

**REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE**  
**MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE**  
**UNIVERSITE MOULOU D MAMMERI DE TIZI OUZOU**  
**FACULTÉ DES SCIENCES**  
**DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE**



**Mémoire de fin d'étude en vue de l'obtention du diplôme**  
**de Master**



**Option : Physique de la matière de dimensionnalité réduite**

**Thème :**

**Interprétation Théorique d'un Spectre Atomique**  
**Cas de ThII**

**Présenté par :**

***Sofiane Ait Mammar***

**Proposé et dirigé par :**

***A. Meftah***

## Remerciements

Je tiens à exprimer ma gratitude à messieurs A. Meftah et D. Deghiche pour leur indéfectible soutien le long de la préparation de ce mémoire, ainsi que Mr. M. Sabri qui répondait toujours présent durant tout mon stage.

J'ai réalisé ce travail au laboratoire de Physique et Chimie Quantique (LPCQ) de Tizi-Ouzou. C'est donc tout naturellement que je remercie le directeur S. Bouarab, qui m'a accueilli m'a fait bénéficier de conditions propices à la recherche. Je tiens à remercier Mr. M. Zemirli chef du département de Physique, Mr. O. Lamrous le responsable de ce Master, les enseignants membres de jury et tous ceux qui ont contribué à ma formation. Enfin, c'est avec une tendresse infinie que je remercie ma famille, de mes parents à mes neveux qui, d'une manière ou d'une autre, m'ont encouragé et soutenu depuis ma scolarisation. Je tiens à remercier mon confrère H. Boudaoud pour ses conseils et ses encouragements. Merci à tous ceux que j'ai malencontreusement oublié de citer.

# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>1</b>
<b>1 Théorie des atomes complexes</b>	<b>5</b>
1.1 Atomes complexes . . . . .	5
1.2 Atomes à plusieurs électrons . . . . .	5
1.3 Méthode de Racah-Slater . . . . .	7
1.4 Approximation de champ central . . . . .	7
1.5 Calcul de perturbations au premier ordre . . . . .	9
1.6 Interaction de configurations . . . . .	10
1.7 Paramètres effectifs . . . . .	12
1.8 Calcul de facteurs de Landé . . . . .	12
1.9 Probabilité de transition . . . . .	13
1.10 Méthode paramétrique . . . . .	13
<b>2 Spectroscopie VUV en émission à haute résolution</b>	<b>15</b>
2.1 Le spectrographe/ spectromètre de Meudon . . . . .	15
2.2 Techniques spectrographiques . . . . .	16
2.3 Source Lumineuse . . . . .	18
2.4 Plaque Photographique . . . . .	20
<b>3 Résultats et discussions</b>	<b>21</b>
3.1 Interprétation théorique des niveaux d'énergie de la parité impaire . . . . .	21
<b>Conclusion générale</b>	<b>30</b>
<b>A Niveaux impairs du ThII et paramètres utilisés</b>	<b>31</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>39</b>

# Introduction

Les études des atomes neutres et des ions une ou deux fois chargés de  $Z$  élevés (lanthanides, groupe du platine, Thorium, Uranium) ont des applications astrophysiques : détermination des abondances dans les étoiles chimiquement particulières, âge de la Galaxie. Les actinides ( numéro atomique  $Z = 89$  (Ac) à  $Z = 103$  (Lr) ) sont des éléments dont tout ou une partie des configurations électroniques comportent, pour l'atome neutre et les ions faiblement chargés, une sous-couche électronique  $4f^N$  ouverte. Dans la mesure où les énergies de liaison des électrons  $5f$ ,  $6d$ ,  $7s$  et  $7p$  sont assez proches, une faible excitation permet de peupler un grand nombre de niveaux d'énergie possibles. Ceci conduit à des spectres optiques dont la complexité dépasse celle des autres éléments de transition. Notre but est d'interpréter les raies spectrales des ions libres, d'identifier les niveaux des transitions et des observables qui les caractérisent (énergie, moment angulaire total, structure hyperfine, déplacement isotopique, facteur de Landé, probabilités de transition). Cette analyse est épaulée par le calcul théorique des niveaux des configurations électroniques dans une approche perturbative. La méthode de Racah-Slater s'applique bien aux atomes neutres et aux séquences d'ions faiblement chargés. Les données atomiques qu'on en déduit sont indispensables aux diagnostics de plasmas. Dans ce travail, nous nous intéressons au spectre  $II$  de l'atome de Thorium ( $Th^{+1}$ ), élément d'intérêt astrophysique servant à valider des modèles de nucléosynthèse sur certains types d'étoiles pauvres en métaux. Les niveaux d'énergies du Thorium une fois ionisé ( $ThII$ ) ont été interprétés grâce à la méthode paramétrique de Racah-Slater, en utilisant le code de Cowan. Les paramètres radiaux obtenus en utilisant un ajustement par la méthode des moindres carrés sont comparés aux valeurs

Hartree-Fock. Dans la parité impaire, 185 niveaux d'énergies appartenant aux configurations  $5f7d^2$ ,  $5f6d7s$ ,  $5f6d^2$ ,  $6d7s7p$ ,  $6d^27p$ , ont été utilisés pour déterminer 50 paramètres radiaux libres. Les 20 autres paramètres sont contraints à varier dans le même rapport ou bien fixé à leurs valeurs HFR. Excepté, deux études paramétriques portant sur les spectres complexes de Lanthanides une fois ionisé *ErII* [1] et *NdII* [2], aucune interprétation théorique concernant les spectres deux des actinides n'est apparue récemment. Dans le cas de Thorium une fois ionisé (*ThII*), une étude paramétrique de Minsky [3] n'avait pas été considérée assez fiable pour être publiée. Le présent manuscrit est scindé en trois chapitres : le premier chapitre est consacré aux méthodes théoriques. La méthode de Racah-slater, qui dérive de l'équation de Schrödinger est donc exposée. Nous verrons aussi les différentes étapes d'un calcul effectué au moyen de la chaîne de programme de R.D Cowan (Los Alamos) [4]. Dans le deuxième nous présentons très brièvement le dispositif utilisé pour la production et l'enregistrement des spectres d'émission à haute résolution des ions atomiques. Le troisième et dernier chapitre est consacré à la description des résultats de l'interprétation théorique des configurations électroniques de parité impaire de  $Th^{+1}$  : les niveaux d'énergie, les probabilités de transition et les facteurs de Landé, théoriques sont rapportés dans le tableau 2. Ils sont comparés aux valeurs expérimentales disponibles dans la littérature.

# Chapitre 1

## Théorie des atomes complexes

### 1.1 Atomes complexes

Généralement, un spectre est dit, complexe s'il résulte d'un atome qui comporte au moins deux électrons. L'équation de Schrödinger ne peut être résolue d'une manière exacte, d'où l'importance d'introduire des méthodes perturbatives. La méthode de Racha-Slater qui dérive de l'équation de Schrödinger est la seule capable de décrire les niveaux d'énergie des atomes neutres et peu ionisés à couches ouvertes. Le point de départ des calculs relatifs à ces systèmes est l'approximation du champ central avant d'aborder la méthode de Racha-Slater, il est utile de rappeler quelques notions de physique atomique.

### 1.2 Atomes à plusieurs électrons

Si un atome comporte  $n$  électrons, chacun de ceux-ci sera caractérisé par une valeur du moment orbital  $\vec{l}_i$  et de spin  $\vec{s}_i$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ). Dans les conditions fréquemment

rencontrées et qui correspondent au cas où l'interaction électrostatique entre les électrons est prépondérante par rapport à l'interaction de spin-orbite ( hypothèse du couplage  $LS$  ), les configurations électroniques seront caractérisées par un moment orbital  $\vec{L}$  résultant du couplage des moments orbitaux des électrons individuels  $\vec{l}_i$  et par un moment de spin  $\vec{S}$  résultant du couplage des moments de spin individuels  $\vec{s}_i$ , où :

$$\vec{L} = \sum_{i=1}^N \vec{l}_i \quad (1.1)$$

$$\vec{S} = \sum_{i=1}^N \vec{s}_i \quad (1.2)$$

Lorsque l'hypothèse du couplage  $LS$  est satisfaite ( c'est-à-dire pour les atomes légers ), du couplage  $\vec{L}$  et de  $\vec{S}$  résultera le moment cinétique total défini par  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ . Le nombre quantique  $J$  associé à ce moment cinétique total pourra prendre toutes les valeurs entières ou demi-entières comprises entre  $L + S$  et  $|L - S|$ . La valeur de  $J$  sera indiquée, pour une configuration déterminée, par un indice inférieur droit affectant le symbole du terme. Un état électronique est caractérisé par une valeur déterminée de  $M$  ( projection de  $J$  sur un axe privilégié ). Un niveau est un ensemble d'états électroniques dégénérés par rapport à  $M$ , c'est-à-dire les  $2J + 1$  états caractérisés par les mêmes valeurs de  $S$ ,  $L$  et  $J$ . Un terme correspond à un groupe de niveaux de  $L$  et  $S$  donnés. Les termes caractérisés par  $S = 0, 1/2, 1, 3/2, 2, 5/2, 3, 7/2, \dots$  portent respectivement le nom de singulet, doublet, triplet, quadruplet, quintuplet, sextuplet, septuplet...

### 1.3 Méthode de Racah-Slater

Les calculs théoriques des niveaux d'énergie et de leurs propriétés radiatives restent au cœur de l'interprétation des spectres. La méthode de Racah-Slater qui dérive de l'équation de Schrödinger est bien adaptée pour décrire les atomes neutres et peu ionisés à couche ouverte  $nd^N$ ,  $nf^N$ . Dans les systèmes atomiques à  $N$  électrons, l'hamiltonien s'écrit :

$$H = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{p_i^2}{2m_i} - \frac{Ze^2}{r_i} \right] + \sum_{i < j}^N \left[ \frac{e^2}{r_{ij}} \right] + \sum_i^N \xi(r_i) l_i s_i \quad (1.3)$$

ou  $\sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i}$  est le terme énergie cinétique,  $\sum_{i=1}^N -\frac{Ze^2}{r_i}$  est le terme d'interaction électron-noyau,  $\sum_{i < j}^N \left[ \frac{e^2}{r_{ij}} \right]$  est le terme d'interaction électron-électron et  $\sum_i^N \xi(r_i) l_i s_i$  représente l'interaction de spin-orbite. Ou  $r_{ij} = |\vec{r}_j - \vec{r}_i|$  est la distance qui sépare deux électrons  $i$  et  $j$ . La méthode habituelle pour obtenir la solution de l'équation de Schrödinger pour un système à plusieurs particules dépend d'une séparation de variables. Ici la somme  $\sum_{i < j}^N \left[ \frac{e^2}{r_{ij}} \right]$  dans l'équation de Schrödinger empêche la séparation de variables, mais elle est trop grande pour être traitée comme une perturbation. Il faut, par conséquent, utiliser des méthodes d'approximation plus fines.

### 1.4 Approximation de champ central

Dans le cadre de cette approximation, l'électron n'est plus soumis à un potentiel total  $V(r) = -\sum_{i=1}^N \frac{Ze^2}{r_i} + \sum_{i < j}^N \left[ \frac{e^2}{r_{ij}} \right]$ , mais à un potentiel effectif  $U(r_i)$ . Ce qui nous amène à écrire l'hamiltonien (1.3) sous la forme :

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + U(r_i) + W \quad (1.4)$$

Où

$$W = \sum_{i=1}^N \left[ -U(r_i) - \frac{Ze^2}{r_i} \right] + \sum_{i>j}^N \frac{e^2}{r_{ij}} + \sum_{i=1}^N \xi(r_i) \vec{l}_i \cdot \vec{s}_i = H_c + H_{so} \quad (1.5)$$

Si  $U(r_i)$  est bien choisi,  $W$  jouera le rôle d'une perturbation de

$$H_0 = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + U(r_i) = \sum_{i=1}^N h_i \quad (1.6)$$

Le calcul à l'ordre zéro consiste à résoudre les équations aux valeurs propres concernant les hamiltoniens monoélectroniques  $h_i$  :

$$h_i \cdot u_i = \varepsilon_i u_i \quad (1.7)$$

Qui est une équation à variables radiales et angulaires séparées. Les  $u_i$  sont de la forme :

$$u_i = \frac{1}{r} P_{n_i, l_i}(r_i) Y_{l_i}^{m_i}(\theta_i, \varphi_i) \quad (1.8)$$

ou  $\frac{1}{r} P_{n_i, l_i}(r_i)$  est la partie radiale,  $Y_{l_i}^{m_i}(\theta_i, \varphi_i)$  est l'harmonique sphérique. Les  $\varepsilon_i$  ne dépendent que de  $n_i$  et  $l_i$ . On obtient alors les fonctions propres de  $H_0$  sous forme d'un déterminant de Slater, soit :

$$\Psi_0 = A \prod_{i=1}^N u_i \quad (1.9)$$

Où  $A$  est un opérateur antisymétriseur. Les valeurs propres de  $H_0$  sont de la forme  $E_{moy} = \sum_i \varepsilon_{n_i, l_i}$  et ne dépendent que des nombres quantiques  $n_i$  et  $l_i$  caractérisant les différents électrons. L'ensemble  $n_i$  et  $l_i$  définit une configuration. Par exemple, la configuration fondamentale de l'atome de thorium est

$$1s^2 2s^2 2p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6 4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^6 6d^2 7s^2 \quad (1.10)$$

Les termes  $H_C$  et  $H_{SO}$  sont des perturbations par rapport à  $H_0$  et peuvent être traités comme tels.

## 1.5 Calcul de perturbations au premier ordre

Pour le terme électrostatique

$$H_c = \sum_{i=1}^N \left[ -U(r_i) - \frac{Ze^2}{r_i} \right] + \sum_{i>j}^N \frac{e^2}{r_{ij}} \quad (1.11)$$

il est possible de montrer que la première somme possède les mêmes valeurs propres pour tous les états d'une même configuration [4]. Donc, la première somme déplace les niveaux d'énergie de la même quantité. Par conséquent, c'est l'interaction coulombienne qui sépare les termes  $LS$  des configurations. Les éléments de matrice de l'interaction de Coulomb, pour une configuration à deux électrons non équivalents [5].

$$\langle \Psi_b | \frac{2}{r_{ij}} | \Psi_{b'} \rangle = \delta_{LSJM,L'S'J'M'} \sum_k f_k F^k(l_i, l_j) + g_k G^k(l_i, l_j) \quad (1.12)$$

Où d'une part :

$$F^k(l_i, l_j) = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{2r_{\leq}^k}{r_{>}^{k+1}} |P_{l_i}(r_1)|^2 |P_{l_i}(r_2)|^2 dr_1 dr_2 \quad (1.13)$$

et

$$f_k = (-1)^L [l_i, l_j] \begin{pmatrix} l_i & k & l_i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_j & k & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} l_i & l_j & L \\ l_j & l_i & k \end{Bmatrix} \quad (1.14)$$

Avec :  $k = 0, 2, \min(2l_i, 2l_j)$ . Et d'autre part :

$$F^k(l_i, l_j) = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{2r_{\leq}^k}{r_{>}^{k+1}} P_{l_i}^*(r_1) P_{l_j}^*(r_2) P_{l_i}(r_1) P_{l_j}(r_2) dr_1 dr_2 \quad (1.15)$$

et

$$g_k = (-1)^S [l_i, l_j] \begin{pmatrix} l_i & k & l_i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} l_i & l_j & L \\ l_j & l_i & k \end{Bmatrix} \quad (1.16)$$

Avec :  $k = |l_i - l_j|, |l_i - l_j| + 2, |l_i - l_j| + 4, \dots, |l_i + l_j|$

Pour le terme spin-orbite :

$$\langle n_i l_i j_i m_i | \xi_{l_i}(l_i, s_i) | n_i l_i j_i m_i \rangle = d_i \zeta_{l_i} \quad (1.17)$$

où

$$\zeta_{l_i} = \int_0^\infty \frac{1}{r} \left( \frac{dV^{l_i}}{dr} \right) |P_{l_i}(r)|^2 dr \quad (1.18)$$

$f_k, g_k, d_i$  sont des des matrices dont les éléments sont des coefficients qui peuvent être calculés soit par la méthode classique de Slater, soit par l'algèbre de Racah.

$F^k, G^k, \zeta_{l_i}$  : sont des intégrales radiales d'interaction électrostatique et de spin-orbite. La nature du couplage dans un système donné dépend essentiellement de l'importance relative de ces intégrales, pour des configurations à deux électrons non équivalents, ce qui est représenté sur la figure (1.1) : nous avons :

$$F^k, G^k \gg \zeta_1, \zeta_2 : \text{Couplage } L - S$$

$$F^k, G^k \ll \zeta_1, \zeta_2 : \text{Couplage } j - j$$

## 1.6 Interaction de configurations

Il est possible de traiter explicitement les interactions de configurations en introduisant dans le calcul plusieurs configurations proches, de même parité. On élargit alors la base de calcul, et on augmente le nombre d'intégrales. Nous aurons par conséquent, en plus des intégrales radiales précédentes :

$$R^k(l_i l_j, l_i' l_j') = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{2r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} P_i^*(r_1) P_j^*(r_2) P_{i'}(r_1) P_{j'}(r_2) dr_1 dr_2 \quad (1.19)$$

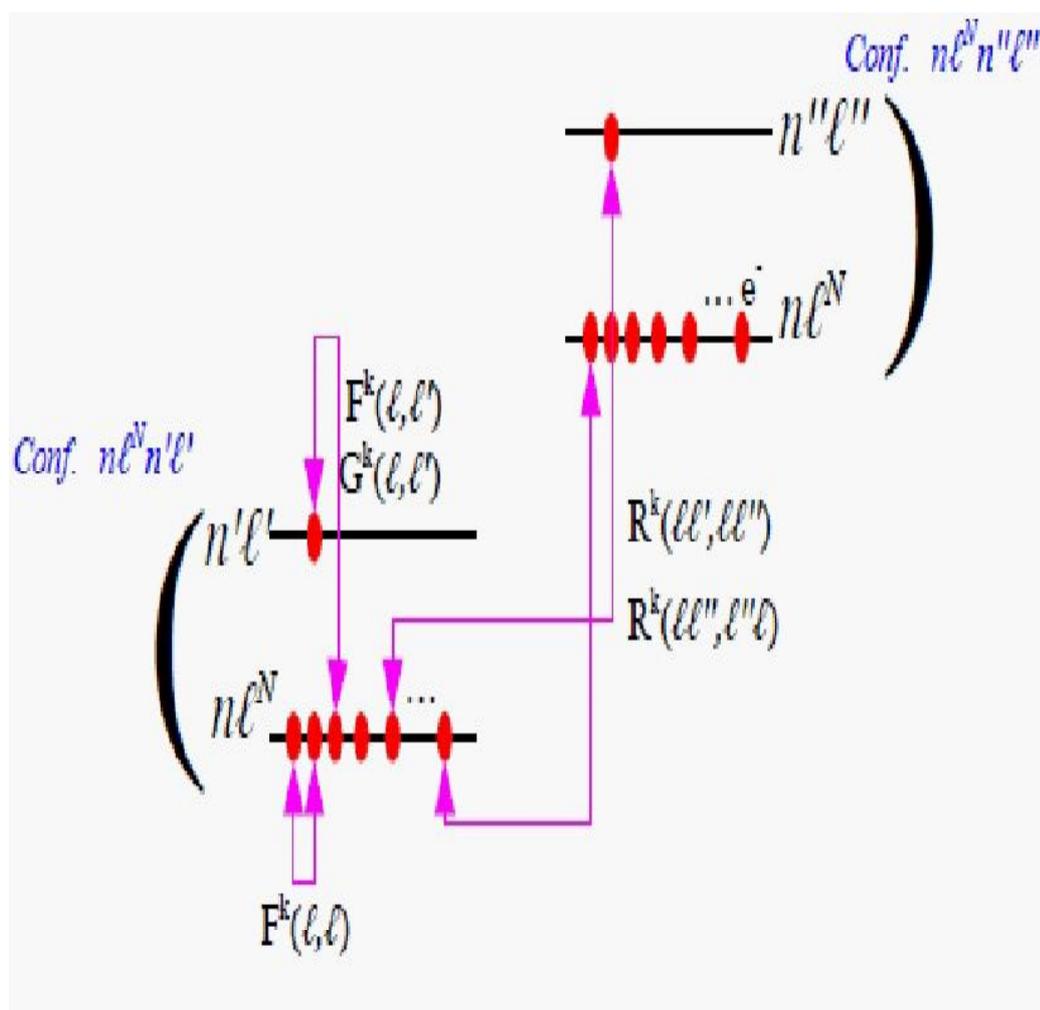


FIG. 1.1: Intégrales radiales de Slater et différentes interactions

où  $R^k$  est intégrale radiale d'interaction de configurations. Le coefficient angulaire de cette intégrale radiale est noté  $r^k$ , par analogie avec les coefficients angulaires  $f_k, g_k$  rencontrés dans les configurations individuelles.

## 1.7 Paramètres effectifs

Il est possible de tenir compte de l'interaction avec des configurations lointaines, sans élargir davantage la base de calcul, et cela grâce à l'introduction de la technique des opérateurs effectifs ( $\alpha, \beta, \gamma, \dots$ ), utilisée dans l'étude des perturbations d'ordre supérieur ou égal à deux.

## 1.8 Calcul de facteurs de Landé

La levée de dégénérescence d'un niveau  $J$  soumis à un champ magnétique ( effet Zeeman ), a une grande importance pratique dans la classification des spectres  $I$  et  $II$  ou l'on peut observer à haute résolution dans le domaine ultraviolet sur des raies fines. La structure Zeeman d'une raie conduit aux écarts entre les  $2J + 1$  sous-niveaux  $MJ$  des deux niveaux de la transition. Ces écarts entre deux sous-niveaux consécutifs est  $g_L \mu_B B$  où  $g_L$  est le facteur de Landé et  $\mu_B$  est le magnéton de Bohr et  $B$  le champ magnétique. Les facteurs de Landé sont purement angulaires :

$$g_L = (1 + [J(J + 1) + S(S + 1) - L(L + 1)] / (2J(J + 1))) \quad (1.20)$$

En astrophysique ils ont déjà servi à déterminer le champ magnétique de certaines étoiles.

## 1.9 Probabilité de transition

Les transitions radiatives les plus probables dans les ions actinides faiblement chargés sont de type dipolaire électrique. Il est montré que la probabilité d'une transition de nombre d'onde  $\sigma$  partant d'un niveau  $|SLJ\rangle$  ( poids statistique  $g = 2J + 1$  ). Vaut

$$g_A = (64\pi^4 e^2 a_0 / 3h) S \sigma^3 \quad (1.21)$$

où  $S$  est la force de raie. Les intensités des raies sont proportionnelles à  $g_A$  et a un facteur de population des niveaux qui dépend de nombreux processus élémentaires. D'autres grandeurs sont également importantes (comme la force d'oscillateur) dans la mesure où la détermination des abondances des éléments dans les étoiles utilise largement  $\log(gf)$  pour modéliser des spectres d'absorption.

$$f = (mc/8\pi^2 e^2 \sigma^2) A \quad (1.22)$$

## 1.10 Méthode paramétrique

Dans la méthode paramétrique, les intégrales radiales données précédemment sont considérées comme des paramètres ajustables en fonction des résultats expérimentaux. Le calcul paramétrique commence en choisissant un ensemble initial de paramètres  $K_a^{(0)}$ . La diagonalisation de la matrice  $H_c + H_{so}$  conduit à des fonctions propres et à des valeurs propres, en fonction de  $K_a^{(0)}$ ; Si l'on dispose des niveaux expérimentaux  $E_{\text{exp}}$ , on peut alors comparer  $E_a$  et  $E_{\text{exp}}$  et chercher les valeurs  $K_a^{(1)}$  des paramètres qui rendent minimum l'écart quadratique moyen :

$$\langle \Delta E \rangle = \left( \frac{\sum E_{\text{exp}} - E_a}{N - P} \right)^{1/2} \quad (1.23)$$

où  $N$  est le nombre de niveaux expérimentaux et  $P$  le nombre de paramètres.

Avec ces nouvelles valeurs  $K_a^{(1)}$  des  $K_a$ , on recommence le cycle diagonalisation-moindres carrées jusqu'à la convergence, c'est-à-dire jusqu'à ce que, pour tous les paramètres,  $K_a^{(n)} = K_a^{(n+1)}$ . Afin de s'assurer de la signification physique des calculs paramétriques, il est nécessaire de vérifier que les paramètres sont d'un ordre de grandeur compatible avec la théorie.

## Chapitre 2

# Spectroscopie VUV en emission à haute résolution

Dans ce chapitre on va procéder à décrire brièvement le spectrographe de 10.7m de Paris Meudon utilisé pour enregistrer les spectres de ThII, et ses principaux constituants, tels que le cercle de Rowland, la source lumineuse qui est de type étincelle glissante, ainsi que les plaques photographiques qui sont de type (SWR) ; travailler sous VUV, la haute résolution et situer les gammes de longueurs d'onde.

### 2.1 Le spectrographe/ spectromètre de Meudon

La spectroscopie ultraviolet sous vide (*VUV*), couvrant la gamme spectrale 200 – 2000 Å, est un bon outil de diagnostic pour l'astrophysique et la physique des plasmas. Par exemple, les paramètres d'un plasma, à savoir la température, la densité de particules ( neutres ou ions ), l'opacité, l'abondance des espèces, et même les constantes de la physique,

sont couramment déterminées par des mesures spectroscopiques. La spectroscopie à réseau est très utilisée pour l'étude des spectres des atomes et des ions multichargés. Pour obtenir ces spectres il faut exciter l'ion, initialement dans son état électronique fondamental, vers ses états électroniques excités, par l'absorption d'un rayonnement électromagnétique ( visible ou  $UV$  ) ou par des collisions avec d'autres particules ( électrons par exemple ). Lorsque l'ion est dans un état excité, il se désexcite vers les niveaux d'énergie inférieurs en émettant de la lumière. Ce spectre de lumière est constitué d'un grand nombre de raies dont la longueur dépend de l'ion. Ces raies seront enregistrées par des détecteurs. L'analyse de ces spectres permet l'identification des raies émises et de remonter aux niveaux d'énergie des états excités et de l'état fondamental de l'ion.

## 2.2 Techniques spectrographiques

Nous avons enregistré à haute résolution ( $\sim 150000$ ) le spectre de thorium en utilisant le spectrographe de  $10.7m$  de l'observatoire de Meudon. Malgré les grands progrès technologiques enregistrés dans le domaine de la spectroscopie à haute résolution, à savoir la transformée de Fourier dans l'ultraviolet, le Laser  $XUV$ , cet instrument reste incontournable et incomparable car il permet l'étude l'ultraviolet sous vide jusqu'à  $200 \text{ \AA}$  avec des sources pulsées en émission, et il permet l'enregistrement à haute résolution et en une seule exposition d'un intervalle spectral de  $240 \text{ \AA}$  contenant un grand nombre de raies. Les techniques d'enregistrement des spectres dans l'ultraviolet lointain sont déterminées essentiellement par l'opacité des matériaux solides et de l'aire. En effet, en dessous de  $2000 \text{ \AA}$ , le coefficient d'absorption de l'aire, composé essentiellement de  $O_2$  et  $N_2$ , impose l'utilisation

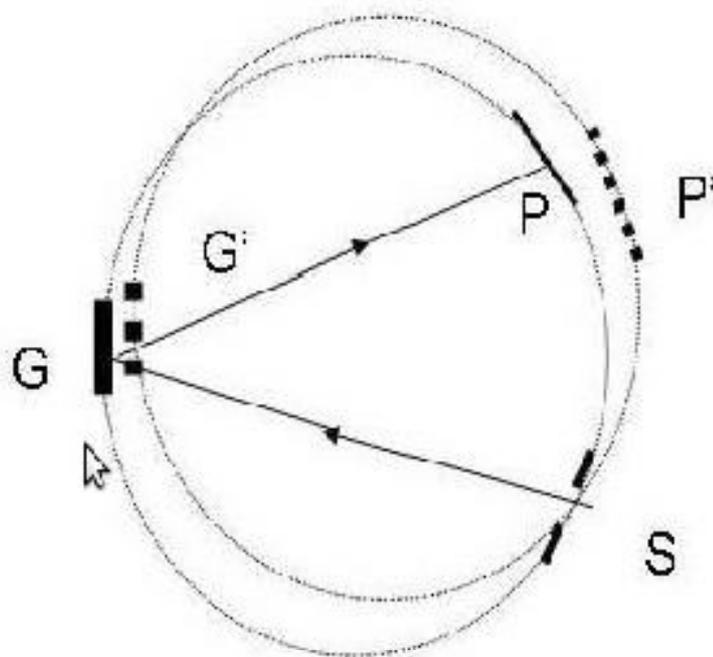


FIG. 2.1: Cercle de Rowland

de spectrographe fonctionnant sous vide. Le spectrographe est équipé d'un réseau de diffraction concave qui constitue à la fois l'élément dispersif et l'élément focalisateur ce qui évite de multiplier les surfaces de réflexion. Dans la théorie des réseaux concaves [6], on montre que la fente, le réseau et le récepteur doivent être situés sur le même cercle appelé cercle de Rowland (figure 2.1). Ce cercle est tangent au réseau et a un diamètre égal au rayon de courbure du réseau. Comme nous l'avons cité au début du paragraphe, le spectrographe de l'observatoire de Meudon a un rayon de courbure  $R = 10.7$  mètres à incidence normale avec un montage "Eagle in plane" dans lequel le faisceau incident et le faisceau diffracté ont des directions voisines. Le spectrographe de  $10.7m$  (voir Figure 2.2) de Meudon fonctionne

depuis 1972. Le réseau concave utilisé est un réseau holographique de 3600 traits par millimètres. Deux fentes de largeurs fixes, 30 et 100  $\mu m$ , sont interchangeables et permettent de trouver un compromis entre résolution et luminosité recherchées. La fente de 30  $\mu m$  est souvent utilisée, ce qui correspond à un pouvoir de résolution égal à  $\sim 150000$ . La dispersion linéaire est de 0.25  $\text{\AA}/mm$  dans le premier ordre. Cet instrument, qui est actuellement unique en Europe, est équipé de deux pompes turbomoléculaires qui permettent d'atteindre un vide de  $10^{-6}$  torr. Un spectrographe semblable existe au NIST mais avec une dispersion trois fois moins grande. Ce cercle est tangent au réseau et a un diamètre égal au rayon de courbure du réseau. Comme nous l'avons cité au début du paragraphe.

## 2.3 Source Lumineuse

Les spectres en émission *VUV* sont produits par une source de décharge du type étincelle glissante. Des étincelles électriques produites entre deux électrodes placées sous vide constituent un moyen d'obtenir des spectres *VUV* d'éléments ionisés. La production d'une telle étincelle nécessite une tension élevée et une distance interélectrodes faible. Ces deux facteurs entraînent un équipement peu maniable et une mauvaise reproductibilité, due à une grande sensibilité vis-à-vis de toute variation de distance interélectrodes. A l'inverse, la source à étincelle "glissante" permet de réduire la tension électrique utilisée. La densité de courant est relativement plus faible que dans une étincelle sous vide simple, et l'élargissement Stark des raies dû aux ions environnants est fortement diminués.

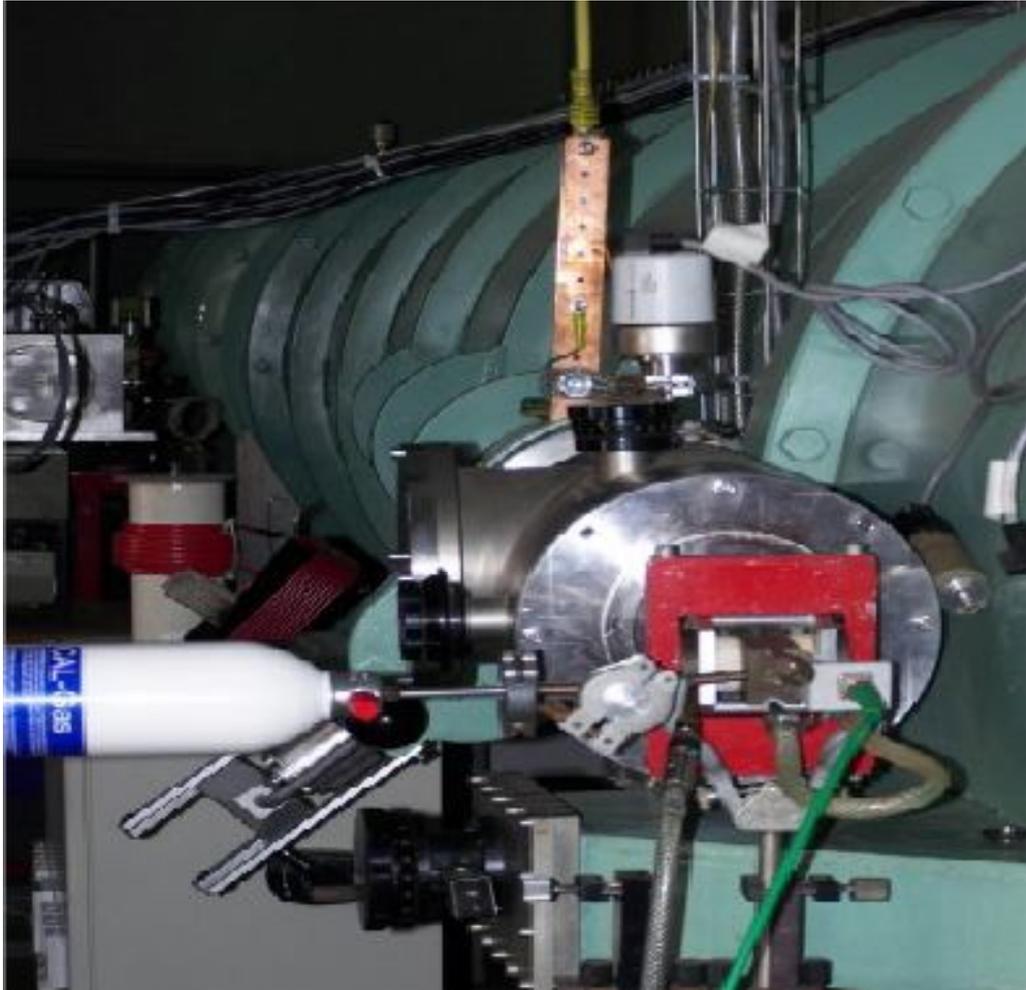


FIG. 2.2: Spectrographe de 10.7m de Meudon

## 2.4 Plaque Photographique

Les spectres d'ions atomiques produits par les étincelles glissantes sont enregistrés sur des plaques photographiques du type Short-Wave-Radiation ( SWR-Kodak ) de dimensions 45×5 cm. Ces spectres peuvent être enregistrés simultanément sur deux plaques en une seule exposition pour un intervalle de 240 Å. Ces plaques photographiques sont choisies pour leurs bon contraste, elles sont recouvertes d'une couche de gélatine particulièrement mince de façon à diminuer l'absorption des rayonnements ultraviolets. La durée d'exposition des plaques diffère d'une région spectrale à une autre. En effet, pour les grandes longueurs d'onde, au-dessus de 800 Å, la durée d'exposition est d'environ 30 minutes à 60 minutes. En revanche, pour les courtes longueurs d'onde, entre 200 à 800 Å, les raies spectrales sont très faibles en intensité, ce qui nécessite une durée d'exposition plus grande.

## Chapitre 3

# Résultats et discussions

### 3.1 Interprétation théorique des niveaux d'énergie de la parité impaire

Les niveaux les plus bas de la parité impaire ont été attribués à la configuration  $5f7s^2$ , grâce à des critères semi-empiriques, des facteurs de Landé  $g_L$ , des déplacements isotopiques ( $IS$ ) et des intensités des transitions. Ces mêmes critères ont servi par la suite à déterminer avec certitude les niveaux les plus bas des configurations  $5f6d7s$ ,  $5f6d^2$ ,  $6d7s7p$ ,  $7s^27p$ . Contrairement aux configurations  $6d^27p$ ,  $5f7p^2$  et  $5f^27p$  où l'emplacement des plus bas niveaux est à confirmer (figure 3.3). Concernant la configuration complètement inconnue  $5f^3$ , son plus bas niveau a été estimé à  $55000 \pm 5000 cm^{-1}$  par Zalubas [7]. La même démarche nous a permis de placer le plus bas niveau de la configuration  $7p^3$  autour de  $105000 \pm 5000 cm^{-1}$ . Cette dernière a été rajoutée à la base de calcul à cause de sa forte interaction avec les configurations  $6d7s7p$ ,  $6d^27p$  et  $7s^27p$ . La méthode de Cowan a été utilisée pour déterminer

la valeur Hartree Fock Relativiste (*HFR*) des intégrales radiales relatives aux 10 configurations de la base, ou son fonctionnement principal est illustré sur le diagramme de la figure (3.1). Vu la complexité des actinides, les niveaux d'énergie ainsi que les facteurs de Landé construits à partir des paramètres radiaux HFR ne sont pas en bon accord avec les valeurs expérimentales. Par conséquent, nous avons utilisé des facteurs d'échelle (*SF*) allant de 0.37 à 1.3 pour chaque type de paramètre afin d'améliorer les calculs (figures 3.4 et 3.5) et tous les paramètres d'interactions de configurations ( *IC* ) ont été multipliés par un facteur d'échelle constant qui vaut 0.65. Ce qui a permis d'aboutir à des écarts moyens théorie/expérience de l'ordre de  $250 \text{ cm}^{-1}$  et de commencer une optimisation des paramètres radiaux par la méthode des moindres carrés. Dans cette optimisation, nous avons fait varier un certain nombre de paramètres dans le même rapport et limiter le nombre de paramètres libres afin d'avoir un nombre de niveaux cinq fois plus grand que le nombre de paramètres. Au fur et à mesure de la progression du processus d'ajustement, plus de niveaux ont été introduits dans le fit et les contraintes sur les paramètres ont été progressivement supprimées, de telles sortes à obtenir  $N_{niv} = 185$  et  $N_{param} = 56$ . La version Kramida [8] du code Cowan fonctionnant sur PC a été utilisée dans ce travail.

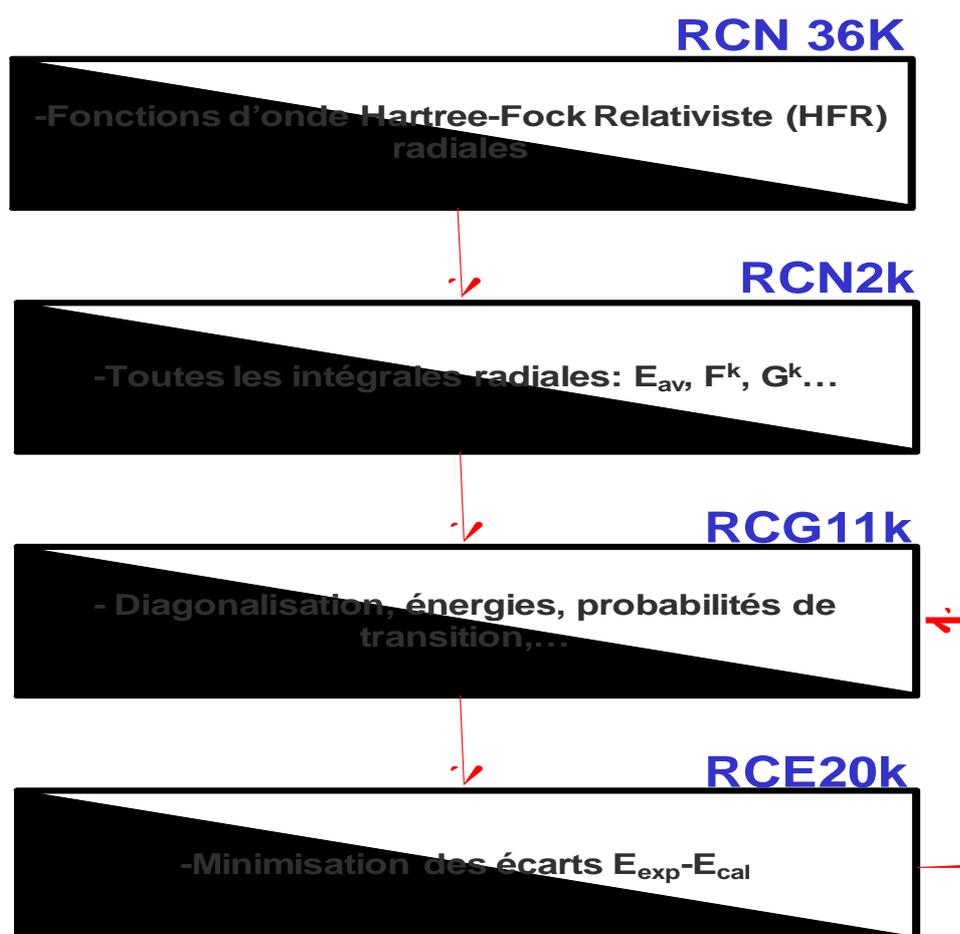


FIG. 3.1: Bases de calcul du code Cowan

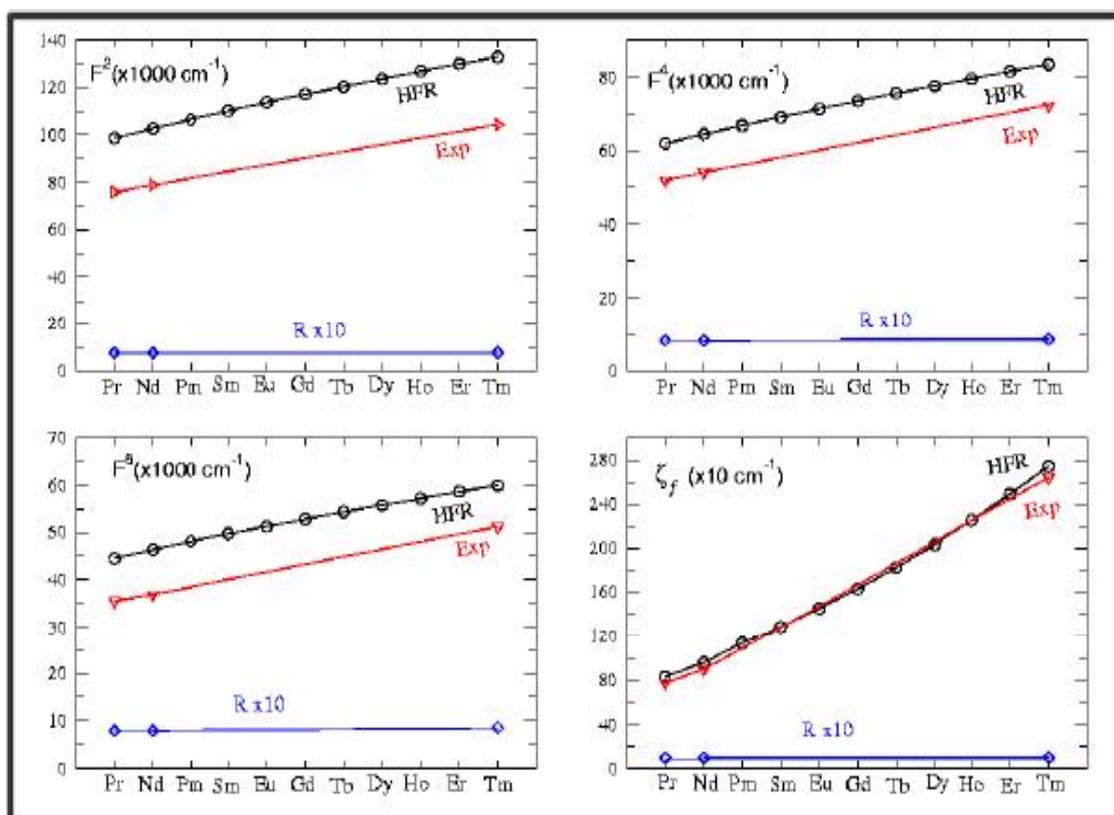


FIG. 3.2: Evolution des paramètres radiaux et estimation du facteur d'échelle SF

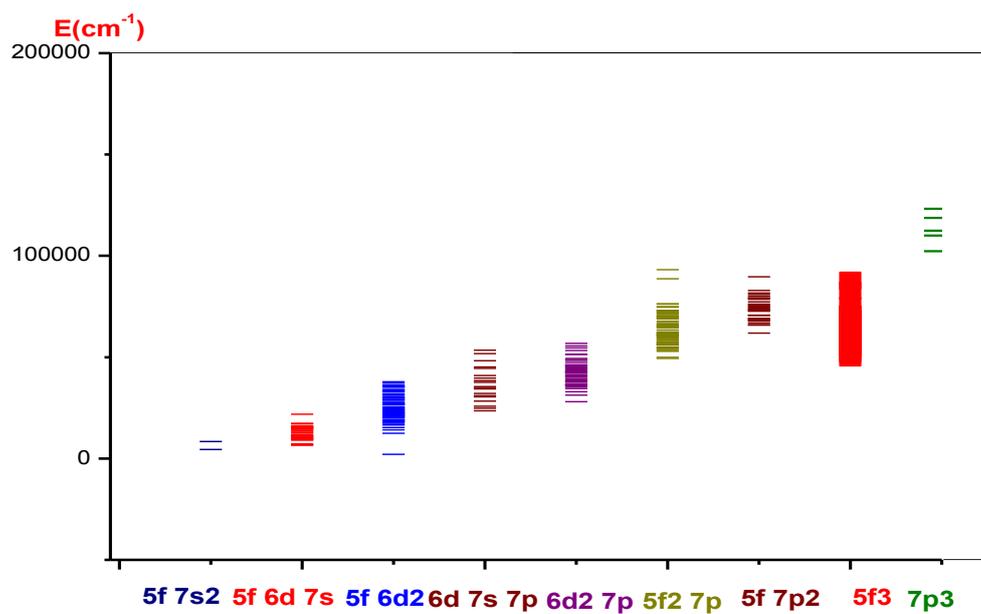
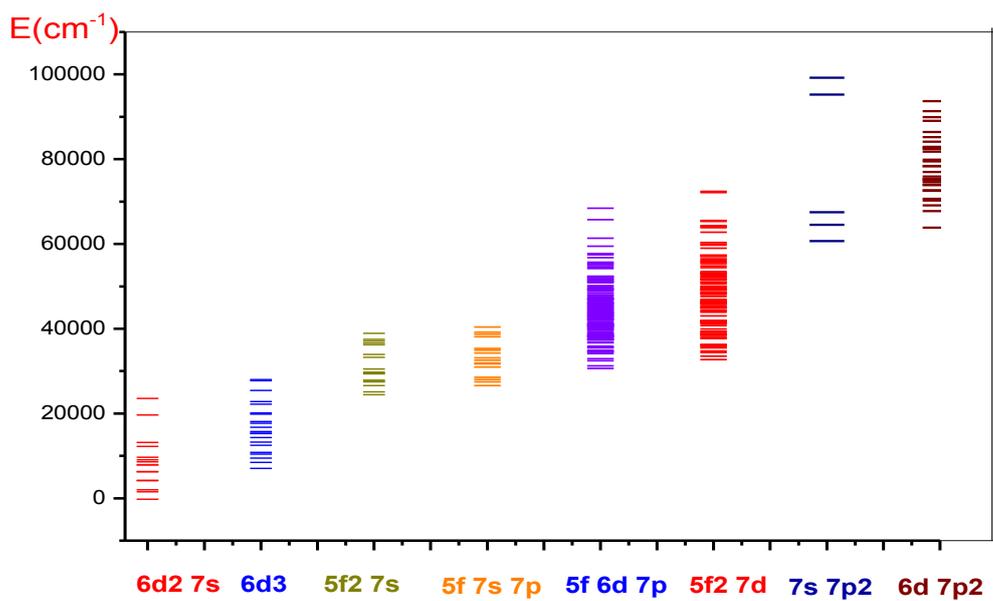


Figure 3.3 : Niveaux d'énergie théoriques des configurations paires : d2s, d3, f2s, fsp, fdp, f2d, sp2, dp2 et impaires : fs2, fds, fd2, dsp, d2p, f2p, fp2, f3, p3

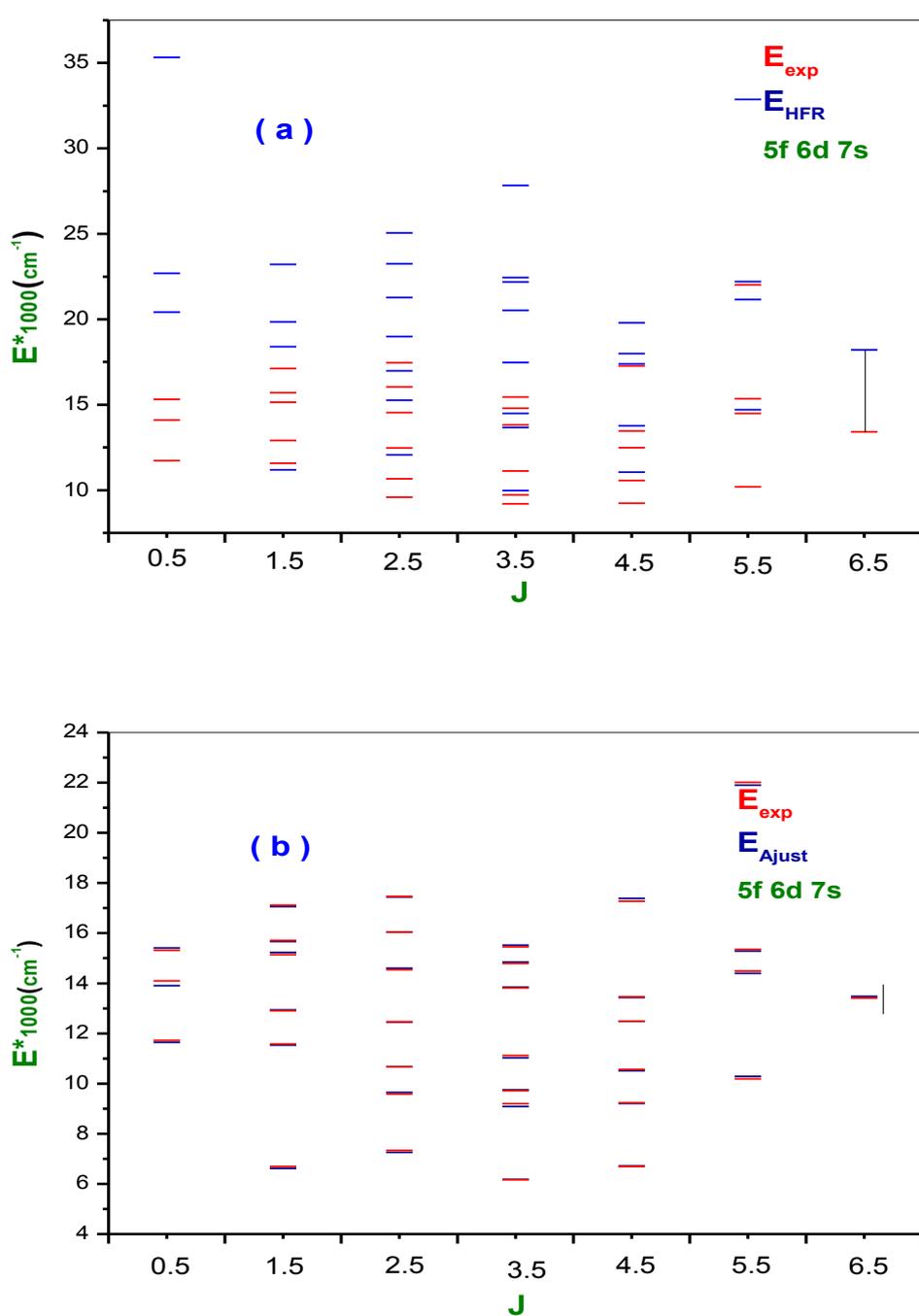


Figure 3.4 : Comparaison entre les niveaux d'énergie expérimentaux de la configuration  $5f-6d7s$  de Th II ; d'une part avec ceux calculés avec les paramètres *HFR* (a), et d'autre part avec les valeurs calculées avec les paramètres ajustés à partir des facteurs d'échelle (b).

L'ensemble des paramètres radiaux ajustés utilisés dans la dernière diagonalisation, les intégrales radiales HFR et les facteurs d'échelle qui en résultent sont donnés dans le tableau 1 de l'appendice. La différence  $P_{HFR} - P_{fit}$  de l'énergie moyenne  $E_{av}$  des configurations  $5f6d7s$  et  $5f6d^2$  sont cohérentes ( $7368 \text{ cm}^{-1}$  et  $6426 \text{ cm}^{-1}$  respectivement). Bien que le paramètre effectif  $F^1(5f6d)$  est mal défini que les autres paramètres effectifs ( $717 \pm 279$ ), sa valeur est tout à fait compatible avec les valeurs de ces mêmes paramètres dans l'*ErII* [1] et le *NdII* [2]. Tous les niveaux identifiés de la parité impaire sont rapportés dans le tableau 2 de l'appendice. Les colonnes successives donnent la valeur de  $J$ , l'énergie  $E_{exp}$ , le facteur de Lande  $g_{L_{exp}}$ , l'énergie théorique, le facteur de Lande  $g_{L_{Th}}$  et le déplacement isotopique. Seules les composantes des fonctions d'onde dont le pourcentage est supérieur 20% sont rapportées en couplage *LS*. Les premières comparaisons présentées dans ce tableau portent sur les valeurs des énergies et de  $g_L$ . A peu d'exceptions, l'accord est excellent. Le plus grand désaccord  $\frac{g_{L_{Th}}}{g_{L_{exp}}}$  se produit pour les faibles valeurs de  $J$ , où on a de grandes incertitudes sur les fonctions d'onde.

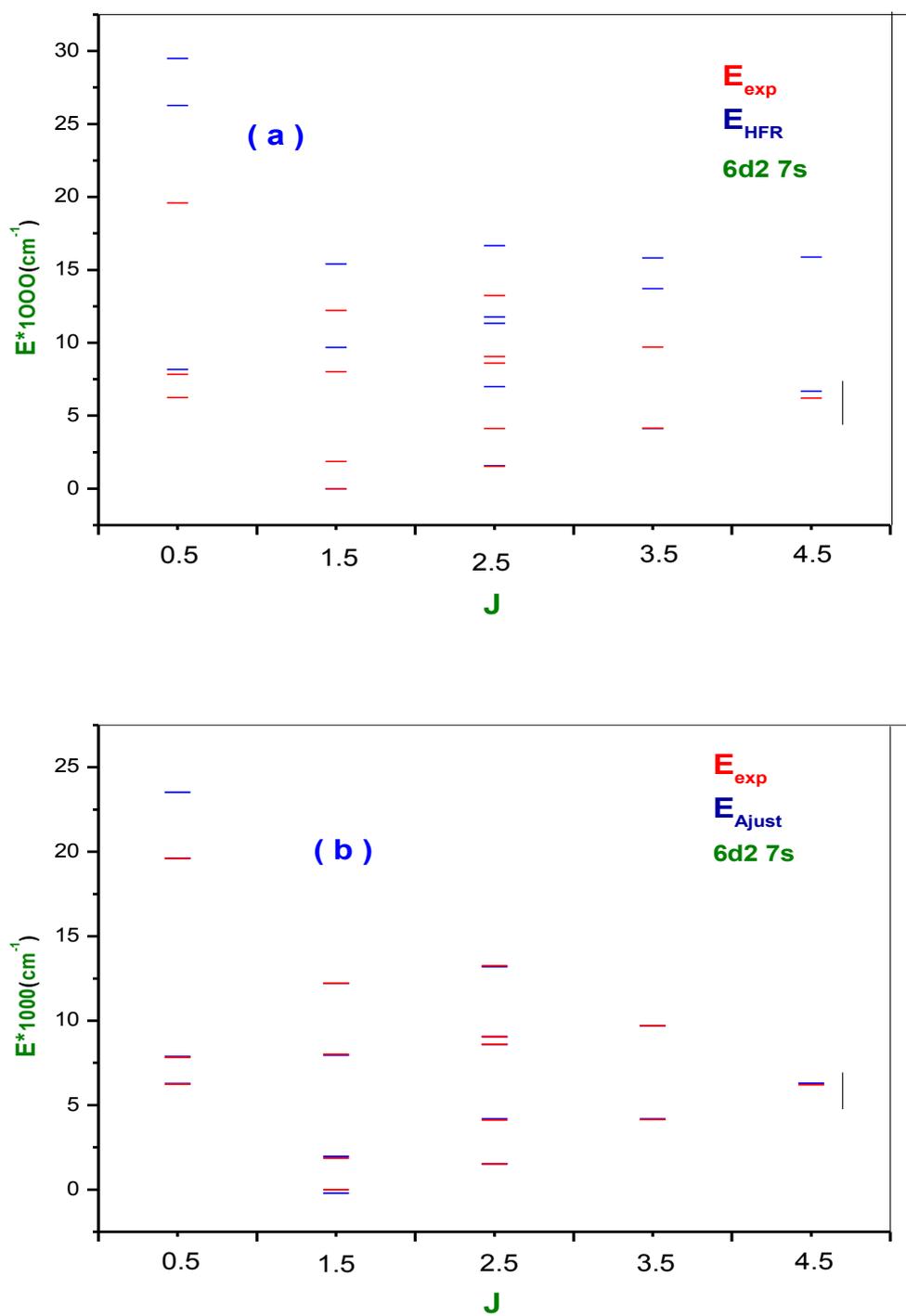


Figure 3.5 : Comparaison entre les niveaux d'énergie expérimentaux de la configuration fondamentale  $6d2-7s$  de  $\text{Th II}$  ; d'une part avec ceux calculés avec les paramètres  $HFR$  (a), et d'autre part avec les valeurs calculées avec les paramètres ajustés à partir des facteurs d'échelle (b).

Dans la gamme d'énergie  $23372 - 32957 \text{ cm}^{-1}$ , 10 niveaux avec des moments angulaires totaux  $J$  entre  $3/2$  et  $7/2$  sont présents, avec une durée de vie mesurée [9] et tous avec des valeurs de  $g_{L_{\text{exp}}}$  établis à partir de plusieurs modèles Zeeman. En dépit de certains accords, la correspondance proposée dans le tableau 2 n'est pas tout à fait satisfaisante. La méthode paramétrique nous semble limitée dans les cas d'extrêmes complexités. Davantage d'efforts sont nécessaires pour les niveaux d'énergie de la parité paire afin de rendre les paramètres radiaux plus cohérents.

## Conclusion générale

Dans ce travail, le but était d'étudier le spectre de Thorium une fois ionisé (*ThII*). Nous avons présenté la méthode paramétrique de Racah-Slater qui joue un rôle important dans le calcul des observables physiques telles-que l'énergie, déplacement isotopique, facteur de Landé, probabilités de transition. Nous avons montré que cette méthode paramétrique de Racah-Slater permet d'interpréter les niveaux d'énergie d'un spectre complexe tel que le *ThII*. En effet, les énergies des niveaux, les probabilités de transition, les facteurs de Landé calculés théoriquement dans ce cas sont en assez bon accord avec les valeurs expérimentales disponibles [10]. A l'instar, du *ErII* [1] et du *NdII* [2] nous avons réalisé le calcul paramétrique en utilisant les codes Cowan qui fonctionnent selon le diagramme suivant. Dans la dernière diagonalisation, nous avons ajusté les valeurs théoriques des niveaux d'énergie aux valeurs expérimentales et la déviation moyenne théorie/expérience est de  $126 \text{ cm}^{-1}$  pour la parité impaire et  $127 \text{ cm}^{-1}$  pour la parité paire. Le bon accord entre les énergies théoriques et les énergies expérimentales nous renseigne sur la fiabilité des fonctions d'onde calculées. Cela nous permet de prédire certaines observatoires physiques très utiles en astrophysique et dans les diagnostics plasma tels que les facteurs de Landé et les déplacements isotopiques, ..etc. En perspective, nous pensons qu'il est possible d'améliorer les calculs, donc de réduire la déviation moyenne expérience/théorie en augmentant la base de calcul avec les configurations de Rydberg  $6d7s8p$ ,  $5f6d7d$ . Dans un futur proche, ces résultats seront utilisés pour étendre l'analyse expérimentale des spectres *ThII* dans l'ultraviolet (*UV*) non-encore exploités jusque-là.

## Annexe A

# Niveaux impairs du ThII et paramètres utilisés

**Tableau1** : Paramètres ajustés et HFR (en  $\text{cm}^{-1}$ ) des configurations impaires du ThII.

Configuration	P	P <sub>HFR</sub>	P <sub>Ajust</sub>	SF(P <sub>Ajust</sub> /P <sub>HFR</sub> )
5f7s2	Eav	19112,5	9115,9	
	$\zeta$ (5f)	1317,0	1136,9	0,863
5f6d7s	Eav	22776,8	15408,7	0,676
	$\zeta$ (5f)	1277,5	1103,2	0,863
	$\zeta$ (6d)	1531,1	1317,3	0,860
	F <sup>1</sup> (5f,6d)	/	717,2	/
	F <sup>2</sup> (5f,6d)	28290,6	19632,7	0,694
	F <sup>3</sup> (5f,6d)	/	863,3	/
	F <sup>4</sup> (5f,6d)	15831,6	16908,1	1,067
	G <sup>1</sup> (5f,6d)	21005,7	13568,1	0,646
	G <sup>2</sup> (5f,6d)	/	3489,3	/
	G <sup>3</sup> (5f,6d)	14615,1	12501,9	0,855
	G <sup>4</sup> (5f,6d)	/	2389,2	/
	G <sup>5</sup> (5f,6d)	10709,2	6741,8	0,629
	G <sup>3</sup> (5f,7s)	5068,6	3579,8	0,706
	G <sup>2</sup> (6d,7s)	20400,9	13482,7	0,660
5f6d <sup>2</sup>	Eav	32561,3	26134,7	
	F <sup>2</sup> (6d,6d)	32678,9	23146,7	0,708
	F <sup>4</sup> (6d,6d)	21545,3	15908,8	0,738
	$\alpha$	/	-27,5	/
	$\beta$	/	/	/
	T(D2)	/	/	/
	$\zeta$ (5f)	1238,2	1069,7	0,864
	$\zeta$ (6d)	1410,6	1288,6	0,913
	F <sup>1</sup> (5f,6d)	/	717,2	/
	F <sup>2</sup> (5f,6d)	27180,3	18020,4	0,663
	F <sup>3</sup> (5f,6d)	/	863,3	/
	F <sup>4</sup> (5f,6d)	15191,3	14373,2	0,946
	G <sup>1</sup> (5f,6d)	20810,0	13796,8	0,663

Configuration	Paramètre	Paramètre HFR	Paramètre Ajusté	SF
6d7s7p	G <sup>2</sup> (5f,6d)	/	3489,3	/
	G <sup>3</sup> (5f,6d)	14248,4	12483,6	0,876
	G <sup>4</sup> (5f,6d)	/	2389,2	/
	G <sup>5</sup> (5f,6d)	10374,7	4826,2	0,465
	Eav	39860,7	38945,1	
	ζ (6d)	2011,7	2219,3	1,103
	ζ (7p)	4510,8	5817,9	1,289
	F <sup>1</sup> (6d,7p)	/	/	/
	F <sup>2</sup> (6d,7p)	18657,0	11990,7	0,642
	G <sup>2</sup> (6d,7s)	20237,8	13769,4	0,680
	G <sup>1</sup> (6d,7p)	10557,7	8891,5	0,842
	G <sup>2</sup> (6d,7p)	/	/	/
	G <sup>3</sup> (6d,7p)	8080,7	3049,6	0,377
	G <sup>1</sup> (7s,7p)	26547,1	14204,6	0,535
6d <sup>2</sup> 7p	Eav	62721,9	43164,1	
	F <sup>2</sup> (6d,6d)	37120,5	24380,6	0,656
	F <sup>4</sup> (6d,6d)	24782,1	15080,6	0,608
	α	/	-27,5	/
	β	/	/	/
	T(D2)	/	/	/
	ζ (6d)	1884,7	1704,0	0,904
	ζ (7p)	3752,0	4304,9	1,147
	F <sup>1</sup> (6d,7p)	/	/	/
	F <sup>2</sup> (6d,7p)	17491,9	10258,0	0,586
	G <sup>1</sup> (6d,7p)	10179,2	6238,4	0,612
	G <sup>2</sup> (6d,7p)	/	/	/
	G <sup>3</sup> (6d,7p)	7652,4	3456,4	0,451
	7s <sup>2</sup> 7p	Eav	43034,0	42009,3
ζ (7p)		5345,6	6068,1	1,135
5f <sup>2</sup> 7p	Eav	73728,0	61246,8	0,831

Configuration	Paramètre	Paramètre HFR	Paramètre Ajusté	SF
5f7p <sup>2</sup>	F <sup>2</sup> (5f,5f)	53794,7	44112,7	0,820
	F <sup>4</sup> (5f,5f)	34160,2	28011,2	0,819
	F <sup>6</sup> (5f,5f)	24730,9	20279,9	0,820
	$\alpha$	/	10,0	/
	$\beta$	/	/	/
	$\gamma$	/	10,0	/
	$\zeta$ (5f)	1112,3	1112,3	1
	$\zeta$ (7p)	2973,0	2973,0	1
	F <sup>1</sup> (5f,7p)	/	10,0	/
	F <sup>2</sup> (5f,7p)	9146,2	7957,2	0,870
	G <sup>2</sup> (5f,7p)	2759,8	2263,8	0,819
	G <sup>3</sup> (5f,7p)	/	/	/
	G <sup>4</sup> (5f,7p)	2343,3	1921,3	0,820
	Eav	77589,5	72522,4	
	F <sup>2</sup> (7p,7p)	22391,8	1836131	0,820
	$\alpha$	/	/	/
	$\zeta$ (5f)	1338,9	1338,9	1
	$\zeta$ (7p)	3957,0	3957,0	1
	F <sup>1</sup> (5f,7p)	/	/	/
	F <sup>2</sup> (5f,7p)	9730,2	8465,2	0,870
G <sup>2</sup> (5f,7p)	2462,9	2020,9	0,820	
G <sup>3</sup> (5f,7p)	/	/	/	
G <sup>4</sup> (5f,7p)	2205,8	1809,8	0,819	

Tableau2: Niveaux impairs du ThII. Les six dernières colonnes représentent les composantes des principales configurations.

$E^{exp}$	$E^{th}$	$g_L^{exp}$	$g_L^{th}$	J	IS	% fs2	fds	fd2	dsp	d2p	s2p
11725.429	11675	0.255	0.307	0.5	-456		50	22			
14101.798	13958	0.523	0.480	0.5	-539		57	25			
15324.240	15408	2.565	2.562	0.5			92				
17837.801	17726	1.080	1.044	0.5	-669		30	46			
18568.266	18638	1.007	0.995	0.5	-785			84			
22355.206	22443	0.770	0.811	0.5	-520		40	24			
25027.036	24663	0.600	0.442	0.5				47			
25266.496	25192	0.725	1.935	0.5	-746			80			
25594.862	25739	1.270	0.636	0.5							24
26626.478	26707	0.645	0.616	0.5	-545		25	28			
30564.572	30454	0.553	0.455	0.5	-589				32		
31625.676	31233	0.521	0.507	0.5	-594			25			
34330.500	34670	1.503	1.691	0.5	-485						45
35199.988	35318	0.972	0.993	0.5	-483				23		54
37130.334	37255		0.655	0.5	-594			78			
37608.986	37682	2.239	1.878	0.5	-173				39		37
37716.323	37836	0.690	0.628	0.5	-611						39
40825.600	40917	0.261	0.290	0.5							49
43744.086	43556	2.215	2.221	0.5							69
46426.061	46277	0.814	0.761	0.5	-427						53
48532.052	48352	0.717	0.735	0.5							07
	51690		0.694	0.5							54
	53622		0.658	0.5							
	58504		0.050	0.5		59					
	62603		0.506	0.5							
	65672		0.168	0.5							
	66072		1.657	0.5							
	67214		0.388	0.5							
	68588		0.212	0.5							
	69549		0.981	0.5							
	73034		2.044	0.5							
	75019		0.692	0.5							
	79330		0.632	0.5							
	88693		0.667	0.5							
	118621		0.666	0.5							
6691.387	6613	0.492	0.507	1.5	-362		96				
11576.401	11519	0.832	0.796	1.5	-367		88				
12902.377	12940	1.167	1.175	1.5	-395		69				
15144.737	15238	1.366	1.356	1.5	-378		69				
15710.841	15693	1.06	1.103	1.5	-446		75				
17121.620	17099	1.277	1.277	1.5	-518		39	27			
18214.426	18217	0.876	0.840	1.5	-695			51			
19050.829	19060	0.888	0.920	1.5	-725			58			
21131.799	21159	1.240	1.202	1.5	-636			32			
23012.058	23217	1.017	0.996	1.5	-650			32			
23372.581	23530	1.067	0.801	1.5	-554				56		
24132.035	24029		1.060	1.5	-682			42			
24414.641	24478	1.429	1.346	1.5	-494			64			
25188.121	25167	0.937	1.252	1.5	-678			50			
26586.264	26519		0.845	1.5	-742			61			
26965.203	26935	1.384	1.481	1.5	-691			65			
27403.165	27483	1.002	0.950	1.5	702			40			
28720.835	28436	1.162	1.190	1.5	-215				47		
29720.315	29722	0.990	0.925	1.5	-539			30			
31353.125	31308	0.863	0.860	1.5	-551						
31928.712	31612	0.891	0.868	1.5	-375			44			
33215.466	32902	1.036	0.983	1.5	-632			32			
33843.036	33762	1.190	1.220	1.5	-644			43			
34986.606	35035	1.298	1.293	1.5					58		
36390.516	36199	0.829	1.178	1.5	-573			67			
36444.809	36409	1.182	0.839	1.5	-502						
36581.559	36577	1.107	1.159	1.5	-639						57
37601.701	37460	1.267	1.227	1.5	-250				26		23
38436.168	38501	1.419	1.409	1.5	-154				35		
40472.450	40528	1.249	1.269	1.5	-473						
42112.939	42096	1.467	1.186	1.5	-508						
42418.226	42435	1.304	1.575	1.5	-504						
43287.632	43116	1.564	1.521	1.5	-527						
	45218		1.093	1.5						30	
46423.755	46431	1.118	1.163	1.5							
	48506		1.139	1.5						23	
51528.460	51853	0.925	0.995	1.5						26	
	54657		0.736	1.5							
	55695		1.278	1.5							
	55998		0.523	1.5							
	57074		1.289	1.5							
	58109		1.787	1.5						26	
	58992		0.856	1.5							
	61020		0.893	1.5							
	61604		1.108	1.5							
	64223		1.076	1.5							
	64916		1.275	1.5							
	65806		1.098	1.5							

$E^{exp}$	$E^{th}$	$g_L^{exp}$	$g_L^{th}$	J	IS	% fs2	fds	fd2	dsp	d2p	s2p
	66885		0.749	1.5							
	67908		1.315	1.5							
	68460		0.969	1.5							
	68981		0.926	1.5							
	69609		1.500	1.5							
	70339		1.118	1.5							
	72172		1.560	1.5							
	72891		1.054	1.5							
	73676		0.834	1.5							
	76320		1.119	1.5							
	77356		0.939	1.5							
	83004		1.279	1.5							
	93137		1.336	1.5							
	102249		1.885	1.5							
	109987		0.988	1.5							
	123072		1.260	1.5							
4490.262	4495	0.856	0.857	2.5	54		91				
7331.485	7252	1.061	1.067	2.5	-365		91				
9585.404	9662	0.601	0.605	2.5	-375		93				
10673.138	10686	1.088	1.089	2.5	-361		87				
12472.177	12467	0.982	0.974	2.5	-399		80				
14545.556	14597	1.339	1.341	2.5	-363		84				
16033.148	16036	1.070	1.076	2.5	-432		68				
17460.627	17441	1.510	1.507	2.5	-350		87				
17983.383	18060	0.995	1.005	2.5	-727			51			
19248.270	19243	0.931	0.968	2.5	-661			38			
20120.155	20094	0.743	0.829	2.5	-782			58			
20310.941	20325	1.161	0.944	2.5	-602			46			
20686.147	20702	0.945	1.021	2.5	-779			55			
21297.516	21394	0.767	0.737	2.5	-743			63			
22513.292	22424	1.170	1.184	2.5	-746			73			
24463.789	24371	1.396	1.324	2.5	-695			52			
24873.983	24920	1.081	1.158	2.5	-387			20	35		
25440.231	25509	1.138	1.137	2.5	-723			73			
26424.471	26477	1.169	1.223	2.5	-738			59			
28243.812	28170	0.922	0.981	2.5	-421				24		
28587.359	28694	1.000	1.075	2.5	-751			44			
28923.203	28958	1.070	0.937	2.5	-725			68			
29095.464	29131	0.998	0.983	2.5	-706		45				
30972.162	31152	1.217	1.091	2.5	-163				29		
31810.548	32207	1.118	1.272	2.5	-376				52		
32850.063	32956	1.093	1.084	2.5	-683			51			
33355.784	33407	0.952	0.945	2.5	-702			48			
34212.023	34312	1.148	1.082	2.5	-274				32		
35156.911	35283	1.079	1.055	2.5	-673			66			
36687.986	36359	1.049	1.102	2.5	-506						51
37846.167	37633	1.165	1.191	2.5	-469						30
38581.635	38384	1.105	1.161	2.5	-336						45
38493.766	38441	1.217	1.030	2.5	-409				32		
39861.639	39736	1.172	1.112	2.5	-318			35	22		
40654.463	40879	0.943	1.063	2.5	-581				27		
42219.758	42366	1.168	1.117	2.5	-511						57
43382.787	43257	1.203	1.233	2.5	-521						54
	44238		1.131	2.5							29
45221.542	45128	1.347	1.325	2.5	-466						50
46155.537	45994	1.152	1.095	2.5	-917				25		27
49289.526	49487	1.208	1.222	2.5							50
51946.833	51699	0.937	0.927	2.5							29
	53464		0.640	2.5							
54648.269	54772		1.101	2.5							
	56383		0.650	2.5							
	56963		1.141	2.5							
	57270		1.054	2.5							
	58628		0.615	2.5							
	59506		1.001	2.5							
	61065		1.116	2.5							
	61958		0.921	2.5							
	62474		0.933	2.5							
	63352		1.090	2.5							
	64337		1.138	2.5							
	65297		1.022	2.5							
	66054		1.099	2.5							
	66123		1.013	2.5							
	68302		1.046	2.5							
	69246		1.066	2.5							
	70315		1.170	2.5							
	70989		1.077	2.5							
	71429		1.256	2.5							
	71724		1.243	2.5							
	73141		1.305	2.5							
	74247		0.965	2.5							
	75090		1.140	2.5							
	76171		1.187	2.5							
	81075		0.868	2.5							
	81598		1.150	2.5							
	87725		0.859	2.5							

$E^{exp}$	$E^{th}$	$g_L^{exp}$	$g_L^{th}$	$J$	IS	% fs2	fds	fd2	dsp	d2p	s2p
	112385		1.200	2.5							
6168.356	6181	0.718	0.724	3.5	-371		96				
8378.859	8379	1.132	1.127	3.5	42		85				
9202.265	9114	0.911	0.902	3.5	-358		81				
9720.297	9766	1.173	1.172	3.5	-357		87				
11116.584	11038	0.983	0.987	3.5	-411		70				
12485.683	12462	0.855	0.845	3.5	-680				51		
13818.337	13854	1.153	1.156	3.5	-404		59				
14791.992	14848	0.862	0.861	3.5	-574		49	34			
15453.035	15516	1.296	1.294	3.5	-393		80				
16906.598	16934	0.950	0.959	3.5	-692					46	
18973.777	18948	1.120	1.130	3.5	-665		28	34			
20080.668	20029	1.142	1.155	3.5	-585		37				
20969.012	21033	0.981	0.971	3.5	-786					71	
21682.747	21638	1.200	1.253	3.5	-775					67	
22685.446	22811		0.985	3.5	-786		86				
23518.421	23518	1.200	1.121	3.5	-777					48	
23697.656	23620	1.000	1.065	3.5	-351					45	
24982.445	25039	0.990	0.984	3.5	-763					69	
26963.912	26963		1.198	3.5	-775		86				
27249.545	27344	1.382	1.397	3.5	-739				76		
30101.405	30220	1.130	1.137	3.5	-762					81	
30994.266	30908	1.199	1.226	3.5	-277					70	
31800.192	31811	1.168	1.150	3.5	-584				56		
32957.429	33130	1.072	1.044	3.5	-509						63
33902.083	34169	1.000	1.027	3.5	-685			37			
35593.530	35483	1.130	1.279	3.5	-715					47	
36583.819	36693	1.140	1.137	3.5	-429					20	33
37756.788	37817	1.118	1.100	3.5	-703				45		
38764.651	38880	1.098	1.089	3.5	-526						54
39396.554	39341	1.131	1.150	3.5	-568				28		
40184.106	40119	1.230	1.247	3.5	-550						39
40706.811	40883	1.073	1.064	3.5	-640						53
42944.467	42932	1.246	1.199	3.5	-494						47
	44595		1.073	3.5		29	30				
44650.488	44839	1.234	1.329	3.5	-568						52
45689.333	45754	1.261	1.191	3.5							36
49121.931	49030	1.110	1.128	3.5							38
	50123		0.765	3.5							
	53574		1.076	3.5		34					
	54643		0.941	3.5							
	56088		0.980	3.5							
	57515		1.166	3.5							
	57891		1.113	3.5							
	59010		0.966	3.5							
	59418		1.029	3.5							
	59936		1.067	3.5							
	60856		0.995	3.5							
	61102		1.133	3.5							
	61994		1.115	3.5							
	62230		1.077	3.5							
	65789		1.074	3.5							
	66139		1.238	3.5							
	66446		1.126	3.5							
	67929		1.137	3.5							
	69226		1.147	3.5							
	69714		1.208	3.5							
	70570		1.182	3.5							
	71210		1.149	3.5							
	73393		1.070	3.5							
	74658		1.319	3.5							
	75300		1.068	3.5							
	75732		1.004	3.5							
	79140		1.128	3.5							
	82802		1.138	3.5							
	89783		1.143	3.5							
6700.186	6716	1.018	1.018	4.5	-386		89				
9238.020	9220	1.083	1.083	4.5	-508		91				
10572.041	10517	0.931	0.928	4.5	-453		71				
12488.287	12512	1.245	1.251	4.5	-351		93				
13469.967	13459	1.185	1.187	4.5	-365		91				
14275.576	14202		0.789	4.5	-755		78				
15242.898	15291	1.000	1.005	4.5	-775				86		
17272.250	17370		1.075	4.5	-508		66				
17722.984	17760	1.080	1.057	4.5	-779				86		
20989.806	21112	0.940	0.963	4.5	-762		36			25	
22139.656	22174	1.090	1.075	4.5	-773					63	
22642.105	22571	1.043	1.047	4.5	-629		35			38	
23730.653	23618	1.186	1.203	4.5	-711					61	
24757.506	24725	1.130	1.151	4.5	-786					91	
25607.111	25592	1.090	1.136	4.5	-752					48	
27351.358	27460		1.040	4.5	-747					56	
27787.842	27827	1.160	1.113	4.5						68	
29788.449	29731		1.242	4.5	-772					85	
30956.567	31128		0.936	4.5	-762					71	
35593.437	35705		1.098	4.5	-209					71	

$E^{exp}$	$E^{th}$	$g_L^{exp}$	$g_L^{th}$	J	IS	% fs2	fds	fd2	dsp	d2p	s2p
36193.435	36016	1.149	1.199	4.5	-572						53
37569.760	37523	1.290	1.283	4.5	-131				68		25
39443.996	39556	1.145	1.132	4.5	-560						62
42318.014	42301	1.167	1.149	4.5	-549						71
45489.124	45601	1.089	1.098	4.5							77
46368.209	46364	1.088	1.108	4.5							69
49495.558	49578	0.780	0.810	4.5							
	49755		0.747	4.5							
	53035		1.009	4.5							
	54064		0.898	4.5							
	56259		0.998	4.5							
	56707		1.079	4.5							
	57602		1.055	4.5							
	59236		1.207	4.5							
	60796		1.081	4.5							
	61433		1.151	4.5							
	61479		1.151	4.5							
	61755		1.144	4.5							
	63137		1.142	4.5							
	63520		1.121	4.5							
	65687		1.167	4.5							
	66507		0.942	4.5							
	68220		1.095	4.5							
	70679		1.162	4.5							
	71798		0.945	4.5							
	72939		1.170	4.5							
	74887		1.111	4.5							
	76188		1.007	4.5							
	78598		1.157	4.5							
10189.067	10281	1.128	1.127	5.5	-365		95				
14484.323	14412	1.090	1.089	5.5	-449		71				
15349.879	15304	1.267	1.266	5.5	-353		97				
16564.628	16543	0.980	0.973	5.5	-775			89			
17771.064	17847	1.100	1.086	5.5	-774			93			
20288.574	20167	0.970	0.981	5.5	-774			93			
22014.877	21913	1.100	1.097	5.5	-505		68				
24309.221	24126	1.100	1.105	5.5	-679			65			
25414.920	25545	1.250	1.235	5.5	-802			97			
26770.492	26527		1.250	5.5	-802			92			
30310.207	30302	1.100	1.104	5.5	-751			68			
31924.599	31854	0.990	1.031	5.5	-652			68			
35602.412	35500	1.020	1.009	5.5	-775			71			
41447.959	41294	1.267	1.259	5.5	-565						91
47466.271	47550	1.130	1.105	5.5							82
	51720		0.969	5.5							
	53003		1.016	5.5							
	55195		1.013	5.5							
56370.341	56285		1.159	5.5							
	57753		1.013	5.5							
	59355		1.103	5.5							
	60063		1.185	5.5							
	62048		1.183	5.5							
	62890		1.196	5.5							
	64161		1.002	5.5							
	64684		1.045	5.5							
	65703		1.089	5.5							
	68386		1.073	5.5							
	70299		1.070	5.5							
	72638		1.238	5.5							
	80076		1.119	5.5							
13406.433	13478	1.231	1.231	6.5	-342		97				
18816.865	18892	1.100	1.106	6.5	-784			92			
19912.339	20003	1.160	1.177	6.5	-774			87			
23187.013	23289		1.112	6.5	-643			85			
26647.795	26778		0.954	6.5				97			
35165.359	35219	1.080	1.077	6.5				96			
	53603		1.103	6.5							
	56280		1.151	6.5							
	57861		1.130	6.5							
	59258		0.942	6.5							
	61031		1.126	6.5							
	65004		1.036	6.5							
	65549		1.069	6.5							
	69103		0.987	6.5							
22028.010	22007	1.180	1.197	7.5	-771			99			
30223.150	29824		1.071	7.5				99			
	55380		1.189	7.5							
	60667		1.198	7.5							
	60871		1.047	7.5							
	64595		0.973	7.5							
	70819		1.069	7.5							
	65445		1.059	8.5							

# Bibliographie

- [1] J. F. Wyart et J. E. Lawler. Phys.Scr. **79** 45301(2009).
- [2] J. F. Wyart. Phys. Scr. **82**, 35302(2010).
- [3] N. Minsky. These de doctorat, Jerusalem (1969).
- [4] R. D. Cowan. The Theory of Atomic Structure and Spectra Univ. of Calif. Press, Berkeley (1981).
- [5] E. Biémont. Spectroscopie atomique, Instrumentation et structures atomiques, Editions De Boeck Université (2006).
- [6] A. Thorne, U. Litzén et S. Johansson. Spectrophysics, Principles and Applications, Springer Edition (1999).
- [7] R. Zalubas et C.H. Corliss. J. Res. Nat. BurStand. A **78**, 163(1974).
- [8] A. E. Kramida. The MS Windows version of the Cowan code, available online at <http://das101.isan.troitsk.ru/Cowan>.
- [9] H. Nilsson, Z.G. Zhang, H. Lundberg. A&A **382**, 368(2002).
- [10] Jr. Engleman, et B. A. Palmer. J. opt. Soc. Am. B, **1**, 782(1984).