

**UNIVERSITE ASSANE SECK DE ZIGUINCHOR**

**UFR SCIENCES ET TECHNOLOGIES**



**Ecole Doctorale: Sciences, Technologies et Ingénierie (ED-STI)**

**Thèse de Doctorat unique**

**Spécialité : Physique Atomique et Nucléaire**

**Présentée par**

**Abdourahmane DIALLO**

**Théorie modifiée des orbitales atomiques appliquée au calcul variationnel des énergies des états doublement excités  $Nsnp$  des systèmes héliumoides et à l'étude de la photoionisation résonante des ions  $CIII$ ,  $KrII$  et  $ArII$**

Soutenue publiquement le **03 Février 2021** devant la commission d'examen:

<b>Nom et Prénom</b>	<b>Grade</b>	<b>Qualité</b>	<b>Établissement</b>
Abdoulaye GASSAMA	Professeur	Président	UASZ
Diène NDIAYE	Professeur	Rapporteur	UGB
Issakha YOUM	Professeur	Rapporteur	UCAD
Maurice NDEYE	Maître de Conférences IFAN	Rapporteur	UCAD
Moctar CAMARA	Professeur	Examineur	UASZ
Ababacar NDIAYE	Maître Assistant	Examineur	UASZ
Ibrahima SAKHO	Maître de Conférences	Directeur de Thèse	UT



# Résumé

**Titre :** Théorie modifiée des orbitales atomiques appliquée au calcul variationnel des énergies des états doublements excités  $N_{\text{snp}}$  des systèmes héliumoïdes et à l'étude de la photoionisation résonante des ions  $\text{Cl II}$ ,  $\text{Kr II}$  et  $\text{Ar II}$

**Nature :** Thèse de Doctorat unique en Physique atomique et nucléaire

**Présentée par :** Abdourahmane DIALLO

**Date de soutenance :** 03 février 2021 devant la commission d'examen à 15 heures

**Lieu de soutenance :** Université Assane Seck de Ziguinchor (UASZ)

## Composition du jury :

Abdoulaye **GASSAMA**, Professeur, (UASZ) Président

Diéne **NDIAYE**, Professeur, (UGB) Rapporteur

Issakha **YOUM**, Professeur, (UCAD) Rapporteur

Maurice **NDEYE**, Maître de Conférence IFAN (UCAD), Rapporteur

Moctar **CAMARA**, Professeur, (UASZ), Examineur

Ababacar **NDIAYE**, Maître Assistant, (UASZ), Examineur

Ibrahima **SAKHO**, Maître de Conférences (UT), Directeur de Thèse

Le présent travail porte sur le formalisme de la théorie modifiée des orbitales atomiques (TMOA) appliquée à l'étude de la photoionisation résonante des systèmes atomiques à plusieurs électrons. Dans ce présent travail nous avons utilisé la méthode TMOA pour le calcul des énergies de résonance, des largeurs naturelles, des énergies totales et d'excitation des systèmes atomiques à plusieurs électrons autrement dit les systèmes héliumoïdes. Ce présent travail est structuré en trois chapitres :

Dans le premier chapitre nous avons décrit les différents processus de photoionisation résonante, et la description des séries de Rydberg. Nous avons également effectué une revue de quelques méthodes théoriques et expérimentales appliquées à l'étude de la photoionisation résonante, et des largeurs naturelles des séries de Rydberg. Le deuxième chapitre est réservé au formalisme de la méthode de la théorie modifiée des orbitales atomiques (TMOA) appliquée aux calculs des énergies des états doublement excités  $2_{\text{snp}}$ ,  $3_{\text{snp}}$ , et  $4_{\text{snp}}$  des systèmes héliumoïdes. En fin notre troisième et dernier chapitre porte sur l'étude de la photoionisation

résonante des ions Cl II, Kr II, Ar II par la méthode de la théorie modifiée des orbitales atomique (TMOA). Les résultats obtenus dans ce chapitre sont comparés aux résultats obtenus dans la littérature théorique et expérimentale consultée.

Ainsi nous avons appliqué le formalisme TMOA pour le calcul :

Des énergies de résonances de la série de Rydberg  $[3s^23p^3(^2D_{5/2}^0)]nd$  provenant de l'état fondamental  $3s^23p^4^3P_2^0$  ainsi que des états métastables  $3s^23p^4^3P_1^0$ ,  $3s^23p^4^3P_0^0$ ,  $3s^23p^4^1S_0^0$ ,  $3s^23p^4^1D_2$  des ions Cl II.

Des énergies de résonance de la série  $[3s^23p^4(^1D_2)]ns, nd$  ( $j=1/2$ ) et de la série  $[3s^23p^4(^1D_2)]nd$  ( $j = 3/2$ ) provenant de l'état métastable  $3s^23p^5^2P_{1/2}^0$  des ions Ar II

Des énergies de résonance de la série  $[3s^23p^4(^1D_2)]nd$  ( $j = 3/2$ ) provenant de l'état fondamental  $3s^23p^5^2P_{3/2}^0$  des ions Ar II.

Des largeurs naturelles des séries  $[3s^23p^4(^1D_2)]ns, nd$  ( $j = 1/2$ ),  $[3s^23p^4(^1D_2)]ns, nd$  ( $j = 3/2$ ) provenant de l'état métastable  $3s^23p^5^2P_{3/2}^0$  des ions  $Ar^+$ .

Des énergies de résonance et le défaut quantique de la série  $[4s^24p^4(^1D_2)]$  provenant de l'état fondamental  $34s4p^5^2P_{3/2}^0$  des ions Kr II.

Des énergies de résonance et le défaut quantique de la séries  $[4s^24p^4(^3D_2)]ns, nd$  provenant de l'état métastable  $34s4p^5^2P_{1/2}^0$  des ions Kr II.

Des énergies totales des états  $(3snp^1P^o)$ ,  $(2snp^1P^o)$ ,  $(4snp^1P^o)$  ainsi que les énergies d'excitation des états  $(3snp^1P^o)$ ,  $(2snp^1P^o)$ ,  $(4snp^1P^o)$ .

Les résultats obtenus pour les Ions Cl II, Ar II, Kr II, ont fait l'Object d'une première publication à la revue internationales indexés, Journal of Modern Physics, 2018, 9, 2594-2622. Les résultats obtenus pour la procédure variationnelle ont aussi fait l'objet d'une troisième publication à la revue internationales indexés, Journal of Modern Physics, 2021, 12, 105-121.

**Mots clés :** Théorie modifiée des orbitales atomiques, photoionisation résonante, photoexcitation,, largeur naturelle, série de Rydberg, systèmes Hélioïdes.

# Abstract

The present work deals with the formalism of the modified atomic orbital theory (MAOT) applied to the study of the resonant photoionization of atomic systems with several electrons. In this work we have used the MAOT method for the calculation of resonance energies, natural widths, total energies and excitation of multi-electron atomic systems other words He-like systems. This present work is structured in three chapters:

In the first chapter we have written the different processes of resonant photoionization, and the description of the Rydberg series. We also carried out a review of some theoretical and experimental methods applied to the study of resonant photoionization, and the natural widths of the Rydberg series. The second chapter is reserved for formalism of the method of the modified atomic orbital theory (MAOT) applied to the calculations of the energies of the doubly excited states  $2snp$ ,  $3snp$ , and  $4snp$  of the He-like systems. Finally our third and last chapter deals with the study of resonant photoionization of Cl II, Kr II, Ar II ions by the modified atomic orbital theory (MAOT) method. The results obtained in this chapter are compared with the results obtained in the theoretical and experimental literature consulted.

So we applied the MAOT formalism for the calculation:

The resonance energies of the  $[3s^23p^3(^2D_{5/2}^0)]nd$  Rydberg series originating from the  $3s^23p^4^3P_2^0$  ground state and from the  $3s^23p^4^3P_1^0$ ,  $3s^23p^4^3P_0^0$ ,  $3s^23p^4^1S_0^0$ ,  $3s^23p^4^1D_2$  metastable states of Cl II ions.

The resonance energies of the  $3s^23p^4(^1D_2)ns, nd$  ( $j = 1/2$ ) and of the  $3s^23p^4(^1D_2)nd$  ( $j = 3/2$ ) series originating from the  $3s^23p^5^2P_{1/2}^0$  metastable state of the Ar II ions. The resonance energies of the  $3s^23p^4(^1D_2)nd$  ( $j = 3/2$ ) series originating from the  $3s^23p^5^2P_{3/2}^0$  ground state of the Ar II ions.

The natural widths of the  $[3s^23p^4(^1D_2)]ns, nd$  ( $j = 1/2$ ) and of the  $[3s^23p^4(^1D_2)]ns, nd$  ( $j = 3/2$ ) series originating from the  $3s^23p^5^2P_{1/2}^0$  metastable state of Ar<sup>+</sup> ions.

The resonance energies and quantum defect of the  $[4s^24p^4(^1D_2)]nd$  series originat-

ing from the  $4s^24p^5 P_{3/2}^0$  ground state of the Kr II ions.

The resonance energies and quantum defect of the  $4s^24p^4(^3P_2, ^3P_1)]ns$  and  $4s^24p^4(^3P_1)]ns$  series originating from the  $4s^24p^5 ^2P_{1/2}^0$  metastable state of the Kr II ions.

The resonance energies and quantum defect of the  $4s^24p^4(^3D_2)]ns, nd$  series originating from the  $4s^24p^5 ^2P_{1/2}^0$  metastable state of the Kr II ions.

Total energies of the states  $(3snp^1P^o)$ ,  $(2snp^1P^o)$ ,  $(4snp^1P^o)$  as well as the excitation energies of the states  $(3snp^1P^o)$ ,  $(2snp^1P^o)$ ,  $(4snp^1P^o)$ .

The results obtained in this work are in good agreement with the experimental and theoretical values available.

The results obtained for the Cl II, Ar II, Kr II ions, made the Object of a first publication in the international indexed journals, Journal of Modern Physics, 2018, 9, 2594-2622. The results obtained for the variational procedure were also the subject of a third publication in the international indexed journals, Journal of Modern Physics, 2021, 12, 105-121.

**Keywords:** Modified atomic orbital theory, resonant photoionization, photoexcitation, natural width, Rydberg series, He-like systems.

# Remerciements

Je remercie très fort le Bon Dieu, le Tout-Puissant de m'avoir donné le courage, la volonté et la patience de mener ce présent travail. Ce travail a été réalisé au sein du laboratoire LCPM de L'UASZ, sous la direction du Professeur Ibrahima SAKHO ; par ailleurs mon encadreur.

Je tiens à le remercier infiniment pour avoir accepté de m'encadrer, mais aussi de m'avoir donné tous les moyens et opportunités nécessaires pour la réussite de ce travail. Je le remercie encore de m'avoir donné du courage à travers les différentes présentations effectuées pendant toute cette période, et qui me seront utiles à jamais.

Je lui estime particulièrement toute ma reconnaissance pour m'avoir fait bénéficier de ses compétences scientifiques, ses qualités humaines et sa constante disponibilité. Mes sincères remerciements sont également adressés à tous mes professeurs de physique et autres.

Mes remerciements sont aussi adressés au professeur Ababacar Ndiaye, Lat Grand Ndiaye, Diouma Kobor, Modou Tine, Moustapha Thiame, Samo Diatta, Moctar Camara, Bamol A. Sow, Joseph S. DIATTA, Lamine Mbaye, pour la connaissance qu'ils m'ont transmise durant tout mon parcours universitaire.

Mes remerciements sont également adressés au Professeur Abdoulaye GASSAMA de l'Université Assane Seck de Ziguinchor, pour avoir participé à notre formation universitaire et pour avoir accepté de présider ce présent jury de Thèse. Qu'il trouve ici exprimer toutes mes grâces.

Je garde un merci à mes aînés docteurs et doctorants des deux laboratoires LOSEC et LCPM. Mes profonds remerciements vont également à Moustapha Sow (Cyprien), Aliou badara Sarr, Mamadou Diouldé Ba, Moussa Touré et Issa Faye, Hamdy Ng Sabaly, M Diba, Cheikh. W. Diédhiou, Jules Basse, Omar Kata Faye, Moussa Camara, Youssouph Coly, Jean K. Badiane ; qui m'ont également soutenu pour la réussite de ce travail.

Un grand merci Mamadou Fallou Diallo un frère qui aussi m'a beaucoup soutenu pour la réussite de ce travail. Un grand respect pour mes amis Amadou Djibril

Diallo, Checkou Cherif Danfa, Thierno Sadou Diallo, Saifoulaye Diallo, Mamadou Aliou Diallo, Lamarana Diallo, qui m'ont toujours encouragé en me motivant rien que pour la réussite de ce noble travail.

Je garde aussi un grand merci à tous ceux qui de près ou de loin, ont contribué à notre formation morale, scolaire et Universitaire.

Je remercie également le Docteur Malick Sow de l'Université Cheikh Anta Diop de Dakar pour notre collaboration et surtout le travail que nous faisons ensemble à distance, un grand merci à lui.

Nos remerciements sont aussi adressés au Professeur Moctar CAMARA de l'Université Assane Seck de Ziguinchor, au Docteur Ababacar NDIAYE, pour avoir accepté d'examiner cette présente Thèse. Veuillez donc trouver exprimer en quelques lignes Professeur, notre profonde gratitude. Nous exprimons de même notre reconnaissance aux Professeurs Issakha YOUM, Maurice NDEYE de l'Université Cheikh Anta Diop de Dakar, au Professeur Diène NDIAYE de l'Université Gaston Berger, pour avoir accepté d'être rapporteur de cette présente Thèse. Qu'ils en soient donc infiniment remerciés.

A nos maitres et professeurs qui ont assuré notre formation à l'élémentaire, au collège puis au lycée, nous adressons nos sincères remerciements. Qu'Allah puisse les rétribuer tous. Aux autorités de l'école doctoral, du rectorat, aux personnels des services administratifs et Techniques et aux professeurs de l'UFR Sciences et Techniques de l'Université Assane Seck de Ziguinchor, nous témoignons notre profonde gratitude.

Un grand merci à ma femme Mariama Foly Diallo celle qui me soutient partout où je suis. Qu'elle en soit donc infiniment remerciée.

Un grand merci à mon père et ma mère qui se sont toujours sacrifiés pour mes études. Je remercie infiniment mon oncle Saidou Diallo et ma tante Mariama Ba. Sachez que je vous remercie tous au fond du cœur, et je suis très fière de vous.

Enfin, permettez-moi de terminer par là ou j'aurais dû commencer en l'occurrence, ce que j'ai le plus chère, ma très chère famille de Boubbata.

Ce travail est dédié à mon oncle Ibrahima Diallo (que la terre lui soit légère).

# Table des matières

<b>Résumé</b>	<b>i</b>
<b>Abstract</b>	<b>iii</b>
<b>Remerciements</b>	<b>v</b>
<b>Table des matières</b>	<b>vii</b>
<b>Table des figures</b>	<b>xi</b>
<b>Liste des tableaux</b>	<b>xiii</b>
<b>Liste des acronymes</b>	<b>xix</b>
<b>1 Généralités sur la photoionisation résonante et les séries de Rydberg</b>	<b>7</b>
1.1 Processus de photoionisation . . . . .	9
1.1.1 Photoionisation direct ou simple, Photoionisation résonante.	9
1.1.1.1 La Photoionisation direct ou simple . . . . .	9
1.1.1.2 La Photoionisation résonante. . . . .	10
1.1.2 Photoionisation multiple. . . . .	11
1.1.3 Illustration du phénomène d'autoionisation dans le cas des systèmes atomiques à plusieurs électrons . . . . .	12
1.2 Série de Rydberg. . . . .	14
1.2.1 Définition . . . . .	14
1.2.2 Parité paire et parité impaire . . . . .	15
1.2.3 Energie et largeur naturelle de résonance . . . . .	16
1.3 Quelques méthodes expérimentales et théoriques appliquées à l'étude de la photoionisation résonante et des largeurs naturelles des séries de Rydberg. . . . .	18
1.3.1 Méthodes expérimentales . . . . .	18
1.3.1.1 Montage du rayonnement synchrotron. . . . .	18
1.3.1.2 Excitation par rayonnement synchrotron. . . . .	19
1.3.1.3 Excitation par spectroscopie de photoabsorption. . . . .	20
1.3.1.4 Excitation par impact photonique. . . . .	20

1.3.2	Méthodes théoriques. . . . .	20
1.3.2.1	Méthodes variationnelle de Hylleraas. . . . .	21
1.3.2.2	Méthodes de diagonalisation. . . . .	21
1.3.2.3	Méthodes des coordonnées hyper sphériques. . . . .	22
1.3.2.4	Méthodes de la rotation complexe. . . . .	22
1.3.2.5	Méthodes de la constante d'écran par unité de charge nucléaire. . . . .	22
1.3.3	Notion de section efficace . . . . .	23
1.3.3.1	Détermination expérimentale de section efficace. . . . .	25
1.3.3.2	Détermination théorique de section efficace. . . . .	25
<b>2</b>	<b>Théorie modifiée des orbitales atomiques appliquée au calcul des énergies des états doublements excités de types Nsnp des systèmes héliumoides.</b>	<b>29</b>
2.1	Théorie des orbitales atomiques de Slater . . . . .	32
2.1.1	Définition . . . . .	32
2.1.2	Le model de Slater . . . . .	32
2.2	Modification de la théorie des orbitales atomiques . . . . .	35
2.3	Procédure variationnelle de la théorie modifiée des orbitales atomiques . . . . .	35
2.3.1	Construction de la fonction d'onde . . . . .	36
2.3.2	Détermination de la constante d'écran . . . . .	42
2.4	Résultats et Discussions. . . . .	45
2.4.1	Expression des énergies totales. . . . .	46
2.4.2	Expression du paramètre variationnel $\alpha$ . . . . .	47
2.4.3	Analyse et discussion des Résultats. . . . .	48
<b>3</b>	<b>Etude de la photoionisation résonante des ions ClII, KrII, ArII par la méthode de la TMOA</b>	<b>55</b>
3.1	Historique des éléments (Cl II, Kr II, Ar II) . . . . .	59
3.1.1	Le Chlore . . . . .	59
3.1.1.1	Historique du chlore . . . . .	59
3.1.1.2	Effets potentiels du chlore dans l'environnement et la santé . . . . .	59
3.1.1.3	Quelques avantages et inconvénients . . . . .	60
3.1.2	Le Krypton . . . . .	61
3.1.2.1	Historique du Krypton . . . . .	61
3.1.2.2	Effets potentiels du Krypton dans l'environnement et la santé . . . . .	61
3.2	Formalisme général de la méthode de la TMOA appliquée à la photoionisation résonante. . . . .	62
3.2.1	Description de la théorie modifiée des orbitales atomiques . . . . .	62
3.2.1.1	Expression générales des énergies totales des énergies de résonance et des largeurs naturelles. . . . .	62

3.2.1.2	Expressions des énergies de résonance et des largeurs naturelles des ions Cl II, Kr II, Ar II. . . . .	64
3.3	Résultats et discussion. . . . .	65
3.3.1	Expressions des constantes d'écrans . . . . .	65
3.3.2	Les énergies de résonance des différentes séries . . . . .	66
3.3.3	Les largeurs naturelles des différentes séries . . . . .	68
<b>Conclusion générale et perspectives</b>		<b>93</b>
<b>Bibliographie</b>		<b>97</b>
<b>Annexes</b>		<b>i</b>
<b>Procédure de calcul pour la détermination de la fonction d'onde radiale</b>		<b>iii</b>
<b>Principe de détermination de la constante d'écran</b>		<b>vii</b>
<b>Programme de calcul des fonctions d'ondes</b>		<b>xi</b>
<b>Publications aux revues internationales indexées.</b>		<b>xvii</b>



# Table des figures

0.0.1	Schéma de l'impact du laser sur la cible entraînant la création du plasma (Detalle, et al 2007) . . . . .	2
0.0.2	Niveau d'énergies des atomes et ions portés à l'état excité . . . . .	3
1.1.1	Illustration schématique des processus de photoionisation directe . . . . .	9
1.1.2	Illustration schématique des processus de photoionisation résonante. . . . .	10
1.1.3	Illustration schématique des processus de photoionisation multiple (« Shake off ») . . . . .	11
1.1.4	Illustration schématique des processus de photoionisation multiple (effet Auger) . . . . .	12
1.1.5	Illustration du phénomène d'autoionisation dans le cas de l'atome d'hélium He (I.Sakho 2013). . . . .	14
1.2.1	Largeur naturelle des niveaux excités . . . . .	17
1.3.1	Schéma de principe d'une installation synchrotron (Couprie, 2013). . . . .	18
1.3.2	Processus de diffusion des photons incidents par une particule cible (atome ou ion) . . . . .	23
2.1.1	Règles de Slater pour la détermination de la constante d'écran. . . . .	33
3.0.1	La nébuleuse NGC6741 (a) vu par le télescope hubble de la NASA/ESA (b), et la nébuleuse planétaire IC 5117 (c) . . . . .	57



# Liste des tableaux

1.1	Parités de quelques séries du système atomique à plusieurs électrons.	16
2.1	Expressions explicites de quelques fonctions d'onde hydrogénoïde.	39
2.2	Les énergies totales des états doublement excités de types $(Nsnp)^1P^o$ des systèmes héliumoïdes ( $Z = 2$ à $10$ ) en Rydberg (1 Ryd = 13,60569 eV).	51
2.3	Les énergies totales des états doublement excités de types $(Nsnp)^1P^o$ des systèmes héliumoïdes ( $Z = 2$ à $10$ ) en eV (1 Ryd = 13,60569 eV).	52
2.4	Les énergies totales des états doublement excités de types $(Nsnp)^1P^o$ des systèmes héliumoïdes ( $Z = 2$ à $10$ ) en eV (1 Ryd = 13,60569 eV).	52
2.5	Les énergies totales des états doublement excités de types $(Nsnp)^1P^o$ des systèmes héliumoïdes ( $Z = 2$ à $10$ ) en eV (1 Ryd = 13,60569 eV).	53
2.6	Les énergies d'excitations des états doublement excités de types $(Nsnp)^1P^o$ des systèmes héliumoïdes ( $Z = 2$ à $5$ ) en eV (1 Ryd = 13,60569 eV; 1 ua = 2 Ryd).	53
3.1	Énergies de résonance de la série Rydberg $[3s^23p^3(^2D_{5/2}^0)]nd$ provenant de l'état fondamental $3s^23p^4^3P_2^0$ des ions $Cl^+$ convergeant vers le seuil de $Cl^{2+}$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés aux calculs de matrice R de Dirac-Coulomb (DCR) (McLaughlin, 2017) et aux données expérimentales à ALS (Hernández et al. 2015). Les énergies limites sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2014). $\sigma_1(^2D_{5/2}) = -0,770 \pm 0,048$ ; $\sigma_2(^2D_{5/2}) = 15,00$ .	71
3.2	Énergies de résonance (E) et défaut quantique ( $\delta$ ) de la série Rydberg $[3s^23p^3(^2D_{5/2}^0)]nd$ provenant de l'état métastable $3s^23p^4^3P_2^0$ des ions $Cl^+$ convergeant vers le seuil $3s^23p^3(^2D_{5/2}^0)$ de $Cl^{2+}$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés aux calculs de la matrice R de Dirac-Coulomb (DCR) (McLaughlin. 2017) et aux données expérimentales à ALS (Hernández et al. 2015). Les énergies limites sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2014). $\sigma_1(^2D_{5/2}) = -0,781 \pm 0,048$ ; $\sigma_2(^2D_{5/2}) = 15,00$ .	72

- 3.3 Énergies de résonance ( $E$ ) et défaut quantique ( $\delta$ ) de la série Rydberg  $[3s^23p^3(^2D_{5/2}^0)]nd$  provenant de l'état métastable  $3s^23p^43P_0^0$  des ions  $Cl^+$  convergeant vers le seuil  $3s^23p^3(^2D_{5/2}^0)$  de  $Cl^{2+}$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés aux calculs de la R-matrice de Dirac-Coulomb (DCR) (McLaughlin. 2017) et aux données expérimentales à ALS (Hernández et al. 2015). Les énergies limites sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2014).  $\sigma_1(^2D_{5/2}) = -0,789 \pm 0,048; \sigma_2(^2D_{5/2}) = 15,00$ . . . . . 73
- 3.4 Énergies de résonance ( $E$ ) et défaut quantique ( $\delta$ ) de la série de Rydberg  $[3s^23p^3(^2P_{3/2}^0)]nd$  provenant de l'état fondamental  $3s^23p^43P_2^0$  des ions  $Cl^+$  convergeant vers le seuil  $3s^23p^3(^2P_{3/2}^0)$  de  $Cl^{2+}$ . (TMOA) sont comparés aux calculs de la matrice R de Dirac-Coulomb (DCR) (McLaughlin. 2017) et aux données expérimentales à ALS (Hernández et al. 2015). Les énergies limites sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2014).  $\sigma_1(^2P_{3/2}) = -1,006 \pm 0,077; \sigma_2(^2P_{3/2}) = 15,00$ .. . . . 74
- 3.5 Énergies de résonance ( $E, eV$ ), et défaut quantique ( $\delta$ ) de la série de Rydberg  $[3s^23p^3(^2P_{3/2}^0)]nd$  provenant de l'état métastable  $3s^23p^43P_1^0$  des ions  $Cl^+$  convergeant vers le seuil  $3s^23p^3(^2P_{3/2}^0)$  de  $Cl^{2+}$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés aux calculs de la matrice R de Dirac-Coulomb (DCR) (McLaughlin. 2017) et aux données expérimentales à ALS (Hernández et al. 2015). Les énergies limites sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2014).  $\sigma_1(^2P_{3/2}) = -1,018 \pm 0,076; \sigma_2(^2P_{3/2}) = 15,00$ . . . . . 75
- 3.6 Énergies de résonance ( $E, eV$ ) et défaut quantique ( $\delta$ ) de la série de Rydberg  $[3s^23p^3(^2P_{3/2}^0)]nd$  provenant de l'état métastable  $3s^23p^43P_0^0$  des ions  $Cl^+$  convergeant vers le seuil  $3s^23p^3(^2P_{3/2}^0)$  de  $Cl^{2+}$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés aux calculs de la matrice R de Dirac-Coulomb (DCR) (McLaughlin. 2017) et aux données expérimentales à ALS (Hernández et al. 2015). Les énergies limites sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2014).  $\sigma_1(^2P_{3/2}) = -1,088 \pm 0,076; \sigma_2(^2P_{3/2}) = 15,00$ . . . . . 76
- 3.7 Energie de résonance ( $E, eV$ ), défaut quantique ( $\delta$ ) de la série de Rydberg  $[3s^23p^5(^2P_{1/2}^0)]nd$  provenant de l'état métastable  $3s^23p^41S_0^0$  des ions  $Cl^+$  convergeant vers le seuil  $3s^23p^3(^2P_{1/2}^0)$  de  $Cl^{2+}$ . Comparaison des résultats actuels (TMOA) avec les calculs de la matrice R de Dirac - Coulomb (DCR) (McLaughlin. 2017) et avec les données expérimentales à ALS (Hernández et al. 2015). Les énergies limites sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2014).  $\sigma_1(^2P_{3/2}) = -0,262 \pm 0,015; \sigma_2(^2P_{3/2}) = 15,00$ . . . . . 77

- 3.8 Énergies de résonance ( $E, eV$ ) et défaut quantique ( $\delta$ ) de la série  $[3s^23p^3(^2D_{5/2}^0)]nd$  provenant de l'état métastable  $3s^23p^4(^1D_2)$  des ions  $Cl^+$  convergeant vers le seuil  $3s^23p^3(^2D_{5/2}^0)$  de  $Cl^{2+}$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés aux données expérimentales à ALS (Hernández et al. 2015) et aux calculs de la matrice R de Dirac-Coulomb (DCR) (McLaughlin. 2017). Les énergies limites sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2014).  $\sigma_1(^2D_{5/2}) = -0,483 \pm 0,050; \sigma_2(^2D_{5/2}) = 15,00$ . . . . . 78
- 3.9 Énergies de résonance ( $E, eV$ ) et défaut quantique ( $\delta$ ) de la série  $[3s^23p^4(^1D_2)]ns$  ( $j = 1/2$ ) provenant de l'état métastable  $3s^23p^5(^2P_{1/2}^0)$  des ions  $Ar^+$  convergeant vers le seuil  $3s^23p^5(^1D_2)$  de  $Ar^{2+}$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés à la SCUNC (Sakho, 2018) et aux données QB (Covington et al. 2011). Les énergies limites en eV sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2010).  $\sigma_1(^1D_2) = 4,227 \pm 0,224; \sigma_2(^1D_2) = 16,00$ . . . . . 79
- 3.10 Énergies de résonance ( $E, eV$ ) et défaut quantique ( $\delta$ ) de la série  $[3s^23p^4(^1D_2)]nd$  ( $j = 1/2$ ) provenant de l'état métastable  $3s^23p^5(^2P_{1/2}^0)$  des ions  $Ar^+$  convergeant vers le seuil  $3s^23p^4(^1D_2)$  de  $Ar^{2+}$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés à la SCUNC (Sakho, 2018) et aux données QB (Covington et al. 2011). Les énergies limites sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2010).  $\sigma_1(^1D_2) = -1,159 \pm 0,265; \sigma_2(^1D_2) = 16,00$ . . . . . 80
- 3.11 Énergies de résonance ( $E$ ) et défaut quantique ( $\delta$ ) de la série  $[3s^23p^4(^1D_2)]nd$  ( $j = 3/2$ ) provenant de l'état métastable  $3s^23p^5(^2P_{1/2}^0)$  des ions  $Ar^+$  convergeant vers le seuil  $3s^23p^4(^1D_2)$  de  $Ar^{2+}$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés à la SCUNC (Sakho, 2018) et aux données QB (Covington et al. 2011). Les énergies limites sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2010). (Ralchenko et al. 2010).  $\sigma_1(^1D_2) = -1,159 \pm 0,265; \sigma_2(^1D_2) = 16,00$ . . . . . 81
- 3.12 Énergies de résonance ( $E$ ) et défaut quantique ( $\delta$ ) de la série  $[3s^23p^4(^1D_2)]ns$  ( $j = 1/2$ ) provenant de l'état fondamental  $3s^23p^5(^2P_{3/2}^0)$  des ions  $Ar^+$  convergeant vers le seuil  $3s^23p^4(^1D_2)$  de de  $Ar^{2+}$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés à la SCUNC (Sakho, 2018) et aux données QB (Covington et al. 2011). Les énergies limites sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2010).  $\sigma_1(^1D_2) = 4,234 \pm 0,224; \sigma_2(^1D_2) = 16,00$ . . . . . 82
- 3.13 Énergies de résonance ( $E$ ) et défaut quantique ( $\delta$ ) de la série  $[3s^23p^4(^1D_2)]nd$  ( $j = 1/2$ ) provenant de l'état fondamental  $3s^23p^5(^2P_{3/2}^0)$  des ions  $Ar^+$  convergeant vers le seuil  $3s^23p^4(^1D_2)$  de de  $Ar^{2+}$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés à la SCUNC (Sakho, 2018) et aux données QB (Covington et al. 2011). Les énergies limites sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2010).  $\sigma_1(^1D_2) = -1,159 \pm 0,265; \sigma_2(^1D_2) = 16,00$ . . . . . 83

- 3.14 Énergies de résonance (E) et défaut quantique ( $\delta$ ) de la série  $[3s^23p^4(^1D_2)]ns$  ( $j = 3/2$  provenant de l'état fondamental  $3s^23p^5(^2P_{3/2}^0)$ ) des ions  $Ar^+$  convergeant vers le seuil  $3s^23p^4(^1D_2)$  de  $Ar^{2+}$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés à la SCUNC (Sakho, 2018) et aux données QB (Covington et al. 2011). Les énergies limites sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2010).  $\sigma_1(^1D_2) = 4,294 \pm 0,224; \sigma_2(^1D_2) = 16,00$ . . . . . 84
- 3.15 Energies de résonance (E, eV) et défaut quantique ( $\delta$ ) de la série  $[3s^23p^4(^1D_2)]nd$  ( $j = 3/2$  provenant de l'état fondamental  $3s^23p^5(^2P_{3/2}^0)$ ) des ions  $Ar^+$  convergeant vers le seuil  $3s^23p^4(^1D_2)$  de  $Ar^{2+}$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés à la SCUNC (Sakho, 2018) et aux données QB (Covington et al. 2011). Les énergies limites sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2010).  $\sigma_1(^1D_2) = -1,575 \pm 0,265; \sigma_2(^1D_2) = 16,00$ . . . . . 85
- 3.16 Largeurs naturelles ( $\Gamma, meV$ ) de la série  $[3s^23p^4(^1D_2)]ns, nd$  ( $j = 3/2$ ) provenant de l'état métastable  $3s^23p^5(^2P_{1/2}^0)$  des ions  $Ar^+$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés à la SCUNC (Sakho, 2018) et aux données QB (Covington et al. 2012). Pour :  $[4s^24p^4(^1D_2)]ns : \sigma_1(^1D_2) = 5.494 \pm 0.010; \sigma_2(^1D_2) = 17.989 \pm 0.010$ . Pour :  $[4s^24p^4(^1D_2)]nd : \sigma_1(^1D_2) = 0.168 \pm 0.010; \sigma_2(^1D_2) = 17.998 \pm 0.010$ . . . . . 86
- 3.17 Largeurs naturelles ( $\Gamma, meV$ ) de la série  $[3s^23p^4(^1D_2)]ns, nd$  ( $j = 1/2$ ) provenant de l'état métastable  $3s^23p^5(^2P_{1/2}^0)$  des ions  $Ar^+$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés à la SCUNC (Sakho, 2018) et aux données QB (Covington et al. 2012). Pour :  $[4s^24p^4(^1D_2)]ns : \sigma_1(^1D_2) = 0.670 \pm 0.010; \sigma_2(^1D_2) = 18.038 \pm 0.010$ . Pour :  $[4s^24p^4(^1D_2)]nd : \sigma_1(^1D_2) = 1.399 \pm 0.010; \sigma_2(^1D_2) = 17.827 \pm 0.010$ . . . . . 87
- 3.18 Énergies de résonance (E) et défaut quantique ( $\delta$ ) de la série  $[4s^24p^4(^1D_2)]nd$  provenant de l'état fondamental  $4s^24p^5(^2P_{3/2}^0)$  des ions  $Kr^+$  convergeant vers le seuil  $[4s^24p^4(^1D_2)]$  de  $Kr^{2+}$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés à la SCUNC (Sakho, 2018), aux données expérimentales à ALS (Hinojoha et al. 2012). Les énergies de résonance à ALS sont calibrées à  $\pm 30$  meV et les défauts quantiques sont estimés avec une erreur de moins de 20%. Les énergies limites sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2011).  $\sigma_1(^1D_2) = 0.719 \pm 0.116; \sigma_2(^1D_2) = 34.00$ . . . . . 88

- 3.19 Énergies de résonance (E) et défaut quantique ( $\delta$ ) de la série  $4s^24p^4(^3P_2, ^3P_1)]ns$  provenant de l'état métastable  $4s^24p^5(^2P_{1/2}^0)$  des ions  $Kr^+$  convergeant vers le seuil  $[4s^24p^4(^1D_2)]$  de  $Kr^{2+}$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés aux données expérimentales à ALS (Hinojoha et al. 2012). Les énergies de résonance à ALS sont calibrées à  $\pm 30$  meV et les défauts quantiques sont estimés avec une erreur de moins de 20%. Les énergies limites ( $E = 29,367eV$ ) sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2011).  $\sigma_1(^3P_2) = -1,438 \pm 0,104$ ;  $\sigma_2(^3P_2) = 34,00$ ;  $\sigma_1(^3P_1) = -0,863 \pm 0,138$ ;  $\sigma_2(^3P_1) = 34,00$ . . . . . 89
- 3.20 Énergies de résonance (E) et défaut quantique ( $\delta$ ) de la série  $[4s^24p^4(^3P_2, ^3P_1)]ns, nd$  provenant de l'état métastable  $4s^24p^5(^2P_{1/2}^0)$  des ions  $Kr^+$  convergeant vers le seuil  $[4s^24p^4(^1D_2)]$  de  $Kr^{2+}$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés aux données expérimentales à ALS (Hinojoha et al. 2012). Les énergies de résonance à ALS sont calibrées à  $\pm 30$  meV et les défauts quantiques sont estimés avec une erreur de moins de 20%. Les énergies limites ( $E = 29,367eV$ ) sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2011).  $\sigma_1(^1D_2) = -0.414 \pm 0.116$ ;  $\sigma_2(^1D_2) = 34.00$  pour  $[4s^24p^4(^3D_2)]ns$ .  $\sigma_1(^1D_2) = -0.698 \pm 0.116$ ;  $\sigma_2(^1D_2) = 34.00$  pour  $[4s^24p^4(^3D_2)]nd$ . . . . . 90
- 3.21 Énergies de résonance (E) et défaut quantique ( $\delta$ ) des  $[4s^24p^4(^3D_2, ^1S_0)]ns, nd$  des ions  $Kr^+$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés aux données expérimentales à ALS (Hinojoha et al. 2012). Les énergies de résonance à ALS sont calibrées à  $\pm 30$  meV et les défauts quantiques sont estimés avec une erreur de moins de 20%.  $\sigma_1(^1D_2) = -0.785 \pm 0.116$ ;  $\sigma_2(^1D_2) = 34.00$ ;  $\sigma_1(^1S_0) = -0.811 \pm 0.116$ ;  $\sigma_2(^1S_0) = 34.00$ . . . . . 91



# Liste des acronymes

ALS: Advanced Light Source.  
CEUCN: Constante d'écran par unite de charge nucleaire.  
DARC: Dirac R-matrix Atomic Code.  
ECR: Electron Cyclotron resonance ion Source.  
MAOT: Modified Atomic Orbital Theory  
MCDF : Muticonfiguration Dirac- Fock.  
MRC: Methode de la Rotation Complexe.  
NIST: National Institute of Standards and Technology.  
PID: Photoionisation directe. PIR, Photoionisation resonante.  
SCUNC: Screening constant by unit nuclear charge.  
LURE : Laboratoire pour l'Utilisation du Rayonnement Electromagnetique.  
SR: Rayonnement Synchrotron.



---

## Introduction générale

La majeure partie de la matière visible de l'univers est sous forme de plasma, un mélange d'ions et d'électrons en interaction avec le rayonnement électromagnétique constitué de photon. Ainsi la connaissance d'interaction ion-photon revêt un caractère déterminant non seulement pour la compréhension des observations astrophysiques, mais également des plasmas de laboratoire comme les plasmas produits par laser ou les plasmas de fusion thermonucléaire, ainsi que l'abondance des éléments chimiques. Dans les plasmas denses et chauds, le transport d'énergie est principalement gouverné par la photoabsorption par les ions du plasma ( Sakho, 2016). C'est un processus qui a une intensité maximale dans la gamme d'énergie XUV des photons. Le fer est l'élément le plus lourd produit par les étoiles lors de la nucléosynthèse. Il a ainsi une abondance cosmique significative, lui conférant un rôle de première importance en astrophysique : les raies spectrales de ses ions ont été observées dans la plupart des plasmas d'intérêt astrophysique, dans différents états de charge d'autant plus élevés que le plasma est chaud (El Hassan, 2010). Dans les étoiles et en particulier le soleil, ce sont les ions de fer qui contribuent essentiellement au transport d'énergie du centre de l'étoile vers l'extérieur, les éléments légers ayant déjà perdu tout ou une grande partie de leurs électrons. La photoabsorption des atomes et des ions est ainsi l'un des processus fondamentaux se produisant dans le cœur des étoiles. Elle est considérée comme un processus fondamental d'une grande importance dans de nombreux environnements plasmatiques à haute température, tels que ceux des étoiles et des nébuleuses (Bregman, et al. 1986) et ceux dans des expériences de fusion à confinement inertiel (Hofmann, 1990). Par conséquent il est important de disposer de données numériques des paramètres de résonances (énergies et largeurs naturelles notamment) utiles surtout pour le projet d'opacité (Seaton, 1987) qui est une large collaboration créée en 1984 et qui a comme objectif principal de calculer et de compiler sous forme de catalogue les propriétés collisionnelles et radiatives de tous les états d'ionisation des dix premiers éléments du tableau de classification périodique. L'étude des phénomènes de photoionisation des atomes a débuté dès que des sources de photons d'énergie supérieure aux différents seuils d'ionisations sont apparues. L'étude de la photoionisation résonante permet de déterminer les paramètres de Résonance (énergies, largeurs naturelles, forces d'oscillateurs, etc.) des séries de Rydberg des systèmes atomiques multichargés constituant les plasmas stellaires et de laboratoire. La détermination des paramètres des séries de Rydberg permet entre autres de diagnostiquer les plasmas stellaires et de laboratoire (Kahn, 1999 ; Keller et Dreizler,

1999 ; Faenov et al, 1999), de mettre au point de nouveaux types de lasers (Harris, 1989), de réaliser la séparation d'isotopes par photoionisation sélective (Letokhov, 1987), etc. Le diagnostic des plasmas de laboratoire créés par la spectroscopie sur plasma induit par laser (LIBS, Laser Induced Breakdown Spectroscopy) permet entre autre l'identification de la composition chimique d'un matériau à partir du calcul des énergies de résonance. La figure suivante montre la création d'un plasma de laboratoire à l'aide d'un système LIBS.

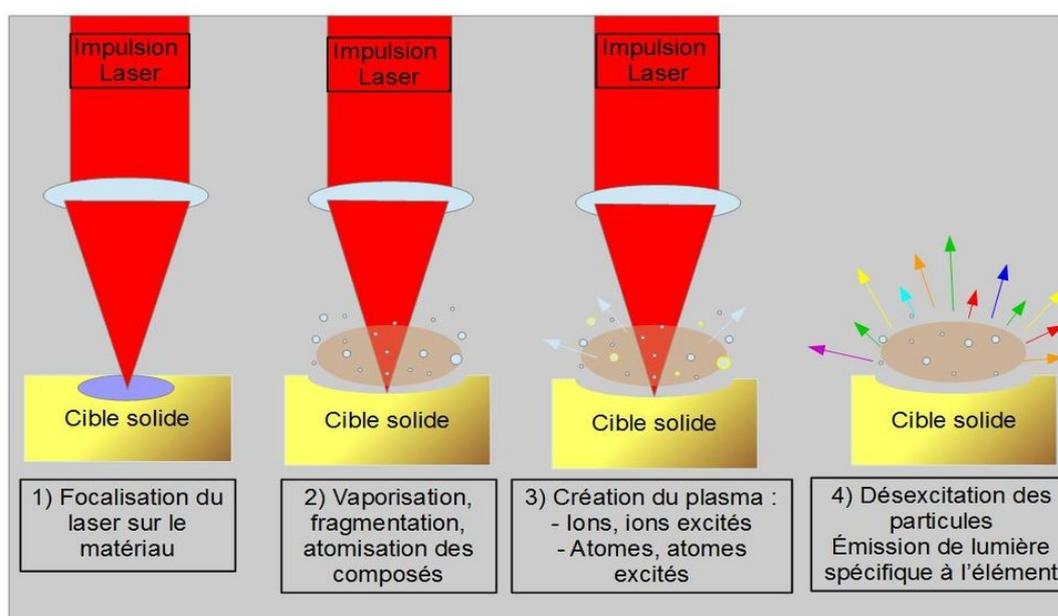


FIGURE 0.0.1 – Schéma de l'impact du laser sur la cible entraînant la création du plasma (Detalle, et al 2007)

En envoyant un faisceau de rayonnement laser (ordre de quelques dizaines de milli joules) sur un échantillon, il provoque un brutal échauffement de la matière (étape 1). En effet, cette focalisation augmente la densité surfacique d'énergie à un niveau très élevé. Ainsi lorsque l'énergie par unité de surface délivrée par le laser (fluence) est supérieure au seuil d'ablation du matériau, celui-ci est vaporisé au niveau du point d'impact (focal) du laser (étape 2). Cette vapeur absorbe une partie du rayonnement laser, elle s'échauffe et est en partie ionisée. La vaporisation entraîne la formation d'un plasma contenant des électrons, des atomes, et des ions dans des états excités, ainsi que l'éjection de la matière de la surface du matériau (étape 3). Un micro plasma est immédiatement formé avant que l'impulsion laser

---

ne se termine. A la fin de l'impulsion, il y'a vaporisation des particules éjectées lors du processus d'ablation, mais aussi d'exciter optiquement les espèces atomiques et ioniques contenues dans le plasma créé lors de l'impulsion (étape 4). Cela permet d'émettre un rayonnement.

Ainsi les atomes et ions formés sont portés à des états excités (voir figure). En se désexcitant vers le niveau fondamental 0 d'énergie  $E_0$ , ils émettent chacun un rayonnement lumineux caractéristique dont l'ensemble donne le spectre du plasma issu de l'échantillon analysé.

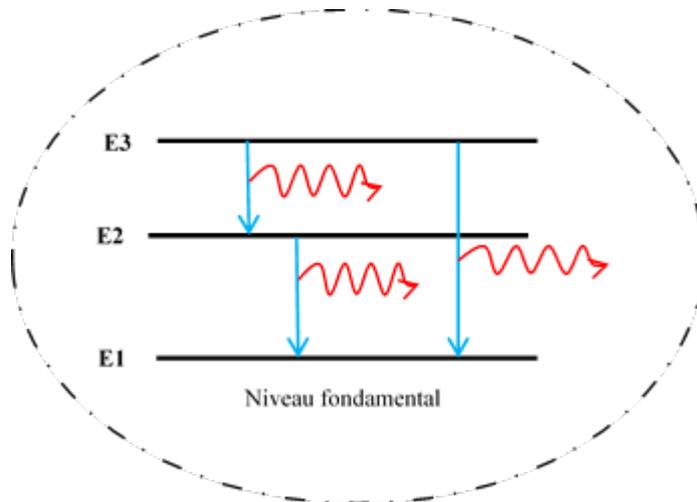


FIGURE 0.0.2 – Niveau d'énergies des atomes et ions portés à l'état excité

La détermination des énergies de résonance  $E_2$  et  $E_1$  par rapport au niveau fondamental, Permet le calcul des longueurs d'onde des raies émises lors des transitions  $2 \rightarrow 0$  et  $1 \rightarrow 0$ . Ce qui permet donc l'identification de l'élément chimique au sein duquel se produisent les transitions électroniques ainsi que de l'ensemble des éléments chimiques composant l'échantillon après analyse complète du spectre du plasma obtenu. La spectroscopie d'émission du plasma induit par laser (LIBS) est une technique d'analyse multi élémentaire, rapide, compacte et ne nécessitant qu'une préparation minimale de l'échantillon. Elle peut être adaptée pour réaliser à moindre coût un système de mesure portable des matériaux. Bien qu'elle est moins sensible que les techniques classiques d'analyses chimiques, avec une limitation de détection de l'ordre d'une dizaine de ppm ( $1 \text{ ppm} = 10^{-4} \%$ ), la LIBS possède néanmoins des atouts majeurs qui la positionnent en tant que méthode de pré-analyse. Elle est peut-être moins précise que ses concurrentes mais elle permet tout de même de prendre une première décision vis-à-vis d'un site donné (Sirven, 2006) . La technique LIBS permet des analyses à distance, en temps réel, sans

préparation préalable du substrat (absence de contamination). Elle est utilisable sur tout type de milieux : liquides (eau, acier fondu, pétrole), solides (alliages métalliques, céramiques, sédiments marins,..) ou gaz. Elle offre la possibilité de travailler sur des lignes de production (métallurgie, polymères, médicaments,) et d'étudier à distance des substances potentiellement dangereuses (Sirven, 2006).

La technique LIBS est très souvent utilisée à des fins environnementales : détection de composants toxiques, pollution de surface (détection de polluants métalliques dans le sol), pollution urbaine au niveau d'émissions gazeuses en sortie de tuyères provenant, par exemple, d'incinérateurs industriels (Sirven, 2006). Elle peut également être mise-en œuvre pour le contrôle de la qualité de l'eau qui constitue l'un des enjeux majeurs du développement durable.

Ainsi dans les systèmes héliumoïdes, des études ont permis aux expérimentateurs et aux théoriciens de mettre en évidence l'importance des phénomènes de corrélations électroniques dans les états fondamentaux et doublement excités (Sow, 2015). Le développement des sources de rayonnement synchrotrons a fourni des données expérimentales de haute précision, qui servent de base pour le perfectionnement des méthodes théoriques ab-initio et semi-empiriques bien élaborées permettant une description détaillée des processus d'excitation et de désexcitation radiatives des résonances autoionisantes. Du point de vue expérimental, les mesures quantitatives des paramètres de résonance de photoionisation fournissent des données précises et utiles pour le développement de modèles théoriques d'interactions à électrons multiples (Covington et al, 2011). Ces mesures expérimentales utilisent un rayonnement synchrotron tels que, ALS (Advanced Light Source) aux USA (Covington et al. 2011), Spring8 au Japon (Oura et al, 2000), et SOLEIL (Source Optimisée de Lumière d'Énergie Intermédiaire de LURE (Laboratoire pour l'Utilisation du Rayonnement Électromagnétique) en France (Bizau et al, 2011). Certaines de ces méthodes théoriques sont couramment utilisées comme l'approche Multi-Configuration de type Dirac- Fock MCDF (Simon et al, 2010), la Théorie du Défaut Quantique QDT (Dubau et Seaton, 1984), l'approche de la R-matrix (Liang et al, 2013), largement utilisée dans les collaborations internationales telles que le Projet Opacité, la méthode de la Constante d'Écran par Unité de Charge Nucléaire (CEUCN) (Sakho, 2013).

Les méthodes théoriques et expérimentales donnent des valeurs précises des énergies et des largeurs naturelles de résonance des séries de Rydberg des systèmes atomiques à plusieurs électrons. Parmi ces méthodes théoriques citées, une autre méthode qui a été initiée par Sakho (2010) a vu le jour. Il s'agit d'une modifi-

---

cation de la théorie des orbitales de Slater (1930), ensuite par Sow (2015), mais aussi Diop (2018), nommée en anglais : MAOT (Modified Atomic Orbital Theory). Cette méthode est basée sur deux approches : une procédure semi-empirique et une procédure variationnelle. La procédure semi-empirique a été appliquée avec succès à l'étude des états excités et des séries de Rydberg de divers systèmes atomiques (Sakho, 2010a ; 2014) . La procédure variationnelle n'a été appliquée avec succès par Malick Sow (2015). Ainsi nous nous proposons de l'appliquer pour la première fois aux calculs des énergies totales et excités des états doublements excités de type  $(Nsnp)^{2s+1}L^\pi$  des systèmes héliumoïdes. Néanmoins la procédure semi-empirique a été appliquée avec succès à l'étude de la photoionisation des ions *CrII*, *ArII*, et *KrII* (Diallo et al 2018). Ce présent mémoire de Thèse est structuré en trois chapitres.

Dans le premier chapitre nous avons décrit les différents processus de photoionisation résonante, et les séries de Rydberg. Nous avons également effectué une revue de quelques méthodes théoriques et expérimentales appliquées à l'étude de la photoionisation résonante, et des largeurs naturelles des séries de Rydberg.

Dans le second chapitre nous avons décliné le formalisme de la méthode de la théorie modifiée des orbitales atomiques (TMOA) appliqué aux calculs des énergies des états doublement excités  $2snp$ ,  $3snp$ , et  $4snp$  des systèmes héliumoïdes. Dans ce chapitre nous avons également appliquée la procédure variationnelle de la théorie modifiée des orbitales atomiques aux calculs des énergies totales, des énergies d'excitation des états doublement excités de type  $2snp$ ,  $3snp$ ,  $4snp$  des systèmes héliumoïdes. Les résultats obtenus sont comparés aux résultats trouvés par d'autres auteurs utilisant des méthodes théoriques et expérimentales.

En fin notre troisième et dernier chapitre porte sur l'étude de la photoionisation résonante des ions *CIII*, *KrII*, *ArII* par la méthode de la théorie modifiée des orbitales atomiques (TMOA). Les résultats obtenus dans ce chapitre sont comparés aux résultats obtenus dans la littérature théorique et expérimentale consultée. Nous terminons par une conclusion générale ainsi que les perspectives. Cette conclusion générale est suivie par une référence bibliographique et les annexes portant les détails de certains calculs que nous avons utilisés.



## Chapitre 1

# Généralités sur la photoionisation résonante et les séries de Rydberg

## **Introduction**

L'étude des phénomènes de photoionisation a débuté dès que des sources de photons d'énergie supérieure aux différents seuils d'ionisation sont apparues. L'effet photoélectrique découvert en 1887 par H.R.Hertz quand il mit en évidence l'ionisation des électrons d'une plaque métallique, dont le travail de sortie est faible fut expliqué par Albert Einstein grâce au concept de quantum d'énergie, appelé photon aujourd'hui. Cette observation fondatrice allait être suivie par de nombreuses expériences qui apportaient chacune des connaissances de plus en plus fines (Guyetand, 2008). L'interaction d'un faisceau de photon avec un ensemble d'atome conduit, dans le domaine des rayons X mous (20- 1000 eV), à l'excitation ou à l'ionisation, simple ou multiple, des atomes en couches externe ou en couche interne suivent l'énergie des photons incidents (Wuillemier, 1978). Ainsi la photoionisation des ions est considérée comme le processus fondamental régissant la dynamique des interactions photon-ions dans les plasmas chauds comme ceux des étoiles et des nébuleuses (Bregman et Harrington, 1986) ou dans les plasmas de fusion créés par les expériences de confinement inertiel (Hofmann, 1990) dans les tokomaks (une chambre torique de confinement magnétique destinée à contrôler un plasma pour étudier la possibilité de la production d'énergie par fusion nucléaire).

## 1.1 Processus de photoionisation

On distingue les processus de photoionisation directe et résonante ainsi que les processus de photoionisation multiple déterminés par les phénomènes du “Shake off” et de la désexcitation Auger. Ces différents processus sont expliqués en détail dans ce qui suit.

### 1.1.1 Photoionisation direct ou simple, Photoionisation résonante.

#### 1.1.1.1 La Photoionisation direct ou simple

La photoionisation correspond à la transition directe d'un des électrons de l'ion  $X^{n+}$  vers un état du continuum. C'est un processus à seuil, qui n'est possible que si l'énergie du photon du rayonnement lumineux est supérieure à l'énergie de liaison de l'électron ( $e^-$ ) dans l'ion  $X^{n+}$ . Il est représenté schématiquement dans la (figure1.1.1).

Exemple de la photoionisation direct et résonante de l'ion Argon ( $Ar^+$ ).

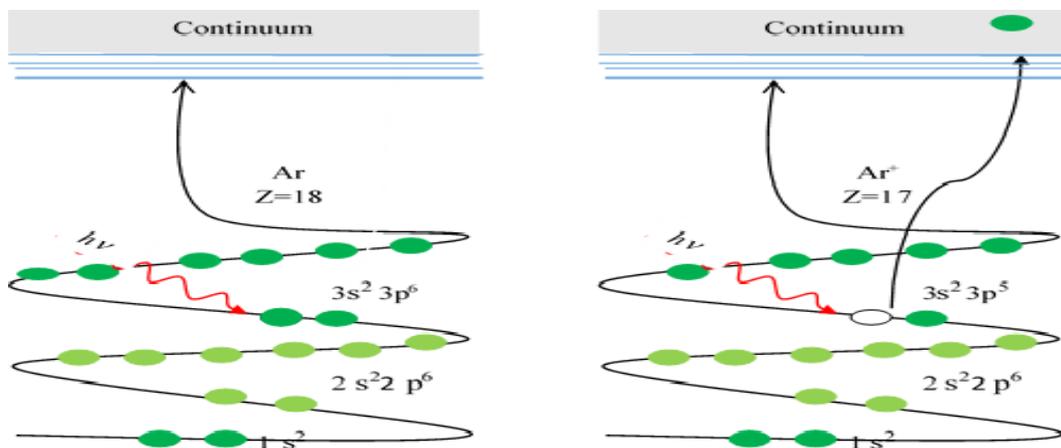
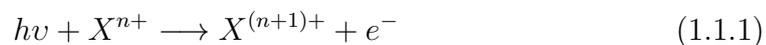


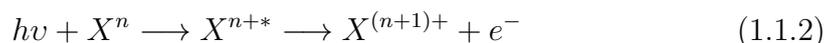
FIGURE 1.1.1 – Illustration schématique des processus de photoionisation directe

Le processus est illustré comme suit



### 1.1.1.2 La Photoionisation résonante.

La photoionisation résonante (PIR) est un processus évoluant en deux étapes : une photoexcitation suivie d'une ionisation. Lorsque l'énergie du photon est supérieure au premier seuil d'ionisation de l'ion  $X^{n+}$ , l'absorption du photon par l'ion peut provoquer le transfert d'un ou de plusieurs électrons de l'ion  $X^{n+}$  vers des orbitales liées vacantes. Le processus est illustré comme suit :



Considérons le cas particulier d'un atome ( $X$ ), lorsque l'énergie du photon est supérieure au premier seuil d'ionisation du système atomique, l'absorption du photon par l'atome peut provoquer l'excitation de deux ou plusieurs électrons de l'atome ( $X$ ) vers des orbitales liées vacantes, produisant ainsi un état excité neutre (Diop, 2018) : c'est le processus de photoexcitation (figure 1.1.2) (gauche).

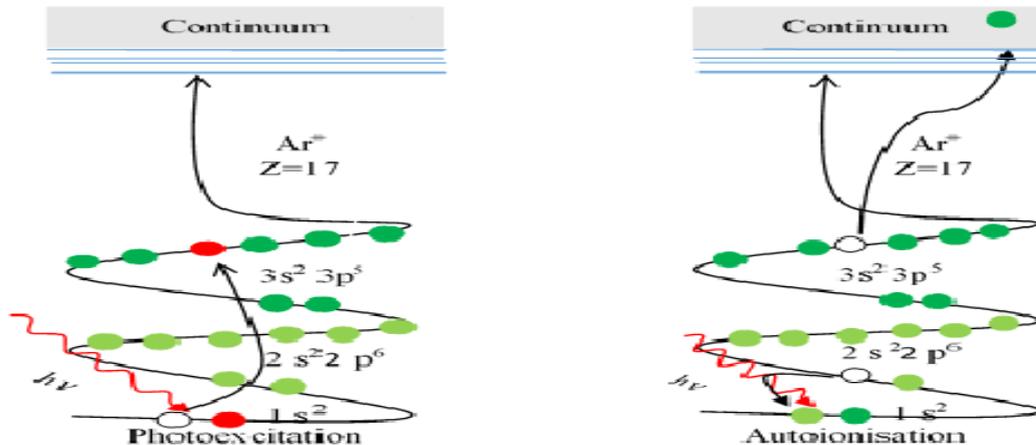


FIGURE 1.1.2 – Illustration schématique des processus de photoionisation résonante.

Ce processus de photoexcitation est observé lorsque l'énergie du photon est égale à la différence entre les énergies de liaison des électrons dans les orbitales de départ et les orbitales d'arrivée. En général, l'atome se trouve dans un état très excité avec souvent, une lacune (un trou) en couche interne. Cet état intermédiaire, de courte durée de vie ( $10^{-14}s$ ) se situe au-dessus du seuil d'ionisation ou un électron externe vient combler le trou et l'énergie libérée sert à émettre un électron vers le

continuum (figure 1.1.2) (droite) de l'ion résiduel  $X^+$  le laissant soit dans son état fondamental soit dans un état excité.

Notons que les processus de photoionisation directe (PID) et résonante (PIR) ont les mêmes états initial et final et par conséquent peuvent interférer et produire des raies de forme asymétrique appelées profils de Fano (Fano, 1961).

### 1.1.2 Photoionisation multiple.

La photoionisation multiple est un processus de photoionisation qui peut être directe ou résonante. La photoionisation multiple se manifeste à travers le processus du « Shake off » ou désexcitation Auger. Le processus du Shake off se produit avec l'émission simultanée de deux ou de plusieurs électrons vers le continuum de l'ion résiduel (figure 1.1.4).

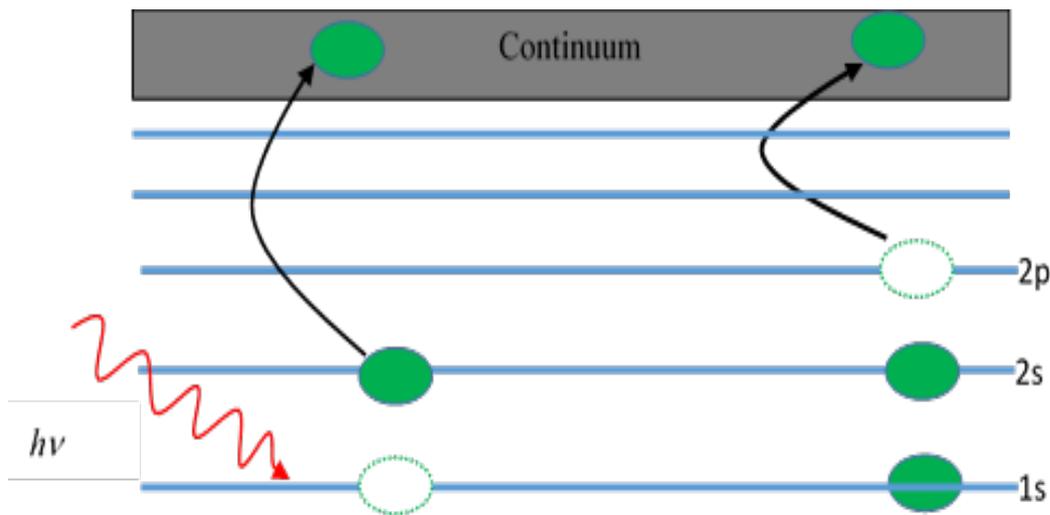


FIGURE 1.1.3 – Illustration schématique des processus de photoionisation multiple (« Shake off »)

Dans le cas de l'émission de deux électrons, ce processus peut être traduit par l'équation :

$$h\nu + X^{n+} \xrightarrow{\text{Shake..off}} X^{(n+2)+} + 2e^- \quad (1.1.3)$$

Dans le cas de la désexcitation Auger, l'ion  $X^{n+}$  absorbe un photon  $h\nu$  d'énergie suffisante provoquant ainsi un processus de photoionisation directe ou résonante

laissant l'ion résiduel  $X^{*(n+1)+}$  dans un état excité avec une lacune en couche interne. Un électron en couche externe vient alors combler la lacune située en couche interne dans l'ion résiduel (figure 1.1.5).

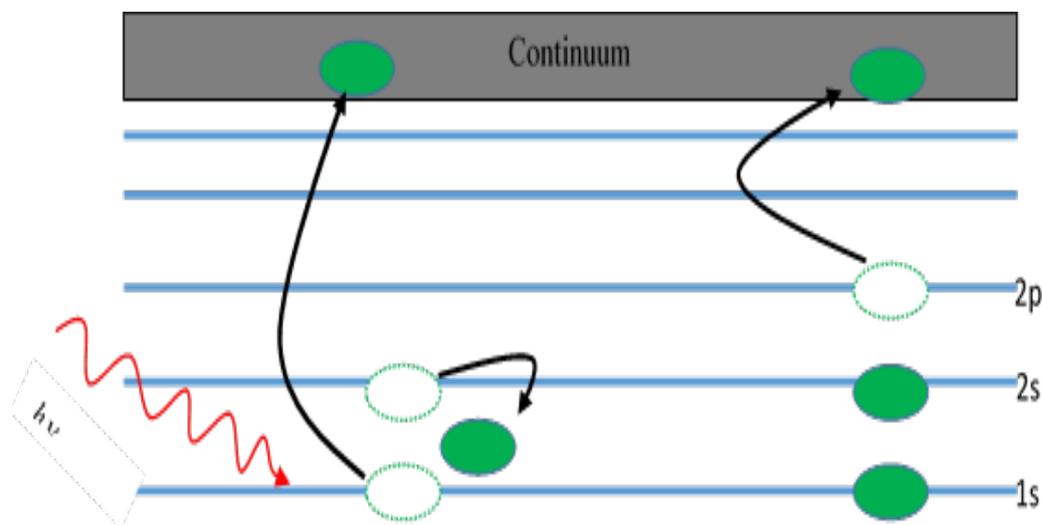
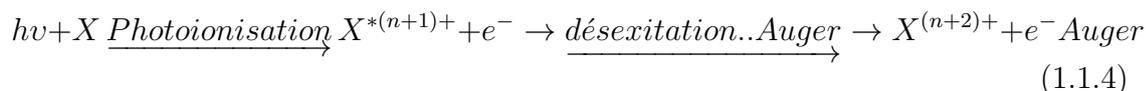


FIGURE 1.1.4 – Illustration schématique des processus de photoionisation multiple (effet Auger)

L'énergie excédentaire sert alors à envoyer dans le continuum de l'ion  $X^{*(n+1)+}$  un second électron appelé « électron Auger ». L'effet Auger peut être traduit par l'équation :



### 1.1.3 Illustration du phénomène d'autoionisation dans le cas des systèmes atomiques à plusieurs électrons

Pour mieux comprendre le phénomène d'autoionisation, considérons le cas particulier des systèmes atomiques  $X$  à deux électrons (atome ou ion). On appelle autoionisation, l'ionisation du système atomique  $X$  suite à une redistribution de l'énergie au sein du même système atomique se trouvant dans un état excité. Notons que le phénomène d'autoionisation ne peut se produire qu'à condition que l'énergie de la configuration de l'élément  $X$  à l'état excité soit supérieure à la

limite d'ionisation simple de l'atome (de l'ion). Autrement dit les états excités discrètes de  $X^*$  doivent appartenir au domaine du continuum de l'ion  $X^{n+}$ .

Les détails sont mentionnés sur la figure 1.1.5. Sur cette figure on a représenté les niveaux d'énergie des électrons (1) et (2) respectivement repérés par les nombres quantiques principaux  $n$  et  $p$ . A l'état fondamental, les deux électrons occupent l'état  $1s^2$ . En fixant par exemple l'électron (1) dans cet état et en excitant l'électron (2), il peut arriver que l'énergie d'excitation soit suffisante pour que l'électron (2) passe dans le domaine du spectre continue noté  $I$  sur la figure 1.1.5. Dans ce cas, il se produit une ionisation ordinaire (c'est-à-dire une photoionisation directe). Pour l'atome d'hélium pris à l'état fondamental, l'énergie d'excitation suffisante à l'extraction d'un électron vaut  $24.58eV$ .

Envisageons maintenant le cas où les deux électrons sont excités. L'électron (1) est supposé se trouve dans l'état  $n = 2$  et l'autre dans les états  $p \geq 2$ . Lorsque l'électron (2) est dans l'état  $p = 2$ , tous les états discrets de la configuration  $(n = 2; p \geq 2)$  du diagramme énergétique noté II, sont situés dans le domaine du spectre continu du diagramme énergétique I. Dans ce cas, l'électron (2) peut soit revenir vers l'état fondamental par émission de photons (flèches vertes de transitions radiatives) soit, passer dans le domaine du continuum de I (flèche rouge). Dans ce cas, la configuration  $(n = 2; p \geq 2)$  se désintègre avec production d'un ion résiduel ( $He^+$ ) et d'un électron ( $e^-$ ). Le même raisonnement peut être fait lorsque l'électron (1) se trouve au niveau  $n = 3$  et l'autre aux niveaux excités  $p \geq 3$  (configuration III) et ainsi de suite. De ce fait, entre les états discrets de II (ou III) et les états continus de I, il y'a résonance par laquelle l'électron excité a la plus grande probabilité de passer dans le continuum de I : il se produit ainsi une désintégration autoionisante (Sakho 2013).

Entre les états discrets du diagramme II (ou III), et les états continus du diagramme I, il y'a résonance : l'électron situé au niveau  $p = 3$  à une plus grande chance de passer dans le continuum du domaine I (flèche rouge) suivie d'une désintégration de l'état  $p = 3$  et une ionisation (production d'un ion résiduel et d'un électron libre).

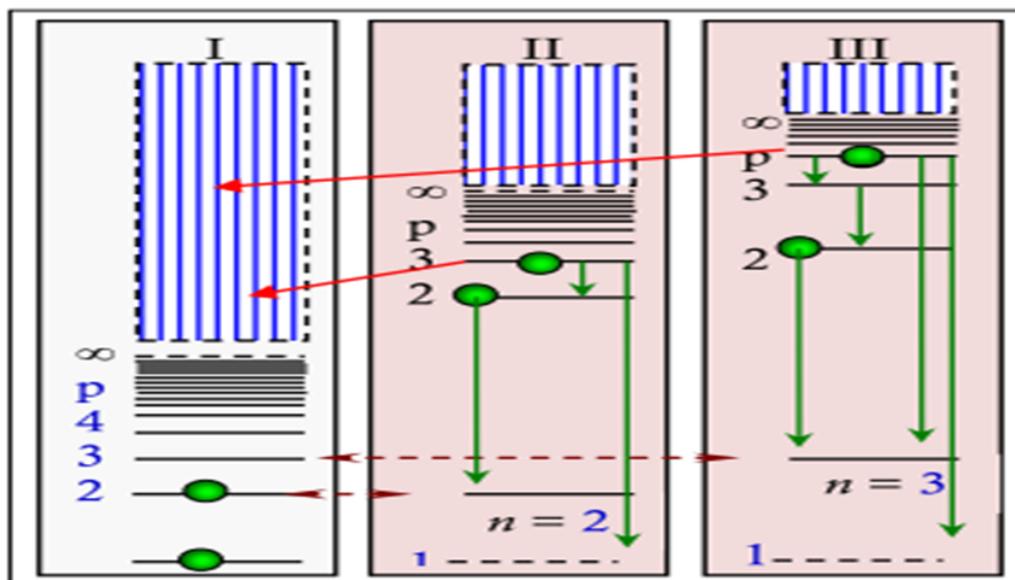


FIGURE 1.1.5 – Illustration du phénomène d’autoionisation dans le cas de l’atome d’hélium He (I.Sakho 2013).

## 1.2 Série de Rydberg.

### 1.2.1 Définition

Défini en 1888, les atomes ou ions de Rydberg portent le nom du physicien suédois Johannes Rydberg. Ces systèmes atomiques sont très sensibles à l’action d’un champ extérieur, aux processus de collision entre particules, au rayonnement électromagnétique etc., et font l’objet d’intenses recherches tant au plan expérimental qu’au plan théorique.

Un atome ou ion de Rydberg se forme lorsqu’un système atomique se trouvant à l’état excité voit l’un de ses électrons occuper des états de plus en plus excités caractérisés par une augmentation du nombre quantique principal  $n$ . L’électron transitant d’un état excité à un autre est appelé électron externe et les autres constituent les électrons internes formant avec le noyau une sorte de système hydrogénoïde de charge effective  $Z^*$ . Herrick et sinanoglu ont fait savoir que les états autoionisants (configuration doublement excité) des systèmes atomiques à deux électrons (systèmes héliumoïdes) sont désignés sous le label  $(Nl, nl')^{2s+1} L^\pi$  (Herrick et Sinanoglu, 1975).

Avec :

- $N$  et  $n$  sont respectivement les nombres quantiques principaux de l’électron interne et de l’électron externe ( $n = N, N + 1, N + 2, \dots$ );

- $l$  et  $l'$  sont respectivement leurs nombres quantiques orbitaux ;
- $S$  désigne le spin total ;  $\pi$  est la parité du système ;
- $L = l + l'$  caractérise l'état quantique considéré ( $S, P, D, F \dots$ ).

Par exemple, pour  $N = 2$  (on parle alors de seuil d'excitation  $N = 2$ ) et  $n = 3$ , on peut avoir les configurations doublement excitées ( $2s3s$ ), ( $3s3p$ ), ( $2p3d$ ), etc. L'ensemble des états autoionisants convergeant vers le même seuil d'excitation, donne une série de configurations appelées états ou série de Rydberg.

Dans le domaine quantique la parité (symétrie des états), joue un rôle fondamental dans les processus d'interaction rayonnement matière, surtout dans les règles de sélections encore appelées règles de transitions bipolaire, quadripolaires. Ainsi une meilleure approximation permet d'écrire la fonction d'onde  $\psi(x, y, z, s)$ , d'un système de particule sous la forme d'un produit d'une fonction dépendant des coordonnées d'espace  $(x, y, z)$ , et d'une autre fonction dépendant de la coordonnée de spin ( $s$ ) soit :

$$\psi(x, y, z, s) = \phi(x, y, z) * \psi(s) \quad (1.2.1)$$

### 1.2.2 Parité paire et parité impaire

Une particule est en mouvement de parité paire(ou le système quantique), lorsque sa réflexion par rapport à l'origine des coordonnées ne varie pas le signe de la parité spatiale  $\phi(x, y, z)$  de la fonction d'onde  $\psi(x, y, z, s)$ . Soit :

$$\psi(-x, -y, -z, s) = \psi(x, y, z, s) \text{ Parité paire}$$

Ainsi dans le cas contraire le mouvement de la particule(ou le système quantique) est de la parité impaire. Soit :

$$\psi(-x, -y, -z, s) = -\psi(x, y, z, s) \text{ Parité impaire}$$

En effet lorsque la particule possède un moment angulaire orbital ( $l$ ) bien précis, la parité spatiale  $\phi(x, y, z)$  ne varie pas, si l'orbital ( $l$ ) est paire ; et varie au cas contraire. Cette parité du système satisfait à la relation simple  $\pi = (-1)^l$ , et ceci est indépendant du nombre quantique magnétique  $m$ .

On en déduit que le système à une parité paire « even en anglais » ou impaire « Odd en anglais », si  $L$  est paire ou impaire. Ainsi dans quelques-uns de ces états sont récapitulés dans le tableau ci-dessous. Nous constatons que la parité n'est pas uniforme, contrairement aux états symétriques doublement excités (ayant tous une

parité paire «e»).

TABLE 1.1 – Parités de quelques séries du système atomique à plusieurs électrons.

Valeur de $l$	0	1	2	3
Valeur de $l'$	0	1	2	3
Etat quantique	S	P	D	F
Valeur de $L=l+l'$	0	1	2	3
Parité $\pi = (-1)^L$	<i>even</i>	<i>Odd</i>	<i>even</i>	<i>Odd</i>
Terme	$S^e$	$P^o$	$D^e$	$F^o$
Spectroscopique				
Etats excités	$(Ns ns)^{1,3}S^e$	$(Ns ns)^{1,3}P^e$	$(Np np)^{1,3}D^e$	$(Np np)^{1,3}F^o$
$(Nl, nl')^{2S+1}L^\pi$				

Dans certains cas, les séries de Rydberg sont définies en considérant les deux électrons de la couche externe (cas des systèmes atomiques à plusieurs électrons) du système atomique. Tous les autres formant avec le noyau une sorte de « cœur fermé ». Dans le cas du béryllium la configuration électronique à l'état fondamentale est  $1s^2 2s^2 {}^1S^e$ . Ainsi pour constituer les séries de Rydberg, les deux électrons sont portés dans des états excités. Ce qui peut donner les séries :  $1s^2 2pns {}^{1,3}P^o$  et  $1s^2 2pnd {}^{1,3}P^o$  ( $n \geq 2$ ) convergeant vers le seuil d'excitation  $2p$ .

### 1.2.3 Energie et largeur naturelle de résonance

L'étude de la photoionisation résonante permet de déterminer les paramètres de résonance (énergies, largeurs naturelles, et force d'oscillateur, etc...) des séries de Rydberg des systèmes multichargés constituant les plasmas stellaire et de laboratoire. La détermination des paramètres des séries de Rydberg permet entre autre de diagnostiquer les plasmas stellaire et de laboratoire (Kahn, 1999 ; Keller et Dreizler, 1999 ; Faenov et al, 1999), de mettre au point de nouveau type de laser (Harris, 1989), de réaliser la séparation d'isotopes par photoionisation sélective (Andreev.S.V, Letokhov, 1987).

Ainsi, les largeurs naturelles quant à elles permettent de connaître la durée de vie des états excités, qui est un paramètre très important dans la conception des lasers. La relation d'incertitude de Heisenberg temps-énergie est donnée par la relation :

$$\Delta E \times \Delta t \geq \hbar \quad (1.2.2)$$

Dans cette relation  $E$  désigne l'énergie d'un système physique dans un état donné, et  $\Delta t = \tau$  est la durée de vie du système dans cet état. L'élargissement naturel des raies spectrales est expliqué par l'inégalité temps-énergie de Heisenberg. La durée de vie  $\Delta t$  d'un état excité est liée à l'existence d'une largeur naturelle  $\Delta E$  des niveaux. Dans la figure 1.2.1, la détermination de la largeur naturelle d'un niveau excité et donc de la durée de vie, permet de déceler l'existence d'états appelés états métastables dans les systèmes atomiques. La moyenne des fréquences  $\nu_1$  et  $\nu_2$  correspond à la fréquence  $\nu_0$  de la transition  $1 \rightarrow 0$ .

L'expression de la largeur naturelle des raies spectrales en fonction des fréquences est  $\Delta\nu = \nu_2 - \nu_1$  ce qui donne alors  $\nu_1 = \nu_0 - \frac{\Delta\nu}{2}$ , et  $\nu_2 = \nu_0 + \frac{\Delta\nu}{2}$ .

De la relation (1.2.2), il vient  $\Delta E = \frac{\hbar}{\Delta t}$ , et  $\Delta\nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{1}{\tau}$  avec  $\tau$  la durée de vie de l'état excité considéré. Du point de vue pratique, la mesure  $\Delta\nu$  et donc de  $\Delta E$  (puisque  $\Delta E = h\Delta\nu$ ) est rendue complexe par les influences dues d'une part aux interactions interatomiques, et d'autre part à l'effet Doppler (variation de la fréquence d'un signal lumineux lorsque la source et l'émetteur sont en mouvement relatif) (Sakho, 2013). De plus la mesure expérimentale de  $\tau$  permet de déterminer la valeur de la largeur naturelle  $\Gamma = \Delta E$  ou  $\Delta\nu$ .

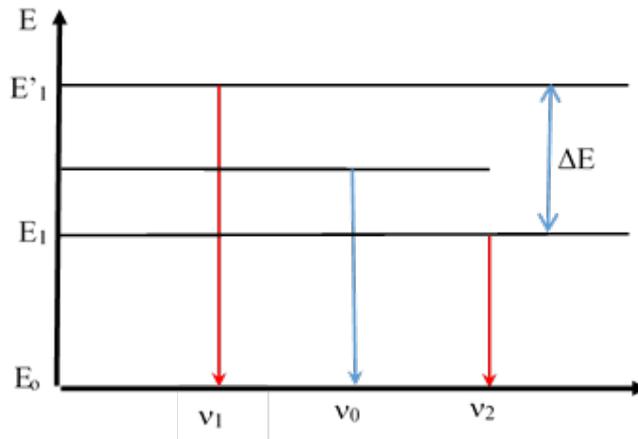


FIGURE 1.2.1 – Largeur naturelle des niveaux excités

## 1.3 Quelques méthodes expérimentales et théoriques appliquées à l'étude de la photoionisation résonante et des largeurs naturelles des séries de Rydberg.

### 1.3.1 Méthodes expérimentales

#### 1.3.1.1 Montage du rayonnement synchrotron.

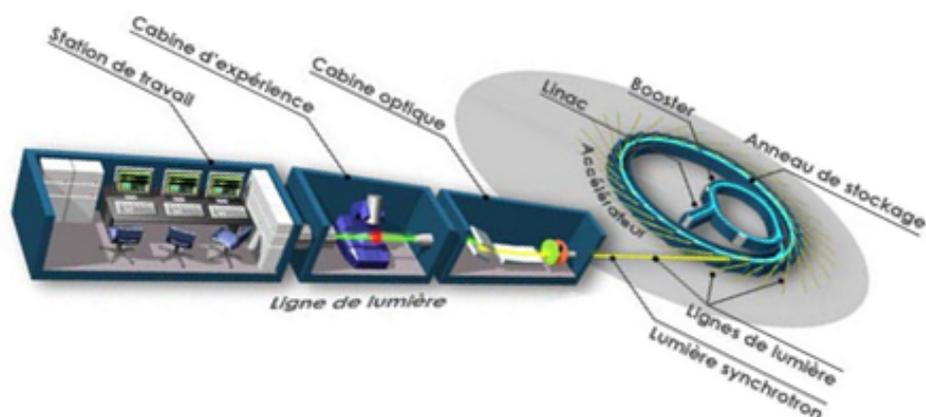


FIGURE 1.3.1 – Schéma de principe d'une installation synchrotron (Couprie, 2013).

Les électrons émis par le canon sont accélérés dans le linac ( figure 1.3.1), puis dans le booster pour être ensuite injectés dans l'anneau de stockage. Après accumulation, ils produisent du rayonnement synchrotron.. Ce rayonnement est utilisé par un grand nombre de lignes de lumière, construites tangentiellement à l'orbite des électrons, pour des expériences scientifiques très variées. L'émission de lumière synchrotron se produit de l'infrarouge aux rayons X durs. Chaque utilisateur peut sélectionner, dans la gamme définie pour la ligne de lumière, la longueur d'onde adaptée à l'expérience qu'il conduit. Les lignes de lumière sont complémentaires les unes des autres et chacune d'elle est orientée pour des techniques, des domaines de recherche et des applications particulières.

La cabine Optique

C'est la première cabine où arrive, depuis l'accélérateur le faisceau de lumière. Mirrors et monochromateurs sélectionnent la longueur d'onde nécessaire à l'expérience et focalisent le faisceau. Les dispositifs optiques et toute l'instrumentation qui les accompagnent ont été définis, fabriqués et testés pour chaque ligne de lumière. Ce sont des objets de très haute technologie dont la mise au point conditionne

### 1.3 Quelques méthodes expérimentales et théoriques appliquées à l'étude de la photoionisation résonante et des largeurs naturelles des séries de Rydberg.

---

beaucoup la qualité des expériences réalisées.

La station de travail

De cette cabine, chercheurs et ingénieurs assurent de nombreuses tâches. Ils interviennent sur certains paramètres de l'expérience (position de l'échantillon, focalisation, longueur d'onde, etc.) et suivent l'enregistrement des résultats via des systèmes électroniques et informatiques.

La cabine expérience

L'échantillon à étudier, généralement très petit ( $< \text{mm}$ ), est positionné sur son support. Lorsqu'il « reçoit » la lumière incidente, il « répond » de diverses manières. Cette réponse est enregistrée par un ou plusieurs détecteurs qui dépendent du type d'émission : la précision du positionnement de l'échantillon et de la trajectoire du faisceau incident doit être très fine, étant donné les petites dimensions du faisceau comme de l'échantillon.

Par définition, le rayonnement synchrotron est un rayonnement électromagnétique émis par les particules chargées accélérées, comme les électrons qui se déplacent à des vitesses relativistes sur des trajectoires courbes dans les anneaux de stockage. Ce rayonnement est d'une importance capitale pour les expériences, car il délivre une bonne intensité des flux de photons, une grande stabilité et une large gamme spectrale qui permet d'étudier les processus de photoionisation dans les différentes sous-couches électroniques des ions.

Le développement de ce rayonnement a permis l'apparition de nouveaux montages à ASTRID à l'université d'Aarhus au Danemark (Kjeldsen et al. 1999), SOLEIL en France (Bizau et al. 2011), ALS (Advanced Light Source) aux USA (Covington et al, 2011) et à Spring 8 au Japon (Oura et al, 2000). Le développement de ces sources de rayonnements synchrotron a fourni des données expérimentales de haute précision servant de base pour le perfectionnement des méthodes théoriques.

Concernant l'étude consacrée à l'atome Béryllium, les diverses méthodes expérimentales utilisées à l'étude des états doublement excités sont classées suivant deux modes d'excitation que sont : excitation par spectre de photoabsorption et par rayonnement synchrotron monochromatique (SOW, 2014).

#### 1.3.1.2 Excitation par rayonnement synchrotron.

D'après Wehlitz (Wehlitz et al, 2003), qui par le biais du rayonnement synchrotron monochromatique avec un pouvoir de résolution très élevé ( $> 200\text{\AA}$ ), ont déterminé les différentes paramètres (énergie et largeur naturelles) qui décrivent le profil d'absorption de la résonance des états  $1s^2 2pns \ ^1P^0$  et  $1s^2 2pnd \ ^1P^0$  doublement excités de l'atome de béryllium.

### 1.3.1.3 Excitation par spectroscopie de photoabsorption.

Des étincelles à vide ont été utilisées dans les expériences de Mehlman-Balloffet (1969), et Esteva (1972), pour photoexciter et ioniser les atomes de *Be* et des spectres ont été enregistrés sur un film hautement sensible. Ces derniers sont les premiers à reporter les énergies de résonance de l'atome de Béryllium pour les états  $1s^2 2pn s \ ^1P^0$  et  $1s^2 2pd \ ^1P^0$  doublement excité en utilisant le spectre de photoabsorption.

### 1.3.1.4 Excitation par impact photonique.

La première technique mise en œuvre pour étudier les différents processus de photoionisation dans les ions multichargés fut la photoabsorption. L'utilisation de faisceaux intenses de photons (Domke, 1992) produits par rayonnement synchrotron et laser dans des domaines spectrales très étendues a largement contribué au développement des études expérimentales sur la photoabsorption résonante des atomes et des ions.

Ainsi les premières expériences sur la photoabsorption pour la détermination des paramètres de résonance (notamment les énergies d'excitations) des états autoionisants, à l'aide de source du rayonnement synchrotron, ont été utilisées sur l'hélium par Madden et codling (Madden, 1963), (Madden, et Codling, 1965), dans le domaine spectral de l'ultraviolet lointain (165–200Å). L'utilisation du laser à fréquence variable dans les mesures spectroscopiques (Double Plasma Produit par Laser : DLPP) (Kennedy, et al. 2004) ouvre de nouvelles perspectives dans l'étude des résonances autoionisantes. Cette technique consiste à mesurer l'absorption par un plasma, produit par focalisation d'un laser pulsé intense sur une cible solide, des photons émis par un second plasma produit aussi par un laser, en fonction de l'énergie des photons. Cette méthode permet en particulier d'isoler une espèce ionique donnée dans des plasmas constitués d'ions légers et peu chargés, qui apparaissent à une distance de la cible solide et à un temps après l'impulsion laser bien séparés selon leur état de charge.

En somme, le développement de ces sources de rayonnements synchrotron a fourni des données expérimentales de haute précision servant de base pour le perfectionnement des méthodes théoriques.

## 1.3.2 Méthodes théoriques.

Dans ce paragraphe nous allons faire un aperçu des principales méthodes théoriques qui ont permis d'avoir des résultats plus ou moins complets sur la description

### 1.3 Quelques méthodes expérimentales et théoriques appliquées à l'étude de la photoionisation résonante et des largeurs naturelles des séries de Rydberg.

des processus d'excitations et de désexcitations radiatives et non radiatives des états d'autoionisation. Ainsi, parmi les méthodes appliquées aux traitements des états autoionisants des systèmes atomiques à deux électrons, de nombreux calculs approchés ont été développés. Il s'agit en l'occurrence :

#### 1.3.2.1 Méthodes variationnelle de Hylleraas.

Les premières méthodes théoriques approchées utilisant le principe variationnel de Ritz furent appliquées dans un premier temps au traitement de l'état fondamental de l'atome d'Hélium par Kellner (1927) puis avec un grand succès par Hylleraas (1928).

La méthode variationnelle de Hylleraas généralisée aux états autoionisants des systèmes atomiques à deux électrons par Biaye (2001) pour l'étude de la dynamique des corrélations électroniques des états  $nl^2$ , ( $n \leq 4$  et  $l \leq 3$ ) de l'hélium et des ions héliumoïdes ( $Li^+$ ,  $Be^{2+}$ ,  $B^{3+}$ ,  $C^{4+}$ ,  $N^{5+}$ ,  $O^{6+}$ ,  $F^{7+}$ ,  $Ne^{8+}$ ,  $Na^{9+}$ ,  $Mg^{10+}$ ) (Biaye, 1997; Biaye et al, 2001). La méthode a été aussi appliquée aux calculs des énergies des états symétriques doublement excités  $(2p^2)^1D$ ,  $(2d^2)^1G$  et  $(2f^2)^1I$  de l'Hélium et des ions héliumoïdes de charges nucléaires  $Z \leq 12$  (Biaye et al. 2001). Ainsi, en utilisant de nouvelles fonctions d'onde de formes spéciales de type Hylleraas, la méthode variationnelle de Hylleraas est employée dans la description des états doublement excités ( $nl^2$ ) et ( $nlml'$ )  $n \leq 4$  de l'hélium et des ions héliumoïdes ( $Z \leq 12$ ) (Biaye et al., 2005<sup>1</sup>, 2005<sup>2</sup>), de l'ion Hydrogène négatif (Biaye et al., 2009) et dans la description des états singulets et triplets des systèmes héliumoïdes (Dieng et al., 2010).

#### 1.3.2.2 Méthodes de diagonalisation.

Utilisée initialement dans le cas de la photoionisation résonante monocanal (interaction d'une ou de plusieurs résonances avec un seul continuum) de l'hélium et des ions héliumoïdes sous le seuil d'excitation  $n=2$  de l'ion résiduel (Balashov et al.1970). Ainsi elle a été généralisée à l'étude de la photoionisation résonante multicanal (interaction d'une ou de plusieurs résonances avec plusieurs continuum) pour la description de la résonance  $(3s3p)^1P^o$  de l'hélium et dans l'étude des systèmes héliumoïdes multichargés sous les seuils d'excitation  $n = 2$ , et  $n = 3$  de l'ion résiduel (Wagué, 1984; 1987; 1988; 1989; 1990), ainsi que pour l'étude de quelques particularités de la photoabsorption résonante des ions multichargés (Wagué et al., 1981). Par la suite d'autres l'ont utilisés sous le seuil  $n = 3$  pour le calcul des énergies et largeurs des états autoionisants des ions héliumoïdes multichargés  $C^{4+}$ ,  $N^{5+}$ , et  $O^{6+}$  (Faye et Wagué 1994; 1995), puis (Ndao et al., 1998; 1999).

### 1.3.2.3 Méthodes des coordonnées hyper sphériques.

C'est une méthode qui a été introduite par Macek (Macek et Burke, 1967 ; Macek et al.1968) et employé dans le calcul des énergies des états autoionisants ( $nlnl'$ ) des systèmes à deux électrons. C'est une méthode qui a permis les phénomènes de corrélation électroniques, le classement des supermultiplets ou séries de Rydberg de l'hélium et des ions héliumoïdes (Lin et al.1984 ; Herrick et Kelleman, 1980).

### 1.3.2.4 Méthodes de la rotation complexe.

Cette méthode consiste à observer le comportement de l'hamiltonien lors de l'extension de l'espace réel à l'espace complexe.

L'extension de l'espace réel à l'espace complexe se traduit par le changement de la variable radiale  $r$  en variable complexe  $re^{i\theta}$ , qui transforme l'hamiltonien réel  $\hat{H}(r)$  en hamiltonien complexe  $\hat{H}(r, \theta)$  ; soit :

$$\hat{H}(r) = \hat{T} + \hat{V} \quad (1.3.1)$$

$$\hat{H}(r, \theta) = \hat{T}e^{-2i\theta} + \hat{V}e^{-i\theta} \quad (1.3.2)$$

$\hat{T}$  et  $\hat{V}$  sont respectivement les opérateurs de l'énergie cinétique et de l'énergie potentielle. Ces applications dans les processus de collision atomique a été développé par Ho (Ho 1983). Cette méthode a été largement utilisée notamment pour le calcul des énergies totales, des largeurs et des énergies d'excitation des états autoionisants  $^1Se$ ,  $^1P^\circ$  et  $^3P^\circ$  convergeant vers les seuils d'excitation  $n = 2; 4$  (Ho, 1979 ; 1980), et  $n = 4, 6$  (Ho, 1997).

### 1.3.2.5 Méthodes de la constante d'écran par unité de charge nucléaire.

C'est une méthode qui a été appliquée aux calculs des énergies de l'état fondamental et des états doublements excités des systèmes atomiques à deux électrons (Sakho et al. 2006 ; Sakho et al. 2008a ; Sakho et al. 2008b ; Sakho et al. 2010),,, et à trois électrons (Sakho et Wagué, 2010). Elle a été aussi appliquée aux calculs des énergies d'excitation des systèmes atomiques à plusieurs électrons (Sakho, 2010 ; Sakho, 2011a ; Sakho, 2011b ; Sakho, 2012),. La méthode a été aussi appliquée dans le calcul des énergies de résonances des séries de Rydberg des états  $(K, T, A)n^{1,3}L^\pi$  de l'hélium et de ses ions assimilés (Badiane et al.2018a) ; dans le calcul variationnelle des états doublements excités  $(nl)^2^1L^\pi$  de l'hélium et de ses ions assimilés (Badiane et al.2018b). Ainsi (Ba et al, 2018) ont appliqués la méthode dans le cas

### 1.3 Quelques méthodes expérimentales et théoriques appliquées à l'étude de la photoionisation résonante et des largeurs naturelles des séries de Rydberg.

de la photoionisation ( $3s^23p^3 nd$ ) des séries de Rydberg des ions  $Cl^+$ .

Cette méthode a l'avantage de conduire à des résultats assez précis sans avoir recours ni à un développement mathématique excessif ni à un programme informatique fastidieux.

#### 1.3.3 Notion de section efficace

Dans le cas de la photoionisation, la notion de section efficace intervient dans les processus de diffusion d'un flux de particules incidentes par une particule cible. Considérons le cas le plus général d'une interaction entre des particules cibles et des particules incidentes. Dans le cas particulier des processus de photoionisation, les particules incidentes sont des photons et la particule cible un système atomique.

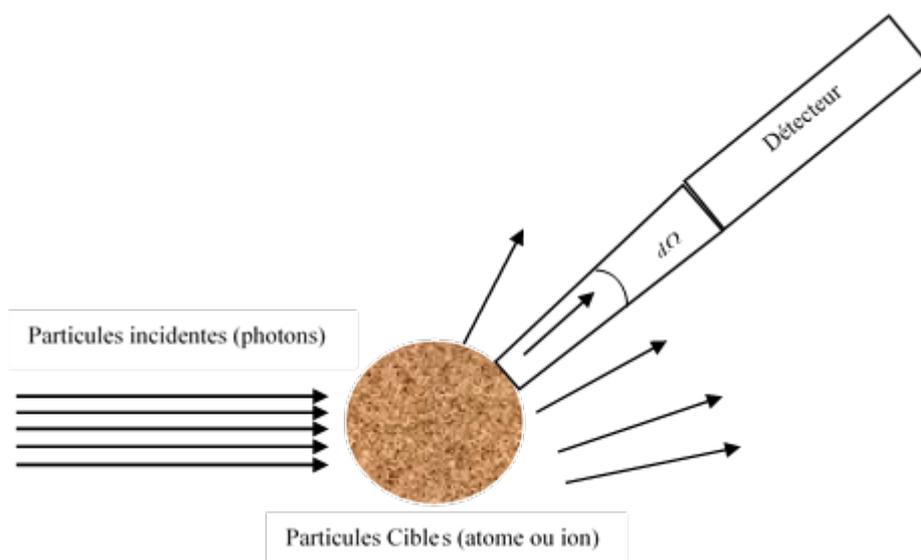


FIGURE 1.3.2 – Processus de diffusion des photons incidents par une particule cible (atome ou ion)

Désignons par  $J$  le flux des particules incidentes et  $n_i$  le nombre de ces particules par unité de volume dans le faisceau incident et  $\nu$  leur vitesse par rapport à la cible, il suit :

$$J = n_i \nu \quad (1.3.3)$$

Lorsque les interactions mutuelles sont négligées entre les particules incidentes, le nombre  $N_d$  de particules diffusées par la cible par unité de temps dans l'angle

solide  $d\Omega$  s'écrit :

$$N_d = J\Sigma(\Omega)d\Omega \quad (1.3.4)$$

Ainsi l'expression  $\Sigma(\Omega)$  est la grandeur qui caractérise l'interaction entre une particule incidente et la cible. Cette grandeur qui a la dimension d'une surface est appelée section efficace de diffusion de la particule par la cible dans la direction  $\Omega$ .

En pratique, sauf pour des cas comme celui de la diffraction dans les cristaux, la cible est constituée d'un grand nombre  $N_c$  de diffuseurs atomiques et les distances mutuelles de ces diffuseurs sont suffisamment grands par rapport à la longueur d'onde des particules incidentes pour pouvoir négliger toute cohérence entre les ondes diffusées par chaque diffuseur. Chaque centre diffuseur agit donc indépendamment des autres (Hassan, 2010). Dans le cas des milieux dilués, les diffusions multiples de particules incidentes sont négligeables, ce qui donne cette nouvelle expression de l'équation (1.3.4) :

$$N_d = JN_c\sigma(\Omega)d\Omega \quad (1.3.5)$$

Où  $\sigma(\Omega)$  est la section efficace de diffusion de la particule par le centre diffuseur dans la direction  $\Omega$ , ou section efficace différentielle de diffusion.

Une intégration sur l'angle  $\Omega$ , donne le nombre totale ( $N_{tot}$ ) de particules diffusées par unité de temps.

$$N_{tot} = JN_c\sigma_{tot} \quad (1.3.6)$$

$$\sigma_{tot} = \int \sigma(\Omega)d\Omega \quad (1.3.7)$$

$\sigma_{tot}$  est appelée section efficace totale de diffusion. Elle est exprimée en barn ( $1barn = 10^{-24}cm^2$ ). Cependant, il faut noter que l'expression de la section efficace de photoionisation dépend de la méthode expérimentale ou théorique utilisée.

1.3 Quelques méthodes expérimentales et théoriques appliquées à l'étude de la photoionisation résonante et des largeurs naturelles des séries de Rydberg.

**1.3.3.1 Détermination expérimentale de section efficace.**

Dans cette partie, El Hassan dans ces travaux expérimentaux réalisés à SOLEIL (Hassan, 2010), a exprimé la section efficace de photoionisation comme suit :

$$\sigma = S \times \frac{qe^2 \langle \nu \rangle \eta \delta_x \delta_y}{IJ\Omega \int_o^L \frac{dz}{F(z)}} \quad (1.3.8)$$

Dans cette expression :

- $S$  est le taux de comptage des photo-ions mesuré par le détecteur ;
- $I$  est le courant des ions cibles mesuré avec la coupe de Faraday et  $J/e\eta$  est l'intensité du courant de photons mesuré avec la photodiode d'efficacité  $\eta$  ;
- $\nu$  est la vitesse des ions cibles dans la zone d'interaction et  $q$  leur charge ;
- $\Omega$  est l'efficacité des détecteurs ;
- $\delta x$  et  $\delta y$  sont les pas avec lesquels sont mesurés les courants élémentaires  $i(x, y)$  et  $j(x, y)$  à l'aide des profilers, et  $F(z)$  est le facteur de forme.

Tous les paramètres intervenant dans l'expression (1.3.8) sont mesurés en valeur absolue pendant l'enregistrement des spectres (Hassan, 2010).

**1.3.3.2 Détermination théorique de section efficace.**

Du point de vue théorique, on peut citer les travaux de Simon (Simon et al. 2010) qui ont utilisé un rayonnement synchrotron et une approche relativiste de la méthode MCDF (Multi-Configuration de type Dirac- Fock) pour étudier la photoionisation résonante des ions  $N^{3+}$  et  $Ar^{8+}$  . Dans ces travaux, la section efficace de photoionisation s'exprime par la relation :

$$\sigma_{i \rightarrow d \rightarrow f} = S_{i \rightarrow d \rightarrow f} \frac{\frac{\Gamma_d}{2\pi}}{(\hbar\omega + E_i - E_d)^2 + \frac{\Gamma_d^2}{4}} \quad (1.3.9)$$

Dans cette expression :

- $\sigma_{i \rightarrow d \rightarrow f}$  désigne la force de résonance ;
- L'indice  $i$  repère l'état initial de l'ion considéré ;
- $d$  repère l'état autoionisante obtenu à l'issu du processus de photoabsorption vers l'état final  $f$  ;
- $\Gamma_d$  désigne la largeur de résonance ;
- $E_{res} = E_d - E_i$  correspond à l'énergie de résonance ;

- $\hbar\omega$  est l'énergie du photon absorbé.

Ainsi la force de résonance dépend des probabilités de transitions spontanées par unité de temps  $A_{i \rightarrow d}^{re}$  relative au processus de photoexcitation radiative et  $A_{d \rightarrow f}^a$  relative au processus d'autoionisation par désexcitation Auger et de la largeur de résonance, soit :

$$\sigma_{i \rightarrow d \rightarrow f} = \frac{2\pi^2 c^2 \hbar^4}{(\hbar\omega)^2} \times \frac{A_{i \rightarrow d}^{re} A_{d \rightarrow f}^a}{\Gamma_d} \quad (1.3.10)$$

## **Conclusion**

Dans ce chapitre une étude bibliographique des différents processus de photoionisation et la description des séries de Rydberg a été faite. Ensuite une revue des différentes méthodes théoriques et expérimentales utilisées dans l'étude des processus de photoionisation a été également rapportée.

Ainsi dans la suite nous allons détailler le formalisme de la théorie modifiée des orbitales atomiques appliquée aux calculs variationnelle et à l'étude de la photoionisation résonantes des systèmes atomiques à plusieurs électrons (systèmes héliumoides).



## Chapitre 2

**Théorie modifiée des orbitales  
atomiques appliquée au calcul des  
énergies des états doublements  
excités de types  $Nsnp$  des systèmes  
héliumoides.**

## Introduction.

La théorie modifiée des orbitales atomiques est une méthode purement théorique initiée par Ibrahimia Sakho (2010). Cette théorie découle de la théorie des orbitales de Slater (1930). La théorie des orbitales de Slater est une théorie dont l'unique but est de déterminer les énergies des états fondamentaux des systèmes atomiques polyélectroniques. C'est une méthode qui n'est pas adaptée à la description correcte des phénomènes de corrélation électroniques dans les états doublement excités des systèmes atomiques. C'est en ce sens que Sakho (2010) a présenté une modification en reconsidérant certains paramètres de la fonction de Slater. Dans ces expressions (Sakho, 2010), le nombre quantique  $n^*$  de Slater est remplacé par le nombre quantique principal  $n$ , de plus les orbitales sont considérés séparément et notés  $\nu\ell$ ,  $\nu$  le nombre quantique principal.

Ainsi bon nombres d'études ont apportées des preuves sur l'importance de la corrélation électronique dans l'état fondamental et dans les états doublements excités des systèmes héliumoides (Ivanov et Safronova, 1993; Fano et Lin, 1975; Hylleraas, 1928; Wagué, 1990),,,. Pour l'état fondamental, les calculs sont effectués en utilisant plusieurs fonctions d'ondes de types Slater combinée avec celle de type Hylleraas. En établissant ces fonctions d'ondes, les effets relativistes et magnétiques ont été négligés en tenant compte de l'effet d'écran par l'intermédiaire du paramètre variationnel de Slater, de l'écartement des deux électrons, de leurs distance par rapport au noyau par l'introduction des trois paramètres de corrélation électroniques ( $jk m$ ). Pour certaines méthodes utilisant un calcul de technique analytique, certains auteurs se sont intéressés à la mise en œuvre des techniques de calcul permettant à une expression analytique de l'énergie. En combinant la méthode variationnelle de Ritz à la théorie des perturbations, Beth et Salpeter (Beth et Salpeter, 1957) ont obtenu une excellente expression semi-empirique de l'énergie totale d'un système atomique à deux électrons. Cette expression leurs a permis d'établir une expression de la première énergie d'ionisation de la série isoélectronique de l'hélium  $He$ .

Concernant les états doublement excités des systèmes héliumoides, les premières expériences de Madden et Codling (Madden et Codling, 1963), Codling Madden et Ederer (1967), les explications théoriques de Cooper (Cooper et al, 1963), les états doublements excités des systèmes à deux électrons ont été la cible de certains nombres d'approche théoriques. Bon nombre de chercheurs se sont concentrés sur l'étude des états doublement symétriques de type  $(nl^2)$  avec des électrons excités

---

ayant le même nombre quantique principal  $n$  ( états intracouches) ou l'effet de corrélation électronique est prédominant (Fano, 1983). En raison de la méthode de la théorie des groupes de Herrick (Herrick et al, 1975) et de Raju (Raju, 1990) qui ont approfondi et ont permis à ces états d'être classés de façon approximative et certains de ces propriétés étudiées par Herrick (Herrick et al, 1980). Beaucoup d'études théoriques ont été effectuées sur les états doublement excités ( $nl^2$ ). Parmi ces méthodes citons :

La méthode de l'opérateur de projection (Bhatia et al, 1969), la méthode de la théorie des groupes (Herrick et al, 1975; Kellman et al, 1978), a été utilisé pour le calcul des énergies des états doublement excités  $2s^2$ ,  $2p^2$ . La méthode variationnelle de perturbation indépendante du temps de Ray et Mukherjee (Ray et Mukherjee, 1991) a été appliquée pour le calcul des énergies totales des états  $2s^2$ ,  $2p^2$  et  $3d^2$  de He,  $Li^+$ ,  $Be^{2+}$ , et  $B^{3+}$ . Sakho (Sakho et al, 2008) a utilisé la procédure semi-empirique de la méthode de la Constante d'écran par unité de charge nucléaire (CEUCN) pour calculer les énergies des états doublement excités ( $ns^2$ )  $^1Se$ , ( $np^2$ )  $^1De$ , et ( $Nsnp$ )  $^1P^o$  des systèmes héliumoïdes.

La théorie modifiée des orbitales atomiques (TMOA, MAOT en anglais) a été connue pour sa simplicité, car c'est une méthode de calcul très convenable qui a donné d'énormes résultats à partir de formules semi-empiriques simple sans avoir recours à un programme informatique dans la résolution des problèmes de photo-ionisation résonante. C'est par la suite que Sakho (Sakho et al, 2014) ont étudié les énergies de résonance des séries de Rydberg des états  $2s^22p^4(^1D_2)$   $ns, nd$ ,  $2s^22p^4(^1S_0)$   $ns, nd$ , et  $2s^22p^5(^3P_2)$  à partir de l'état métastable  $2s^22p^5(^2P_{1/2})$  et de l'état fondamental  $2s^22p^5(^2P_{3/2})$  de l'ion  $Ne^+$ . Ainsi le principe variationnelle qui est une méthode purement théorique, met à profit le principe de variation. Cette méthode variationnelle est une technique de calcul permettant de fournir des solutions approchées à la résolution de l'équation de Schrödinger. Dans la suite, après avoir fait un bref rappel de la théorie des orbitales de Slater, nous appliquons pour la première fois la procédure variationnelle de la théorie modifiée des orbitales atomiques aux calculs des énergies totales, des énergies d'excitations des états doublement excités de types  $2snp$ ,  $3snp$ ,  $4snp$  des systèmes héliumoïdes. Cette procédure consiste à la détermination du paramètre variationnelle  $\alpha$  et de la constante d'écran  $\sigma$ , à partir de la construction d'une fonction d'onde corrélée.

## 2.1 Théorie des orbitales atomiques de Slater

### 2.1.1 Définition

Une orbitale atomique est une fonction mathématique qui décrit le comportement ondulatoire d'un électron ou d'une paire d'électron dans un atome. Cette fonction donne la probabilité de présence d'un électron d'un atome dans une région donnée de cet atome. Ainsi chaque orbitale atomique est définie par un triplet  $(nlm)$  avec :  $n$  le nombre quantique principal,  $l$  le nombre quantique orbital et  $m$  le nombre quantique magnétique. Les orbitales atomiques peuvent être des orbitales mono-électroniques qui sont des solutions exactes de l'équation de Schrödinger pour un atome hydrogénéoïde (un électron).

### 2.1.2 Le model de Slater

En physique quantique et chimie numérique, les règles de Slater sont un ensemble de règles (empiriques) qui servent à évaluer la charge nucléaire effective. Dans un atome à plusieurs électrons, la charge effective perçue par chaque électron est :

$$Z^* = Z - \sum_j \sigma_{ij} = Z - \sigma_i \quad (2.1.1)$$

Où  $Z$  est la charge nucléaire réelle et  $\sigma$  représente l'effet d'écran produit par les électrons plus proches ou aussi proches du noyau. Ces règles furent proposées en 1930 par le physicien américain John Clarke Slater (Slater, 1930). A chaque électron  $j$  situé entre l'électron  $i$  et le noyau, est attribuée une constante d'écran  $\sigma_{ij}$  qui dépend des électrons  $(j, i)$ . La détermination de  $Z^*$  s'effectue grâce à des règles empiriques établies par J C Slater dont le principe de calcul consiste à additionner l'écrantage de chaque électron. Ici prenons l'exemple du chlore ( $Cl, Z = 17 = [1s^2]; [2s^2, 2p^6]; [3s^2, 3p^5]$ ). On étudie dans cet exemple (voir figure 2.1.1) un électron de valence (c'est-à-dire appartenant à la dernière couche électronique, ici  $(3s^2 3p^5)$ ). Ainsi, la charge effective pour chaque électron de la sous-couche  $3s$  ou  $3p$  est donnée par l'équation (2.1.1) avec une constante d'écran  $\sigma$  due à tous les autres électrons de la couche  $(3s, 3p)$  et des couches inférieures. Il y a 7 électrons sur la couche  $(3s, 3p)$ , un électron de la couche  $3s$  ou  $3p$  subira donc l'effet d'écran des 6 autres électrons de cette même couche, ainsi que celui des 8 électrons sur la couche  $(2s, 2p)$  et des 2 électrons de la couche  $(1s)$ .

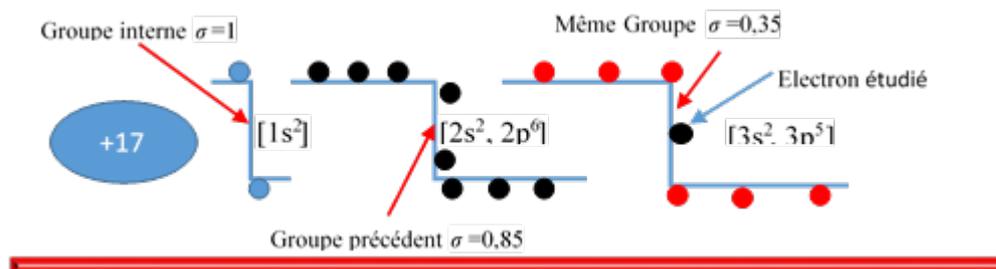


FIGURE 2.1.1 – Règles de Slater pour la détermination de la constante d'écran.

La constante d'écran  $\sigma$  est donnée par :

$$\sigma = ((6 \times 0,35) + (8 \times 0,35) + (2 \times 1)) = 10,9$$

La charge effective  $Z^*$  est donnée par :

$$Z^* = Z - \sigma = 17 - 10,9 = 6,1$$

Ainsi dans sa théorie (Slater, 1930), les règles sont développées afin de construire des approximations analytiques simples de l'orbitale atomique de tout électron dans un atome. Les orbitales de Slater utilisent des fonctions d'ondes hydrogénoïde spéciales du type :

$$\Psi_{nlm} = N_n \left( \frac{r}{a_0} \right)^{n^*-1} \exp \left( -\zeta \frac{r}{a_0} \right) Y_{lm}(\Theta, \varphi) \quad (2.1.2)$$

Dans cette expression,  $N_n$  est la constante de normalisation donnée comme suit :

$$N_n = \frac{2(\zeta)^{n+\frac{1}{2}}}{\sqrt{(2n)!}} \quad (2.1.3)$$

Et,  $\zeta$  est l'exponentielle orbitale donnée par :

$$\zeta = \frac{(Z - \sigma_i)}{n^*} \quad (2.1.4)$$

Le nombre  $n^*$  est le nombre quantique effectif lié au nombre quantique principal  $n$  par une règle établie par Slater (Slater, 1930) de la façon suivante :

$$n \dots \dots \dots 123456 \text{ et } n^* \dots \dots \dots 1233,744,2 \quad (2.1.5)$$

$Y_{ml}(\Theta, \varphi)$ , représente les harmoniques sphériques, où  $\ell$  et  $m$  sont respectivement le nombre quantique azimutal et le nombre quantique magnétique.

Les fonctions d'onde de Slater sont une solution de l'équation de Schrödinger où l'opérateur hamiltonien est sous la forme :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \hat{V}(r) \quad (2.1.6)$$

Dans cette équation, l'opérateur d'énergie potentielle  $\hat{V}(r)$  est de la forme :

$$\hat{V}(r) = -e^2 \frac{(Z - \sigma_i)}{r} + \frac{\hbar^2}{2} \frac{\hbar^2 n^* (n^* - 1)}{r^2} \quad (2.1.7)$$

La valeur propre correspondant aux fonctions propres données par l'équation (2.1.2) est de la forme :

$$E = \frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{(Z - \sigma_i)^2}{(n^*)^2} \quad (2.1.8)$$

En Rydberg, ce résultat peut être donné comme suit :

$$E = -\frac{(Z - \sigma_i)^2}{(n^*)^2} \quad (2.1.9)$$

Pour les systèmes à deux électrons qui intéressent notre étude, l'énergie totale du point de vue des orbitales atomiques de Slater est donnée par :

$$E = -2 \frac{(Z - \sigma_i)^2}{(n^*)^2} \quad (2.1.10)$$

La détermination de  $n^*$  et de  $\sigma_i$  est donné plus haut.

## 2.2 Modification de la théorie des orbitales atomiques

Les observations précédentes montrent que, pour formuler une modification de l'orbitale atomique de Slater pour les états excités, il suffit de reconsidérer les valeurs de  $n$  et de  $\sigma$ . Dans ce but, nous remplaçons dans les fonctions d'onde orbitale de Slater données par l'équation (2.1.2) et dans l'opérateur d'énergie potentielle donné par l'équation (2.1.7), le nombre quantique effectif  $n^*$  par le nombre quantique principal  $n$ .

Considérant séparément l'orbitale atomique notée ici noté  $(\nu l)$ ,  $\nu$  un nombre quantique principal, l'énergie de valeur propre pour  $(\nu l)$  est donnée par l'équation (Sakho 2010ab) :

$$E = -\frac{(Z - \sigma(\ell))^2}{(\nu)^2} \quad (2.2.1)$$

Pour un système atomique à plusieurs électrons  $N$ , l'énergie totale est donnée par (en Rydberg) :

$$E = \sum_{i=1}^N \frac{(Z - \sigma_i(\ell))^2}{(\nu_i)^2} \quad (2.2.2)$$

Dans cette équation (2.2.1), les constantes d'écrans  $\sigma_i(l)$  sont déterminées empiriquement, et dépendent de l'orbital considéré.

## 2.3 Procédure variationnelle de la théorie modifiée des orbitales atomiques

La procédure variationnelle qui est une méthode purement théorique, met à profit le principe de variation. Cette méthode variationnelle est une technique de calcul permettant de fournir des solutions approchées à la résolution de l'équation de Schrödinger. La procédure variationnelle de la théorie modifiée des orbitales atomiques met à profit le principe de variation de Ritz. Cette méthode de variation est généralement basée sur la propriété de l'état fondamental énoncée par Minkine (Minkine et al, 1979) comme suit :

Si la plus petite valeur de l'hamiltonien  $H$  d'un système est  $E_1$ , et si  $|\Phi_1\rangle$  est le

vecteur propre exact associé à la valeur propre  $E_1$ , alors pour tout  $|\Psi\rangle$  de l'espace des états du système est vérifié la relation :

$$\langle H \rangle = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \geq \frac{\langle \Phi_1 | H | \Phi_1 \rangle}{\langle \Phi_1 | \Phi_1 \rangle} = E_1 \quad (2.3.1)$$

L'égalité de cette équation se produit lorsque  $|\Psi\rangle$  est un ket propre de  $H$  avec la valeur propre  $E_1$ . Ainsi le ket  $|\Psi\rangle$  est appelé *ket* d'essai ou encore *ket* corrélée, et la fonction d'onde correspondante  $\Psi(r_1, r_2 \dots r_i)$  est appelée fonction d'onde d'essai, ou encore fonction d'onde corrélée. Plus la fonction d'onde d'essai est proche de la fonction d'onde exacte, plus la valeur obtenue de l'énergie à l'aide de la fonction d'onde d'essai, est proche de la valeur exacte (Sakho 2013).

### 2.3.1 Construction de la fonction d'onde

Dans la construction de la fonction d'onde corrélée, on effectue un produit de fonctions d'ondes de types hydrogéoïde dans lesquels des paramètres variationnels sont introduits. Ainsi dans le cas des systèmes atomiques, ces critères sont généralement déterminés par les effets d'écran exercés par les électrons les uns sur les autres par l'interaction spin-orbite etc... .

Dans le tableau 2.1 nous présentons quelques fonctions d'ondes hydrogéoïde relative aux états  $|n, l, m\rangle$ . Ces fonctions d'ondes sont radiales de type hydrogéoïde et ont la même forme. Elles sont non normées et sont obtenues à partir des coordonnées radiales ( $r$ ) et d'un facteur exponentiel. Pour certains états ( $4s$  et  $4p$ ), nous allons montrer la procédure de calcul utilisée pour la détermination des fonctions d'ondes radiales. Ainsi cette procédure est valable pour tous les états ( $2p, 3d, 4s, 4p$ , etc...), et est notée comme suite :

$$R_{n,l}(r) = \left\{ \left( \frac{2Z}{na_0} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right\}^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{Zr}{na_0}} \left( \frac{2Zr}{na_0} \right)^l L_{n+l}^{2l+1} \left( \frac{2Zr}{na_0} \right) \quad (2.3.2)$$

Les polynômes de Laguerre associés sont liés aux polynômes de Laguerre  $L_{n+l}(r)$  par la formule de Rodrigue :

$$L_n^k(r) = (-1)^k \frac{d^k}{dr^k} L_n(r) \quad (2.3.3)$$

$$L_n(r) = e^r \frac{d^n}{dr^n} (r^n e^{-r}) \quad (2.3.4)$$

Pour des valeurs de  $n$  et  $l$  différents, les polynômes de Laguerre sont mutuellement orthogonaux, ce qui détermine alors l'orthogonalité des fonctions d'ondes radiales. Donnons l'exemple de la fonction d'onde 4s :

Pour l'état 4s on a :  $n=4, l=0$ .

$$L_{n+l}^{2l+1} \left( \frac{2Zr}{na_0} \right) = L_4^1 \left( \frac{2Zr}{na_0} \right) \quad (2.3.5)$$

$$L_4 = e^r \frac{d^4}{dr^4} (r^4 e^{-r}) \quad (2.3.6)$$

A partir de ces expressions nous obtenons :

$$L_4(r) = e^r \frac{d^3}{dr^3} (4r^3 e^{-r} - r^4 e^{-r}) = e^r \frac{d^2}{dr^2} (12r^2 e^{-r} - 4r^3 e^{-r} - 4r^3 e^{-r} + r^4 e^{-r})$$

$$L_4(r) = e^r \frac{d}{dr} (24r e^{-r} - 12r^2 e^{-r} + 4r^3 e^{-r} - 12r^2 e^{-r} + 4r^3 e^{-r} + 4r^3 e^{-r} - r^4 e^{-r})$$

$$L_4(r) = e^r (24e^{-r} - 24r e^{-r} - 24r e^{-r} + 12r^2 e^{-r} - 24r e^{-r} + 12r^2 e^{-r} - 4r^3 e^{-r} +$$

$$-24r e^{-r} + 12r^2 e^{-r} + 12r^2 e^{-r} - 4r^3 e^{-r} + 12r^2 e^{-r} - 4r^3 e^{-r} - 4r^3 e^{-r} + r^4 e^{-r})$$

$$L_4(r) = (24 - 96r + 72r^2 - 16r^3 + r^4) \quad (2.3.7)$$

Ensuite ;

$$L_4^1 = \frac{d}{dr} L_4(r) = 4(-24 + 36r - 12r^2 + r^3) \quad (2.3.8)$$

Ce qui donne :

$$L_{n+l}^{2l+1} \left( \frac{2Zr}{na_0} \right) = L_4^1 \left( \frac{2Zr}{na_0} \right) = (-4) \left[ -24 \left( \frac{2Z}{4a_0} \right)^0 + 36r \left( \frac{2Z}{4a_0} \right)^1 - 12r^2 \left( \frac{2Z}{4a_0} \right)^2 + r^3 \left( \frac{2Z}{4a_0} \right)^3 \right]$$

$$L_{n+l}^{2l+1} \left( \frac{2Zr}{na_0} \right) = L_4^1 \left( \frac{2Zr}{na_0} \right) = (-4) \left( -24 + \frac{18Zr}{a_0} - \frac{3Z^2r^2}{a_0^2} + \frac{Z^3r^3}{8a_0^3} \right) \quad (2.3.9)$$

Ainsi la détermination de la première partie de l'expression (2.3.2)  $\left\{ \left( \frac{2Z}{na_0} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right\}^{\frac{1}{2}}$  pour  $n=4$  et  $l=0$  est :

$$\begin{aligned} \left\{ \left( \frac{2Z}{na_0} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right\}^{\frac{1}{2}} &= \left[ \left( \frac{Z}{2a_0} \right)^3 \left( \frac{6}{8 \times (24)^3} \right) \right]^{\frac{1}{2}} = \left[ \left( \frac{Z}{2a_0} \right)^3 \left( \frac{3}{4 \times (24)^3} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \\ &= \left[ \left( \frac{Z}{2a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left( \frac{1}{96\sqrt{2}} \right) \right] = \left[ \frac{1}{4 \times 96} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \right] \end{aligned}$$

Finalement l'expression devient :

$$\left\{ \left( \frac{2Z}{na_0} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right\}^{\frac{1}{2}} = \left[ \frac{1}{4 \times 96} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \right] \quad (2.3.10)$$

Ainsi partant du produit des expressions (2.3.9), (2.3.10) nous obtenons :

$$\begin{aligned} \left[ \frac{1}{4 \times 96} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \right] \times (-4) \left( -24 + \frac{18Zr}{a_0} - \frac{3Z^2r^2}{a_0^2} + \frac{Z^3r^3}{8a_0^3} \right) \\ = \left[ \frac{1}{96} \left( 24 - \frac{18Zr}{a_0} + \frac{3Z^2r^2}{a_0^2} - \frac{Z^3r^3}{8a_0^3} \right) \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \right] \quad (2.3.11) \end{aligned}$$

En simplifiant par 24 on obtient finalement l'expression de la fonction d'onde radiale 4s comme suite :

$$R_{4,0} = \frac{24}{96} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left( 1 - \frac{3Zr}{4a_0} - \frac{Z^2r^2}{8a_0^2} - \frac{Z^3r^3}{192a_0^3} \right) e^{-\frac{Zr}{4a_0}} \quad (2.3.12)$$

Ainsi la fonction d'onde  $4p$  est donnée comme suite :

$$R_{4,1} = \frac{5}{16\sqrt{2}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{Z}{a_0}r - \frac{1}{4} \frac{Z^2}{a_0^2}r^2 + \frac{1}{80} \frac{Z^3}{a_0^3}r^3\right) e^{-\frac{Zr}{4a_0}} \quad (2.3.13)$$

TABLE 2.1 – Expressions explicites de quelques fonctions d'onde hydrogénoïde.

n	$\ell$	$\Psi_{nl}(r) = R_{n,l}(r)$	Etats
1	0	$\Psi_{1,0}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\left(\frac{Z}{a_0}r\right)}$	S
2	0	$\Psi_{2,0}(r) = \frac{2}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(1 - \frac{Z}{2a_0}r\right) e^{-\left(\frac{Z}{2a_0}r\right)}$	S
	1	$\Psi_{2,1}(r) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{Z}{a_0}r\right) e^{-\left(\frac{Z}{2a_0}r\right)}$	P
	1	$\Psi_{2,1,\pm 1}(r) = \frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{Z}{a_0}r\right) e^{-\left(\frac{Z}{2a_0}r\right)}$	P
3	0	$\Psi_{3,0}(r) = \frac{1}{81\sqrt{3\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(27 - 18\frac{Z}{a_0}r + 2\frac{Z^2}{a_0^2}r^2\right) e^{-\left(\frac{Z}{3a_0}r\right)}$	S
	1	$\Psi_{3,1}(r) = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(6\frac{Z}{a_0}r - \frac{Z^2}{a_0^2}r^2\right) e^{-\left(\frac{Z}{3a_0}r\right)}$	P
	1	$\Psi_{3,1,\pm 1}(r) = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(6\frac{Z}{a_0}r - \frac{Z^2}{a_0^2}r^2\right) e^{-\left(\frac{Z}{3a_0}r\right)}$	P
	2	$\Psi_{3,2}(r) = \frac{1}{81\sqrt{6\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{Z^2}{a_0^2}r^2\right) e^{-\left(\frac{Z}{3a_0}r\right)}$	D
	2	$\Psi_{3,2,\pm 1}(r) = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{Z^2}{a_0^2}r^2\right) e^{-\left(\frac{Z}{3a_0}r\right)}$	D
4	0	$\Psi_{4,0}(r) = \frac{24}{96} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(1 - \frac{3}{4} \frac{Z}{a_0}r + \frac{1}{8} \frac{Z^2}{a_0^2}r^2 - \frac{1}{192} \frac{Z^3}{a_0^3}r^3\right) e^{-\left(\frac{Z}{4a_0}r\right)}$	S
	1	$\Psi_{4,1}(r) = \frac{5}{16\sqrt{2}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{Z}{a_0}r - \frac{1}{4} \frac{Z^2}{a_0^2}r^2 + \frac{1}{80} \frac{Z^3}{a_0^3}r^3\right) e^{-\left(\frac{Z}{4a_0}r\right)}$	P

D'après le tableau, les fonctions d'ondes radiales relatives aux états (2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 4p) sont les suivantes :

Pour l'état 2s :

$$\Psi_{2,0}(r) = \frac{2}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(1 - \frac{Z}{2a_0}r\right) e^{-\left(\frac{Z}{2a_0}r\right)} \quad (2.3.14)$$

Pour l'état 2p :

$$\Psi_{2,1}(r) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{Z}{a_0}r\right) e^{-\left(\frac{Z}{2a_0}r\right)} \quad (2.3.15)$$

Pour l'état  $3s$  :

$$\Psi_{3,0}(r) = \frac{1}{3\sqrt{3\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(1 - \frac{2Z}{3a_0}r + \frac{2Z^2}{27a_0^2}r^2\right) e^{-\left(\frac{Z}{3a_0}r\right)} \quad (2.3.16)$$

Pour l'état  $3p$  :

$$\Psi_{3,1}(r) = \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{Z}{a_0}r - \frac{1Z^2}{6a_0^2}r^2\right) e^{-\left(\frac{Z}{3a_0}r\right)} \quad (2.3.17)$$

Pour l'état  $4s$  :

$$\Psi_{4,0}(r) = \frac{24}{96} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(1 - \frac{3Z}{4a_0}r + \frac{1Z^2}{8a_0^2}r^2 - \frac{1Z^3}{192a_3}r^3\right) e^{-\left(\frac{Z}{4a_0}r\right)} \quad (2.3.18)$$

Pour l'état  $4p$  :

$$\Psi_{4,1}(r) = \frac{5}{16\sqrt{2}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{Z}{a_0}r - \frac{1Z^2}{4a_0^2}r^2 + \frac{1Z^3}{80a_3}r^3\right) e^{-\left(\frac{Z}{4a_0}r\right)} \quad (2.3.19)$$

Pour construire les fonctions d'ondes de type  $(Nl, nl'^{2S+1}L^\pi)$ , on effectue le produit des parties radiales  $R_{n,l}(r)$  tout en considérant les électrons (1) et (2) des systèmes héliumoides, dont les coordonnées radiales sont respectivement  $r_1$ , et  $r_2$ . Dans le cadre du modèle des particules indépendantes ou les phénomènes de corrélation électroniques sont négligées (répulsion coulombienne, interaction spin-orbite, etc. ...), les produits des fonctions sont donnés comme suite :

Pour la fonction  $2s2p$  :

$$2s = \left(1 - \frac{Z}{2a_0}r_1\right) e^{-\left(\frac{Z}{2a_0}r_1\right)} \text{ et } 2p = \left(\frac{Z}{a_0}r_2\right) e^{-\left(\frac{Z}{2a_0}r_2\right)}$$

$$\Psi(2s2p) = \left[\left(1 - \frac{Z}{2a_0}r_1\right) \times \left(\frac{Z}{a_0}r_2\right)\right] e^{-\left(\frac{Z}{2a_0}r_1\right)} \times e^{-\left(\frac{Z}{2a_0}r_2\right)} \quad (2.3.20)$$

Pour la fonction  $3s3p$  :

$$3s = \left(1 - \frac{2}{3} \frac{Z}{a_0} r_1 + \frac{2}{27} \frac{Z^2}{a_0^2} r_1^2\right) e^{-\left(\frac{Z}{3a_0} r_1\right)} \text{ et } 3p = \left(\frac{Z}{a_0} r_2 - \frac{1}{6} \frac{Z^2}{a_0^2} r_2^2\right) e^{-\left(\frac{Z}{3a_0} r_2\right)}$$

$$\Psi(3s3p) = \left[ \left(1 - \frac{2}{3} \frac{Z}{a_0} r_1 + \frac{2}{27} \frac{Z^2}{a_0^2} r_1^2\right) \times \left(\frac{Z}{a_0} r_2 - \frac{1}{6} \frac{Z^2}{a_0^2} r_2^2\right) \right] e^{-\left(\frac{Z}{3a_0} r_1\right)} \times e^{-\left(\frac{Z}{3a_0} r_2\right)} \quad (2.3.21)$$

Pour la fonction 4s4p :

$$4s = \left(1 - \frac{3}{4} \frac{Z}{a_0} r_1 + \frac{1}{8} \frac{Z^2}{a_0^2} r_1^2 - \frac{1}{192} \frac{Z^3}{a_3} r_1^3\right) e^{-\left(\frac{Z}{4a_0} r_1\right)}$$

$$4p = \left(\frac{Z}{a_0} r_2 - \frac{1}{4} \frac{Z^2}{a_0^2} r_2^2 + \frac{1}{80} \frac{Z^3}{a_3} r_2^3\right) e^{-\left(\frac{Z}{4a_0} r_2\right)}$$

$$\Psi(4s4p) = \left[ \left(1 - \frac{3}{4} \frac{Z}{a_0} r_1 + \frac{1}{8} \frac{Z^2}{a_0^2} r_1^2 - \frac{1}{192} \frac{Z^3}{a_3} r_1^3\right) \times \left(\frac{Z}{a_0} r_2 - \frac{1}{4} \frac{Z^2}{a_0^2} r_2^2 + \frac{1}{80} \frac{Z^3}{a_3} r_2^3\right) \right] \times \left( e^{-\left(\frac{Z}{4a_0} r_1\right)} \times e^{-\left(\frac{Z}{4a_0} r_2\right)} \right) \quad (2.3.22)$$

Tenant compte des phénomènes de corrélations électroniques, la charge nucléaire du facteur exponentiel est substituée au profit de la charge effective  $Z^*$ , et en unité atomique, le rayon de Bohr  $a_0 = 1$ .

Ainsi ces fonctions deviennent :

Pour la fonction d'onde 2snp :

$$\Psi(2snp) = \left[ \left(1 - \frac{Z}{2a_0} r_1\right) \times \left(\frac{Z}{a_0} r_2\right) \right] e^{-\frac{Z^*}{n}(r_1+r_2)} \quad (2.3.23)$$

Pour la fonction d'onde 3snp :

$$\Psi(3snp) = \left[ \left(1 - \frac{2}{3} \frac{Z}{a_0} r_1 + \frac{2}{27} \frac{Z^2}{a_0^2} r_1^2\right) \times \left(\frac{Z}{a_0} r_2 - \frac{1}{6} \frac{Z^2}{a_0^2} r_2^2\right) \right] e^{-\frac{Z^*}{n}(r_1+r_2)} \quad (2.3.24)$$

Pour la fonction d'onde  $4snp$  :

$$\Psi(4snp) = \left[ \left( 1 - \frac{3Z}{4a_0}r_1 + \frac{1}{8} \frac{Z^2}{a_0^2}r_1^2 - \frac{1}{192} \frac{Z^3}{a_0^3}r_1^3 \right) \times \left( \frac{Z}{a_0}r_2 - \frac{1}{4} \frac{Z^2}{a_0^2}r_2^2 + \frac{1}{80} \frac{Z^3}{a_0^3}r_2^3 \right) \right] \times e^{-\frac{Z^*}{n}(r_1+r_2)} \quad (2.3.25)$$

L'expression de la charge effective  $Z^*$  est donnée par :

$$Z^* = Z \left( 1 - \frac{\sigma(Nl, nl')}{Z} \right) \quad (2.3.26)$$

Avec  $\sigma(Nl, nl')$  la constante d'écran relative à ces états.

### 2.3.2 Détermination de la constante d'écran

Pour déterminer la constante d'écran, nous partons de la relation :

$$E(\alpha) = \langle H \rangle(\alpha) = \frac{\langle \Psi(\alpha) | H | \Psi(\alpha) \rangle}{\langle \Psi(\alpha) | \Psi(\alpha) \rangle} \quad (2.3.27)$$

Et l'hamiltonien  $H$  (en unité atomique) est (Sakho 2013) :

$$H = -\frac{1}{2}\Delta_1 - \frac{1}{2}\Delta_2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \quad (2.3.28)$$

La valeur moyenne de cette expression (2.3.28), tout en utilisant la relation de fermeture traduisant le fait que les kets  $|r_1, r_1\rangle$  sont des bases continues dans l'espace des états des deux électrons :

$$\iint dr_1^3 dr_2^3 |r_1, r_1\rangle \langle r_1, r_2| = \mathbb{I} \quad (2.3.29)$$

De cette relation on peut à partir de (2.3.29) :

$$E(\alpha) \iint dr_1^3 dr_2^3 \langle \Psi(\alpha) | r_1, r_1 \rangle \times \langle r_1, r_2 | \Psi(\alpha) \rangle$$

$$= \iint dr_1^3 dr_2^3 \langle \Psi(\alpha) | r_1, r_1 \rangle \hat{H} \langle r_1, r_2 | \Psi(\alpha) \rangle \quad (2.3.30)$$

Le développement de (2.3.30) donne :

$$\begin{aligned} E(\alpha) & \iint dr_1^3 dr_2^3 \Psi(r_1, r_2, \alpha) \times \Psi^*(r_1, r_2, \alpha) \\ & = \iint dr_1^3 dr_2^3 \Psi(r_1, r_2, \alpha) \hat{H} \Psi^*(r_1, r_2, \alpha) \end{aligned} \quad (2.3.31)$$

La constante de normalisation notée  $N$  est donnée par :

$$NE(\alpha) = \iint dr_1^3 dr_2^3 \Psi(r_1, r_2, \alpha) \hat{H} \Psi^*(r_1, r_2, \alpha) \quad (2.3.32)$$

Et de cette relation (2.3.32), on obtient :

$$N = \iint dr_1^3 dr_2^3 |\Psi(r_1, r_2, \alpha)|^2 \quad (2.3.33)$$

Pour faciliter le développement de ces expressions, nous avons effectués un changement de variable de certains paramètres de l'équation (2.3.30). C'est par la suite qu'on a posé en coordonnée elliptique :

$$s = (r_1 + r_2), t = (r_1 - r_2), u = r_{12}. \quad (2.3.34)$$

Et l'élément de volume élémentaire  $d\tau = dr_1^3 dr_2^3$  donne :

$$d\tau = 2\pi^2 (s^2 - t^2) u ds dt du \quad (2.3.35)$$

En appliquant ces changements de variables dans l'équation (2.3.33) l'expression précédente de la constante de normalisation notée  $N$  deviennent en coordonnée elliptique :

$$NE(\alpha) = \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u dt \left\{ u (s^2 - t^2) \times \left[ \left( \frac{\partial \Psi}{\partial s} \right)^2 + \left( \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right)^2 + \left( \frac{\partial \Psi}{\partial u} \right)^2 \right] \right\}$$

$$+2 \left( \frac{\partial \Psi}{\partial u} \right) \times \left[ s (u^2 - t^2) \frac{\partial \Psi}{\partial s} + t (s^2 - u^2) \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right] - \Psi^2 [4Zsu - s^2 + t^2] \left. \vphantom{\frac{\partial \Psi}{\partial u}} \right\} \quad (2.3.36)$$

Étant donné qu'on n'a pas tenu compte de la répulsion coulombienne, donc  $\frac{\partial \Psi}{\partial u} = 0$ . La constante de normalisation devienne :

$$NE(\alpha) = \left\{ \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u dtu (s^2 - t^2) \times \left[ \left( \frac{\partial \Psi}{\partial s} \right)^2 + \left( \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right)^2 \right] - \right. \\ \left. - \Psi^2 [4Zsu - s^2 + t^2] \right\} \quad (2.3.37)$$

Pour déterminer les valeurs de la constante d'écran  $\sigma$  et du paramètre variationnel  $\alpha$ , nous partons de cette équation qui est la somme de trois intégrales données comme suite :

$$NE(\alpha) = E_1(\alpha) + E_2(\alpha) + E_3(\alpha) \quad (2.3.38)$$

Le développement de cette expression (2.3.37) permet l'obtention de la valeur de  $\sigma$  et de  $\alpha$  par la formule :

$$\frac{dE(\alpha_i)}{d\alpha_i} = 0 \quad (2.3.39)$$

Les expressions correspondantes à  $E_1(\alpha)$ ,  $E_2(\alpha)$ , et  $E_3(\alpha)$ , sont :

$$E_1(\alpha) = \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u dtu (s^2 - t^2) \times \left( \frac{\partial \Psi}{\partial s} \right)^2 \quad (2.3.40)$$

$$E_2(\alpha) = \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u dtu (s^2 - t^2) \times \left( \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right)^2 \quad (2.3.41)$$

$$E_3(\alpha) = - \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u dt [4Zsu - s^2 + t^2] \Psi^2 \quad (2.3.42)$$

La constante de normalisation vaut ainsi :

$$N = \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u dt (s^2 - t^2) \times \Psi^2 \quad (2.3.43)$$

Avec ces changements de variables, les fonctions d'ondes corrélées des états  $2snp$ ,  $3snp$ ,  $4snp$  deviennent :

$$\Psi(2s2p) = -\frac{1}{8} [(s-t) \times (sZ + tZ - 4)] \times e^{-\alpha s} \quad (2.3.44)$$

$$\begin{aligned} \Psi(3s3p) = & -\frac{1}{1296} [Z(s-t) \times (sZ - tZ - 12) \times \\ & \times (s^2 Z^2 + 2stZ^2 - 18sZ + t^2 Z^2 - 18tZ + 54)] \times e^{-\alpha s} \end{aligned} \quad (2.3.45)$$

$$\begin{aligned} \Psi(3s3p) = & -\frac{1}{983040} [Z(s-t) (s^2 Z^2 - 2stZ^2 - 40sZ + t^2 Z^2 + 40tZ + 320) \times \\ & (s^3 Z^3 + 3s^2 tZ^3 - 48s^2 Z^2 + 3st^2 Z^3 - 96stZ^2 + 576sZ + t^3 Z^3 - \\ & 48t^2 Z^2 + 576tZ - 1536)] e^{-\alpha s} \end{aligned} \quad (2.3.46)$$

## 2.4 Résultats et Discussions.

Dans cette partie, la procédure consiste à déterminer les expressions finales des énergies, la valeur du paramètre variationnel  $\alpha$ , et de la constante d'écran  $\sigma$ . Vu que les calculs utilisés sont très complexes, et nécessite beaucoup de changement de variables, avec des matrices à manipuler, nous avons jugé nécessaire de faire pour

une première fois appel à un programme informatique avec le logiciel matlab. Dans ce programme, nous avons définis dans un premier temps les paramètres  $s, t, u, \alpha$ , et  $z$  de l'équation (2.3.34), l'expression de la dérivée en fonction de chaque paramètre, ainsi que le carré de la dérivée. Dans un second temps, les expressions de ( $E_1, E_2, E_3$  et  $N$ ) des équations (2.3.40, 2.3.41, 2.3.42, 2.3.43), ainsi que leurs factoriels ont été définis et détailler expression par expression. Ensuite pour simplifier certains paramètres, un calcul matriciel a été effectué dans ce programme, et des rapports entre ces matrices ont été faits pour obtenir une expression simple de l'équation (2.3.38) afin d'appliquer la formule de l'équation (2.3.39) pour avoir les valeurs approchées de la constante d'écran  $\sigma$  et du paramètre variationnel  $\alpha$ .

### 2.4.1 Expression des énergies totales.

Dans le cas du calcul variationnel de la théorie modifiée des orbitales atomiques, l'expression de l'énergie totale des états doublements excités de types ( $Nsnp$ ) d'un orbitale est donnée par la formule (en Rydberg) (Sakho, 2010a) :

$$E(Nsnp) = - \left( \frac{(Z - \sigma(ns))^2}{N^2} \right) - \left( \frac{(Z - \sigma(np))^2}{n^2} \right) \quad (2.4.1)$$

Avec  $N \neq n$  et  $\sigma(ns) = \sigma(np)$ .

Dans certains cas il arrive que l'on ajoute un facteur correctif à cette expression pour obtenir des résultats plus proches de ceux trouvés dans la littérature consultées.

Ainsi les expressions des états  $Nsnp$  sont détaillées comme suit :

Pour l'état  $2snp$  :

$$E(2s2p) = - \left( \frac{(Z - \sigma(ns))^2}{N^2} \right) - \left( \frac{(Z - \sigma(np))^2}{n^2} \right) \quad (2.4.2)$$

Avec  $\sigma(ns) = \sigma(np)$  et  $N = n$ .

Pour l'état  $3snp$  :

$$E(3s3p) = - \left( \frac{(Z - \sigma(ns))^2}{N^2} \right) - \left( \frac{(Z - \sigma(np))^2}{n^2} \right) \quad (2.4.3)$$

Avec  $\sigma(ns) = \sigma(np)$  et  $N = n$ .

Pour l'état  $4snp$  :

$$E(4s4p) = - \left( \frac{(Z - \sigma(ns))^2}{N^2} \right) - \left( \frac{(Z - \sigma(np))^2}{n^2} \right) \quad (2.4.4)$$

Avec  $\sigma(ns) = \sigma(np)$  et  $N = n$ .

### 2.4.2 Expression du paramètre variationnel $\alpha$ .

La détermination du paramètre variationnel  $\alpha$  vient de l'expression (2.3.39) avec :

$$\sum_{i=1}^3 = \left( \frac{E_i}{N} \right) \quad (2.4.5)$$

Ainsi le programme de calcul est présenté dans la partie annexe, et le paramètre variationnel  $\alpha$  des états  $2s2p$ ,  $3s3p$  et  $4s4p$  est donné comme suit :

$$\alpha = \frac{n+l+l'}{n} Z \left( 1 - \frac{\sigma(Nl, nl')}{Z} \right) \quad (2.4.6)$$

Pour l'état  $2s2p$  :

$$\alpha_2(2s2p) \approx \frac{3}{2} Z \left( 1 - \frac{1}{2} \times \frac{1}{Z} \right) \quad (2.4.7)$$

Avec  $\sigma(2s2p) = 0,5$

Pour l'état  $3s3p$  :

$$\alpha_3(3s3p) \approx \frac{4}{3} Z \left( 1 - \frac{3}{12} \times \frac{1}{Z} \right) \quad (2.4.8)$$

Avec  $\sigma(3s3p) = 0,25$

Pour l'état  $4s4p$  :

$$\alpha_4(4s4p) \approx \frac{5}{4} Z \left( 1 - \frac{3}{7} \times \frac{1}{Z} \right) \quad (2.4.9)$$

Avec  $\sigma(4s4p) = 0,428$

### 2.4.3 Analyse et discussion des Résultats.

Dans ce présent travail, les résultats obtenus sont comparés à ceux trouvés dans la littérature théorique et expérimentale. Nous avons calculé les énergies totales des états  $(3snp^1P^o)$ ,  $(2snp^1P^o)$ ,  $(4snp^1P^o)$  ainsi que les énergies d'excitations des états  $(3snp^1P^o)$ ,  $(2snp^1P^o)$ ,  $(4snp^1P^o)$ . Pour les états  $(3snp^1P^o)$  les énergies totales sont données en Rydberg et en  $eV$ , représenté dans le Tableau I et II. Pour les états  $(2snp^1P^o)$ ,  $(4snp^1P^o)$ , leurs résultats sont donnés en  $eV$  et représentés dans les tableaux III, IV respectivement. Les équations (2.4.2), (2.4.3), (2.4.4) ont été utilisées pour le calcul de ses énergies totales des états  $(3snp^1P^o)$ ,  $(2snp^1P^o)$ ,  $(4snp^1P^o)$  respectivement. Concernant les énergies d'excitations, nous avons pris les énergies de l'état fondamental donné par Frankowski et Pekeris (Frankowski et Pekeris, 1966). Ces énergies sont donnés en  $u.a$  ( $1u.a = 2Rydberg$ ) leurs valeurs sont données comme suite :  $He(-2.90372)$ ,  $Li^+(-7.27991)$ ,  $Be^{2+}(-13.65556)$ ,  $Be^{3+}(-22.03097)$ .

Dans les tableaux I, II, III, et IV ; nous avons utilisé le calcul variationnel de la théorie modifiée des orbitales atomique(TMOA) des énergies totales des états doublements excités  $(3snp^1P^o)$ ,  $(2snp^1P^o)$ ,  $(4snp^1P^o)$ . Nous avons comparés les résultats obtenus à des résultats théoriques pour l'ensemble de ces états, et des résultats expérimentaux existant que pour les états  $(3s3p^1P^o)$ ,  $(2s2p^1P^o)$ , de l'hélium ( $He$ ) de Kossman (Kossman et al. 1988),  $(2s2p^1P^o)$ , du lithium ( $Li^+$ ) de Diehl (Diehl et al. 1999), et  $(4s4p^1P^o)$  de Woodru (Woodru et al. 1982). Les résultats théoriques auxquels nous avons comparés nos résultats sont ceux de Sakho (Sakho et al. 2008), (Ivanov et Safronova, 1993), (Drake and Dalgarno, 1971), (Ho, 1980), (Biaye et al, 2005), (Bachau et al, 1991), (Sakho et al, 2010), (Wagué, 1987), (Lipsky et al, 1977). Ainsi dans les tableaux I, II, contenant les états  $(3snp^1P^o)$ , nous avons calculés les énergies totales des états doublements excités de types  $(3snp^1P^o)$  allant de ( $Z = 2$  à 10) en utilisant l'équation (2.4.3). Les résultats trouvés sont en parfaits accord avec ceux trouvés dans la littérature théorique et expérimentale consultée et cité plus haut. Pour les états  $(3s3p^1P^o)$  de l'hélium ( $He$ ), nous avons comparés nos résultats avec obtenus avec ceux obtenus expérimentalement par Kossman et al, (Kossman et al, 1988), et les résultats obtenus sont en parfait accords.

Dans les tableaux III, IV, contenant les états  $(2snp^1P^o)$ , et  $(4s4p^1P^o)$ , Nous avons utilisé respectivement les équations (2.4.2, 2.4.4). Ensuite nous avons ajouté à chacune de ces équations un facteur correctif pour pouvoir obtenir des résultats équivalents à ceux trouvés dans la théorie et expérimentale. Dans le tableau III,

des états ( $2snp^1P^o$ ), nous avons calculé les énergies totales des états doublement excités des systèmes héliumoides ( $Z = 2$  à  $10$ ). Nos résultats trouvés sont en bon accord avec les résultats théoriques trouvés par (Sakho et al. 2008; Ivanov et Safronova, 1993; Drake and Dalgarno, 1971), et expérimentaux trouvés par (Kossmann et al. 1988; Diehl et al. 1999),.

Dans le tableau IV, des états ( $4s4p^1P^o$ ), nous avons également calculé les énergies totales des états doublement excités des systèmes héliumoides ( $Z = 2$  à  $10$ ). Les résultats trouvés sont en parfait accord avec ceux trouvés dans la littérature consultée. Dans le tableau V, nous avons présentés les énergies d'excitations des états doublement excités de types ( $Nsnp^1P^o$ ) ( $N, n \leq 5$ ) de l'hélium et de ses ions assimilés. Elles sont calculées à partir des énergies de l'état fondamental donné par Frankowski et Pekeris (Frankowski et Pekeris, 1966). Les résultats trouvés dans ce tableau sont en parfait accord avec les résultats trouvés par les autres auteurs.

## **conclusion**

D'une manière globale, nous avons appliqué la procédure variationnelle de la théorie modifiée des orbitales atomiques pour le calcul des énergies totales et des énergies d'excitations des états doublement excités du système atomique a plusieurs électrons. Ainsi pour parvenir à nos résultats obtenus, nous avons utilisés à l'appui un programme matlab pour une première fois pour pouvoir réduire la complexité des calculs effectués. Ce programme nous a permis de déterminer les expressions approchées du paramètre variationnel  $\alpha$ , et de la constante d'écran  $\sigma$ . Ainsi dans ce chapitre une nouvelle fonction d'onde corrélée adaptée à la description correcte des phénomènes de corrélation électron-électron et électron-noyau dans les états doublement excités de types  $(Nlnl'^{2s+1}L^\pi)$  des systèmes héliumoides a été construite.

Les résultats trouvés dans ce chapitre ont fait lobjet d'une publication dans une revue internationale indéxée. Les énergies totales, et excitations trouvés montrent un bon accord avec ceux existant dans la littérature consultée. Ces résultats présentés montrent que la procédure variationnel de la théorie modifiée des orbitales atomiques appliquée aux calculs des énergies totales et excitations des systèmes atomiques a plusieurs électron peut être utilisée pour mettre en évidence l'importance des effets de corrélations électron-électron dans les états doublement excités de types  $(Nlnl'^{2s+1}L^\pi)$  sans faire recours à des calculs mathématiques très complexes.

TABLE 2.2 – Les énergies totales des états doublement excités de types  $(Nsnp)^1P^o$  des systèmes héliumoïdes ( $Z = 2$  à  $10$ ) en Rydberg ( $1 \text{ Ryd} = 13,60569 \text{ eV}$ ).

Etats	Z									
	2	3	4	5	6	7	8	9	10	
$E^p$	0,68056	1,68056	3,12500	5,01389	7,34722	10,12500	13,34722	17,01389	21,12500	
$3s3p^1P^o$ $E^a$	0,66054	1,64784	3,07958	4,95577	7,27640	10,04147	13,25099	16,90496	21,00337	
$E^b$	0,67140	1,65940	3,09000	4,96600	7,28600	10,04800	13,25600	16,91000	21,00000	
$E^c$	0,66268	1,67395	3,15417	5,10468	7,52607	10,41871	13,78253	17,61787	21,92494	
$E^p$	0,53168	1,31293	2,44141	3,91710	5,74002	7,91016	10,42752	13,29210	16,50391	
$3s4pP^o$ $E^a$	0,53206	1,31269	2,44053	3,91561	5,73790	7,90742	10,42415	13,28811	16,49930	
$E^b$	0,54240	1,31960	2,44400	3,91400	5,73000	7,89600	10,40800	13,26600	16,47200	
$3s5p^1P^o$ $E^p$	0,46278	1,14278	2,12500	3,40944	4,99611	6,88500	9,07611	11,56944	14,36500	
$E^a$	0,47259	1,15756	2,14475	3,43416	5,02579	6,91965	9,11573	11,61403	14,41455	

P : Présent résultats obtenu à partir de l'équation (2.4.3) ; a : (Sakho et al, 2010),  
b : (Bachau et al, 1991) ; c : (Biaye et al, 2005)

TABLE 2.3 – Les énergies totales des états doublement excités de types  $(Nsnp)^1P^o$  des systèmes héliumoides ( $Z = 2$  à  $10$ ) en eV (1 Ryd = 13,60569 eV).

Etats	Z									
	2	3	4	5	6	7	8	9	10	
$2s2p^1P^o$	$E^p$	17,96	46,88	89,39	145,52	215,25	298,58	395,52	506,07	630,22
	$E^a$	18,88	47,76	90,24	146,34	216,03	299,33	396,24	506,76	630,88
	$E^b$	18,86	47,82	90,33	146,40	216,07	299,32	396,18	506,64	630,70
	$E^c$	19,42	48,23	90,63	146,66	216,28	299,51	396,34	506,78	630,84
	$E^f$	18,87	47,84	90,34	146,42	216,09	299,34	396,20	506,20	630,84
	$E^{e,d}$	18,88d	47,78fe							
$2s3p^1P^o$	$E^p$	15,05	37,16	69,09	110,85	162,44	223,86	295,10	376,16	467,06
	$E^a$	15,95	38,23	70,34	112,28	164,04	225,63	297,05	378,29	469,36
	$E^h$	15,95	37,99	69,86	111,55	163,07	224,41	295,59	376,58	467,41

P : Présent résultats obtenu à partir de l'équation (2.4.1) ; a : (Sakho et al, 2008) ; b : (Ho, 1980) ; c : (Ivanov et Safronova, 1993) ; d : résultats expérimental (Kossmann et al, 1988) ; e : Experimental data, (Diehl et al. 1999) ; f : (Drake and Dalgarno, 1971)

TABLE 2.4 – Les énergies totales des états doublement excités de types  $(Nsnp)^1P^o$  des systèmes héliumoides ( $Z = 2$  à  $10$ ) en eV (1 Ryd = 13,60569 eV).

Etats	Z									
	2	3	4	5	6	7	8	9	10	
$2s2p^1P^o$	$E^p$	17,96	46,88	89,39	145,52	215,25	298,58	395,52	506,07	630,22
	$E^a$	18,88	47,76	90,24	146,34	216,03	299,33	396,24	506,76	630,88
	$E^b$	18,86	47,82	90,33	146,40	216,07	299,32	396,18	506,64	630,70
	$E^c$	19,42	48,23	90,63	146,66	216,28	299,51	396,34	506,78	630,84
	$E^f$	18,87	47,84	90,34	146,42	216,09	299,34	396,20	506,20	630,84
	$E^{e,d}$	18,88d	47,78fe							
$2s3p^1P^o$	$E^p$	15,05	37,16	69,09	110,85	162,44	223,86	295,10	376,16	467,06
	$E^a$	15,95	38,23	70,34	112,28	164,04	225,63	297,05	378,29	469,36
	$E^h$	15,95	37,99	69,86	111,55	163,07	224,41	295,59	376,58	467,41

P : Présent résultats obtenu à partir de l'équation (2.4.1) ; a : (Sakho et al, 2008) ; b : (Ho, 1980) ; c : (Ivanov et Safronova, 1993) ; d : résultats expérimental (Kossmann et al, 1988) ; e : Experimental data, (Diehl et al. 1999) ; f : (Drake and Dalgarno, 1971)

TABLE 2.5 – Les énergies totales des états doublement excités de types  $(Nsnp)^1P^o$  des systèmes héliumoïdes ( $Z = 2$  à  $10$ ) en eV (1 Ryd = 13,60569 eV).

Etats	Z									
	2	3	4	5	6	7	8	9	10	
4s4p1Po	$E^p$	5,24	12,91	23,98	38,46	56,33	77,61	102,29	130,37	161,85
	$E^a$	5,35	13,03	24,10	38,58	56,41	77,75	102,43	132,07	162,00
	$E^b$	5,29	12,95	24,01	38,46	56,31	77,56	102,43	130,27	161,72
	$E^c$	5,35								

P : Présent résultats obtenu à partir de l'équation (2.4.4) ; a : (Sakho et al, 2008) ; c : Experimental data, Woodruff and Samson (1982).

TABLE 2.6 – Les énergies d'excitations des états doublement excités de types  $(Nsnp)^1P^o$  des systèmes héliumoïdes ( $Z = 2$  à  $5$ ) en eV (1 Ryd = 13,60569 eV ; 1 ua = 2 Ryd).

Etats	Z				
	2	3	4	5	
2s2p1Po	$E^p$	61,05	151,22	282,19	453,98
	$E^a$	60,13	150,34	281,35	453,15
	$E^b$	60,13			
	$E^{c,d}$	60,13d	150,31c		
2s3p1Po	$E^p$	63,97	160,94	302,50	488,64
	$E^a$	63,06	159,87	301,25	487,21
3s3p 1Po	$E^p$	69,75	175,23	329,07	531,28
	$E^a$	69,91	175,63	330,54	532,15
	$E$	69,91			
3s4p 1Po	$E^p$	71,78	180,23	338,37	546,20
	$E^a$	71,35	179,68	337,69	545,39
3s5p 1Po	$E^p$	72,72	182,55	342,67	553,11
	$E^a$	71,99	181,52	341,34	551,46
4s4p1Po	$E^p$	73,78	185,19	347,60	561,04
	$E^a$	73,66	185,07	347,49	560,91
	$E^c$	73,66			

P : Présent résultats obtenu à partir de l'équation (2.4.4) ; a : (Sakho et al, 2008) ; c : Experimental data, Woodruff and Samson (1982) ; b : (Drake and Dalgarno, 1971) ; c : Experimental data, (Diehl et al. 1999)



## Chapitre 3

# Etude de la photoionisation résonante des ions ClII, KrII, ArII par la méthode de la TMOA

## Introduction

Dans de nombreux systèmes astrophysiques tels que les étoiles et les nébuleuses, la photoionisation est le principal processus régissant l'interaction entre les espèces atomiques. Bon nombre d'études se sont intéressées à l'importance des ions  $Cl II$  ( $Cl^+$ ),  $Ar II$  ( $Ar^+$ ),  $Kr II$  ( $Kr^+$ ). En ce qui concerne les ions  $Cl^+$ , leurs intérêts sont liés à leurs abondances en objets astrophysiques photoionisés. Ainsi des raies d'émissions des ions  $Cl II$  ont été observées dans les spectres du tore (Kuppers et Schneider, 2000), et dans le spectre optique des nébuleuses planétaires NGC 6741 et IC 5117 voir (figure 3.1, 3.3) (Aggarwam K.M ; Keenan F.P, 2003). Très récemment, d'autres (Hernandez et al. 2015) ont mesurés à la Source de Lumière Avancée (ALS en anglais) du laboratoire national de Lawrence Berkeley des sections efficaces de photoionisation absolue pour les ions  $Cl II$ , par utilisation de la technique ions-photon à faisceau fusionné avec une résolution d'énergie de photon de  $15meV$  dans la gamme d'énergie  $19 - 28eV$ . A l'aide de la méthode R-matrice de Dirac-Coulomb (DCR), McLaughlin (Babb J.F ; McLaughlin, 2017) a effectué des calculs pour attribuer et identifier la série de résonance des spectres ALS des ions  $Cl II$ , en utilisant les mêmes gammes d'énergies que dans les expériences de Hernandez (Hernandez et al. 2015). Concernant l'Argon, c'est un élément très important présent dans plusieurs systèmes astrophysiques. Une surabondance de l'élément Argon présent dans le spectre des rayons X de supernovas jaunes a été révélée par le satellite Chandra (Lewis, 2005) dédié à l'analyse du spectre de l'objet stellaire. De plus des rayons spectraux de l'élément Argon dans le spectre des rayons X de supernovas jaunes ont été observés dans les spectres optiques d'étoiles et de nébuleuses planétaires (Kraus, 2005). Ces exemples montrent du point de vue de l'astrophysique une importance capitale de l'élément Argon. Ainsi Covington (Covington et al. 2011) ont effectués les premières mesures expérimentales de la section efficace de photoionisation de l'ion Argon. Ces auteurs ont également déterminés les énergies de résonance et les largeurs naturelles dominantes liées aux séries de Rydberg  $3s^23p^4(^1D_2)ns, nd$  et  $3s^23p^4(^1S_0)ns, nd$ , dans les spectres d'émissions des ions Argon. Ces énergies ont été relativement mesurées à l'état métastable  $ArII(^2P_{1/2}^o)$  et à l'état fondamental ( $^2P_{3/2}^o$ ). Pour l'élément Krypton, c'est un élément qui a une importance majeure pour le diagnostic des plasmas stellaires tels que les étoiles et les nébuleuses planétaires. Il est aussi important pour le diagnostic des plasmas de laboratoires tels que ceux obtenus par fusion inertielle. Des auteurs comme Hinojosa (Hinojosa et al. 2012) ont étudiés expérimentalement la photoionisation

de l'ion Kr II au niveau d'ALS à Berkeley dans la gamme d'énergie photonique de 23 à 39 eV. Dans les spectres de photoionisation, ces auteurs ont observés plusieurs séries de Rydberg, notamment les séries de  $KrII[4s^24p^4(^1D_2)]ns, nd$ , convergent vers le seuil d'excitation  $KrII[4s^24p^4(^1D_2)]$ . Ainsi des auteurs comme Sakho (Sakho, 2018) par application du formalisme de la constante d'écran par unité de charge nucléaire (CEUCN/SCUNC) pour rendre compte des données précises appartenant aux différentes séries de Rydberg de l'Argon (Ar II) et du Krypton (Kr II) observés dans les travaux de Covington (Covington et al. 2011) pour Ar II et de Hinojosa (Hinojosa et al.2012) pour le Kr II. Dans ce présent travail, nous appliquons la théorie modifiée des orbitales atomiques pour rapporter les énergies de résonances des séries de Rydberg des ions  $ClII [3s^23p^3(^2D_{5/2})]nd$ , et  $[3s^23p^3(^2P_{3/2})]nd$ ;  $ArII 3s^23p^4(^1D_2)ns, nd$ ; et du  $KrII [4s^24p^4(^1D_2)]ns, nd$  et  $[4s^24p^4(^3P_2, ^3P_1)]ns$ ;  $[4s^24p^4(^3D_2)]ns, nd$  et  $[4s^24p^4(^3D_2, ^1S_0)]ns, nd$ . Les largeurs naturelles des séries  $ArII [3s^23p^4(^1D_2)]ns, nd$  sont également rapportées.

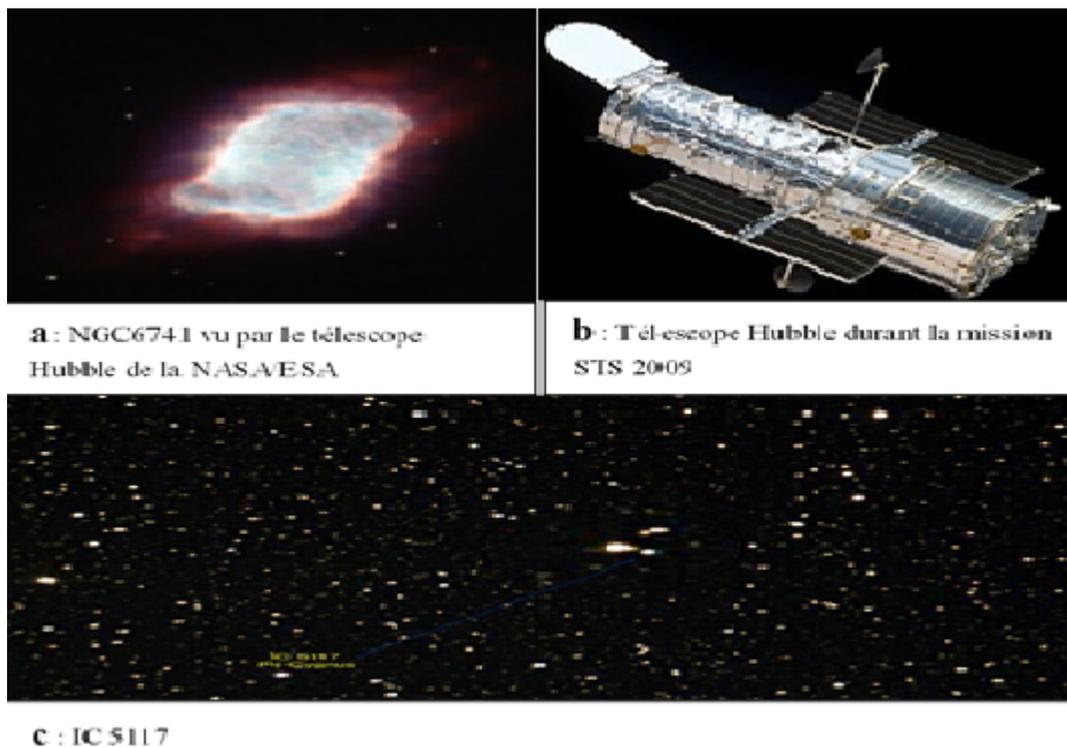


FIGURE 3.0.1 – La nébuleuse NGC6741 (a) vu par le télescope hubble de la NASA/ESA (b), et la nébuleuse planétaire IC 5117 (c)

Sur ces images nous avons présentés la nébuleuse NGC6741 qui est une nébuleuse planétaire située dans la constellation du l'aigle, ainsi que la nébuleuse planétaire IC5117 de magnitude 11 qui apparait dans la constellation du cygne. Pour la suite

*Chapitre 3 Etude de la photoionisation résonante des ions ClII, KrII, ArII par la méthode de la TMOA*

---

nous allons faire un petit rappel de ses éléments (Chlore, Argon, Krypton), ensuite nous présenterons la méthodologie utilisée (TMOA/MAOT) pour le calcul de nos résultats comparés à ceux obtenus dans la littérature consultée.

## 3.1 Historique des éléments (Cl II, Kr II, Ar II)

### 3.1.1 Le Chlore

#### 3.1.1.1 Historique du chlore

Les premiers scientifiques ou hygiénistes à avoir suggéré la désinfection de l'eau avec du chlore semblent avoir été Louis-Bernard Guyton de Morveau (en France) et William Cumberland Cruikshank (en Angleterre), tous deux vers 1800 (Rideal, 1895). John Snow a été le premier à réussir efficacement utiliser du chlore pour désinfecter l'eau de Soho, à Londres afin de stopper l'épidémie de choléra de 1854. De son côté, William Soper a utilisé du citron chloré pour traiter les déchets corporels de patients atteints de typhoïde en 1879 (Sletten, 1974).

#### 3.1.1.2 Effets potentiels du chlore dans l'environnement et la santé

— Environnement :

La présence des chlorures dans les sources d'eau potable peut être attribuée à la dissolution des dépôts de sel, (National Académie Press, 1974) à l'épandage de sel sur les routes pour faire fondre la glace et la neige, (Murray, et al, 1977; Ralston, et al, 1971),, aux effluents des usines de produits chimiques, (Little, 1971) à l'exploitation des puits de pétrole, (Pettyjohn, 1971) aux eaux d'égouts, à l'écoulement des eaux d'irrigation, (Pettyjohn, 1972) aux eaux de lixiviation des déchets, (Schneider, 1970) aux émanations volcaniques, aux embruns marins et à l'intrusion de l'eau de mer dans les zones côtières. Chacune de ces sources peut entraîner une contamination locale des eaux de surface et des eaux souterraines. L'ion chlorure est très mobile et finit par être transporté dans des bassins fermés ou vers les océans. Les rejets de centrales nucléaires comptent parmi les plus gros rejets de chlore ou de sous-produits de la désinfection par chloration dans l'environnement fluvial (Savoir, et al, 1986) ou marin. Ces actions peuvent causer une diminution de la production primaire (photosynthèse) en période de chloration par décoloration des algues planctoniques microscopiques (phytoplancton) ; Mortalité d'environ 30 % des œufs de sole au cours du transit (pouvant être estimée à 100 % pour d'autres espèces comme le sprat) ; Mortalité de larves et juvéniles de poissons sur les grilles de filtration ; Action sur le taux de fertilité d'algues benthiques. La combinaison du choc thermique et chloré affecte différemment les espèces marines qui le su-

bissent, certaines en meurent et d'autres y sont plus résilientes et alors d'autant plus susceptibles de blooms planctoniques ou bactériens que leur niche écologique a été libérée d'espèces concurrentes par l'effet biocide du chlore.

— Santé

Le chlore est un gaz jaune-verdâtre, plus lourd que l'air avec une odeur d'eau de javel. Si elles sont inhalées, les vapeurs du chlore peuvent causer des irritations aux yeux, à la gorge et aux voies respiratoires. L'odeur du chlore est une mise en garde qui permet d'éviter de se retrouver en présence de concentrations trop fortes, car de telles concentrations peuvent provoquer des problèmes plus graves tels qu'une toux importante, une respiration difficile et douloureuse et, dans les cas extrêmes, la mort.

### **3.1.1.3 Quelques avantages et inconvénients**

— Avantages

Le chlore est un élément qui se présente dans la nature sous forme de chlorure de sodium (sel de table). Il est souvent utilisé pour purifier l'eau potable ; en fait, presque toute l'eau potable dans notre pays est purifiée à l'aide du chlore. Parmi les autres usages courants du chlore, on retrouve : traitement de l'eau des piscines, eau de javel pour la lessive, agent de blanchiment dans l'industrie du papier et des textiles, etc. Le chlore constitue également un élément de base essentiel pour la mise au point et la production de nombreux produits de consommation, par exemple : Parements de vinyle pour les maisons ; tuyaux de CPV utilisés en plomberie ; produits pharmaceutiques ; et produits chimiques et insecticides agricoles ;

— Inconvénients

Le chlore en réagissant avec certains composés organiques naturels crée des sous-produits toxiques ou écotoxiques, qui sont cancérigènes et doivent donc être surveillés dans les réseaux d'eau potable. L'OMS estime néanmoins que les risques pour la santé de ces sous-produits, restent faibles au regard de ceux induits par une désinfection inadéquate de l'eau. Ainsi des risques peuvent se présenter comme

risques de création de nouvelles molécules toxiques, de produits de dégradation indésirables ou de synergies toxiques du chlore avec des molécules toxiques ou « précurseurs » déjà présente dans l'eau (Deborde et al, 2006) ; risques d'accident grave en cas de mélange avec un acide ; déclenchement de réactions allergiques (chlorosensibilité) ; Peut tacher, ronger ou décolorer certains tissus ou d'autres matières.

## 3.1.2 Le Krypton

### 3.1.2.1 Historique du Krypton

Le krypton est l'élément chimique de numéro atomique 36, de symbole Kr. C'est un gaz noble, inodore et incolore, découvert par William Ramsay et Morris Travers le 30 mai 1898 (Gmelin, 1926) en réalisant une distillation de l'air liquide. Étymologiquement, le nom de « krypton » dérive du grec ancien (kryptos) signifiant « caché ». Sa température de fusion et d'ébullition sont respectivement - 157 °C, - 153° C, il a trois isotope et sa configuration électronique est  $[Ar] 3d^{10}4s^24p^6$  .

### 3.1.2.2 Effets potentiels du Krypton dans l'environnement et la santé

— Santé

Inhalation : Ce gaz est inerte et est classé comme agent asphyxiant simple. L'inhalation dans des concentrations excessives peut provoquer le vertige, la nausée, des vomissements, la perte de conscience, et la mort. La mort peut résulter des erreurs dans le jugement, confusion, ou la perte de conscience des individus qui viennent au secours des autres. A de basses concentrations d'oxygène, la perte de conscience et la mort peuvent se produire en quelques secondes sans avertissement. L'effet des gaz simples d'agent asphyxiant est proportionnel au degré auquel ils diminuent la quantité (pression partielle) de l'oxygène dans l'air qui est respiré. L'oxygène peut être diminué à 75% du pourcentage normal dans l'air avant que les symptômes appréciables se développent. Ceci exige alternativement la présence d'un agent asphyxiant simple dans une concentration de 33% dans le mélange d'air et de gaz. Quand l'agent asphyxiant simple atteint une concentration de 50%, des symptômes marqués peuvent être produits. Une concentration de 75% est mortelle en quelques minutes.

Symptômes : Les premiers symptômes produits par un agent asphyxiant simple sont de rapides respirations et un manque d'air. La vigilance mentale est diminuée et la coordination musculaire est altérée. Le jugement postérieur devient défectueux et toutes les sensations sont diminuées. L'instabilité émotionnelle résulte souvent et la fatigue se produit rapidement. Pendant que l'asphyxie progresse, il peut y avoir nausée et vomissement, prostration et perte de conscience, et finalement convulsions, coma profond et mort.

— Environnement.

Le krypton est un gaz atmosphérique rare, non-toxique et chimiquement inerte. La température froide extrême ( $-244^{\circ}C$ ) gèlera les organismes par contact, mais aucun effet écologique à long terme n'est prévu.

## 3.2 Formalisme général de la méthode de la TMOA appliquée à la photoionisation résonante.

Le formalisme de la théorie modifiée des orbitales atomiques (TMOA, MAOT en anglais) a été connue pour sa simplicité, car c'est une méthode de calcul très convenable qui a donné d'énormes résultats à partir de formules semi-empiriques simple sans avoir recours à un programme informatique dans la résolution des problèmes de photoionisation résonante. Dans la suite nous utilisons la théorie modifiée des orbitales atomiques pour donner les expressions des énergies totales, des énergies de résonances des séries de Rydberg présentées, des largeurs naturelles, du défaut quantique du système atomique à plusieurs électrons.

### 3.2.1 Description de la théorie modifiée des orbitales atomiques

Dans cette partie nous décrivons brièvement les différentes expressions cités précédemment.

#### 3.2.1.1 Expression générales des énergies totales des énergies de résonance et des largeurs naturelles.

Dans le cadre de la théorie modifiée des orbitales atomiques (TMOA), l'énergie totale d'un orbital ( $\nu\ell$ ) donné est exprimé sous la forme (Sakho, 2010ab) :

$$E = -\frac{(Z - \sigma(\ell))^2}{(\nu)^2} \quad (3.2.1)$$

Pour un système atomique à plusieurs électrons  $N$ , l'énergie totale est donnée par (en Rydberg) :

$$E = \sum_{i=1}^N \frac{(Z - \sigma_i(\ell))^2}{(\nu_i)^2} \quad (3.2.2)$$

En ce qui concerne la notation spectroscopique habituelle  $(Nl, nl')^{2s+1}L^\pi$ , cette équation devient :

$$E = \sum_{i=1}^N \frac{(Z - \sigma_i(2s+1L^\pi))^2}{(\nu_i)^2} \quad (3.2.3)$$

Ainsi dans l'équation (3.2)  $\sigma$  est la constante d'écran relative à l'électron occupant l'orbital  $(\nu\ell)$ ,  $\ell$  désigne le nombre quantique orbital,  $\nu$  représente le nombre quantique principal, et  $Z$  représente le numéro atomique. En général les états doublement excités des systèmes atomiques à deux électrons sont donnés sous le label  $(Nl, nl')^{2s+1}L^\pi$ . Dans cette notation,  $N$  et  $n$  désignent respectivement les nombres quantiques principaux des électrons interne et externe,  $l$  et  $l'$  sont leurs nombres quantiques orbitaux respectifs,  $S$  le spin total,  $L$  le moment angulaire total et  $\pi$  la parité du système.

Dans la photoionisation des atomes et des ions, les énergies de résonances sont généralement mesurées relativement à la limite de convergence  $E_{inf}$  ( $E_\infty$ ) d'une série de Rydberg  $(2s+1L_J)nl$ . Pour ces états l'expression générale de l'énergie de résonance est donnée par la formule suivante (Sakho 2014) :

$$En = E_\infty - \frac{1}{n^2} \left\{ Z - \sigma_1(2s+1L_J) - \sigma_2(2s+1L_J) - \sigma_2^\alpha(2P_{3/2}^0, 1D_2) \times \right. \\ \left. (n-m) \times (n-q) \sum_k \frac{1}{f_k(n, m, q, s)} \right\}^2 \quad (3.2.4)$$

Dans cette équation  $m$  et  $q$  ( $m < q$ ), désigne les nombres quantiques principaux de la série de Rydberg  $(2s+1L_J)nl$  du système atomique considéré, utilisé dans la détermination de la constante d'écran  $\sigma_i(2s+1L_J)$ ,  $s$  représente le spin de

l'électron  $n\ell(s = 1/2)$ ,  $E_\infty$  est la valeur de l'énergie limite de la série, déterminé généralement à partir de la base de donnée atomique de NIST,  $E_n$  désigne l'énergie de résonance correspondante et  $Z$  représente la charge nucléaire de l'élément considéré. Le seul problème que nous rencontrons en utilisant le formalisme de TMOA est lié à la détermination du terme  $\sum_k \frac{1}{f_k(n,m,q,s)}$ . L'expression correcte de ce terme est déterminée itérativement en imposant l'équation générale (3.2.4) pour donner des données précises avec des valeurs constantes du défaut quantique tout au long de la série considérée. La valeur de  $\alpha$  est fixée à 1 ou 2 pendant l'itération. L'expression standard du défaut quantique est donnée comme suit :

$$E_n = E_\infty - \frac{RZ^2}{(n - \delta)^2} \quad (3.2.5)$$

Dans cette équation  $R$  est la constante de Rydberg,  $E_\infty$  la limite de convergence,  $Z_{core}$  et la charge électrique de l'ion cœur et  $\delta$  le défaut quantique respectivement.

Les largeurs naturelles sont données par (en unités de Rydberg) :

$$\Gamma_n = \frac{1}{n^2} \left\{ Z - \sigma_1 \left( {}^{2s+1}L_J \right) - \sigma_2 \left( {}^{2s+1}L_J \right) \times \frac{1}{n} - \sigma_2^\alpha \left( {}^2P_{3/2}^0, {}^1D_2 \right) \times (n - m) \times (n - q) \sum_k \frac{1}{f_k(n, m, q, s)} \right\}^2 \quad (3.2.6)$$

### 3.2.1.2 Expressions des énergies de résonance et des largeurs naturelles des ions Cl II, Kr II, Ar II.

Dans le présent travail, pour toutes les séries de Rydberg étudiées à la fois pour Cl II, Ar II et Kr II, les énergies de résonance sont données par la formule :

$$En = E_\infty - \frac{1}{n^2} \left\{ Z - \sigma_1 \left( {}^{2s+1}L_J \right) - \sigma_2 \left( {}^{2s+1}L_J \right) \times \frac{1}{n} - \sigma_2^2 \left( {}^{2s+1}L_J \right) \times (n - m)^2 \times \left[ \frac{1}{(n + s + 2)^2} + \frac{1}{(n - 2s)^4} \right] + \sigma_2 \left( {}^{2s+1}L_J \right) \times (n - m)^2 \left[ \frac{1}{(n + m + s)^4} + \frac{1}{(n + m - 4)^4} \right] \right\}^2 \quad (3.2.7)$$

Ainsi les largeurs naturelles de la série  $[3s^2 3p^4 ({}^1D_2)] ns (j = 1/2)$  provenant de l'état métastable des ions Ar II sont données par (en unités de Rydberg) :

$$\Gamma_n = E_\infty - \frac{1}{n^2} \left\{ Z - \sigma_1 \left( {}^{2s+1}L_J \right) - \sigma_2 \left( {}^{2s+1}L_J \right) \times \frac{1}{n} - \sigma_2^2 \left( {}^{2s+1}L_J \right) \times (n-m) \times (n-q) \times \left[ \frac{1}{(n+q-m+s+1)^4} + \frac{1}{(n+m+s)^4} + \frac{1}{(n+q+s)^4} + \frac{1}{(n+m-s)^4} \right] \right\} \quad (3.2.8)$$

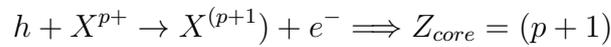
Pour toutes les autres séries, les largeurs naturelles sont données sous une même forme que l'équation (3.2.8).

### 3.3 Résultats et discussion.

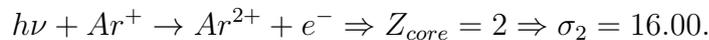
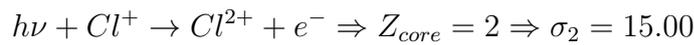
Dans cette partie, nous allons donner en détaille les expressions des constantes d'écrans correspondantes, les énergies de résonances des éléments, les largeurs naturelles, ainsi qu'une analyse et comparaison de nos résultats avec ceux disponibles dans la littérature théorique et expérimental consultée.

#### 3.3.1 Expressions des constantes d'écrans

Les constantes d'écrans  $\sigma_1$  dans les équations (3.2.7) et (3.2.8) sont évaluées de manière empirique à l'aide des données de Covington et al. (2011), Hinojosa et al. (2012) et de Hernández et al. (2015). Pour les constantes d'écrans  $\sigma_2$ , elles sont évaluées de manière théorique à partir de la simple équation  $\sigma_2 = Z - Z_{core}$ . Ainsi pour un ion unique du plasma  $X^{p+}$  donnée, la charge principale de l'ion est donnée par le processus de photoionisation suivante :



Pour les trois ions (Cl II, Ar II, Kr II) nous avons respectivement :



$$h\nu + Kr^+ \rightarrow Kr^{2+} + e^- \Rightarrow Z_{core} = 2 \Rightarrow \sigma_2 = 34.00.$$

### 3.3.2 Les énergies de résonance des différentes séries

Dans les tableaux 1 à 8, nous avons énumérés les énergies de résonances de la série de Rydberg  $\left[3s^23p^3 \left(^2D_{5/2}^0\right)\right] nd$  provenant de l'état fondamental  $3s^23p^43P_2^0$  ainsi que des états métastables  $3s^23p^43P_1^0$ ,  $3s^23p^43P_0^0$ ,  $3s^23p^41S_0^0$ ,  $3s^23p^41D_2$  des ions  $Cl^{II}$ . Les résultats obtenus par le formalisme TMOA sont comparés aux résultats obtenus par les calculs disponibles de la R-matrice de Dirac-Coulomb (DCR) (Babb ; McLaughlin, 2017), et les données expérimentales à ALS de (Hernández et al, 2015). Pour les résultats fournis par la DCR et ALS, les énergies de résonances sont limitées à  $n = 13$  (tableau 4). En général en raison de la configuration de l'interaction électron-électron, et d'autres effets, les pics de la section transversale se chevauchent, ce qui rend difficile l'identification des raies dans le spectre atomique lorsque  $n$  augmente. Nous voyons que pour toutes les séries étudiées, les résonances issues du formalisme TMOA sont suffisamment stables et peut être effectué jusqu'à  $n = 40$ , avec des défauts quantiques pratiquement constant dans toutes les séries étudiées.

Dans le tableau 2, les valeurs entre parenthèses de la série  $\left[3s^23p^3 \left(^2D_{5/2}^0\right)\right] 11d$  sont des valeurs expérimentales à ALS et DCR incertaines, mais éclairées par les résultats obtenus par le formalisme TMOA qui est de  $25,493 eV$  (MAOT),  $25,493 eV$  (DCR) et  $(25,492 eV)$  (ALS). Ainsi l'excellent accord avec les résultats théoriques indique que les données ALS peuvent être déclarées précises à  $25,492 eV$ . Dans le tableau 3 la même conclusion peut être tirée pour la série  $\left[3s^23p^3 \left(^2D_{5/2}^0\right)\right] 8d$  ou le résultat de TMOA ( $25,001 eV$ ) correspond très bien à la valeur de DCR ( $24,999 eV$ ) et celle de ALS ( $25000 eV$ ). Pour ce niveau, les données ALS doivent être considérées comme précises à  $25000 eV$ .

Dans le tableau 4 nous avons les énergies de résonance de la série de Rydberg  $\left[3s^23p^3 \left(^2P_{3/2}^0\right)\right] nd$  provenant de l'état fondamental  $3s^23p^43P_2^0$  des ions  $Cl^+$ . Dans ce tableau, deux valeurs incertaines à ALS sont citées pour les niveaux  $\left[3s^23p^3 \left(^2P_{3/2}^0\right)\right] 6d$  et  $\left[3s^23p^3 \left(^2P_{3/2}^0\right)\right] 12d$  respectivement à  $(25,745 eV)$  et  $(27,114 eV)$  à comparer avec les prévisions MAOT à  $25,749 eV$  et  $27,113 eV$  et aux données DCR respectivement égal à  $25,755 eV$  et  $27,115 eV$ . Pour  $n = 11$  et  $13$ , les calculs MAOT à  $27,031 eV$  et  $27,176 eV$ , respectivement, semblent en très bon accord avec les mesures d'ALS à  $27,031 eV$  et  $27,175 eV$ . Par la suite, les données DCR

à 25,755 eV ( $n = 6$ ) et à 27,178 eV ( $n = 13$ ) sont probablement supérieures aux données exactes. Les valeurs expérimentales d'ALS entre parenthèses peuvent être considérées comme certaines à 25,745 eV et 27,114 eV. En outre, dans le tableau 5 les données citées de MAOT à 25,659 eV semblent très bon accord avec la mesure incertaine à ALS à (25,660 eV). Une légère différence est observée lors de la comparaison avec le calcul DCR correspondant égal à 25,668 eV. La comparaison indique clairement que la valeur à ALS est correcte à 25,660 eV. Dans les tableaux 6, 7 toutes les données ALS sont certaines. En général, de bons accords sont obtenus entre la théorie et l'expérimental. Dans le tableau 8, il est difficile d'éclairer les données à ALS incertaines à (24,152 eV) pour le niveau  $[3s^23p^3(^2D_{5/2}^0)] 11d$ . Pour ce niveau, la prédiction MAOT à 24,146 eV se comparait assez bien aux calculs DCR égaux à 24,138 eV. Dans l'ensemble les comparaisons dans les tableaux 2 à 8 indiquent un très bon accord avec une très bonne précision entre les résultats obtenus par TMOA et les mesures à ALS, mais au contraire une légère différence avec ceux du DCR. Les tableaux 9, 10, 11 énumèrent les énergies de résonance de la série  $[3s^23p^4(^1D_2)] ns, nd$  ( $j=1/2$ ) et de la série  $[3s^23p^4(^1D_2)] nd$  ( $j = 3/2$ ) provenant de l'état métastable  $3s^23p^5^2P_{1/2}^0$  des ions Ar II. La comparaison indique un excellent accord entre les résultats actuels de la théorie modifiée des orbitales atomiques (TMOA) et les résultats de la constante d'écran par unité de charge nucléaire (CEUCN) (Sakho., 2018) et du technique multicanal QB à matrice R qui définit les matrices Q et B en termes de solutions asymptotiques (Covington et al. 2011). Ces très bons accords s'observent également en comparant les énergies de résonance de la série  $[3s^23p^4(^1D_2)] ns, nd$  ( $j = 1/2$ ) provenant de l'état fondamental  $3s^23p^5^2P_{3/2}^0$  des ions Ar II. Pour les deux tableaux 9 à 12, les données QB sont limitées à  $n = 16$  et les valeurs SCUNC à  $n = 30$ . Les données MAOT en hauteur sont totalisées jusqu'à  $n = 40$  avec un défaut quantique constant le long de chaque série. Les tableaux 13 et 14 indiquent respectivement les énergies de résonance des séries  $[3s^23p^4(^1D_2)] nd$  ( $j = 1/2$ ) et  $[3s^23p^4(^1D_2)] ns$  ( $j = 3/2$ ) provenant de l'état fondamental  $3s^23p^5^2P_{3/2}^0$  des ions Ar II. Là encore, les accords entre les résultats actuels du MAOT et les résultats du SCUNC (Sakho, 2018) et du QB (Covington et al, 2011) sont en très bons accord. Le tableau 15 présente les énergies de résonance de la série  $[3s^23p^4(^1D_2)] nd$  ( $j = 3/2$ ) provenant de l'état fondamental  $3s^23p^5^2P_{3/2}^0$  des ions Ar II. Dans ce tableau, une donnée QB incertaine est citée à (28,774 eV) pour le niveau  $[3s^23p^4(^1D_2)] 10d$ . Pour ce niveau, la prévision MOAT est à 28,735 eV et doit être comparée à la prévision SCUNC à 28,734 eV. Par la suite, les données QB à (28,774 eV) associées à un défaut quantique égal à (0,422)

sont moins précises. Pour ce niveau, les prédictions MAOT et SCUNC associées aux défauts quantiques 0.721 et 0.724 sont préférables. Dans le présent travail, la même formule (3.2.7) est utilisée à la fois pour Cl II, Ar II et Kr II ; ce qui confirme la simplicité de la méthode.

### 3.3.3 Les largeurs naturelles des différentes séries

Dans cette partie les résultats du formalisme TMOA sont obtenus à partir de l'équation (3.2.8) pour les trois ions. Ainsi les tableaux 16 et 17 répertorient les largeurs naturelles des séries  $[3s^23p^4(^1D_2)]ns, nd$  ( $j = 1/2$ ) (tableau 16),  $[3s^23p^4(^1D_2)]ns, nd$  ( $j = 3/2$ ) (tableau 17) provenant de l'état métastable  $3s^23p^5^2P_{3/2}^0$  des ions  $Ar^+$ . On peut constater que les résultats de MAOT actuelles concordent bien avec les résultats du SCUNC (Sakho, 2018) et du QB (Covington et al. 2011). Le tableau 18 répertorie les énergies de résonance et le défaut quantique de la série  $[4s^24p^4(^1D_2)]$  provenant de l'état fondamental  $4s^24p^5^2P_{3/2}^0$  des ions Kr II. Les comparaisons indiquent de très bons accords entre les résultats actuels du formalisme MAOT et les calculs SCUNC (Sakho, 2018) jusqu'à  $n = 30$  et les mesures de ALS de (Hinojoha et al. 2012) jusqu'à  $n = 13$ . Deux données ALS incertaines sont citées pour les niveaux  $12d$  et  $13d$ , respectivement à  $(25,880 eV)$  et  $(25,926 eV)$ . Les défauts quantiques de ALS associés sont égaux à  $(-0,671)$  et  $(-0,663)$  respectivement. Les comparaisons indiquent de très bons accords entre les résultats actuels du formalisme MAOT et les calculs SCUNC (Sakho, 2018) jusqu'à  $n = 30$  et les mesures de ALS de (Hinojoha et al. 2012) jusqu'à  $n = 13$ . Deux données ALS incertaines sont citées pour les niveaux  $[4s^24p^4(^1D_2)]12d$  et  $[4s^24p^4(^1D_2)]13d$ , respectivement à  $(25,880 eV)$  et  $(25,926 eV)$ . Les défauts quantiques de ALS associés sont égaux à  $(-0,671)$  et  $(-0,663)$  respectivement. Pour les mêmes niveaux, les calculs MAOT et SCUNC sont respectivement à  $25,863 eV$  et  $25,861 eV$  pour l'état  $[4s^24p^4(^1D_2)]12d$  et à  $25,913 eV$  et  $25,912 eV$  pour l'état  $[4s^24p^4(^1D_2)]13d$ . Les défauts quantiques constants sont totalisés pour les prédictions MAOT et SCUNC, respectivement à  $-0,31$  et  $-0,37$ . Les estimations MAOT et SCUNC peuvent donc être considérées comme des données précises pour les résonances  $[4s^24p^4(^1D_2)]12d$  et  $[4s^24p^4(^1D_2)]13d$ . Le tableau 19 indique les énergies de résonance et le défaut quantique des séries  $[4s^24p^4(^3P_2, ^3P_1)]ns$  et  $[4s^24p^4(^3P_1)]ns$  provenant de l'état métastable  $4s^24p^5^2P_{1/2}^0$  des ions Kr II. Pour la série  $[4s^24p^4(^3P_1)]ns$ , les comparaisons indiquent de bons accords entre la théorie et les expériences. Il convient de souligner les très bons accords pour  $n = 13 - 20$ . Cela peut éclairer la précision de la mesure incertaine à ALS listée entre paren-

thèses. Pour la série  $[4s^24p^4(^3P_1)]ns$ , l'unique donnée ALS citée est à  $23,996\text{ eV}$ . Les nouvelles valeurs MAOT de  $n = 14$  à  $40$  sont présentées avec un défaut quantique constant d'environ  $0,42$ . Le tableau 20 répertorie les énergies de résonance et le défaut quantique de la série  $[4s^24p^4(^3D_2)]ns, nd$  provenant de l'état métastable  $4s^24p^5^2P_{1/2}^0$  des ions Kr II. Là encore, les données MAOT s'accordent très bien avec celles d'ALS (Hinojoha et al. 2012). Il convient de souligner les excellents accords entre théorie et expériences pour les niveaux  $[4s^24p^4(^3D_2)]8s$  et  $[4s^24p^4(^3D_2)]9s$ . Pour ces états, les travaux MAOT et ALS fournissent les mêmes valeurs, respectivement égales à  $24,650\text{ eV}$  et  $24,842\text{ eV}$ . On peut également mentionner l'excellent accord pour les défauts quantiques  $(0,20)$  pour la théorie et les expériences. Le tableau 21 présente les énergies de résonance et le défaut quantique pour la série  $[4s^24p^4(^3D_2,^1S_0)]ns, nd$  des ions Kr II. Là encore, les bons accords entre les données actuelles MAOT et ALS (Hinojoha et al. 2012) peuvent éclairer la précision de la mesure incertaine à ALS listée entre parenthèses. Dans l'ensemble, pour les ions Cl II, Ar II et Kr II, il est démontré dans ce travail les possibilités de reproduire des mesures extrêmement élevées à ALS à partir d'une expression analytique simple (MAOT).

## **Conclusion**

Dans ce chapitre nous avons vu qu'une énergie de résonance élevée et précise allant jusqu'à  $n = 40$  est rapportée en appliquant la théorie modifiée de l'orbitale atomique. Pour les ions Cl II, Ar II et Kr II étudiés, une seule formule a été établie pour reproduire avec une très bonne précision des mesures expérimentales élevées telles que celles effectuées à la source de lumière avancée (ALS) du laboratoire national Lawrence Berkeley. Un grand nombre d'entre elles sont présentées sous forme de données de référence utiles pour l'interprétation des spectres atomiques d'objets astrophysiques contenant des éléments de chlore, d'argon et de krypton.

TABLE 3.1 – Énergies de résonance de la série Rydberg  $[3s^23p^3(^2D_{5/2}^0)]nd$  provenant de l'état fondamental  $3s^23p^4^3P_2^0$  des ions  $Cl^+$  convergeant vers le seuil de  $Cl^{2+}$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés aux calculs de matrice R de Dirac-Coulomb (DCR) (McLaughlin, 2017) et aux données expérimentales à ALS (Hernández et al. 2015). Les énergies limites sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2014).  $\sigma_1(^2D_{5/2}) = -0,770 \pm 0,048$ ;  $\sigma_2(^2D_{5/2}) = 15,00$ .

n	MAOT	DCR	ALS	MAOT	DCR	ALS
	E	E	E	$\delta$	$\delta$	$\delta$
6	24,348	24,353	24,348	0,362	0,30	0,38
7	24,824	24,846	24,829	0,363	0,35	0,35
8	25,127	25,130	25,128	0,362	0,30	0,36
9	25,331	25,334	25,335	0,361	0,34	0,34
10	24,474	25,476	25,479	0,360	0,35	0,32
11	25,579	25,584	25,583	0,360	0,30	0,32
12	25,658			0,359		
13	25,719			0,359		
14	25,768			0,358		
15	25,806			0,358		
16	25,838			0,358		
17	25,863			0,358		
18	25,885			0,358		
19	25,903			0,358		
20	25,919			0,358		
21	25,932			0,359		
22	25,944			0,359		
23	25,954			0,359		
24	25,963			0,359		
25	25,970			0,359		
26	25,977			0,360		
27	25,983			0,360		
28	25,989			0,360		
29	25,994			0,361		
30	25,998			0,361		
31	26,002			0,361		
32	26,006			0,361		
33	26,009			0,362		
...	...			...		
39	26,024			0,363		
40	26,025			0,364		
...	...	...	...			
$\infty$	26,060	26,060	26,060			

TABLE 3.2 – Énergies de résonance (E) et défaut quantique ( $\delta$ ) de la série Rydberg  $[3s^2 3p^3 ({}^2D_{5/2}^0)] nd$  provenant de l'état métastable  $3s^2 3p^4 {}^3P_2^0$  des ions  $Cl^+$  convergeant vers le seuil  $3s^2 3p^3 ({}^2D_{5/2}^0)$  de  $Cl^{2+}$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés aux calculs de la matrice R de Dirac-Coulomb (DCR) (McLaughlin. 2017) et aux données expérimentales à ALS (Hernández et al. 2015). Les énergies limites sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2014) .  $\sigma_1({}^2D_{5/2}) = -0,781 \pm 0,048$  ;  $\sigma_2({}^2D_{5/2}) = 15,00$ .

n	MAOT	DCR	ALS	MAOT	DCR	ALS
	E	E	E	$\delta$	$\delta$	$\delta$
6	24,259	24,264	24,259	0,367	0,36	0,37
7	24,737	24,762	24,750	0,368	0,30	0,33
8	25,040	25,039	25,036	0,367	0,37	0,38
9	25,244	25,237	25,238	0,366	0,40	0,40
10	25,388	25,385	25,384	0,365	0,40	0,42
11	25,493	25,493	(25,492)	0,365	0,36	(0,37)
12	25,572			0,364		
13	25,633			0,363		
14	25,681			0,363		
15	25,720			0,363		
16	25,751			0,363		
17	25,777			0,363		
18	25,799			0,363		
19	25,817			0,363		
20	25,833			0,363		
21	25,846			0,363		
22	25,858			0,364		
23	25,868			0,364		
24	25,877			0,364		
25	25,884			0,364		
26	25,891			0,365		
27	25,897			0,365		
28	25,903			0,365		
29	25,908			0,365		
30	25,912			0,366		
31	25,916			0,366		
32	25,920			0,366		
33	25,923			0,367		
...	...			...		
39	25,938			0,368		
40	25,939			0,369		
...	...	...	...		...	...
$\infty$	25,974	25,974	25,974			

TABLE 3.3 – Énergies de résonance ( $E$ ) et défaut quantique ( $\delta$ ) de la série Rydberg  $[3s^23p^3(^2D_{5/2}^0)]nd$  provenant de l'état métastable  $3s^23p^4^3P_0^0$  des ions  $Cl^+$  convergeant vers le seuil  $3s^23p^3(^2D_{5/2}^0)$  de  $Cl2^+$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés aux calculs de la R-matrice de Dirac-Coulomb (DCR) (McLaughlin. 2017) et aux données expérimentales à ALS (Hernández et al. 2015). Les énergies limites sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2014) .  $\sigma_1(^2D_{5/2}) = -0,789 \pm 0,048$ ;  $\sigma_2(^2D_{5/2}) = 15,00$ .

n	MAOT	DCR	ALS	MAOT	DCR	ALS
	E	E	E	$\delta$	$\delta$	$\delta$
6	24,219	24,223	24,219	0,370	0,36	0,37
7	24,697	24,733		0,372	0,27	
8	25,001	24,999	(25,000)	0,371	0,38	(0,38)
9	25,205	25,198		0,370	0,40	
10	25,349	25,349		0,369	0,40	
11	25,455			0,368		
12	25,534			0,367		
13	25,595			0,367		
14	25,643			0,367		
15	25,682			0,366		
16	25,713			0,366		
17	25,739			0,366		
18	25,761			0,366		
19	25,779			0,367		
20	25,795			0,367		
21	25,808			0,367		
22	25,820			0,367		
23	25,830			0,367		
24	25,839			0,368		
25	25,846			0,368		
26	25,853			0,368		
27	25,859			0,368		
28	25,865			0,369		
29	25,870			0,369		
30	25,874			0,369		
31	25,878			0,370		
32	25,882			0,370		
33	25,885			0,370		
...	...			...		
39	25,900			0,372		
40	25,901			0,372		
...	...	...	...		...	...
$\infty$	25,936	25,936	25,936			

TABLE 3.4 – Énergies de résonance (E) et défaut quantique ( $\delta$ ) de la série de Rydberg  $[3s^23p^3(^2P_{3/2}^0)]nd$  provenant de l'état fondamental  $3s^23p^4^3P_2^0$  des ions  $Cl^+$  convergeant vers le seuil  $3s^23p^3(^2P_{3/2}^0)$  de  $Cl^{2+}$ . (TMOA) sont comparés aux calculs de la matrice R de Dirac-Coulomb (DCR) (McLaughlin. 2017) et aux données expérimentales à ALS (Hernández et al. 2015). Les énergies limites sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2014).  $\sigma_1(^2P_{3/2}) = -1,006 \pm 0,077$ ;  $\sigma_2(^2P_{3/2}) = 15,00..$

n	MAOT	DCR	ALS	MAOT	DCR	ALS
	E	E	E	$\delta$	$\delta$	$\delta$
6	25,749	25,755	(25,745)	0,459	0.46	(0.47)
7	26,246	26,253	26,246	0,469	0.45	0.47
8	26,562	26,576	26,564	0,471	0,45	0,46
9	26,774	26,780	26,778	0,471	0,44	0,45
10	26,923	26,927	26,928	0,470	0,44	0,43
11	27,031	27,035	27,031	0,469	0,43	0,47
12	27,113	27,115	(27,114)	0,468	0,44	(0,45)
13	27,176	27,178	27,175	0,467	0,42	0,48
14	27,225			0,467		
15	27,264			0,466		
16	27,296			0,466		
17	27,323			0,466		
18	27,345			0,466		
19	27,364			0,466		
20	27,379			0,466		
21	27,393			0,466		
22	27,405			0,466		
23	27,415			0,466		
24	27,424			0,467		
25	27,432			0,467		
26	27,439			0,467		
27	27,445			0,467		
28	27,450			0,468		
29	27,455			0,468		
30	27,460			0,468		
31	27,464			0,469		
32	27,467			0,469		
33	27,471			0,470		
...	...			...		
39	27,485			0,472		
40	27,487			0,472		
...	...	...	...		...	...
$\infty$	27,522	27,522	27,522			

TABLE 3.5 – Énergies de résonance ( $E, eV$ ), et défaut quantique ( $\delta$ ) de la série de Rydberg  $[3s^23p^3(^2P_{3/2}^0)]nd$  provenant de l'état métastable  $3s^23p^4^3P_1^0$  des ions  $Cl^+$  convergeant vers le seuil  $3s^23p^3(^2P_{3/2}^0)$  de  $Cl^{2+}$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés aux calculs de la matrice R de Dirac-Coulomb (DCR) (McLaughlin, 2017) et aux données expérimentales à ALS (Hernández et al. 2015). Les énergies limites sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2014).  $\sigma_1(^2P_{3/2}) = -1,018 \pm 0,076; \sigma_2(^2P_{3/2}) = 15,00$ .

n	MAOT	DCR	ALS	MAOT	DCR	ALS
	E	E	E	$\delta$	$\delta$	$\delta$
6	25,659	25,668	(25,660)	0,464	0,45	(0,45)
7	26,157	26,162	26,157	0,474	0,46	0,47
8	26,473	26,480	26,475	0,477	0,45	0,47
9	26,686	26,695	26,687	0,476	0,43	0,46
10	26,835	26,842	26,833	0,475	0,42	0,49
11	26,944			0,474		
12	27,025			0,473		
13	27,088			0,472		
14	27,138			0,472		
15	27,177			0,471		
16	27,209			0,471		
17	27,236			0,471		
18	27,258			0,471		
19	27,276			0,471		
20	27,292			0,471		
21	27,306			0,471		
22	27,318			0,471		
23	27,328			0,471		
24	27,337			0,472		
25	27,345			0,472		
26	27,351			0,472		
27	27,358			0,473		
28	27,363			0,473		
29	27,368			0,473		
30	27,373			0,474		
31	27,377			0,474		
32	27,380			0,475		
33	27,384			0,475		
...	...			...		
39	27,398			0,477		
40	27,400			0,477		
...	...	...	...		...	...
$\infty$	27,435	27,435	27,435			

TABLE 3.6 – Énergies de résonance ( $E, eV$ ) et défaut quantique ( $\delta$ ) de la série de Rydberg  $[3s^2 3p^3 ({}^2P_{3/2}^0)] nd$  provenant de l'état métastable  $3s^2 3p^4 {}^3P_0^0$  des ions  $Cl^+$  convergeant vers le seuil  $3s^2 3p^3 ({}^2P_{3/2}^0)$  de  $Cl^{2+}$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés aux calculs de la matrice R de Dirac-Coulomb (DCR) (McLaughlin. 2017) et aux données expérimentales à ALS (Hernández et al. 2015). Les énergies limites sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2014).  $\sigma_1({}^2P_{3/2}) = -1,088 \pm 0,076$ ;  $\sigma_2({}^2P_{3/2}) = 15,00$ .

n	MAOT	DCR	ALS	MAOT	DCR	ALS
	E	E	E	$\delta$	$\delta$	$\delta$
6	25,603	25,635		0,493	0,44	
7	26,108	26,117	26,108	0,505	0,48	0,51
8	26,429	26,434	26,430	0,507	0,49	0,50
9	26,644	26,650	26,648	0,507	0,47	0,49
10	26,794	26,797		0,506	0,48	
11	26,904			0,504		
12	26,986			0,503		
13	27,050			0,502		
14	27,099			0,502		
15	27,139			0,501		
16	27,171			0,501		
17	27,198			0,501		
18	27,220			0,501		
19	27,239			0,501		
20	27,255			0,501		
21	27,290			0,501		
22	27,280			0,501		
23	27,290			0,502		
24	27,299			0,502		
25	27,307			0,502		
26	27,314			0,503		
27	27,320			0,503		
28	27,326			0,504		
29	27,331			0,504		
30	27,335			0,504		
31	27,339			0,505		
32	27,343			0,505		
33	27,346			0,506		
...	...			...		
39	27,361			0,508		
40	27,363			0,509		
...	...	...	...		...	...
$\infty$	27,398	27,398	27,398			

TABLE 3.7 – Energie de résonance ( $E$ , eV), défaut quantique ( $\delta$ ) de la série de Rydberg  $[3s^23p^5(^2P_{1/2}^0)]nd$  provenant de l'état métastable  $3s^23p^4^1S_0^0$  des ions  $Cl^+$  convergeant vers le seuil  $3s^23p^3(^2P_{1/2}^0)$  de  $Cl^{2+}$ . Comparaison des résultats actuels (TMOA) avec les calculs de la matrice R de Dirac - Coulomb (DCR) (McLaughlin. 2017) et avec les données expérimentales à ALS (Hernández et al. 2015). Les énergies limites sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2014).  $\sigma_1(^2P_{3/2}) = -0,262 \pm 0,015$ ;  $\sigma_2(^2P_{3/2}) = 15,00$ .

n	MAOT	DCR	ALS	MAOT	DCR	ALS
	E	E	E	$\delta$	$\delta$	$\delta$
4	20,426	20,420	20,426	0,127	0,13	0,13
5	21,762	21,734	21,742	0,127	0,16	0,15
6	22,477	22,459	22,463	0,126	0,16	0,15
7	22,902	22,890	22,900	0,126	0,16	0,13
8	23,176	23,170	23,178	0,125	0,15	0,12
9	23,363	23,361		0,125		
10	23,496			0,125		
11	23,594			0,124		
12	23,668			0,124		
13	23,726			0,124		
14	23,771			0,124		
15	23,808			0,124		
16	23,838			0,124		
17	23,863			0,124		
18	23,884			0,124		
19	23,901			0,124		
20	23,916			0,124		
21	23,929			0,124		
22	23,940			0,124		
23	23,950			0,124		
24	23,959			0,124		
25	23,966			0,124		
26	23,973			0,125		
27	23,979			0,125		
28	23,984			0,125		
29	23,989			0,125		
30	23,993			0,125		
31	23,997			0,125		
32	24,000			0,125		
33	24,004			0,125		
...	...			...		
37	24,014			0,125		
...						
$\infty$	24,054	24,054	24,054			

TABLE 3.8 – Énergies de résonance ( $E, eV$ ) et défaut quantique ( $\delta$ ) de la série  $[3s^23p^3(^2D_{5/2}^0)]nd$  provenant de l'état métastable  $3s^23p^4(^1D_2)$  des ions  $Cl^+$  convergeant vers le seuil  $3s^23p^3(^2D_{5/2}^0)$  de  $Cl^{2+}$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés aux données expérimentales à ALS (Hernández et al. 2015) et aux calculs de la matrice R de Dirac-Coulomb (DCR) (McLaughlin. 2017). Les énergies limites sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2014).  $\sigma_1(^2D_{5/2}) = -0,483 \pm 0,050$ ;  $\sigma_2(^2D_{5/2}) = 15,00$ .

n	MAOT	DCR	ALS	MAOT	DCR	ALS
	E	E	E	$\delta$	$\delta$	$\delta$
6	22,979	22,969	22,979	0,232	0,25	0,27
7	23,427	23,392		0,233	0,32	
8	23,713	23,719	23,718	0,232	0,21	0,21
9	23,907	23,907	23,907	0,232	0,23	0,23
10	24,045	24,039	24,040	0,231	0,28	0,27
11	24,146	24,138	(24,152)	0,231	0,32	(0,27)
12	24,222			0,230		
13	24,281			0,230		
14	24,328			0,230		
15	24,366			0,230		
16	24,396			0,230		
17	24,421			0,229		
18	24,443			0,229		
19	24,461			0,229		
20	24,476			0,229		
21	24,489			0,229		
22	24,500			0,229		
23	24,510			0,229		
24	24,519			0,230		
25	24,526			0,230		
26	24,533			0,230		
27	24,539			0,230		
28	24,544			0,230		
29	24,549			0,230		
30	24,554			0,230		
31	24,558			0,230		
32	24,561			0,230		
33	24,564			0,230		
...	...			...		
39	24,579			0,231		
40	24,581			0,231		
...	...	...	...		...	...
$\infty$	24,615	24,615	24,615			

TABLE 3.9 – Énergies de résonance ( $E, eV$ ) et défaut quantique ( $\delta$ ) de la série  $[3s^23p^4(^1D_2)]ns$  ( $j = 1/2$ ) provenant de l'état métastable  $3s^23p^5(^2P_{1/2}^0)$  des ions  $Ar^+$  convergeant vers le seuil  $3s^23p^5(^1D_2)$  de  $Ar^{2+}$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés à la SCUNC (Sakho, 2018) et aux données QB (Covington et al., 2011). Les énergies limites en eV sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2010).  $\sigma_1(^1D_2) = 4,227 \pm 0,224$ ;  $\sigma_2(^1D_2) = 16,00$ .

n	MAOT	SCUNC	QB	MAOT	SCUNC	QB
	E	E	E	$\delta$	$\delta$	$\delta$
8	27,830	27,830	27,830	1,672	1,673	1,673
9	28,169	28,173	28,173	1,695	1,682	1,682
10	28,400	28,401	28,401	1,696	1,689	1,688
11	28,561	28,561	28,561	1,689	1,694	1,692
12	28,678	28,676	28,677	1,679	1,697	1,695
13	28,765	28,763	28,763	1,670	1,699	1,698
14	28,831	28,829	28,829	1,662	1,700	1,699
15	28,883	28,881	28,881	1,656	1,701	1,701
16	28,925	28,923	28,923	1,652	1,701	1,702
17	28,958	28,956		1,649	1,700	
18	28,985	28,984		1,647	1,700	
19	29,008	29,007		1,647	1,698	
20	29,027	29,027		1,648	1,697	
21	29,044	29,043		1,649	1,695	
22	29,058	29,057		1,652	1,693	
23	29,070	29,069		1,655	1,691	
24	29,080	29,080		1,658	1,688	
25	29,089	29,089		1,662	1,686	
26	29,097	29,097		1,666	1,683	
27	29,104	29,104		1,670	1,680	
28	29,110	29,110		1,675	1,677	
29	29,116	29,116		1,679	1,674	
30	29,121	29,121		1,684	1,671	
31	29,126			1,689		
32	29,130			1,694		
33	29,133			1,699		
...	...			...		
39	29,150			1,727		
40	29,152			1,732		
...						
$\infty$	29,189	29,189	29,189			

TABLE 3.10 – Énergies de résonance ( $E, eV$ ) et défaut quantique ( $\delta$ ) de la série  $[3s^23p^4(^1D_2)]nd$  ( $j = 1/2$ ) provenant de l'état métastable  $3s^23p^5(^2P_{1/2}^0)$  des ions  $Ar^+$  convergeant vers le seuil  $3s^23p^4(^1D_2)$  de  $Ar^{2+}$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés à la SCUNC (Sakho, 2018) et aux données QB (Covington et al. 2011). Les énergies limites sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2010).  $\sigma_1(^1D_2) = -1,159 \pm 0,265$ ;  $\sigma_2(^1D_2) = 16,00$ .

n	MAOT	SCUNC	QB	MAOT	SCUNC	QB
	E	E	E	$\delta$	$\delta$	$\delta$
8	28,211	28,211	28,211	0,540	0,540	0,540
9	28,428	28,426	28,426	0,543	0,555	0,554
10	28,581	28,578	28,576	0,543	0,563	0,574
11	28,691	28,689	28,691	0,542	0,568	0,546
12	28,775	28,772	28,773	0,541	0,571	0,562
13	28,838	28,837	28,837	0,540	0,573	0,568
14	28,889	28,887	28,887	0,539	0,573	0,572
15	28,929	28,928	28,928	0,538	0,573	0,574
16	28,961	28,960		0,538	0,572	
17	28,988	28,987		0,537	0,571	
18	29,011	29,010		0,537	0,570	
19	29,010	29,029		0,537	0,568	
20	29,045	29,045		0,537	0,567	
21	29,059	29,059		0,537	0,565	
22	29,071	29,071		0,537	0,563	
23	29,081	29,081		0,537	0,560	
24	29,090	29,090		0,537	0,558	
25	29,098	29,098		0,538	0,556	
26	29,105	29,105		0,538	0,553	
27	29,111	29,111		0,538	0,551	
28	29,117	29,117		0,538	0,548	
29	29,122	29,122		0,539	0,546	
30	29,126	29,126		0,539	0,543	
31	29,130			0,539		
32	29,134			0,540		
33	29,137			0,540		
...	...			...		
39	29,152			0,542		
40	29,154			0,543		
...						
$\infty$	29,189	29,189	29,189			

TABLE 3.11 – Énergies de résonance (E) et défaut quantique ( $\delta$ ) de la série  $[3s^23p^4(^1D_2)]nd$  ( $j = 3/2$ ) provenant de l'état métastable  $3s^23p^5(^2P_{1/2}^0)$  des ions  $Ar^+$  convergeant vers le seuil  $3s^23p^4(^1D_2)$  de  $Ar^{2+}$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés à la SCUNC (Sakhko, 2018) et aux données QB (Covington et al. 2011). Les énergies limites sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2010). (Ralchenko et al. 2010).  $\sigma_1(^1D_2) = -1,159 \pm 0,265$ ;  $\sigma_2(^1D_2) = 16,00..$

n	MAOT	SCUNC	QB	MAOT	SCUNC	QB
	E	E	E	$\delta$	$\delta$	$\delta$
8	27,821	27,821	27,821	1,693	1,693	1,692
9	28,163	28,171	28,171	1,717	1,688	1,691
10	28,396	28,401	28,401	1,718	1,689	1,690
11	28,558	28,561	28,561	1,710	1,692	1,689
12	28,676	28,677	28,677	1,700	1,693	1,688
13	28,763	28,763	28,764	1,691	1,695	1,688
14	28,830	28,830	28,830	1,683	1,695	1,688
15	28,882	28,882	28,882	1,676	1,695	1,687
16	28,924	28,923	28,923	1,672	1,694	1,687
17	28,957	28,957		1,669	1,692	
18	28,985	28,984		1,667	1,691	
19	29,008	29,007		1,667	1,688	
20	29,027	29,027		1,668	1,686	
21	29,043	29,043		1,669	1,683	
22	29,057	29,057		1,672	1,679	
23	29,069	29,069		1,675	1,676	
24	29,080	29,080		1,678	1,672	
25	29,089	29,089		1,682	1,668	
26	29,097	29,097		1,686	1,663	
27	29,104	29,104		1,691	1,659	
28	29,110	29,111		1,695	1,655	
29	29,116	29,116		1,700	1,650	
30	29,121	29,121		1,705	1,645	
31	29,126			1,710		
32	29,130			1,715		
33	29,133			1,720		
...	...			...		
39	29,150			1,750		
40	29,152			1,754		
...						
$\infty$	29,189	29,189	29,189			

TABLE 3.12 – Énergies de résonance (E) et défaut quantique ( $\delta$ ) de la série  $[3s^23p^4(^1D_2)]ns$  ( $j = 1/2$ ) provenant de l'état fondamental  $3s^23p^5(^2P_{3/2}^0)$  des ions  $Ar^+$  convergeant vers le seuil  $3s^23p^4(^1D_2)$  de  $Ar^{2+}$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés à la SCUNC (Sakho, 2018) et aux données QB (Covington et al. 2011). Les énergies limites sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2010).  $\sigma_1(^1D_2) = 4,234 \pm 0,224$ ;  $\sigma_2(^1D_2) = 16,00$ .

n	MAOT	DCR	ALS	MAOT	DCR	ALS
	E	E	E	$\delta$	$\delta$	$\delta$
8	28,007	28,007	28,007	1,674	1,674	1,673
9	28,346	28,352	28,351	1,698	1,681	1,682
10	28,577	28,579	28,579	1,699	1,688	1,688
11	28,739	28,739	28,739	1,691	1,694	1,692
12	28,856	28,854	28,854	1,681	1,698	1,696
13	28,943	28,941	28,941	1,672	1,701	1,698
14	29,009	29,007	29,007	1,664	1,702	1,700
15	29,061	29,059	29,059	1,658	1,702	1,701
16	29,103	29,101	29,100	1,654	1,702	1,702
17	29,136	29,135		1,651	1,700	
18	29,163	29,162		1,649	1,698	
19	29,186	29,185		1,649	1,696	
20	29,205	29,205		1,650	1,693	
21	29,222	29,221		1,652	1,690	
22	29,236	29,235		1,654	1,686	
23	29,248	29,247		1,657	1,682	
24	29,258	29,258		1,660	1,678	
25	29,267	29,267		1,664	1,673	
26	29,275	29,275		1,668	1,668	
27	29,282	29,282		1,672	1,663	
28	29,288	29,289		1,677	1,658	
29	29,294	29,294		1,682	1,653	
30	29,299	29,299		1,686	1,647	
31	29,304			1,691		
32	29,308			1,696		
33	29,311			1,701		
...	...			...		
39	29,328			1,730		
40	29,330			1,734		
...						
$\infty$	29,367	29,367	29,367			

TABLE 3.13 – Énergies de résonance (E) et défaut quantique ( $\delta$ ) de la série  $[3s^23p^4(^1D_2)]nd$  ( $j = 1/2$ ) provenant de l'état fondamental  $3s^23p^5(^2P_{3/2}^0)$  des ions  $Ar^+$  convergeant vers le seuil  $3s^23p^4(^1D_2)$  de  $Ar^{2+}$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés à la SCUNC (Sakho, 2018) et aux données QB (Covington et al. 2011). Les énergies limites sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2010).  $\sigma_1(^1D_2) = -1,159 \pm 0,265$ ;  $\sigma_2(^1D_2) = 16,00$ .

n	MAOT	DCR	ALS	MAOT	DCR	ALS
	E	E	E	$\delta$	$\delta$	$\delta$
8	28,389	28,389	28,389	0,540	0,540	0,540
9	28,606	28,603	28,603	0,543	0,560	0,554
10	28,759	28,755	28,754	0,543	0,567	0,574
11	28,869	28,867	28,869	0,542	0,572	0,546
12	28,953	28,950	28,951	0,541	0,575	0,562
13	29,016	29,014	29,014	0,540	0,578	0,568
14	29,067	29,065	29,065	0,539	0,581	0,572
15	29,107	29,105	29,105	0,538	0,583	0,574
16	29,139	29,138		0,538	0,585	
17	29,166	29,165		0,537	0,587	
18	29,189	29,187		0,537	0,588	
19	29,207	29,206		0,537	0,589	
20	29,223	29,223		0,537	0,590	
21	29,237	29,236		0,537	0,589	
22	29,249	29,248		0,537	0,589	
23	29,259	29,259		0,537	0,587	
24	29,268	29,268		0,537	0,585	
25	29,276	29,276		0,538	0,581	
26	29,283	29,283		0,538	0,577	
27	29,289	29,289		0,538	0,572	
28	29,295	29,295		0,538	0,566	
29	29,300	29,300		0,539	0,559	
30	29,304	29,304		0,539	0,551	
31	29,308			0,539		
32	29,312			0,540		
33	29,315			0,540		
...	...			...		
39	29,330			0,542		
40	29,332			0,543		
...						
$\infty$	29,367	29,367	29,367			

TABLE 3.14 – Énergies de résonance (E) et défaut quantique ( $\delta$ ) de la série  $[3s^23p^4(^1D_2)]ns$  ( $j = 3/2$  provenant de l'état fondamental  $3s^23p^5(^2P_{3/2}^0)$ ) des ions  $Ar^+$  convergeant vers le seuil  $3s^23p^4(^1D_2)$  de  $Ar^{2+}$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés à la SCUNC (Sakho, 2018) et aux données QB (Covington et al. 2011). Les énergies limites sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2010).  $\sigma_1(^1D_2) = 4,294 \pm 0,224$ ;  $\sigma_2(^1D_2) = 16,00$ .

n	MAOT	SCUNC	QB	MAOT	SCUNC	QB
	E	E	E	$\delta$	$\delta$	$\delta$
8	27,999	27,999	27,999	1,693	1,693	1,692
9	28,341	28,348	28,348	1,717	1,692	1,691
10	28,574	28,578	28,579	1,718	1,692	1,690
11	28,736	28,739	28,739	1,710	1,693	1,689
12	28,736	28,855	28,855	1,700	1,694	1,688
13	28,941	28,941	28,941	1,691	1,694	1,688
14	29,008	29,008	29,098	1,683	1,695	1,688
15	29,060	29,060	29,060	1,676	1,695	1,687
16	29,102	29,101	29,101	1,672	1,695	1,687
17	29,102	29,135		1,669	1,695	
18	29,163	29,162		1,667	1,695	
19	29,186	29,185		1,667	1,694	
20	29,205	29,205		1,668	1,694	
21	29,221	29,221		1,669	1,693	
22	29,235	29,235		1,672	1,692	
23	29,247	29,247		1,675	1,691	
24	29,258	29,258		1,678	1,690	
25	29,267	29,267		1,682	1,689	
26	29,275	29,275		1,686	1,688	
27	29,282	29,282		1,691	1,687	
28	29,288	29,288		1,695	1,686	
29	29,294	29,294		1,700	1,684	
30	29,299	29,299		1,705	1,683	
31	29,304			1,710		
32	29,308			1,715		
33	29,311			1,720		
...	...			...		
39	29328			1,750		
40	29,330			1,754		
...	...	...	...		...	...
$\infty$	29,367	29,367	29,367			

TABLE 3.15 – Energies de résonance (E, eV) et défaut quantique ( $\delta$ ) de la série  $[3s^23p^4(^1D_2)]nd$  ( $j = 3/2$  provenant de l'état fondamental  $3s^23p^5(^2P_{3/2}^0)$ ) des ions  $Ar^+$  convergeant vers le seuil  $3s^23p^4(^1D_2)$  de  $Ar^{2+}$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés à la SCUNC (Sakho, 2018) et aux données QB (Covington et al. 2011). Les énergies limites sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2010).  $\sigma_1(^1D_2) = -1,575 \pm 0,265; \sigma_2(^1D_2) = 16,00$ .

n	MAOT	SCUNC	QB	MAOT	SCUNC	QB
	E	E	E	$\delta$	$\delta$	$\delta$
8	28,341	28,341	28,341	0,717	0,717	0,716
9	28,573	28,573	28,573	0,721	0,721	0,720
10	28,735	28,734	(28,774)	0,721	0,724	(0,422)*
11	28,852	28,851	28,850	0,720	0,727	0,738
12	28,939	28,939	28,937	0,718	0,729	0,745
13	29,006	29,006	29,004	0,717	0,729	0,744
14	29,059	29,058	29,047	0,715	0,729	0,744
15	29,100	29,100	29,099	0,714	0,728	0,744
16	29,134	29,134		0,713	0,727	
17	29,162	29,162		0,713	0,725	
18	29,185	29,185		0,713	0,722	
19	29,204	29,204		0,712	0,720	
20	29,221	29,221		0,712	0,718	
21	29,221	29,235		0,713	0,716	
22	29,247	29,247		0,713	0,714	
23	29,257	29,257		0,713	0,713	
24	29,267	29,267		0,714	0,712	
25	29,275	29,275		0,714	0,712	
26	29,282	29,282		0,715	0,713	
27	29,288	29,288		0,715	0,715	
28	29,294	29,294		0,716	0,719	
29	29,299	29,299		0,717	0,723	
30	29,304	29,303		0,717	0,729	
31	29,308			0,718		
32	29,311			0,719		
33	29,315			0,719		
...	...			...		
39	29,330			0,724		
40	29,332			0,724		
...	...	...	...		...	...
$\infty$	29,367	29,367	29,367			

TABLE 3.16 – Largeurs naturelles ( $\Gamma, meV$ ) de la série  $[3s^23p^4(^1D_2)]ns, nd$  ( $j = 3/2$ ) provenant de l'état métastable  $3s^23p^5(^2P_{1/2}^0)$  des ions  $Ar^+$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés à la SCUNC (Sakho, 2018) et aux données QB (Covington et al. 2012). Pour :  $[4s^24p^4(^1D_2)]ns$  :  $\sigma_1(^1D_2) = 5.494 \pm 0.010$ ;  $\sigma_2(^1D_2) = 17.989 \pm 0.010$ . Pour :  $[4s^24p^4(^1D_2)]nd$  :  $\sigma_1(^1D_2) = 0.168 \pm 0.010$ ;  $\sigma_2(^1D_2) = 17.998 \pm 0.010$ .

n	$[4s^24p^4(^1D_2)]ns$			$[4s^24p^4(^1D_2)]nd$		
	MAOT	SCUNC	QB	MAOT	SCUNC	QB
	$\Gamma$	$\Gamma$	$\Gamma$	$\Gamma$	$\Gamma$	$\Gamma$
8	103,5	103,4	103,4	0,112	0,110	0,110
9	64,9	64,8	64,8	0,072	0,070	0,070
10	43,4	43,0	43,0	0,048	0,047	0,050
11	30,4	30,0	30,0	0,034	0,033	0,040
12	22,1	21,7	21,8	0,024	0,024	0,030
13	16,5	16,2	16,3	0,018	0,018	0,020
14	12,7	12,4	12,5	0,014	0,014	0,020
15	9,9	9,8	9,8	0,011	0,011	0,020
16	7,8	7,8	7,8	0,008	0,009	
17	6,3	6,4		0,007	0,008	
18	5,1	5,3		0,005	0,006	
19	4,2	4,5		0,004	0,005	
20	3,5	3,8		0,004	0,005	
21	2,9	3,3		0,003	0,004	
22	2,5	2,9		0,003	0,003	
23	2,1	2,5		0,002	0,003	
24	1,8	2,2		0,002	0,003	
25	1,5	2,0		0,002	0,002	

TABLE 3.17 – Largeurs naturelles ( $\Gamma, meV$ ) de la série  $[3s^23p^4(^1D_2)]ns, nd$  ( $j = 1/2$ ) provenant de l'état métastable  $3s^23p^5(^2P_{1/2}^0)$  des ions  $Ar^+$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés à la SCUNC (Sakho, 2018) et aux données QB (Covington et al. 2012). Pour  $[4s^24p^4(^1D_2)]ns$  :  $\sigma_1(^1D_2) = 0.670 \pm 0.010$ ;  $\sigma_2(^1D_2) = 18.038 \pm 0.010$ . Pour  $[4s^24p^4(^1D_2)]nd$  :  $\sigma_1(^1D_2) = 1.399 \pm 0.010$ ;  $\sigma_2(^1D_2) = 17.827 \pm 0.010$ .

n	$[4s^24p^4(^1D_2)]ns$			$[4s^24p^4(^1D_2)]ns$		
	MAOT	SCUNC	QB	MAOT	SCUNC	QB
	$\Gamma$	$\Gamma$	$\Gamma$	$\Gamma$	$\Gamma$	$\Gamma$
8	0,44	0,44	0,44	25,7		25,7
9	0,22	0,22	0,22	18,1		18,1
10	0,13	0,11	0,13	12,9		33,8
11	0,08	0,06	0,08	9,3		8,5
12	0,05	0,03	0,08	6,9		3,8
13	0,03	0,02	0,04	5,2		5,3
14	0,02	0,01	0,02	4,0		4,4
15	0,01	0,01	0,02	3,1		3,6
16				2,5		
17				2,1		
18				1,7		
19				1,4		
20				1,2		
21				1,0		
22				0,9		
23				0,8		
24				0,7		
25				0,6		

TABLE 3.18 – Énergies de résonance (E) et défaut quantique ( $\delta$ ) de la série  $[4s^24p^4(^1D_2)]nd$  provenant de l'état fondamental  $4s^24p^5(^2P_{3/2}^0)$  des ions  $Kr^+$  convergeant vers le seuil  $[4s^24p^4(^1D_2)]$  de  $Kr^{2+}$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés à la SCUNC (Sakho, 2018), aux données expérimentales à ALS (Hinojoha et al. 2012). Les énergies de résonance à ALS sont calibrées à  $\pm 30$  meV et les défauts quantiques sont estimés avec une erreur de moins de 20%. Les énergies limites sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2011).  $\sigma_1(^1D_2) = 0.719 \pm 0.116$ ;  $\sigma_2(^1D_2) = 34.00$ .

n	MAOT	SCUNC	ALS	MAOT	SCUNC	ALS
	E	E	E	$\delta$	$\delta$	$\delta$
5	24,342	24,342	24,342	-0,387	-0,387	- 0,385
6	24,882	24,878	24,878	-0,386	- ,375	- 0,370
7	25,220	25,215	25,217	-0,387	- 0,369	- 0,370
8	25,444	25,439	25,441	-0,389	- 0,366	- 0,370
9	25,600	25,596	25,598	-0,390	- 0,365	- 0,360
10	25,713	25,710	25,712	-0,390	- 0,365	- 0,358
11	25,798	25,796	25,796	-0,391	- 0,365	- 0,345
12	25,796	25,861	(25,880)	-0,391	- 0,366	(- 0,671)
13	25,913	25,912	(25,926)	-0,391	- 0,367	(- 0,663)
14	25,954	25,953		-0,391	- 0,368	
15	25,987	25,987		-0,390	- 0,369	
16	26,014	26,014		-0,390	- 0,370	
17	26,037	26,037		-0,390	- 0,371	
18	26,056	26,056		-0,389	- 0,372	
19	26,072	26,072		-0,389	- 0,373	
20	26,086	26,086		-0,389	- 0,373	
21	26,098	26,098		-0,388	- 0,374	
22	26,108	26,108		-0,388	- 0,374	
23	26,108	26,117		-0,387	- 0,374	
24	26,125	26,125		-0,387	- 0,374	
25	26,133	26,132		-0,387	- 0,374	
26	26,139	26,139		-0,386	- 0,374	
27	26,144	26,144		-0,386	- 0,373	
28	26,149	26,149		-0,385	- 0,373	
29	26,154	26,154		-0,385	- 0,372	
30	26,158	26,158		-0,385		
31	26,162			-0,384		
32	26,165			-0,384		
33	26,168			-0,383		
...	...			...		
39	26,182			-0,381		
40	26,184			-0,381		
...	...	...	...		...	...
$\infty$	29,367	29,367	29,367			

TABLE 3.19 – Énergies de résonance (E) et défaut quantique ( $\delta$ ) de la série  $4s^24p^4(^3P_2, ^3P_1)]ns$  provenant de l'état métastable  $4s^24p^5(^2P_{1/2}^0)$  des ions  $Kr^+$  convergeant vers le seuil  $[4s^24p^4(^1D_2)]$  de  $Kr^{2+}$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés aux données expérimentales à ALS (Hinojoha et al. 2012). Les énergies de résonance à ALS sont calibrées à  $\pm 30$  meV et les défauts quantiques sont estimés avec une erreur de moins de 20%. Les énergies limites ( $E = 29,367eV$ ) sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2011).  $\sigma_1(^3P_2) = -1,438 \pm 0,104$ ;  $\sigma_2(^3P_2) = 34,00$ ;  $\sigma_1(^3P_1) = -0,863 \pm 0,138$ ;  $\sigma_2(^3P_1) = 34,00$ .

n	$[4s^24p^4(^3P_2)]ns$				$[4s^24p^4(^3P_1)]ns$			
	MAOT	ALS	MAOT	ALS	MAOT	ALS	MAOT	ALS
	E	E	$\delta$	$\delta$	E	E	$\delta$	$\delta$
11	23,910	(23,906)	-0,771	(-0,716)				
12	23,969	23,969	-0,765	-0,779				
13	24,016	24,016	-0,762	-0,791				
14	24,053	(24,059)	-0,761	(-0,940)	23,957		0,418	
15	24,084	24,083	-0,761	-0,730	23,996	23,996	0,419	0,403
16	24,109	24,109	-0,762	-0,774	24,028		0,420	
17	24,131	(24,129)	-0,762	(-0,686)	24,054		0,420	
18	24,148	(24,147)	-0,763	(-0,707)	24,076		0,420	
19	24,164	(24,162)	-0,764	(-0,659)	24,094		0,420	
20	24,177	(24,176)	-0,764	(-0,731)	24,110		0,420	
21	24,188		-0,765		24,124		0,420	
22	24,198		-0,765		24,135		0,420	
23	24,207		-0,765		24,145		0,419	
24	24,214		-0,766		24,154		0,419	
25	24,221		-0,766		24,162		0,419	
26	24,227		-0,766		24,169		0,419	
27	24,232		-0,766		24,175		0,419	
28	24,237		-0,766		24,180		0,419	
29	24,242		-0,766		24,185		0,418	
30	24,246		-0,766		24,190		0,418	
31	24,249		-0,766		24,194		0,418	
32	24,252		-0,765		24,197		0,418	
33	24,255		-0,765		24,201		0,418	
...	...		...		...		...	
39	24,269		-0,764		24,215		0,418	
40	24,270		-0,763		24,217		0,418	
...								
$\infty$	24,303	24,303			24,252			

TABLE 3.20 – Énergies de résonance (E) et défaut quantique ( $\delta$ ) de la série  $[4s^24p^4(^3P_2, ^3P_1)]ns, nd$  provenant de l'état métastable  $4s^24p^5(^2P_{1/2}^0)$  des ions  $Kr^+$  convergeant vers le seuil  $[4s^24p^4(^1D_2)]$  de  $Kr^{2+}$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés aux données expérimentales à ALS (Hinojoha et al. 2012). Les énergies de résonance à ALS sont calibrées à  $\pm 30$  meV et les défauts quantiques sont estimés avec une erreur de moins de 20%. Les énergies limites ( $E = 29,367eV$ ) sont extraites des tableaux NIST (Ralchenko et al. 2011).  $\sigma_1(^1D_2) = -0.414 \pm 0.116$ ;  $\sigma_2(^1D_2) = 34.00$  pour  $[4s^24p^4(^3D_2)]ns$ .  $\sigma_1(^1D_2) = -0.698 \pm 0.116$ ;  $\sigma_2(^1D_2) = 34.00$  pour  $[4s^24p^4(^3D_2)]nd$ .

n	$[4s^24p^4(^3D_2)]ns$				$[4s^24p^4(^3D_2)]nd$			
	MAOT E	ALS E	MAOT $\delta$	ALS $\delta$	MAOT E	ALS E	MAOT $\delta$	ALS $\delta$
6	23,927	23,927	0,200	0,200	24,214	24,214	-0,371	-0,375
7	24,368	(24,366)	0,200	(0,205)	24,553	24,551	-0,369	-0,371
8	24,650	24,650	0,200	(0,204)	24,778	24,775	-0,370	-0,371
9	24,842	24,842	0,200	0,201	24,935	24,933	-0,371	-0,375
10	24,978	-	0,199	-	25,049	25,047	-0,372	-0,379
11	25,079	25,082	0,199	0,152	25,134	25,132	-0,372	-0,363
12	25,154	25,158	0,199	0,139	25,199	25,196	-0,373	-0,349
13	25,213		0,198		25,251	25,248	-0,373	-0,364
14	25,259		0,198		25,292		-0,373	
15	25,297		0,198		25,325		-0,373	
16	25,327		0,198		25,352		-0,373	
17	25,352		0,198		25,375		-0,373	
18	25,373		0,198		25,394		-0,373	
19	25,391		0,198		25,410		-0,373	
20	25,391		0,198		25,424		-0,373	
21	25,419		0,198		25,436		-0,373	
22	25,431		0,198		25,446		-0,372	
23	25,440		0,198		25,455		-0,372	
24	25,449		0,198		25,463		-0,372	
25	25,457		0,198		25,470		-0,372	
26	25,463		0,198		25,477		-0,371	
27	25,469		0,198		25,482		-0,371	
28	25,475		0,198		25,487		-0,371	
29	25,479		0,198		25,492		-0,371	
30	25,484		0,198		25,496		-0,370	
31	25,488		0,198		25,500		-0,370	
32	25,491		0,198		25,503		-0,370	
33	25,494		0,198		25,506		-0,370	
...	...		...		...		...	
39	25,509		0,199		25,520		-0,368	
40	25,511		0,199		25,522		-0,368	
...								
$\infty$	25,545	25,545			25,555			

TABLE 3.21 – Énergies de résonance (E) et défaut quantique ( $\delta$ ) des  $[4s^2 4p^4(^3D_2, ^1S_0)] ns, nd$  des ions  $Kr^+$ . Les résultats actuels (TMOA) sont comparés aux données expérimentales à ALS (Hinojoha et al. 2012). Les énergies de résonance à ALS sont calibrées à  $\pm 30$  meV et les défauts quantiques sont estimés avec une erreur de moins de 20%.  $\sigma_1(^1D_2) = -0.785 \pm 0.116$ ;  $\sigma_2(^1D_2) = 34.00$ ;  $\sigma_1(^1S_0) = -0.811 \pm 0.116$ ;  $\sigma_2(^1S_0) = 34.00$ .

n	$4s^2 4p^5 \ ^2P_{1/2}^0 \longrightarrow 4s^2 4p^4 (^1S_0) ns$				$4s^2 4p^5 \ ^2P_{3/2}^0 \longrightarrow 4s^2 4p^4 (^1S_0) nd$			
	MAOT E	ALS E	MAOT $\delta$	ALS $\delta$	MAOT E	ALS E	MAOT $\delta$	ALS $\delta$
4	23,738	23,738	0,357	0.358				
5	25,315	25,312	0,358	0.360	25,965	(25,947)	0,369	(0,385)
6	26,132	26,124	0,355	0.368	26,780	26,780	0,380	0,379
7	26,608	26,602	0,353	0.371	27,261	(27,261)	0,381	(0,379)
8	26,910	26,904	0,352	0.376	27,566	27,566	0,381	0,376
9	27,112	27,108	0,351	0.377	27,771	27,771	0,379	0,378
10	27,255	(27,261)	0,351	(0.303)	27,915	27,914	0,378	0,381
11	27,360	27,356	0,351	0.400	28,021	28,020	0,378	0,383
12	27,439	27,435	0,351	0.412	28,100	28,099	0,377	0,381
13	27,500	(27,495)	0,351	(0.435)	28,161	(28,160)	0,377	(0,394)
14	27,548	(27,544)	0,352	(0.436)	28,210	(28,208)	0,376	(0,394)
15	27,586		0,352		28,249	(28,247)	0,376	(0,418)
16	27,618		0,353		28,280		0,376	
17	27,644		0,354		28,306		0,376	
18	27,665		0,354		28,328		0,376	
19	27,683		0,355		28,346		0,376	
20	27,699		0,356		28,362		0,376	
21	27,712		0,356		28,375		0,377	
22	27,724		0,357		28,387		0,377	
23	27,734		0,358		28,397		0,377	
24	27,743		0,358		28,405		0,377	
25	27,750		0,359		28,413		0,378	
26	27,757		0,359		28,420		0,378	
27	27,763		0,360		28,426		0,378	
28	27,769		0,361		28,432		0,379	
29	27,774		0,361		28,437		0,379	
30	27,778		0,362		28,441		0,379	
31	27,782		0,362		28,445		0,379	
32	27,786		0,363		28,449		0,380	
33	27,789		0,363		28,452		0,380	
...	...		...		...		...	
39	27,804		0,366		28,467		0,382	
40	27,805		0,366		28,468		0,382	
...								
$\infty$	27,840	27.840			28,503		28,503	



# Conclusion générale et perspectives

Dans ce mémoire de thèse nous avons fait une revue sur les différents processus de photoionisation résonante des séries de Rydberg des systèmes atomiques à plusieurs électrons, ainsi que quelques méthodes théoriques et expérimentales utilisées dans la photoionisation résonante. Nous avons également fait une étude détaillée du formalisme de la théorie modifiée des orbitales atomiques (TMOA) aux calculs des énergies et des largeurs naturelles des séries de Rydberg des systèmes atomique à deux électrons (systèmes héliumoides). Un travail sur la procédure variationnelle de la théorie modifiée des orbitales atomiques aux calculs des énergies totales et des énergies d'excitations des états doublements excités de types  $(Nsnp)^{2S+1}L^\pi$  a été décliné.

Ainsi l'analyse des énergies de résonance des séries de Rydberg des systèmes atomiques à plusieurs électrons est fait sur la base de la formule standard du défaut quantique. Les conditions d'analyse des énergies de résonances basée sur la détermination de la charge nucléaire effective  $Z^*$ , permettent alors de déterminer directement la charge électrique  $Z_{core}$  en unité de charge élémentaire (e) de l'ion résiduel obtenu après le processus de photoionisation directe et de préciser le signe du défaut quantique pour une série de Rydberg donnée sans avoir à le calculer ou à le mesurer. Ce résultat apporte des facilités à l'analyse des énergies de résonance via une procédure très simple contrairement aux procédures complexes des méthodes expérimentales et théoriques basées sur la détermination de la section efficace de photoionisation.

En ce qui concerne la procédure semi-empirique de la théorie modifiée des orbitales atomiques, nous l'avons décliné à l'étude de la photoionisation des ions  $Cl^+$ ,  $Kr^+$ ,  $Ar^+$ . Le formalisme a été appliqué avec succès aux calculs des énergies de résonance et des largeurs naturelles des séries de Rydberg des ions  $Cl^+$ ,  $Kr^+$ ,  $Ar^+$ . Nous avons comparés nos résultats issus de ses calculs avec ceux trouvés dans la

littérature théorique et expérimentale. Ces résultats nous ont valu une publication dans une revue internationale indexée dans le courant de l'année 2018. Ensuite nous l'avons appliquée aux calculs des énergies et des largeurs naturelles des séries  $(2pn.s^1P^o)$ ,  $(2pnd^1P^o)$ , des ions  $N^{3+}$ ,  $N^{6+}$ ,  $O^{4+}$ ,  $F^{5+}$ , et ces résultats ont été comparés avec ceux existants dans la littérature consultée.

Dans cette thèse nous retenons que la procédure semi-empirique de TMOA a été appliquée avec succès dans le calcul des énergies et des largeurs naturelles des séries de Rydberg. Ainsi nous retenons encore une simplicité de la procédure et qui permet d'obtenir des valeurs très précises des énergies de résonance jusqu'à des états de Rydberg hautement excités ( $n \geq 40$ ) avec un défaut quantique pratiquement constant. La théorie modifiée des orbitales atomiques (TMOA/ MAOT (en anglais)) a été connue pour sa simplicité, car c'est une méthode de calcul très convenable qui a donné d'énormes résultats à partir de formules semi-empiriques simple sans avoir recours à un programme informatique dans la résolution des problèmes de photoionisation résonante (Sakho.I, 2012, 2013, 2014, 2019; Sow. M et al, 2014, 2020; Diop. B et al 2014). Ainsi les résultats obtenus dans cette thèse et les résultats antérieurs montrent que le formalisme semi-empirique de la TMOA est une méthode phare parmi les autres techniques de calculs utilisées dans différents centres de recherches internationaux. Son efficacité a permis aujourd'hui d'identifier beaucoup de raies qui été jusqu'à présent non visibles pour plusieurs systèmes atomiques du fait du recouvrement des pics des sections efficace de photoionisation pour les valeurs élevées de  $n$ . Contrairement à la procédure semi-empirique de la TMOA, les techniques expérimentales et théoriques les plus sophistiquées ne permettent pas d'avoir des valeurs de ces énergies au-delà de  $n = 20$  du fait du recouvrement des pics des sections efficace de photoionisation pour les valeurs élevées de  $n$ . Ces recouvrements sont généralement dus à la faiblesse de la résolution utilisée ou à des interférences entre les séries de Rydberg identifiées et celles non identifiées. En résumé, durant cette période de thèse, nous avons fait un total de dix publications dans des revues internationales indexées, dont trois dans ce travail de thèse (Diallo et al, 2018a,b; 2021) et sept avec la collaboration de notre groupe de recherche (Badiane et al, 2018a,b, 2019; Ba et al, 2018a,b; Sow et al, 2017; Gning et al, 2019) .

L'une des principales perspectives de cette étude est de chercher à déterminer les forces d'oscillateur  $f_{ij}$  qui sont des paramètres de résonance liés aux processus d'absorption d'un rayonnement électromagnétique de fréquence  $\nu_{ij}$  faisant transiter  $n_i$  système atomiques d'un niveau inférieur d'énergie  $E_i$  à un niveau supérieur d'éner-

---

gie  $E_j$  . Nous envisageons également d'étendre le travail aux calculs des paramètres caractéristiques des états triplement excités du lithium et des ions lithumoides en utilisant une fonction d'onde corrélée.



# Bibliographie

- Aggarwal, K. M, F. P. Keenan, et A. Z. Msezane. 2003 *Energy levels radiativerates and collision strengths for transitions in Fe xvii* . The Astrophysical Journal Supplement Series 144 (1) : 169.
- Andreev, S. V., V. S. Letokhov, et V. I. Mishin. 1987. *Laser resonance photoionization spectroscopy of Rydberg levels in Fr* . Physical review letters 59 (12) : 1274.
- Ba, M. D., **Diallo.A**, Badiane, J. K, Gning,M. T, Sow, M, et Sakho. I, 2018. *Photoionization of the  $3s^2 3p^3 nd$  Rydberg series of  $Cl^+$  ion using the Screening constant by unit nuclear charge method* Radiation Physics and Chemistry.
- Ba, M. D, J. K. Badiane, **Diallo.A**, M. T. Gning, M. Sow, et I. Sakho « *Auger  $1s2nl(s, p, d, f)$  Transition Energies in Be – Like Ions* » AAS-CIT Journal of Physics
- Bachau, H., F. Martin, A. Riera, et M. Yanez. 1991. *Resonance parameters and properties of helium – like doubly excited states :  $2 \leq Z \leq 10$* . Atomic Data and Nuclear Data Tables 48 (2) : 167–212.
- Badiane, J. K, Ba,M. D, **Diallo.A**,Gning, M.T, Sow, M et I. Sakho. 2018. *Variationnal Calculation of the Doubly  $(nl)^2 L^\pi$  Excited States of He – Like Ions via the Screening Constant by Unit Nuclear Charge Formalism* . International Journal of Applied Mathematics and Theoretical Physics 4 (2) : 27.
- Badiane, J.K, **A.Diallo**, M. D. Ba, M.T.Gningue, M.Sow, et I.Sakho. 2018. *Screening Constant by Unit Nuclear Charge Calculations of Resonance Energies of  $^3(K, T, A)nL^\pi$  Rydberg Series of He– Like Ions.* » International Journal of Applied Mathematics and Theoretical Physics 4 (2) : 55.

- Badiane, J. K, **Diallo.A**, Ba, M.D, M.T. Gning, M. Sow, I. Sakho, 2019« *Photoionization study of the  $(3d^9 4s^3 D_{3,2,1})np$  and the  $(3d^9 4s^1 D_2)np$  Rydberg series of Cu – like  $Zn^+$  ion via the Screening constant by unit nuclear charge method* »Radiation Physics and Chemistry
- Balashov, V. V, S. I. Grishanova, I. M. Kruglova, et V. S. Senashenko. 1970. *Resonance photoionization of helium and helium – like ions*. Opt. Spectrosc. (USSR) (Engl. Transl.) 28 : 466-71 (May 1970).
- Bethe, Hans A., et Edwin E. Salpeter. 2012. *Quantum mechanics of one-and two – electron atoms*. Springer Science & Business Media.
- Biaye M. *Etude dynamique des corrélations électroniques dans les états  $(nl)^2$  ( $n \leq 4$  et  $l \leq 3$ ) de l'hélium et des ions héliumoides  $Li^+$ ,  $Be^{2+}$ ,  $B^{3+}$ ,  $C^{4+}$ ,  $N^{5+}$ ,  $O^{6+}$ ,  $F^{7+}$ ,  $Ne^{8+}$ ,  $Na^{9+}$ ,  $Mg^{10+}$* . These de 3<sup>eme</sup> Cycle, UCAD (1997).
- Biaye, M., M. Dieng, I. Sakho, A. Kont. S. Ndao, et A. Wague. 2009. *The doubly excited states description of the negative hydrogen ion using special forms of the Hylleraas type wave functions* Chinese Journal of Physics 47 (2) : 166-172.
- Biaye, M., A. Kont. S. Ndao, N. A. B. Faye, et A. Wague. 2005. *The singlet doubly excited  $(nl)^2$  states of helium – like systems* . Physica Scripta 71 (1) : 39.
- Biaye, M., A. Konte, N. A. B. Faye, et A. Wague. 2001. *Energies and electron correlation effects in two – electron doubly excited  $(nl)^2$  states* . The European Physical Journal D-Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics 13 (1) : 21–25.
- Biaye, M., A. Konte, A. S. Ndao, et A. Wague. 2005. *Calculations of Doubly Excited  $^1P^o$ ,  $^1D^e$ ,  $^1F^o$ ,  $^1G^e$ ,  $^1H^o$  Intrashell States of Helium Sequence using Special Forms of Hylleraas – Type Wave Functions* . Physica Scripta 72 (5) : 373.
- Biaye, M, *Nouvelle description des états singulets doublement excités  $(nl)^2$  et  $nlnl'$  de l'hélium et des ions héliumoides de charge nucléaire  $Z \leq 12$*  . These de Doctorat d'état, UCAD (2005).
- Bizau, J. M., C. Blancard, M. Coreno, D. Cubaynes, C. Dehon, N. El Hassan, F. Folkmann, M. F. Gharaibeh, A. Giuliani, et J. Lemaire. 2011. *Photoionization study of  $Kr^+$  and  $Xe^+$  ions with the combined use of*

- 
- a merged – beam set – up and an ion trap* . Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics 44 (5) : 055205.
- Bizau, J.-M., Cubaynes, D., Esteva, J.-M., Wulleumier F. J., Blancard C., Bruneau, J., Champeaux, J. P., Compant la Fontaine, A., Couillaud, C., Marmoret, R., Rnt, C., Hitz, D., Delaunay, M., Haque, N., Deshmukh, P. C., Zhou, H. L., and Manson, S. T., 2001. *Absolute Measurements and Theoretical Calculations of Photoionization Cross Sections along the Isonuclear Sequence of Multiply Charged Barium Ions* . Phys. Rev. Lett., 87, 273002.
- Bizau, J.-M., Bouisset, E., Blancard, C., Champeaux, J. P., Compant la Fontaine, A., Couillaud, C., Cubaynes, D., Hitz, D., Vinsot, C., and Wulleumier, F. J., 2003. *Recent results on the photoionisation of multiply-charged ions* . Nucl. Instrum. Meth. B, 205, 290.
- Bizau, J.-M, Champeaux, J.-P., Cubaynes, D., Blancard, C, Hitz, D., Bruneau, J., Lemaire, J-L, Compant La Fontaine, A, Girard, A, Wulleumier, F. J, 2004, *L-Shell Photoionisation of  $N^{2+}$  and  $O^{3+}$  Isoelectronic Ions* . Phys. Scr., 110, 57.
- Bizau, J.-M., Champeaux, J.-P. Cubaynes, D, Wulleumier, F. J, Folkmann, F. Jacobsen, T. S, Penent, F, Blancard, C, and Kjeldsen, H, 2005. *Absolute cross sections for L-shell photoionization of the ions  $N^{2+}$ ,  $N^{3+}$ ,  $O^{3+}$ ,  $O^{4+}$ ,  $F^{3+}$ ,  $F^{4+}$  and  $Ne^{4+}$* . A&A 439, 387.
- Bregman, Joel N, et J. Patrick Harrington. 1986. *Photoionization in the halo of the Galaxy* The Astrophysical Journal 309 : 833–845.
- Bullet, D. W. 1978. *Electronic Band Structure and Bonding in Transition Metal Layered Dichalcogenides by Atomic Orbital Methods* . Journal of Physics C : Solid State Physics 11 (22) : 4501. <https://doi.org/10.1088/0022-3719/11/22/007>.
- Codling, K., R. P. Madden, et D. L. Ederer. 1967. *Resonances in the Photo – Ionization Continuum of NeI (20 – 150eV)* . Physical Review 155 (1) : 26.
- Cooper, J. W., U. Fano, et F. Prats. 1963. *Classification of two – electron excitation levels of helium*. Physical Review Letters 10 (12) : 518.
- Couprrie, Marie-Emmanuelle, Jean-Claude Denard, Laurent Farvacque, Gae Bec, Amor Nadji, et Jean-Luc Revol. *Le rayonnement synchrotron, une source de lumière dédiée à la recherche* . Reflets de la Physique, no 34 35 (2013) : 18–23.

- Covington, A. M., A. Aguilar, I. R. Covington, G. Hinojosa, C. A. Shirley, R. A. Phaneuf, I. Alvarez, C. Cisneros, Ivan Dominguez-Lopez, et M. M. Sant'Anna. 2011. *Valence – shell photoionization of chlorine like Ar<sup>+</sup> ions* . Physical Review A 84 (1) : 013413.
- Deborde, M., J.-P. Duguet, E. Barron, S. Rabouan, et B. Legube. 2006. *La chloration et l'ozonation des eaux : quels effets sur les perturbateurs endocriniens* TSM. Techniques sciences modes génie urbain génie rural, n° 12 : 61–67.
- Detalle, Vincent, Quentin Glorieux, et Romain Bruder. *La spectroscopie d'émission optique sur plasma induit par laser (LIBS) : un nouvel outil analytique pour l'étude in situ de la peinture murale et des polychromies* . L'actualite chimique, no 312 313 (2007) : 98-104.
- Diallo, A.**, Ba, M. D, Badiane, J.K, Gning, M.T, Sow, M, Sakho. I, 2018a. *Photoionization Study of CIII, ArII and KrII Ions Using the Modified Atomic Orbital Theory* . Journal of Modern Physics 9 : 2594-2622.
- Diallo, A.**, Ba, M. D, Badiane, J.K, Gning, M.T, Sow, M, Sakho. I, 2018b, « *Modified Atomic Orbital Calculations of Energy and Width of the 2pns<sup>1</sup>P<sup>o</sup> and 2pnd<sup>1</sup>P<sup>o</sup> Rydbergs Series of Be – like N<sup>3+</sup>, O<sup>4+</sup>, F<sup>5+</sup> and Ne<sup>6+</sup> Ions* ». Journal of Atomic, Molecular, Condensate & Nano Physics
- Diehl, S., D. Cubaynes, J. M. Bizau, F. J. Wuilleumier, E. T. Kennedy, J. P. Mosnier, et T. J. Morgan. 1999. *New high – resolution measurements of doubly excited states of Li<sup>+</sup>* . Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics 32 (17) : 4193.
- Dieng, M., I. Sakho, M. Biaye, et A. Wague. 2010. *The Intra – shell singlet and triplet doubly excited states energycalculations of helium – like Ions using special forms of the Hylleraas – type wave functions* . Chinese Journal of Physics 48 (1) : 38-48.
- Diop, B. 2014. « *Modifed Orbital Atomic Study of Dominant Rydberg Series in the Photoionization Spectra of Halogen-like Kr+ and Xe+ Ions*. Chinese Journal of Physics Vol.52, n 4.
- Diop, B. *application de la méthode de la constante d'écran par unité de charge nucléaire, de la théorie modifiée des orbitales atomiques et de la rotation complexe au calculs des paramètres de résonances des séries de Rydberg de Mg, des ions Bérylliumoïdes Kr<sup>+</sup>, Xe<sup>+</sup>, Ne<sup>+</sup>, etdes énergies de l'état fondamental et des états monoexcités du lithium*

- 
- et de sa série isoélectronique* Thèse de doctorat unique UCAD (2018).
- Dirac, P. A. M., 1928. *The Quantum Theory of the Electron* . Proc. R. Soc. Lond. A 117 (778) : 610-24. <https://doi.org/10.1098/rspa.1928.0023>.
- Domke, M, T. Mandel, A. Puschmann, C. Xue, D. A. Shirley, G. Kaindl, H. Petersen, et P. Kuske. 1992. *Performance of the high – resolution SX700/II monochromatic* . Review of scientific instruments 63 (1) : 80–89.
- Drake, Gordon William Frederic, et Alexander Dalgarno. 1971. *A  $1/Z$  expansion study of the  $2s2p^1P$  and  $^3P$  autoionizing resonances of the helium isoelectronic sequence* . Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences 320 (1543) : 549–560.
- Dubau, J, et M. J. Seaton. 1984. *Quantum defect theory. XIII. Radiative transitions* . Journal of Physics B : Atomic and Molecular Physics 17 (3) : 381.
- Durand, Marc-Antoine, Doumbia, M.L, s. d. *développement d'un outil d'analyse de la qualité de l'onde dans un réseau électrique intelligent* , 164.
- El Hassan, N, Bizau J-M, Blanchard, C, Cosse, P, Cubaynes. D, Faussurier G, and Folkmann F, 2009. *Photoionization cross sections of iron isonuclear sequence ions :  $Fe^{2+}$  to  $Fe^{6+}$* . Phys. RevA79, 033415.
- El Hassan, Nouha. *Etude des processus de photoexcitation et de photoionisation dans les ions multichargés*. Thèse de doctorat Université Paris 11, (2010) N 9765.
- Esteva, J. M., G. Mehlman-Balloffet, et J. Romand. 1972. *Spectres d'absorption dans l'ultraviolet lointain de Be, B, C, N, Mg, Al et Si* . Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 12 (9) : 1291–IN1.
- Faenov, A. Ya, I. Yu Skobelev, F. B. Rosmej. 1999. *High resolution X – ray spectroscopy of laser generated plasmas* . Physica Scripta 1999 (T80A) : 43.
- Fano, U, C. D. Lin. 1975. *Correlations of excited electrons* . In Atomic Physics 4, 47-70. Springer.
- Fano, Ugo. 1961. *Effects of configuration interaction on intensities and phase shifts* . Physical Review 124 (6) : 1866.
- Faye, N. A. B., et A. Wague, 1994. *Doubly – excited state resonances of the helium – like nitrogen ion  $N^{5+}$  near the  $n = 3$  threshold of  $N^{6+}$*  . Zeitschrift für Physik D Atoms, Molecules and Clusters 31 (1) : 37-40.

- Faye, N. A. B, A. Wague. 1995. *Resonant photoionization of  $O^{6+}$  below the  $n = 3$  threshold of the reduced ion* . Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics 28 (9) : 1735.
- Frankowski, K, et C. L. Pekeris. 1966. *Logarithmic terms in the wave functions of the ground state of two – electron atoms* . Physical Review 146 (1) : 46.
- Gharaibeh, M. F., El Hassan N, Al Shorman M. M, Bizau J. M, D Cubaynes, S. Guilbaud, Sakho I, C. Blancard, B. M. McLaughlin. 2014. *K – shell photoionization of B – like atomic nitrogen ions : experiment and theory* . Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics 47 (6) : 065201.
- Gmelin, Leopold. 1926. *Noble gases : helium, neon, argon, krypton, xenon, radon*. Main volume. 1. Verlag Chemie.
- Gning, M.T, Badiane, J.K, **Diallo.A**, Ba, M.D., Sakho, I 2019. « *Photoionization of Aluminum – Like  $P^{2+}$  and Magnesium – Like  $P^{3+}$  by the Screening Constant by Unit Nuclear Charge Method* » Nuclear Science 2019 ; 4(4) : 34-43
- Guynd, Olivier. 2008. *Photoionisation simplet double à deux couleurs d’atomes de gaz rares* . Thèse de doctorat, Université Paris xi Orsay, (2008) N 9030.
- Harris, Stephen E. 1989. *Lasers without inversion : Interference of lifetime-broadened resonances* . Physical review letters 62 (9) : 1033.
- Hartree-Slater, 1976 *Subshell Photoionization Cross – Sections at 1254 and 1487 eV* . 1976. Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena 8 (2) : 129-37.
- Hernez, E. M., A. M. Juz, A. L. D. Kilcoyne, A. Aguilar, L. Hernez, A. Antill. Macaluso, A. Morales-Mori, O. Gonzz-Magat D. Hanstorp. 2015. *Absolute measurements of chlorine  $Cl^+$  cation single photoionization cross section* . Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 151 : 217-223.
- Herrick, D. R., M. E. Kellman, et R. D. Poliak. 1980. *Supermultiplet classification of higher intrashell doubly excited states of  $H^-$  and He* . Physical Review A 22 (4) : 1517.
- Herrick, David R., et Oktay Sinanoglu. 1975. *Comparison of doubly – excited helium energy levels, isoelectronic series, autoionization lifetimes, and group – theoretical configuration-mixing predictions with large – configuration*

- 
- *interaction calculations and experimental spectra* . Physical Review A 11 (1) : 97.
- Hinojosa, G., A. M. Covington, G. A. Alna'Washi, M. Lu, R. A. Phaneuf, M. M. Sant'Anna, C. Cisneros, I. lvarez, A. Aguilar, A. L. D. Kilcoyne. 2012. *Valence – shell single photoionization of Kr<sup>+</sup> ions : experiment and theory* . Physical Review A 86 (6) : 063402.
- Ho, Y. K. 1980. *Doubly excited resonances of the helium sequence associated with N = 4 hydrogenic thresholds* . Physics Letters A 79 (1) : 44–46.
- Ho, Y. K.. 1997. *Doubly – excited <sup>1,3</sup>P<sup>o</sup> autoionization states of He between the N = 4 and N = 6 thresholds of He<sup>+</sup> ions* . Zeitschrift für Physik D Atoms, Molecules and Clusters 42 (2) : 77–81.
- Ho, Yew Kam. 1983. *The method of complex coordinate rotation and its applications to atomic collision processes* . Physics Reports 99 (1) : 1-68.
- Hofmann, Ingo. 1990. *Principles of non–Liouvillean pulse compression by photoionization for heavy – ion fusion drivers*. Laser and Particle Beams 8 (4) : 527–539.
- Hylleraas, Egil A. 1928. *Über den grundzustand des heliumatoms* . Zeitschrift für Physik 48 (7-8) : 469-494.
- Ivanov, I. A., et U. I. Safronova. 1993. *Calculation of the correlation part of the energy to two – electron systems* . Optics and spectroscopy 75 (3) : 298-304.
- Kahn, Steven M. 1999. *Recent progress in X – ray spectroscopy of astrophysical plasmas* . Physica Scripta 1999 (T80A) : 23.
- Keller, Stefan, et Reiner M. Dreizler. 1999. *Signatures of Electron–Electron Interaction in Fast Highly Charged Ion–Atom Collisions* . Physica Scripta 1999 (T80A) : 93.
- Kellman, M. E, et D. R. Herrick. 1978. *Rotor – like spectra for some doubly excited two – electron states* . Journal of Physics B : Atomic and Molecular Physics 11 (24) : L755.
- Kellner, G.W, *Die Ionisierungsspannung des Helium nach der Schrödingerschen Theorie*. 1927. Z. Physik, 44, 91.
- Kennedy, Eugene T, John T. Costello, J.-P. Mosnier, et Paul van Kampen. 2004. *VUV/EUV ionizing radiation and atoms and ions : dual laser plasma investigations* . Radiation Physics and Chemistry 70 (1-3) : 291–321.

- Kiene, Ronald P., et Barrie F. Taylor. 1988. *Biotransformations of organosulphur compounds in sediments via  $\beta$  – mercaptopropionate*. Nature 332 (6160) : 148.
- Kjeldsen, Henrik, Finn Folkmann, J. E. Hansen, Helge Knudsen, M. S. Rasmussen, J. B. West, et Torkild Andersen. 1999. *Measurement of the absolute photoionization cross section of  $C^+$  near threshold*. The Astrophysical Journal Letters 524 (2) : L143.
- Kossmann, H., B. Krassig, et V. Schmidt. 1988a. *New determination of Beutler – Fano parameters for the  $3s3p^1P^1$  resonance in helium*. Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics 21 (9) : 1489.
- Kraus, Michaela, M. Borges Fernandes, Francisco X. d’Araujo, et HJGLM Lamers. 2005a. *The enigmatic Be – star Henize 2 – 90 : the non – spherical mass loss history from an analysis of forbidden lines*. Astronomy & Astrophysics 441 (1) : 289–302.
- Kppers, Michael, et Nicholas M. Schneider. 2000. *Discovery of chlorine in the Iotorus*. Geophysical research letters 27 (4) : 513–516.
- Leone, Nicolas. 2007. *Développement d’une technique d’analyse hautement sensible et polyvalente par spectroscopie de plasma induit par laser : applications aux aérosols et aux matériaux biologiques*. PhD Thesis, Paris 6.
- Lewin, Walter. 2005. *Prompt Chandra observations of nearby core – collapse supernovae*. Chandra Proposal.
- Liang, Liang, Wen-jing Gao, et Chao Zhou. 2013. *Energy levels, oscillator strengths, radiative decay rates, and fine structure collision strengths for KrVII lines*. Canadian Journal of Physics 91 (7) : 554–559.
- Lin, C. D. 1984. *Classification and supermultiplet structure of doubly excited states*. Physical Review a 29 (3) : 1019.
- Lipsky, Lester, Russell Anania, et M. J. Connely. 1977. *Energy levels and classifications of doubly – excited states in two – electron systems with nuclear charge,  $Z = 1, 2, 3, 4, 5$ , below the  $N = 2$  and  $N = 3$  thresholds*. Atomic data and nuclear data tables 20 (2) : 127–141.
- Macek, J. 1968. *Properties of autoionizing states of He*. Journal of Physics B : Atomic and Molecular Physics 1 (5) : 831.
- Macek, J, P. G. Burke. 1967. *Low – energy electron scattering by atomic*

- 
- hydrogen : IV. The effect of resonances on excitation in He scattering* . Proceedings of the Physical Society 92 (2) : 351.
- Madden, R. P, et K. Codling. 1963. *New autoionizing atomic energy levels in He, Ne, and Ar* . Physical Review Letters 10 (12) : 516.
- Madden, R. P., et K. Codling. 1965. *Two – Electron Excitation States in Helium*. The Astrophysical Journal 141 : 364.
- McLaughlin, Brendan M. 2016. *Photoionization of  $Cl^+$  from the  $3s^2 3p^4 \ ^3P^{2,1,0}$  and the  $3s^2 3p^4 \ ^1D^2, \ ^1S^0$  states in the energy range 19–28 eV* . Monthly Notices of the Royal Astronomical Society 464 (2) : 1990–1999.
- Mehlman-Balloffet, G, et J. M. Esteva. 1969. *Far – ultraviolet absorption spectra with auto – ionized levels of beryllium and magnesium* . The Astrophysical Journal 157 : 945.
- Murray, Donald M. 1977. *Economic analysis of the environmental impact of highway deicing salts*. Transportation research record 647 : 29–40.
- Ndao, A. S., A. Wague, N. A. B. Faye, A. Konte. 1998. *Autodetaching singlet and triplet states of below the  $n = 4$  threshold of the residual hydrogen atom* . Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics 31 (16) : 3489.
- Ndao, A. S., A. Wague, N. A. B. Faye, A. Konte. 1999. *High – lying resonance states of He and H* . The European Physical Journal D-Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics 5 (3) : 327–334.
- Oura, M, H. Yamaoka, K. Kawatsura, J. Kimata, T. Hayaishi, T. Takahashi, T. Koizumi, T. Sekioka, M. Terasawa, Y. Itoh. 2000. *Photoionization of  $Ne^{3+}$  ions in the region of the  $1s \rightarrow 2p$  autoionizing resonance* . Physical Review a 63 (1) : 014704.
- Raju, P. K., et B. N. Dwivedi. 1990. *Emission lines from nitrogen – like ions and their diagnostic use* . Astrophysics and Space Science 173 (1) : 13–26.
- Ray, D, et P. K. Mukherjee. 1991. *Doubly excited  $^1Se, \ ^1De$  and  $^1Ge$  states of He,  $Li^+, Be^{2+}$  and  $B^{3+}$* . Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics 24 (6) : 1241.
- Sakho, I. 2010a. *A modification of atomic orbital theory and its application to  $(1snl)^1L^\pi$  and  $(nl^2)^1L^\pi$  excited states of He – like ions* . Journal of Atomic and Molecular Sciences 2 : 103.

- Sakho, I. 2010b. *High – lying  $^1P^\circ$  doubly – excited states of  $H^-$  and He below the  $N = 3-13$  hydrogenic thresholds* . The European Physical Journal D 59 (2) : 171–177.
- Sakho, I. 2011. *High lying energy positions of doubly  $(2pns)^{1,3}P^\circ$  and  $(2pnd)^{1,3}P^\circ$  excited states of the beryllium atom* . Radiation Physics and Chemistry 80 (12) : 1295–1299.
- Sakho, I. 2012. « *Modified atomic orbital theory applied to the calculation of high – lying  ${}_2(KT)_n^{1,3}P^\circ$  Rydberg series of He – like ions* » Natural Science.
- Sakho, I. 2013. « *Photoabsorption of  $H^-$  and He via the Modified Atomic Orbital Theory :Application to the  $^1P^\circ$  - Rydberg States.*” Chinese Journal of Physics Vol.51,n 2.
- Sakho, I. 2014. « *General formalism of the modified atomic orbital theory for the Rydberg series of atoms and ions : application to the photoionization of  $Ne^+$* . J. At. Mol. Sci.
- Sakho, I. 2016. *Photoabsorption of the ground state of Ne and of Ne – like  $Na^+$ ,  $Mg^{2+}$ ,  $Al^{3+}$ ,  $Si^{4+}$ ,  $P^{5+}$ ,  $S^{6+}$ , and  $Cl^{7+}$  ions* . Atomic Data and Nuclear Data Tables 108 : 57–80.
- Sakho, I., A. Konte, A. S. Ndao, M. Biaye, et A. Wague. 2008. *Investigation of  $2snp^{\pm 1,3}P^\circ$  resonances of two – electron systems using the screening constant by unit nuclear charge method* . Physica Scripta 77 (5) : 055303.
- Sakho, I, A. Konte, A. S. Ndao, M. Biaye, et A. Wagu010. *Calculations of  $(nl)^2$  and  $(3lnl)$  autoionizing states in two – electron systems* . Physica Scripta 82 (3) : 035301.
- Sakho, I, A. S. Ndao, M. Biaye, et A. Wague. 2006. *Calculation of the ground – state energy, the first ionization energy and the radial correlation expectation value for He – like atoms* . Physica Scripta 74 (2) : 180.
- Sakho, I. 2008. *Screening constant by unit nuclear charge calculations for  $(ns^2)^1Se$ ,  $(np^2)^1De$  and  $(Nsnp)^1P^\circ$  excited states of He – like systems* . The European Physical Journal D 47 (1) : 37-44.
- Sakho, I, M. Tine, M. Dieng, M. Sow, M. Faye, B. Diop, M. Gu, M. Biaye, et A. Wagu013. *Energy resonances and widths of the  $(2pns)^1P^\circ$  and  $(2pnd)^1P^\circ$  Rydberg series of Be – like ions* . Physica Scripta 88 (3) : 035302.

- 
- Sakho, I. 2011. *Histoire de l'atome*. Editions Publibook.
- Sakho, I. 2018. *Screening Constant by Unit Nuclear Charge Method : Description and Application to the Photoionization of Atomic Systems*. John Wiley & Sons.
- Sakho, I. 2019. « *Photoionization of Ne Atom Ions in the Framework of the Modified Atomic Orbital Theory* » Journal of Atomic, Molecular, Condensate & Nano Physics Vol. 6, No. 2, pp. 93–101, 2019
- Sakho, I. *Formalisme général de la méthode de la constante d'écran par unité de charge nucléaire appliqué à l'étude de la photoionisation résonante des systèmes atomiques à plusieurs électrons*. Th d't UCAD 2013.
- Savoir, R, l. romnee, et wj masschelein. 1986. *Incidence des centrales nucléaires sur l'eau de Meuse : formation potentielle de dérivés organohalogénés au départ de l'eau de Meuse*. Tribune du CEBEDEAU 39 (509) : 3–11.
- Schneider, W. J. 1970. *Hydrologic implications of solid – waste disposal : US Geol*. Survey Circ.
- Seaton, M. J. 1987. *Atomic data for opacity calculations. I. General description*. Journal of Physics B : Atomic and Molecular Physics 20 (23) : 6363.
- Simon, M. C., M. Schwarz, S. W. Epp, C. Beilmann, B. L. Schmitt, Z. Harman, T. M. Baumann, P. H. Mokler, S. Bernitt, et R. Ginzl. 2010. *Photoionization of  $N^{3+}$  and  $Ar^{8+}$  in an electron beam ion trap by synchrotron radiation*. Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics 43 (6) : 065003.
- Sirven, J.B. 2006. *Détection de métaux lourds dans les sols par spectroscopie d'émission sur plasma induit par laser (LIBS)*. PhD Thesis, Université Sciences et Technologies-Bordeaux I.
- Slater, J. C. 1930. *Atomic shielding constants*. Physical Review 36 (1) : 57.
- Sletten, Owen. 1974a. *Halogens and their role in disinfection*. Journal-American Water Works Association 66 (12) : 690–692.
- Sletten, O. 1974b. *Halogens and their role in disinfection*. Journal-American Water Works Association 66 (12) : 690–692.
- Sow, M. et al. 2014 « *Calculations of the High Lying  $(2pns)^{1,3}P^{\circ}$  and  $(2pnd)^{1,3}P^{\circ}$  Rydberg States of the Be Atom via the Modified Atomic Orbital Theory* » Chinese Journal of Physics Vol.52, n 5.

- Sow, M. *Application de la méthode de la Théorie Modifiée des Orbitales Atomiques aux calculs des énergies et largeurs totales des séries de Rydberg  $2pns^{1,3}P^\circ$  et  $2pnd1,^3P^\circ$  du béryllium et des énergies de l'état fondamental et des états excités  $(nl^2)^1L^\pi$  ( $n \leq 4$ ;  $0 \leq l \leq 3$ ) des ions héliumoides ( $1 \leq Z \leq 20$ ).* Th de doctorat unique UCAD 2015.
- Sow, M, **Diallo.A**, Badiane, J.K, Ba, M.D, Sakho, I. 2017 « *Modified Atomic Orbital Theory Applied to the Study of High Lying  $(2pns)^{1,3}P^\circ$  and  $(2pnd)1,^3P^\circ$  Rydberg Series of  $B^+$* . International Journal of Atomic and Nuclear Physics.
- Sow, M. et al 2020. « *Modified Atomic Orbital Calculations of Energy of the  $(2s^{21}S)$  Ground – State, the  $(2p^{21}D)$ ;  $(3d^{21}G)$  and  $(4f^{21}I)$  Doubly Excited States of Helium Isoelectronic Sequence from  $H^-$  to  $Ca^{18+}$* . Journal of Applied Mathematics and Physics, 2020, 8, 85-99
- Wague, A. 1987. *Application of the diagonalization approximation to the  $n = 3$  resonant photoionization of helium – like systems*. Zeitschrift fr Physik D Atoms, Molecules and Clusters 6 (4) : 337–344.
- Wague, A. 1988. *Calculation of the photo – electrons angular distribution asymmetry parameter  $\beta$   $2p$  near the  $(3s3p)^1P$  resonance of He*. Zeitschrift fr Physik D Atoms, Molecules and Clusters 8 (3) : 251–254.
- Wague, A 1989. *Intermediate – coupling effects on the  $n = 2$  resonant photo – ionization of multiply – charged helium – like ions*. Zeitschrift fr Physik D Atoms, Molecules and Clusters 13 (2) : 123–128.
- Wague, A. 1990. *Resonance photoionisation of the metastable  $2^{1,3}S$  helium near the  $n = 2$  and  $n = 3$  excitation thresholds of He*. Zeitschrift fr Physik D Atoms, Molecules and Clusters 15 (3) : 199–202.
- Wague, A, U. I. Safronova, et V. S. Senashenko. 1981. *Sur quelques particularités de la photoabsorption résonante des ions héliumoides multichargés*. Opte Spektrosk 51 (6) : 951–957.
- Wague, A. 1984. *étude théorique des processus de photoabsorption des systèmes atomiques a deux électrons*. Thèse, Universite Paul Sabatier Toulouse 170 p.
- Wehlitz, R., D. Lukic, et J. B. Bluett. 2003. *Resonance parameters of autoionizing  $Be2pnl$  states*. Physical Review a 68 (5) : 052708.
- Woodruff, P. R., et James AR S. 1982. *Measurements of partial cross sections and autoionization in the photoionization of helium to  $He^+$  ( $N = 2$ )*.

---

Physical Review A 25 (2) : 848.

Wuilleumier, f. 1978. *photoionisation simple et multiple dans les atomes* . Le  
Journal de Physique Colloque 39 (C1) : C1-71.

<https://agris.fao.org/agris-search/search.do?recordID=XF2015042295> (Nutriment  
et substance toxique dans l'eau pour le bil et la volaille)

[https://books.google.com/books/about/Water\\_Quality\\_in\\_a\\_Stressed\\_Environment.html?id=I0tP](https://books.google.com/books/about/Water_Quality_in_a_Stressed_Environment.html?id=I0tP)  
(Water quality in a stressed environment)



# Annexes



# Procédure de calcul pour la détermination de la fonction d'onde radiale

La procédure de détermination de la fonction d'onde radiale est donnée comme suite :

$$R_{n,l}(r) = \left\{ \left( \frac{2Z}{na_0} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right\}^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{Zr}{na_0}} \left( \frac{2Zr}{na_0} \right)^l L_{n+l}^{2l+1} \left( \frac{2Zr}{na_0} \right) \quad (0.1)$$

Les polynômes de Laguerre associés sont liés aux polynômes de Laguerre par la formule de Rodrigue :

$$L_n^k(r) = (-1)^k \frac{d^k}{dr^k} L_n(r) \quad (0.2)$$

$$L_n(r) = e^r \frac{d^n}{dr^n} (r^n e^{-r}) \quad (0.3)$$

Pour des valeurs de n et l différents, les polynômes de Laguerre sont mutuellement orthogonaux, ce qui détermine alors l'orthogonalité des fonctions d'ondes radiales. Donnons l'exemple de la fonction d'onde 4s.

Pour l'état 4s on a : n=4, l=0.

$$L_{n+l}^{2l+1} \left( \frac{2Zr}{na_0} \right) = L_4^1 \left( \frac{2Zr}{na_0} \right) \quad (0.4)$$

$$L_4 = e^r \frac{d^4}{dr^4} (r^4 e^{-r}) \quad (0.5)$$

En développant cette expression, nous obtenons :

$$L_4(r) = e^r \frac{d^3}{dr^3} (4r^3 e^{-r} - r^4 e^{-r}) = e^r \frac{d^2}{dr^2} (12r^2 e^{-r} - 4r^3 e^{-r} - 4r^3 e^{-r} + r^4 e^{-r})$$

$$L_4(r) = e^r \frac{d}{dr} (24re^{-r} - 12r^2e^{-r} + 4r^3e^{-r} - 12r^2e^{-r} + 4r^3e^{-r} + 4r^3e^{-r} - r^4e^{-r})$$

$$L_4(r) = e^r (24e^{-r} - 24re^{-r} - 24re^{-r} + 12r^2e^{-r} - 24re^{-r} + 12r^2e^{-r} - 4r^3e^{-r} +$$

$$-24re^{-r} + 12r^2e^{-r} + 12r^2e^{-r} - 4r^3e^{-r} + 12r^2e^{-r} - 4r^3e^{-r} - 4r^3e^{-r} + r^4e^{-r})$$

$$L_4(r) = (24 - 96r + 72r^2 - 16r^3 + r^4) \quad (0.6)$$

Ensuite il vient,

$$L_4^1 = \frac{d}{dr} L_4(r) = 4(-24 + 36r - 12r^2 + r^3) \quad (0.7)$$

Ce qui donne,

$$L_{n+l}^{2l+1} \left( \frac{2Zr}{na_0} \right) = L_4^1 \left( \frac{2Zr}{na_0} \right) = (-4) \left[ -24 \left( \frac{2Z}{4a_0} \right)^0 + 36r \left( \frac{2Z}{4a_0} \right)^1 - 12r^2 \left( \frac{2Z}{4a_0} \right)^2 + r^3 \left( \frac{2Z}{4a_0} \right)^3 \right]$$

$$L_{n+l}^{2l+1} \left( \frac{2Zr}{na_0} \right) = L_4^1 \left( \frac{2Zr}{na_0} \right) = (-4) \left( -24 + \frac{18Zr}{a_0} - \frac{3Z^2r^2}{a_0^2} + \frac{Z^3r^3}{8a_0^3} \right) \quad (0.8)$$

Ainsi la détermination de la première partie de l'expression (?.3.8)  $\left\{ \left( \frac{2Z}{na_0} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right\}^{\frac{1}{2}}$  pour  $n=4$  et  $l=0$  est :

$$\left\{ \left( \frac{2Z}{na_0} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right\}^{\frac{1}{2}} = \left[ \left( \frac{Z}{2a_0} \right)^3 \left( \frac{6}{8 \times (24)^3} \right) \right]^{\frac{1}{2}} = \left[ \left( \frac{Z}{2a_0} \right)^3 \left( \frac{3}{4 \times (24)^3} \right) \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$= \left[ \left( \frac{Z}{2a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left( \frac{1}{96\sqrt{2}} \right) \right] = \left[ \frac{1}{4 \times 96} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \right]$$

Finalement l'expression devienne :

$$\left\{ \left( \frac{2Z}{na_0} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right\}^{\frac{1}{2}} = \left[ \frac{1}{4 \times 96} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \right] \quad (0.9)$$

---

Ainsi partant du produit des expressions (A.0.9), (A.0.8) nous obtenons :

$$\begin{aligned} & \left[ \frac{1}{4 \times 96} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \right] \times (-4) \left( -24 + \frac{18Zr}{a_0} - \frac{3Z^2r^2}{a_0^2} + \frac{Z^3r^3}{8a_0^3} \right) \\ &= \left[ \frac{1}{96} \left( 24 - \frac{18Zr}{a_0} + \frac{3Z^2r^2}{a_0^2} - \frac{Z^3r^3}{8a_0^3} \right) \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \right] \end{aligned} \quad (0.10)$$

En simplifiant par 24 on obtient finalement l'expression de la fonction d'onde radiale 4s comme suite :

$$R_{4,0} = \frac{24}{96} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left( 1 - \frac{3Zr}{4a_0} - \frac{Z^2r^2}{8a_0^2} - \frac{Z^3r^3}{192a_0^3} \right) e^{-\frac{Zr}{4a_0}} \quad (0.11)$$

Par analogie la fonction d'onde 4p est donnée comme suite :

$$R_{4,1} = \frac{5}{16\sqrt{2}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left( \frac{Z}{a_0}r - \frac{1}{4} \frac{Z^2}{a_0^2}r^2 + \frac{1}{80} \frac{Z^3}{a_0^3}r^3 \right) e^{-\frac{Zr}{4a_0}} \quad (0.12)$$



# Principe de détermination de la constante d'écran

Pour déterminer la constante d'écran, nous partons de la relation :

$$E(\alpha) = \langle H \rangle(\alpha) = \frac{\langle \Psi(\alpha) | H | \Psi(\alpha) \rangle}{\langle \Psi(\alpha) | \Psi(\alpha) \rangle} \quad (0.1)$$

Et l'hamiltonien H (en unité atomique) est :

$$H = -\frac{1}{2}\Delta_1 - \frac{1}{2}\Delta_2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \quad (0.2)$$

La valeur moyenne de cette expression (B.0.2), tout en utilisant la relation de fermeture traduisant le fait que les kets  $|r_1, r_1\rangle$  sont des bases continues dans l'espace des états des deux électrons :

$$\iint dr_1^3 dr_2^3 |r_1, r_1\rangle \langle r_1, r_2| = \mathbb{1} \quad (0.3)$$

De cette relation on peut à partir de (B.0.3) :

$$\begin{aligned} E(\alpha) & \iint dr_1^3 dr_2^3 \langle \Psi(\alpha) | r_1, r_1 \rangle \times \langle r_1, r_2 | \Psi(\alpha) \rangle \\ & = \iint dr_1^3 dr_2^3 \langle \Psi(\alpha) | r_1, r_1 \rangle \hat{H} \langle r_1, r_2 | \Psi(\alpha) \rangle \end{aligned} \quad (0.4)$$

Le développement de (B.0.4) donne :

$$\begin{aligned} E(\alpha) & \iint dr_1^3 dr_2^3 \Psi(r_1, r_2, \alpha) \times \Psi^*(r_1, r_2, \alpha) \\ & = \iint dr_1^3 dr_2^3 \Psi(r_1, r_2, \alpha) \hat{H} \Psi^*(r_1, r_2, \alpha) \end{aligned} \quad (0.5)$$

La constante de normalisation notée N est donnée par :

$$NE(\alpha) = \iint dr_1^3 dr_2^3 \Psi(r_1, r_2, \alpha) \hat{H} \Psi^*(r_1, r_2, \alpha) \quad (0.6)$$

Et de cette relation (B.0.6), on obtient :

$$N = \iint dr_1^3 dr_2^3 |(r_1, r_2, \alpha)|^2 \quad (0.7)$$

Pour faciliter le développement de ces expressions, nous avons effectués un changement de variable de certains paramètres de l'équation (B.0.7). C'est par la suite qu'on a posé en coordonnée elliptique :

$$s = (r_1 + r_2) , t = (r_1 - r_2) , u = r_{12}. \quad (0.8)$$

Et l'élément de volume élémentaire  $d\tau = dr_1^3 dr_2^3$  donne :

$$d\tau = 2\pi^2 (s^2 - t^2) u ds dt du \quad (0.9)$$

En appliquant ces changements de variables dans l'équation (B.0.8) l'expression précédente de la constante de normalisation notée N est devienent en coordonnée elliptique :

$$NE(\alpha) = \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u dt \left\{ u (s^2 - t^2) \times \left[ \left( \frac{\partial \Psi}{\partial s} \right)^2 + \left( \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right)^2 + \left( \frac{\partial \Psi}{\partial u} \right)^2 \right] \right. \\ \left. + 2 \left( \frac{\partial \Psi}{\partial u} \right) \times \left[ s (u^2 - t^2) \frac{\partial \Psi}{\partial s} + t (s^2 - u^2) \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right] - \Psi^2 [4Zsu - s^2 + t^2] \right\} \quad (0.10)$$

Étant donné qu'on n'a pas tenu compte de la répulsion coulombienne, donc  $\frac{\partial \Psi}{\partial u} = 0$  :

La constante de normalisation devienne :

$$NE(\alpha) = \left\{ \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u dt u (s^2 - t^2) \times \left[ \left( \frac{\partial \Psi}{\partial s} \right)^2 + \left( \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right)^2 \right] - \Psi^2 [4Zsu - s^2 + t^2] \right\} \quad (0.11)$$

Pour déterminer les valeurs de la constante d'écran  $\sigma$  et du paramètre variationnelle  $\alpha$ , nous partons de cette équation qui est la somme de trois intégrales données comme suite :

---


$$NE(\alpha) = E_1(\alpha) + E_2(\alpha) + E_3(\alpha) \quad (0.12)$$

Le développement de cette expression (B.0.12) permet l'obtention de la valeur de  $\sigma$  et de  $\alpha$  par la formule :

$$\frac{dE(\alpha_i)}{d\alpha_i} = 0 \quad (0.13)$$

Les expressions correspondantes à  $E_1(\alpha)$ ,  $E_2(\alpha)$ , et  $E_3(\alpha)$ , sont :

$$E_1(\alpha) = \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u dtu (s^2 - t^2) \times \left( \frac{\partial \Psi}{\partial s} \right)^2 \quad (0.14)$$

$$E_2(\alpha) = \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u dtu (s^2 - t^2) \times \left( \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right)^2 \quad (0.15)$$

$$E_3(\alpha) = - \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u dt [4Zsu - s^2 + t^2] \Psi^2 \quad (0.16)$$

La constante de normalisation vaut ainsi :

$$N = \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u dtu (s^2 - t^2) \times \Psi^2 \quad (0.17)$$

Avec ces changements de variables, nous obtenons les fonctions d'ondes corrélées des états 2snp, 3snp, 4snp ( voir équations 2.3.44 ; 2.3.45 ; 2.3.46 de la section 2.3.2).



# Programme de calcul des fonctions d'ondes

```

État 3snp
clear all;
close all;
clc;
%3S3P
%var s psi;
syms s t a u z r N;
r1=((s+t)/2)
r2=((s-t)/2)
S=(1-((2*z*r1)/3)+((2*z^2*r1^2)/27))
%D=(z*r2-((z^2*r2^2)/6))
D=((z*r2)/3)-((z^2*r2^2)/18)%verification
Psi=S*D factor(Psi) %verification
Psi= -(z*(s - t)*(s*z - t*z - 12)*(s^2*z^2 + 2*s*t*z^2 - 18*s*z + t^2*z^2 -
18*t*z + 54))/3888)*exp(-a*s)%verification
fo=Psi*Psi
f1ordre1=diff(Psi,s,1)%dérivée par rapport a s
f2ordre1=diff(Psi,t,1)%dérivée par rapport à t
f4=f1ordre1*f1ordre1 %pour calculer E1
f5=f2ordre1*f2ordre1 %pour calculer E2
fz=-fo*(4*z*s*u-s^2+t^2) % pour calculer E3
fn=fo*u*(s^2-t^2) %pour calculer N
%calcul des énergies
fe1=f4*u*(s^2-t^2)%l'expression de E1
int1=int(fe1,t,0,u)%1er integral en fct t de E1
int2=int(int1,u,0,s)%2em integral en fct u de E1
factor(int2)
%E1=int(int2,s,0,inf)%integral en fnt de s de 0 à inf
%Calcul de E2 fe2=f5*u*(s^2-t^2)%l'expression de E2
int1=int(fe2,t,0,u)%1er integral en fct t de E2
int3=int(int1,u,0,s)%2em integral en fct u de E2
factor(int3) %E2=int(int3,s,0,inf)%integral en fnt de s de 0 à inf
fe6=int(fz,t,0,u)%1er dérivée de E3

```

```

int7=int(fe6,u,0,s)%2em derrivée de E3 factor(int7)
%calcul de la normalisation N
fN=int(fn,t,0,u)%1er int de N
intN=int(fN,u,0,s)%2em int de N
factor(intN)
%calcul factorial3S3P octobre18
%E1=((15360*a^2*z^8*factorial(13)/(2*a)^14)-(953355*a^2*z^7*factorial(12)/(2*a)^13)
+(23283936*a^2*z^6*factorial(11)/(2*a)^12)-(279659952*a^2*z^5*factorial(10)/(2*a)^11)
+(1704716442*a^2*z^4*factorial(9)/(2*a)^10)-(4882512492*a^2*z^3*factorial(8)/(2*a)^9)
+(5224025664*a^2*z^2*factorial(7)/(2*a)^8)-(133120*a*z^8*factorial(12)/(2*a)^13)
+(7263516*a*z^7*factorial(11)/(2*a)^12)-(153122112*a*z^6*factorial(10)/(2*a)^11)
+(1555226244*a*z^5*factorial(9)/(2*a)^10)-(7796633130*a*z^4*factorial(8)/(2*a)^9)
+(17623580832*a*z^3*factorial(7)/(2*a)^8)-(13870688832*a*z^2*factorial(6)/(2*a)^7)
+(292864*z^8*factorial(11)/(2*a)^12)-(13736580*z^7*factorial(10)/(2*a)^11)
+(246813138*z^6*factorial(9)/(2*a)^10)-(2108499822*z^5*factorial(8)/(2*a)^9)
+(8721721008*z^4*factorial(7)/(2*a)^8)-(15762146400*z^3*factorial(6)/(2*a)^7)
+(10087773696*z^2*factorial(5)/(2*a)^6))/(1361849448960)
% factor(E1)
%E2=((1024*z^8*factorial(11)/(2*a)^12)-(46398*z^7*factorial(10)/(2*a)^11)
+(961389*z^6*factorial(9)/(2*a)^10)-(10961973*z^5*factorial(8)/(2*a)^9)
+(71401176*z^4*factorial(7)/(2*a)^8)-(250577712*z^3*factorial(6)/(2*a)^7)
+(387991296*z^2*factorial(5)/(2*a)^6))/(52378824960)
% factor(E2)
%E3=-((10240*z^9*factorial(12)/(2*a)^13)-(3965*z^8*factorial(12)/(2*a)^13)
-(642576*z^8*factorial(11)/(2*a)^12)+(244272*z^7*factorial(11)/(2*a)^12)
+(15846336*z^7*factorial(10)/(2*a)^11)-(5933664*z^6*factorial(10)/(2*a)^11)
-(190980504*z^6*factorial(9)/(2*a)^10)+(71180208*z^5*factorial(9)/(2*a)^10)
+(1160894592*z^5*factorial(8)/(2*a)^9)-(435287358*z^4*factorial(8)/(2*a)^9)
-(3297926016*z^4*factorial(7)/(2*a)^8)+(1256352768*z^3*factorial(7)/(2*a)^8)
+(3491921664*z^3*factorial(6)/(2*a)^7)-(1357969536*z^2*factorial(6)/(2*a)^7)
)/(209515299840)
% factor(E3)
%N=((5120*z^8*factorial(13)/(2*a)^14)-(317785*z^7*factorial(12)/(2*a)^13)
+(7761312*z^6*factorial(11)/(2*a)^12)-(93219984*z^5*factorial(10)/(2*a)^11)
+(568238814*z^4*factorial(9)/(2*a)^10)-(1627504164*z^3*factorial(8)/(2*a)^9)
+(1741341888*z^2*factorial(7)/(2*a)^8))/(453949816320)
% factor(N)
% %fin factorial verification octobre
%calcul des matrix
E1=[863136 -2490264 3193506 -2179224 849726 -183495 17920]
E2=[186624 -361584 360612 -221454 87399 -21090 2560]
E31=[1679616 -5552064 7817472 -5787288 2400960 -535480 51200]
E32=[-653184 2115072 -2931228 2156976 -899040 203560 -19825]
N=[225504 -843048 1324566 -1086480 497520 -122225 12800]
%fin mati verification

```

---

```

%calcul des rapport énergie/normalisation 3S3P oct
U=E1/N
V=E2/N
W1=E31/N
W2=E32/N
%fin 3S3P oct
clc;
%4S4P
%var s psi;
syms s t a u z r N;
r1=((s+t)/2);
r2=((s-t)/2);
S1=((1)-(3*z*r1/4)+(z^2*r1^2/8)-(z^3*r1^3/192));
D1=((z*r2)-(z^2*r2^2/4)+(z^3*r2^3/80));
Psi=S1*D1
factor(Psi)
Psi=-(z*(s-t)*(s^2*z^2-2*s*t*z^2-40*s*z+t^2*z^2+40*t*z+320)*(s^3*z^3
+3*s^2*t*z^3-48*s^2*z^2+3*s*t^2*z^3-96*s*t*z^2+576*s*z+t^3*z^3-
48*t^2*z^2+576*t*z-1536))/983040
%Psi=(-(z*(s-t)*(s^2*z^2-2*s*t*z^2+t^2*z^2-80*z+320)*(s^3*z^3
+3*s^2*t*z^3-48*s^2*z^2+3*s*t^2*z^3-96*s*t*z^2+576*s*z+t^3*z^3-
48*t^2*z^2+576*t*z-1536))/1966080)*exp(-a*s)
fo=Psi*Psi
f1ordre1=diff(Psi,s,1)%dérivée par rapport a s
f2ordre1=diff(Psi,t,1)%dérivée par rapport à t
f4=f1ordre1*f1ordre1 %pour calculer E1
f5=f2ordre1*f2ordre1 %pour calculer E2
fz=-fo*(4*z*s*u-s^2+t^2) % pour calculer E3
fn=fo*u*(s^2-t^2) %pour calculer N
%calcul des énergies
fe1=f4*u*(s^2-t^2)%l'expression de E1
int1=int(fe1,t,0,u)%1er integral en fct t de E1
int2=int(int1,u,0,s)%2em integral en fct u de E1
factor(int2)
%E1=int(int2,s,0,inf)%integral en fnt de s de 0 à inf
%Calcul de E2 fe2=f5*u*(s^2-t^2)%l'expression de E2
int1=int(fe2,t,0,u)%1er integral en fct t de E2
int3=int(int1,u,0,s)%2em integral en fct u de E2
factor(int3) %E2=int(int3,s,0,inf)%integral en fnt de s de 0 à inf
fe6=int(fz,t,0,u)%1er dérivée de E3
int7=int(fe6,u,0,s)%2em dérivée de E3 factor(int7)
%calcul de la normalisation N
%calcul de la normalisation N
fN=int(fn,t,0,u)%1er int de N
intN=int(fN,u,0,s)%2em int de N

```

```

factor(intN)
% calcul du factoriel octobre18
% E1=((17280*z^12*factorial(15)/(2*a)^16) -(2658315*z^11*factorial(14)
/(2*a)^15)+(173099996*z^10*factorial(13)/(2*a)^14)-(6223041344*z^9*factorial(12)
/(2*a)^13)+(135444268544*z^8*factorial(11)/(2*a)^12)-(1843702468608*z^7*factorial(10)
/(2*a)^11)+(15671709081600*z^6*factorial(9)/(2*a)^10) -(80595282493440*z^5*factorial(8)
/(2*a)^9)+(233844359823360*z^4*factorial(7)/(2*a)^8)-(334410389913600*z^3*factorial(6)
/(2*a)^7)+(181375126732800*z^2*factorial(5)/(2*a)^6))/2720626900992000
% factor(E1)
% E2=((2304*z^12*factorial(15)/(2*a)^16)-(344355*z^11*factorial(14)
/(2*a)^15)+(22465192*z^10*factorial(13)/(2*a)^14)-(835958656*z^9*factorial(12)
/(2*a)^13)+(19728916480*z^8*factorial(11)/(2*a)^12)-(310596329472*z^7*factorial(10)
/(2*a)^11)+(3317739110400*z^6*factorial(9)/(2*a)^10)-(23754878484480*z^5*factorial(8)
/(2*a)^9)+(109391873310720*z^4*factorial(7)/(2*a)^8)-(294734580940800*z^3*factorial(6)
/(2*a)^7)+(362750253465600*z^2*factorial(5)/(2*a)^6))/5441253801984000
% factor(E2)
% E3= -((458752*z^13*factorial(16)/(2*a)^17) -(184331*z^12*factorial(16)
/(2*a)^17)-(84860160*z^12*factorial(15)/(2*a)^16) + (33631744*z^11*
factorial(15)/(2*a)^16)+(6749056000*z^11*factorial(14)/(2*a)^15)
-(2637995520*z^10*factorial(14)/(2*a)^15)-(301983039488*z^10*
factorial(13)/(2*a)^14)+(116470079488*z^9*factorial(13)/(2*a)^14)
+(8362999676928*z^9*factorial(12)/(2*a)^13)-(3186512822272*z^8*
factorial(12)/(2*a)^13)-(148589503315968*z^8*factorial(11)/(2*a)^12)
+(56067168927744*z^7*factorial(11)/(2*a)^12)+(1698682424524800*z^7*
factorial(10)/(2*a)^11)-(637242974404608*z^6*factorial(10)/(2*a)^11)
-(12190999589683200*z^6*factorial(9)/(2*a)^10)+(4571444910489600*
z^5*factorial(9)/(2*a)^10)+(51821464780800000*z^5*factorial(8)/(2*a)^9)
-(19549647588556800*z^4*factorial(8)/(2*a)^9)-(116080081108992000*z^4*
factorial(7)/(2*a)^8)+(44359173852364800*z^3*factorial(7)/(2*a)^8)
+(104472072998092800*z^3*factorial(6)/(2*a)^7)-(40628028388147200*
z^2*factorial(6)/(2*a)^7))/696480486653952000
% factor(E3)
%N=((229376*z^12*factorial(17)/(2*a)^18)-(42127547*z^11*factorial(16)
/(2*a)^17)+(3325179328*z^10*factorial(15)/(2*a)^16)-(147647518720*z^9*
factorial(14)/(2*a)^15)+(4059172511744*z^8*factorial(13)/(2*a)^14)
-(71682972401664*z^7*factorial(12)/(2*a)^13)+(816305887248384*
z^6*factorial(11)/(2*a)^12)-(5853981179904000*z^5*factorial(10)/(2*a)^11)
+(24956083843891200*z^4*factorial(9)/(2*a)^10)-(56271633068851200*
z^3*factorial(8)/(2*a)^9)+(51095964273868800*z^2*factorial(7)/(2*a)^8)
/1480021034139648000
% factor(N)
%fin factoriel octobr18
%calcul des matrix octobre18
E1=[2684354560 -14847836160 36339449856 -50098077696 43836948480 -25786048512
10418789888 -2872172928 519299988 -55824615 2721600]

```

---

```
E2=[5368709120 -13086228480 16999514112 -14766047232 9280389120 -4344004608
1517608960 -385827072 67395576 -7231455 362880]
E31=[386547056640 -1503238553600 2684354560000 -2841724846080 1979816345600
-952496816128 321653833728
-75495759872 11810848000 -1113789600 48168960]
E32=[-150323855360 574451875840 -1012672757760 1065604874240 -742707429376
359404929024 -122558185472 29117519872
-4616492160 441416640 -19354755]
N=[38923141120 -171463147520 342192291840 -401342464000 307807649792 -
162178670592 59693713408 -15199009280 2567234040
-260199555 12042240]
%fin matrice octobre18
%calcul des rapports énergie
U=E1/N
V=E2/N
W1=E31/N
W2=E32/N
%fin 4S4Poct.
```



# Publications aux revues internationales indexées.

**A. Diallo**<sup>1</sup>, M. D. Ba<sup>1</sup>, J. K. Badiane<sup>1</sup>, M.T. Gning<sup>1</sup>, M. Sow<sup>2</sup> and I. Sakho<sup>1\*</sup>. Photoionization Study of Cl II, Ar II and Kr II ions using the Modified Atomic Orbital Theory. *Journal of Modern Physics*, 2018, 9, 2594-2622.

**A. Diallo**<sup>1</sup>, M. D. Ba<sup>1</sup>, J. K. Badiane<sup>1</sup>, M. T. Gning<sup>1</sup>, M. Sow<sup>2</sup> and I. Sakho<sup>1\*</sup>. Modified Atomic Orbital Calculations of Energy and Width of the  $2pns\ ^1P^\circ$  and  $2pnd\ ^1P^\circ$  Rydbergs Series of *Be*-like  $N^{3+}$ ,  $O^{4+}$ ,  $F^{5+}$  and  $Ne^{6+}$  Ions. *Journal of Atomic, Molecular, Condensate & Nano Physics* Vol. 5, No. 3, pp. 215–227, 2018

**Abdourahmane Diallo**<sup>1\*</sup>, Ibrahima Sakho<sup>2</sup>, Jean Kouhissoré Badiane<sup>1</sup>, Mamadou Diouldé Ba<sup>1</sup>, Modou Tine<sup>1</sup>. Variational Calculation of the Doubly-Excited States  $Nsnp$  of He-Like Ions via the Modified Atomic Orbitals Theory. *Journal of Modern Physics*, 2021, 12, 105-121.

J K. Badiane, **A. Diallo**, M.D. Ba, M.T. Gning, M. Sow, I. Sakho. Photoionization study of the  $(3d94s\ 3D3,2,1)np$  and the  $(3d94s\ 1D2)np$  Rydberg series of Cu-like Zn<sup>+</sup> ion via the Screening constant by unit nuclear charge method. *Radiation Physics and Chemistry* 158 (2019) 17–21. <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2019.01.008>

Sow M, **Diallo A**, Ba AD, Badiane JK, Diallo S, et al. (2017) Modified Atomic Orbital Theory Applied to the Study of High Lying  $(2pns)\ 1,3P^\circ$  and  $(2pnd)\ 1,3P^\circ$  Rydberg Series of B<sup>+</sup>. *Int J At Nucl Phys* 2 :006.

Jean Kouhissoré Badiane, **Abdourahmane Diallo**, Mamadou Diouldé Ba, Momar Talla Gning, Malick Sow, Ibrahima Sakho. Screening Constant by Unit Nuclear Charge Calculations of Resonance Energies of the (K, T, A)  $1,3L$  Rydberg Series of He-Like Ions. *International Journal of Applied Mathematics and Theoretical Physics*. Vol. 4, No. 2, 2018, pp. 55-60. <http://www.sciencepublishinggroup.com/j/ijamtp>.

M.D. Ba, **A. Diallo**, J.K. Badiane, M.T. Gning, M. Sow, I. Sakho. Photoionization of the  $3s2\ 3p2nd$  Rydberg series of Cl<sup>+</sup> ion using the Screening constant by unit nuclear charge method. *Radiation Physics and Chemistry* 153 (2018) 111–119. <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2018.09.010>.

Mamadou Diouldé Ba, Jean Kouhissoré Badiane, **Abdourahmane Diallo**, Malick Sow, Ibrahima Sakho. Auger  $1s2nl$  (s, p, d, f) Transition Energies in Be-Like Ions. AASCIT Journal of physics. Vol. 4, No. 1, 2018, pp. 20-25. <http://www.aascit.org/journal/physics>

Jean Kouhissoré Badiane, Mamadou Diouldé Ba, **Abdourahmane Diallo**, Momar Talla Nging, Malick Sow, Ibrahima Sakho. Variationnal Calculation of the Doubly (nl)<sup>2</sup> 1L Excited States of He-Like Ions Via the Screening Constant by Unit Nuclear Charge Formalism. International Journal of Applied Mathematics and Theoretical Physics. Vol. 4, No. 2, 2018, pp. 27-41. <http://www.sciencepublishinggroup.com/j/ijamtp>

Momar Talla Gning<sup>1,\*</sup>, Jean Kouhissoré Badiane<sup>2</sup>, **Abdourahmane Diallo**<sup>2</sup>, Mamadou Diouldé Ba<sup>2</sup>, Ibrahima Sakho<sup>1</sup>. Photoionization of Aluminum-Like P<sub>2</sub><sup>+</sup> and Magnesium-Like P<sub>3</sub><sup>+</sup> by the Screening Constant by Unit Nuclear Charge Method. Nuclear Science 2019 ; 4(4) :34-43. <http://www.sciencepublishinggroup.com/j/ns>