

# Université Assane Seck de Ziguinchor



**UFR Sciences et Technologies**  
**Département de Physique**

**Mémoire de Master Physique et applications**

**Spécialité : Physique Atomique et Nucléaire**

**Sujet :**

**Application de la méthode de la théorie modifiée des orbitales atomiques au calcul des énergies de résonance des séries de Rydberg  $4s4p^2np$  et  $4s^24pnd$  de l'ion  $Se^{2+}$  pour le suivi de l'évolution de l'élément sélénium dans l'univers**

Présenté par

**Sidy DIALLO**

Sous la direction de

**Ibrahima SAKHO**

Soutenu publiquement le **17 mars 2017** devant le jury composé de :

<b>Bamol Ali SOW</b>	Maître de Conférences, UASZ	Président
<b>Ababacar NDIAYE</b>	Maître Assistant, UASZ	Rapporteur
<b>Samo DIATTA</b>	Maître Assistant, UASZ	Examineur
<b>Modou TINE</b>	Assistant, UASZ	Examineur
<b>Ibrahima SAKHO</b>	Maître de Conférences, UASZ	Encadrant

## **Dédicaces**

***Je rends grâce à Dieu pour tous ses biens faits.***

***Je dédie ce travail :***

***A mes très chers parents qui ont toujours été là pour moi, et qui m'ont donné un magnifique modèle de labeur et de persévérance. J'espère qu'ils trouveront dans ce travail toute ma reconnaissance et tout mon amour.***

***A mes chers frères et sœurs: Alassane, Seydou, Awa, Niouma, Maïmouna, Abdoulaye et Moussa***

***A mes cousins***

***A mes amis***

***A mes camarades de promotion 2013-2017***

## Remerciements

*En préambule à ce mémoire, je souhaite adresser mes remerciements les plus sincères aux personnes qui m'ont apporté leur aide et qui ont contribué à l'élaboration de ce mémoire.*

*Je tiens à remercier sincèrement Mon grand frère Seydou DIALLO qui n'a ménagé aucun effort pour notre réussite.*

*Mes remerciements s'adressent également Dr Ibrahima SAKHO, Enseignant Chercheur à l'Université Assane SECK de Ziguinchor, qui, en tant qu'Encadreur de mémoire, s'est toujours montré à l'écoute et très disponible tout au long de la réalisation de ce mémoire, ainsi pour l'inspiration, l'aide et le temps qu'il a bien voulu me consacrer et sans qui ce mémoire n'aurait jamais vu le jour.*

*Je tiens à remercier Dr Bamol Ali SOW, Maître de conférence au département physique à l'université Assane SECK de Ziguinchor d'avoir accepté de présider le jury de mon mémoire malgré ses multiples charges. Je voudrais encore une fois lui témoigner ma profonde gratitude.*

*Je voudrais également adresser mes remerciements à Dr Ababacar NDIAYE, maître-assistant au département de physique à l'Université Assane SECK de Ziguinchor d'avoir accepté de faire partie de ce jury, d'en être son rapporteur, mais aussi pour vos conseils et vos support. Je suis pleine d'admiration pour vos profondes connaissances et votre sympathie.*

*Je voudrais également adresser mes remerciements à Dr Samo DIATTA, maître-assistant au département de physique à l'Université Assane SECK de Ziguinchor d'avoir accepté de faire partie de ce jury.*

*Je voudrais également adresser mes remerciements à Dr Modou TINE, assistant au département de physique à l'Université Assane SECK de Ziguinchor d'avoir accepté de faire partie de ce jury.*

*J'en profite aussi pour remercier l'ensemble des étudiants du département de physique de leur présence à mes présentations préliminaires pour leurs conseils, leurs critiques et leurs suggestions.*

*Je remercie aussi l'ensemble des enseignants qui ont participé à ma formation de licence 1 au master 2.*

## Tableaux

<b>Tableau 0.</b> Parités de quelques séries de Rydberg des systèmes atomiques à deux électrons.....	15
<b>Tableau I.</b> Valeurs des constantes d'écran obtenues en utilisant les équations (3.10), (3.11) et (3.12). Les énergies de résonance $E_n$ - ALS pour la série $(^1D_2)nd$ et $(^1S_0)nd$ sont toutes calibrées à $\pm 0.010$ eV et les énergies limites à $\pm 0.050$ .....	33
<b>Tableau II.</b> Energies de résonances $E_n$ de la série de Rydberg $4s^2 4p^2(^1D_2)nd$ observée dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental $4s^2 4p^3 P_{3/2}^0$ de $Se^+$ .....	36
<b>Tableau III.</b> Défaut quantique $\delta$ de la série de Rydberg $4s^2 4p^2(^1D_2)nd$ observée dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental $4s^2 4p^3 P_{3/2}^0$ de $Se^+$ .....	37
<b>Tableau IV.</b> Energies de résonances $E_n$ de la série de Rydberg $4s^2 4p^2(^1S_0)nd$ observée dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental $4s^2 4p^3 P_{3/2}^0$ de $Se^+$ .....	38
<b>Tableau V.</b> Défaut quantique $\delta$ de la série de Rydberg $4s^2 4p^2(^1S_0)nd$ observée dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental $4s^2 4p^3 P_{3/2}^0$ de $Se^+$ .....	39
<b>Tableau VI.</b> Energies de résonances $E_n$ de la série de Rydberg $4s^2 4p^2(^1S_0)nd$ observée dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental $4s^2 4p^3 P_{1/2}^0$ de $Se^+$ .....	40
<b>Tableau VII.</b> Défaut quantique $\delta$ de la série de Rydberg $4s^2 4p^2(^1S_0)nd$ observée dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental $4s^2 4p^3 P_{1/2}^0$ de $Se^+$ .....	41
<b>Tableau VIII.</b> Energies de résonances $E_n$ de la série de Rydberg $4s^2 4p^2(^1D_2)nd$ observée dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental $4s^2 4p^3 D_{3/2}^0$ de $Se^+$ .....	42
<b>Tableau IX.</b> Défaut quantique $\delta$ de la série de Rydberg $4s^2 4p^2(^1D_2)nd$ observée dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental $4s^2 4p^3 D_{3/2}^0$ de $Se^+$ .....	43
<b>Tableau X.</b> Energies de résonances $E_n$ de la série de Rydberg $4s^2 4p^2(^1D_2)nd$ observée dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental $4s^2 4p^3 D_{5/2}^0$ de $Se^+$ .....	44
<b>Tableau XI.</b> Défaut quantique $\delta$ de la série de Rydberg $4s^2 4p^2(^1D_2)nd$ observée dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental $4s^2 4p^3 D_{5/2}^0$ de $Se^+$ .....	45

## Figures

<b>Figure 1.</b> Variation typique de la section efficace de photoionisation en fonction de l'énergie du photon.....	10
<b>Figure 2.</b> Processus de photoionisation directe (PID) et résonante (PIR).....	11
<b>Figure 3.</b> Variation de la section efficace de photoionisation avec l'écart relatif $\varepsilon$ pour trois valeurs de l'index de profil $q=0,1$ et $2$ .....	13
<b>Figure 4.</b> Représentation des principales techniques utilisées pour étudier l'interaction entre un rayonnement X-UV et des ions.....	18
<b>Figure 5.</b> Processus de diffusion de photons incidents par une particule cible (atome ou ion).....	21
<b>Figure 6.</b> Variation de la section efficace de photoionisation en fonction de l'énergie des photons utilisés (Simon et al., 2010).....	24
<b>Figure 7.</b> Courbes de comparaison de nos résultats sur le calcul des énergies de résonances $E_n$ de la série de Rydberg $4s^2 4p^2 ({}^1D_2) nd$ observée dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental $4s^2 4p^3 {}^1P_{3/2}^0$ de $Se^+$ .....	46
<b>Figure 8.</b> Courbes de comparaison de nos résultats sur le calcul des énergies de résonances $E_n$ de la série de Rydberg $4s^2 4p^2 ({}^1S_0) nd$ observée dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental $4s^2 4p^3 {}^1P_{3/2}^0$ de $Se^+$ .....	47
<b>Figure 9.</b> Courbes de comparaison de nos résultats sur le calcul des énergies de résonance $E_n$ de la série de Rydberg $4s^2 4p^2 ({}^1S_0) nd$ observée dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental $4s^2 4p^3 {}^1P_{1/2}^0$ de $Se^+$ .....	48
<b>Figure 10.</b> Courbes de comparaison de nos résultats sur le calcul des énergies de résonances $E_n$ de la série de Rydberg $4s^2 4p^2 ({}^1D_2) nd$ observée dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental $4s^2 4p^3 {}^2D_{3/2}^0$ de $Se^+$ .....	49
<b>Figure 11.</b> Courbes de comparaison de nos résultats sur le calcul des énergies de résonances $E_n$ de la série de Rydberg $4s^2 4p^2 ({}^1D_2) nd$ observée dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental $4s^2 4p^3 {}^2D_{5/2}^0$ de $Se^+$ .....	50

## Liste de quelques acronymes

**ALS** : Advanced Light Sources

**DARC** : Dirac Atomic R-matrix code

**LPP** : Laser Produced Plasma

**MCDF** : Multi-Configuration Dirac-Fock

**PID** : Photoionisation directe

**PIR** : Photoionisation résonante

**RLDI** : Resonant Laser Driven Ionization

**SCUNC** : screening constant by unit nuclear charge

**TMOA** : Théorie Modifiée des Orbitales Atomiques

## Table des matières

<b>Introduction générale</b> .....	<b>7</b>
<b>Chapitre 1: Différents processus de photoionisation, Séries de Rydberg</b> .....	<b>9</b>
1.1 Processus de photoionisation .....	10
1.2 Série de Rydberg .....	14
<b>Chapitre 2: Méthodes expérimentales et théoriques de photoionisation résonante</b> .....	<b>16</b>
2.1 Méthodes expérimentales .....	17
2.2 Méthodes théoriques .....	20
2.3 Section efficace de photoionisation .....	20
2.4 Analyse des énergies de résonance : formule standard du défaut quantique.....	24
<b>Chapitre 3: Application de la théorie modifiée des orbitales atomiques à la photoionisation de l'ion <math>\text{Se}^{2+}</math></b> .....	<b>26</b>
3.1 Brève description de la théorie modifiée des orbitales atomiques.....	27
3.1.1 Théorie des orbitales atomiques de Slater .....	27
3.1.2 Expression générale des énergies de résonance.....	28
3.1.3 Principe de détermination des constantes d'écran .....	29
3.1.4 Principe de détermination des erreurs absolues .....	30
3.2 Énergies de résonance des séries de Rydberg $4s4p^2 np$ et $4s^2 4p nd$ de l'ion $\text{Se}^{2+}$ .....	31
3.2.1 Expressions des énergies .....	31
3.2.2 Valeurs des constantes d'écran .....	32
3.3 Résultats et discussion.....	34
<b>Conclusion et perspectives</b> .....	<b>51</b>
<b>Bibliographie</b> .....	<b>52</b>
<b>Annexe</b> .....	<b>54</b>

## *Introduction générale*

L'univers est peuplé de milliards d'étoiles, mais celles-ci ne vivent pas seules : elles sont regroupées en galaxies, elles même regroupées en amas puis en super-amas. L'univers apparaît ainsi comme un ensemble hyper structuré, dans lequel les éléments qui le composent interagissent sans cesse et que la majeure partie de la matière visible dans l'univers est sous forme de plasmas. Ces plasmas constitutifs entre en interaction entre eux et avec des photons. Il est très important d'avoir une connaissance sur le processus d'interaction ion-photon car il revêt un caractère déterminant dans la compréhension des observations astrophysiques (opacité des étoiles, la composition chimique etc..) et des plasmas de laboratoire. La plupart de ces observations astrophysiques sont véhiculées par les photons. Certains de ces photons sont suffisamment énergétiques pour induire la photoionisation. Les caractéristiques générales de la photoionisation des atomes et des ions dans leur état fondamental sont bien connus grâce à de nombreuses études expérimentales et théoriques (Manson 1977, Starace 1982). Ces études ne seront motivés qu'au début des années 2000 avec le lancement des satellites comme Chandra et XMM Newton pour l'observation des plasmas astrophysiques (Lewin, 2005; Muller et al., 2004) dans le domaine des rayons X. Du point de vue expérimental, des expériences verront le jour dans plusieurs centres, utilisant le rayonnement synchrotron (*rayonnement électromagnétique émis par des particules chargées notamment électrons en mouvement accélérés*), citons ASTRID au Danemark, ALS (Advanced Light Source) aux Etats-Unis, Photon Factory et Spring au Japon. Les mesures quantitatives des paramètres de résonance de photoionisation des ions légers fournissent des données précises et utiles pour le développement de modèles théoriques d'interactions à électrons multiples (Covington *et al.*, 2011). 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. Les méthodes théoriques ou *ab initio* utilisant la section efficace dont la détermination permet le calcul des énergies et largeurs naturelles de résonance on recourt à des approches, parmi lesquelles on peut citer l'approche multi-configurationnelle de type Dirac-Fock – Dirac-Fock multi-configurationnel – MCDF (Bruneau, 1984 ; Simon *et al.*, 2010), la théorie du défaut quantique – Quantum Defect Theory (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, et tant d'autres méthodes théoriques. Ces approches sont basées sur des codes de calculs complexes : code Bruneau pour la MCDF, le GRAP2K code pour MCDHF et Dirac-Atomic-R-matrix pour l'approche R-matrix.

Bien que conduisant à des résultats précis, les méthodes expérimentales et théoriques utilisant la section efficace ne permettent pas d'avoir des énergies de résonances au-delà de  $n=30$ , du fait du recouvrement des pics des sections efficaces de photoionisation pour des valeurs élevées de  $n$  (Sakho, 2007). Ainsi deux méthodes semi empirique ont vues le jour basées sur la détermination des paramètres physiques tels que la constante d'écran, le défaut quantique et la charge nucléaire. A l'état actuel des connaissances il existe que deux méthodes semi empirique que sont la méthode CEUNC (Constant d'Ecran par Unité de Charge Nucléaire) présenté par Sakho dans sa Thèse de doctorat de 3<sup>e</sup> cycle en 2007 et sa Thèse d'état en 2013 à l'Université Cheikh Anta DIOP de Dakar et la TMOA (Théorie Modifiée des Orbitales Atomiques) présenté aussi par Sakho dans Journal of Atomic and Molecular Sciences, 2010, vol.1, pp 103-117. Ces deux méthodes ont des avantages car elles nous permettent un calcul direct des énergies de résonance sans avoir recours à des codes de calcul mais aussi d'avoir des valeurs des énergies de résonances pour des valeurs de  $n$  très élevés. Du fait de leur facilité d'utilisation, nous avons eu comme objectif dans ce travail d'appliquer la méthode de la théorie modifiée des orbitales atomiques pour calculer les énergies de résonances pour les séries de Rydberg  $4s^2 4p^2(^1D_2)$  et  $4s^2 4p^2(^1S_0)$  dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental  $4s^2 4p^3(^2P_{1/2,3/2}^0)$  et  $4s^2 4p^3(^2D_{3/2,5/2}^0)$  de l'ion  $\text{Se}^+$ . Il faut noter que le sélénium fait partie des éléments dont les ions ont un intérêt majeur au plan astrophysique, il a été détecté dans le spectre des étoiles et des nébuleuses astrophysiques. La composition chimique de ces objets illumine les détails de la nucléosynthèse stellaire et l'évolution chimique des galaxies. Les premières mesures expérimentales de la photoionisation sur l'ion sélénium  $\text{Se}^+$  ont été réalisées par Estives et al. (2011) grâce au rayonnement synchrotron. Les mesures ont été faites avec une résolution 5,5 MeV, l'énergie des photons variant de 17,75 à 21,85 eV, effectuées relativement à l'état fondamental  $4s^2 4p^3$  de l'ion  $\text{Se}^+$ . Ce présent travail est structuré de la manière suivante. Dans le chapitre 1, nous étudierons les différents processus de photoionisation et les séries de Rydberg. Dans la section suivante nous rappellerons les différentes méthodes expérimentales et théoriques. Le chapitre 3 sera l'objet de la présentation du formalisme de la théorie modifiée des orbitales atomiques et de l'application. Dans cette partie nous présenterons nos résultats et les comparés avec les autres méthodes à savoir le formalisme SCUNC, ALS et le R-matrix. Et nous terminerons avec la conclusion et les perspectives.

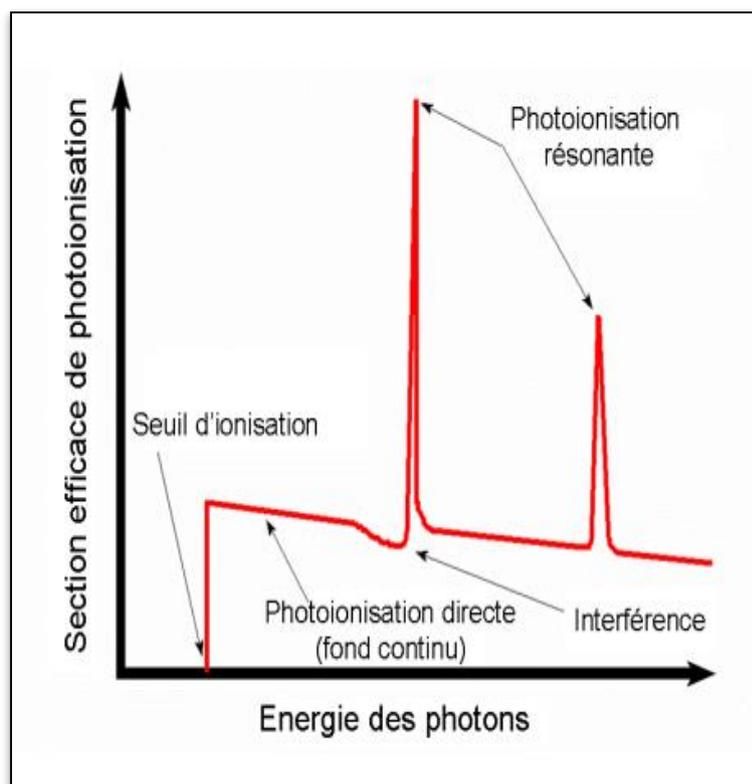
# **Chapitre 1**

***Les processus de photoionisation,  
séries de Rydberg***

### 1.1 : les processus de photoionisation

La photoionisation est le processus physique dans lequel un ion est formé à partir de l'interaction d'un photon avec un atome ou une molécule. Tous les photons qui rencontrent un atome ou un ion ne le photoionisent pas. La probabilité de photoionisation est liée à la section efficace de photoionisation, qui dépend de l'énergie du photon et de la cible considérée. Pour les énergies de photons inférieures au seuil d'ionisation la section de photoionisation est proche de zéro. Mais avec le développement de lasers pulsés, il est devenu possible de créer une lumière extrêmement intense et cohérente où l'ionisation multi photons peut se produire. Généralement les processus de photoionisation sont aux nombres de trois (3) à savoir la photoionisation directe (PID), la photoionisation résonante (PIR) et la photoionisation multiple déterminée par les phénomènes de « shake off » et la désexcitation d'Auger.

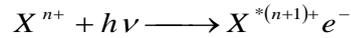
La photoionisation directe et résonante peut être distinguée en étudiant la section efficace de photoionisation en fonction de l'énergie d'absorption, comme l'indique la fig.1.



**fig.1: variation typique de la section efficace de photoionisation en fonction de l'énergie du photon** (Nouha, 2010).

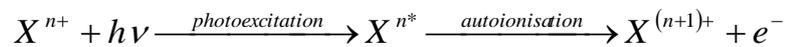
La photoionisation directe est responsable du fond continu, en général lentement décroissant, observé sur le spectre de la fig.1. Elle correspond à la transition directe d'un des électrons de

l'ion vers un état du continuum. C'est un processus à seuil, qui n'est possible que si l'énergie du photon  $h\nu$  est supérieure à l'énergie de liaison de l'électron ( $e^-$ ) dans l'ion  $X^{n+}$ .

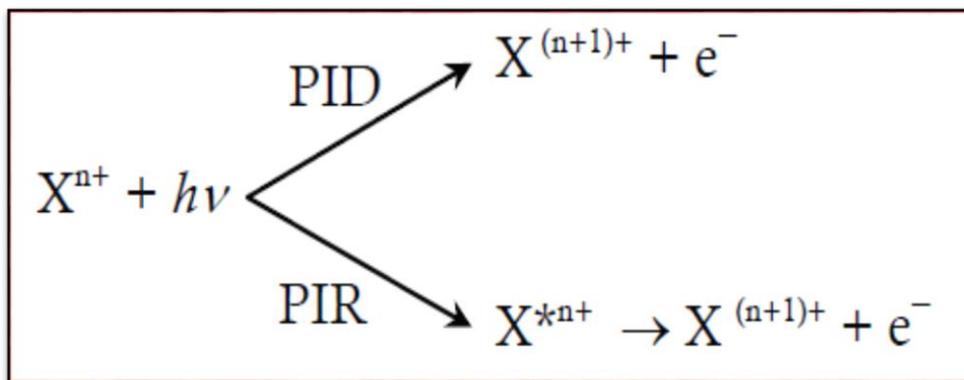


Par contre, la photoionisation résonante est responsable des raies observées (caractérisées par les pics de la section efficace) dans le spectre de la figure 1. C'est un processus évoluant en deux étapes : une photoexcitation suivi d'une autoionisation.

Le phénomène de photoexcitation correspond à l'absorption du photon par l'ion pouvant provoquer le transfert d'un ou plusieurs électrons de l'ion  $X^{n+}$  vers ses orbitales liées vacantes, laissant l'ion dans un état excité  $X^{*n+}$ . Cette absorption n'est possible que si l'énergie du photon est supérieure au premier seuil d'ionisation. La photoexcitation est observée 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'ion est laissé dans un état très excité avec souvent, une lacune (un trou) en couche interne. Dans le cas où le mode privilégié de désexcitation est l'autoionisation, un électron externe vient combler le trou et l'énergie libérée sert à émettre un électron vers le continuum de l'ion résiduel  $X^{(n+)+}$ . Le processus de photoionisation résonante peut alors être traduit formellement par le schéma :



Ces deux processus peuvent être illustrés par le schéma suivant :



**Fig.2. Processus de photoionisation directe (PID) et résonante (PIR).** (Sakho, 2013).

On remarque bien que les processus photoionisation directe et résonante ont les mêmes états initial et final (fig.2). Par conséquent, ils peuvent interférer et produire des raies de formes asymétriques appelées profils de Fano (Fano, 1961) comme l'indique la figure 3. Ces formes

asymétriques sont caractérisées par l'index de profil  $q$  qui est un paramètre intervenant dans la description des états autoionisants. Nous rappelons brièvement ce à quoi renvoie ce concept. Si  $E$  désigne l'énergie du spectre continu,  $E_{res}$  l'énergie de la résonance autoionisante et  $\Gamma^{total}$  la largeur naturelle, l'écart relatif  $\varepsilon$  par rapport à la résonance est défini par la relation :

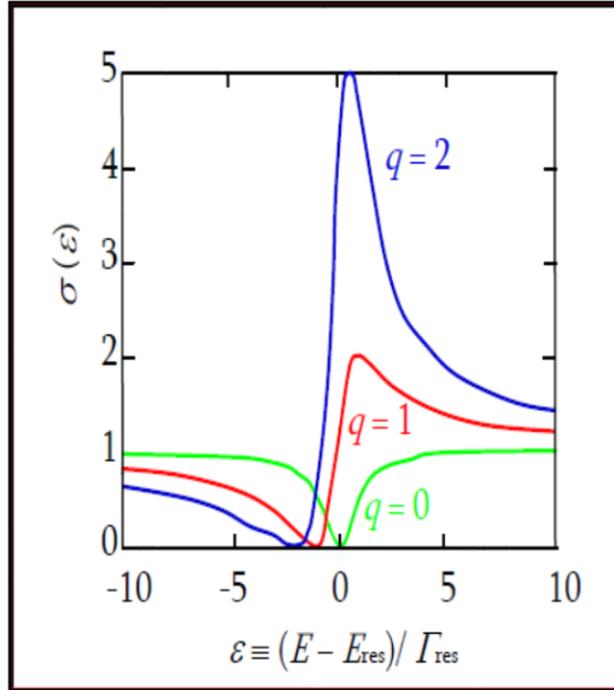
$$\varepsilon = \frac{E - E_{res}}{\frac{1}{2}\Gamma^{total}} \quad (1.1)$$

La section efficace de photoabsorption au voisinage de la résonance est alors définie par la formule de Fano:

$$\sigma = \sigma_b + \sigma_a \frac{(q + \varepsilon)^2}{\varepsilon^2 + 1} \quad (1.2)$$

- ✓  $\sigma_a$  et  $\sigma_b$  sont respectivement les parties de la section efficace de Photoabsorption  $\sigma$  incluant et n'incluant pas les effets de l'interférence de la résonance avec le spectre continu;
- ✓  $q$  est l'index de profil qui caractérise la forme des raies de résonance.

La figure 3 montre différents profils de raies pour trois valeurs de  $q$  d'après l'équation (1.2). La résonance se produit lorsque  $\varepsilon=0$  ; ce qui correspond à  $E = E_{res}$ . On distingue sur cette figure différents « coudes » dus aux effets d'interférences entre les états du continuum et les états discrets. Dans la pratique la mesure de la section efficace permet de déterminer les énergies et les largeurs naturelles des états doublement excités des systèmes atomiques étudiés.



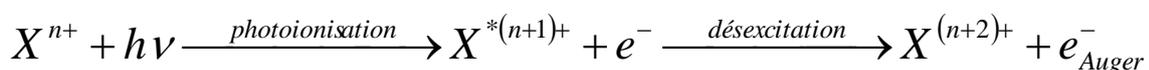
**Fig.3. Variation de la section efficace de photoionisation avec l'écart relatif  $\varepsilon$  pour trois valeurs de l'index de profil  $q=0,1$  et  $2$ .** (Sakho, 2013)

En plus des processus de photoionisation directe et résonante, on distingue la photoionisation dite multiple qui peut être directe ou résonante. La photoionisation multiple se manifeste à travers le processus du « Shake off » ou la 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. Dans le cas de l'émission de deux électrons, ce processus peut être traduit par l'équation :



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 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. L'énergie excédentaire sert alors à envoyer dans le continuum de l'ion  $X^{(n+2)+}$  un second électron appelé « électron Auger ». L'effet Auger peut être traduit par l'équation :



## 1.2 Séries de Rydberg

Défini par le physicien suédois Johannes Robert Rydberg (1854-1919) en 1888, les atomes ou ions de Rydberg se forment 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  $n$ . Dans ces atomes, l'électron est porté sur une orbite très excitée, il est donc très loin du noyau et du cœur formé par les autres électrons. 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  $Z^*$ . La taille de ces atomes est gigantesque, elle peut-être des centaines ou des milliers de fois plus grande que pour un atome ordinaire c'est-à-dire atteindre des dimensions biologiques (celles des virus). Ce sont des ions qui ont capturé un électron et l'électron en retombant d'un niveau de Rydberg au niveau voisin émet des transitions dans le domaine des ondes millimétriques et micro-ondes. Ces atomes furent d'abord observés en radioastronomie à l'aide d'antennes. On observe des raies dans les transitions des atomes d'hydrogène, d'hélium ou de carbone. Ce sont des ions qui ont capturé un électron et l'électron en retombant d'un niveau de Rydberg au niveau voisin émet des transitions dans le domaine des ondes millimétriques et micro-ondes. Ces observations renseignent les radioastronomes sur la densité dans l'espace interstellaire de ces constituants d'atomes primordiaux, en particulier dans la constellation d'Orion. 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.

Dans le cas général, les états autoionisants (configurations doublement excitées), des systèmes atomiques à deux électrons (systèmes héliumoïdes) sont désignés sous le label,  $(Nl, nl)^{2s+1} L^\pi$  (Herrick et Sinanoglu, 1975). Dans cette notation,  $N$  et  $n$  représentent respectivement les nombres quantiques principaux de l'électron interne et de l'électron externe :  $n = N, N + 1, N + 2, \dots$ ;  $l$  et  $l'$  représentent respectivement leurs nombres quantiques orbitaux;  $s$  désigne le spin total ;  $L$  caractérise l'état quantique considéré (S, P, D, F.....) et  $\pi$  la parité du système. Par exemple, pour  $N=2$  (on parle alors de seuil d'excitation  $N=2$ ) et  $n = 3$ , on peut avoir les configurations doublement existées (2s3s), (3s3p), (2p3d), etc. L'ensemble des états autoionisants convergeant vers le même seuil d'excitation, donne toute une série de configurations appelées états ou série de Rydberg. De façon générale, à chaque seuil d'excitation, correspond un nombre infini de configurations. Par exemple, pour le seuil

d'excitation  $N=4$  (avec  $n \geq 4$ ), on obtient sept séries de Rydberg représentées par les configurations  $4snp$ ,  $4pns$ ,  $4pnd$ ,  $4dnp$ ,  $4dnf$ ,  $4fnd$  et  $4fng$  (Herrick et Sinanoglu, 1975). Les seuils d'excitations  $4s$ ,  $4p$ ,  $4d$  et  $4f$  caractérisés par la même valeur du nombre quantique principal  $N$  correspondent respectivement aux valeurs possibles 0, 1, 2 et 3 du nombre quantique orbital  $l$ . Notons que la configuration  $4gnf$  est impossible puisque pour l'état  $g$ ,  $N=5$  et  $l=4$ . Ce qui donnerait par exemple les configurations  $5fng$  et  $5gnf$  (Sakho, 2013).

La parité du système ou de l'état quantique donnée la relation simple  $\pi = (-1)^l$  joue un rôle important dans les processus d'interaction matière-rayonnement plus précisément dans les règles régissant les transitions dipolaires, quadripolaires, ..., appelées règles de sélection. Pour les états autoionisants, le système possède plusieurs particules (électrons dans le cas des systèmes atomiques). Avec une très bonne approximation, la fonction d'onde globale peut être écrite sous la forme de produits des fonctions d'onde individuelles de chaque particule. On représente alors la réflexion du système comme une succession de réflexions de chacune de ces particules l'une après l'autre. Si le système possède un moment angulaire total  $L = \sum_i l_i$  bien déterminé, alors on en déduit que le système a une parité paire «even en anglais» (ou impaire, odd en anglais), si  $L$  est pair (ou impaire). La parité s'écrit donc  $\pi = (-1)^L$ . Dans le tableau 0, nous avons regroupé quelques-uns de ces états, et il est facile de constater que la parité n'est pas uniforme contrairement aux états symétriques de double excitation qui sont tous de parité paire «e» (Sakho, 2013).

**Tableau 0** : Parités de quelques séries de Rydberg des systèmes atomiques à deux électrons (SAKHO, 2013)

valeur de $l$	0	0	1	1	2
valeur de $l'$	0	1	1	2	2
état quantique	S	P	D	F	G
valeur de $L = l + l'$	0	1	2	3	4
Parité $\pi = (-1)^L$	even	Odd	Even	Odd	Even
terme spectroscopique	$S^e$	$P^o$	$D^e$	$F^o$	$G^e$
état excité $(Nl, n'l')^{2s+1} L^\pi$	$(Nsns)^{1,3} S^e$	$(Nsnp)^{1,3} P^o$	$(Npnp)^{1,3} D^e$	$(Npnd)^{1,3} F^o$	$(Ndnd)^{1,3} G^e$

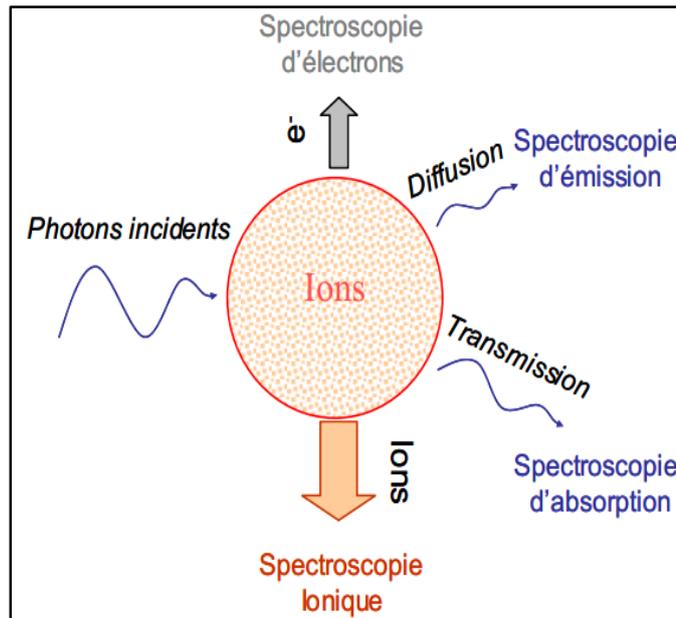
# *Chapitre 2:*

*Méthodes expérimentales et  
théoriques de photoionisation  
résonante*

## 2.1 Méthodes expérimentales

Les progrès dans la technologie des lasers et dans les techniques des jets atomiques ont conduit récemment à un développement considérable des expériences mettant en jeu des atomes excités. En particulier l'utilisation de lasers à colorant permet de préparer sélectivement les atomes dans des niveaux excités. Parmi ces nouvelles expériences, certaines ont pour but l'étude de la photoionisation à partir des états excités et d'autres sont destinées à comprendre des mécanismes plus compliqués, comme par exemple ceux d'ionisation collisionnelle d'atomes très excités. Les expériences du premier type permettent de mesurer des sections efficaces de photoionisation. Notons aussi le développement récent de mesures de sections efficaces de photoionisation obtenues par utilisation simultanée d'un rayonnement synchrotron et d'une excitation laser (Koch 1982, Wuilleumiel' 1982) (Nouha, 2010). Les premières expériences de photoabsorption utilisant le rayonnement synchrotron ont été réalisées par Madden et Codling (1963) puis par Dhez et Ederer (1973) et par Kosmann et al., (1988) pour la détermination des paramètres de résonance (notamment les énergies d'excitation) des états autoionisants de l'atome d'hélium. Mais les études expérimentales avaient des déficits ou manquement liées à la difficulté de confiner des ions de charge bien définie à des densités suffisamment élevées, pendant des temps assez longs et dans un volume restreint. Dans ces conditions, la majorité des paramètres caractérisant les mécanismes d'interaction photon-ion ne sont connus, surtout en ce qui concerne la photoabsorption en couche interne, qu'à travers des calculs théoriques plus ou moins sophistiqués ne prenant en compte que très partiellement les effets de corrélation électronique. On comprend alors mieux tout l'intérêt que revêt l'étude expérimentale de ces processus pour tester la validité des différents modèles développés. Compte tenu des limitations expérimentales mentionnées ci-dessus, la plupart des méthodes développées à ce jour font appel à des lasers de puissance pulsés mais différent par la manière dont les espèces ioniques sont produites. Avec la technique connue sous le sigle RLDI (Resonant Laser Driven Ionization), la matière ionisée est créée par l'interaction d'un faisceau laser avec une colonne de vapeur métallique contenue dans un four. Le milieu est alors essentiellement composé d'espèces monochargées (Lucatorto, et al. 1976). Des ions doublement chargés ont été également produits grâce à l'utilisation d'un deuxième laser pulsé décalé temporellement par rapport au premier (Lucatorto, et al. 1981). Malheureusement, cette méthode ne permet pas d'atteindre des états de charges très élevés. De plus, le fait que le matériau soit initialement présent sous forme de vapeur limite le nombre d'éléments qui peuvent être étudiés. Aujourd'hui cette technique n'est quasiment plus utilisée ; elle est

remplacée par celle connue sous le sigle LPP (Laser Produced Plasma). Avec la technique LPP, la matière ionisée est créée par la focalisation, sous vide, d'un faisceau laser sur une cible solide. Toutes les méthodes expérimentales utilisées avaient le seul but la mesure de la section efficace. En guise d'exemple nous allons prendre l'exemple l'étude expérimentale des processus de photoionisation des ions utilisant les quatre (4) sources à savoir la spectrométrie d'absorption, la spectrométrie ionique, la spectrométrie d'électron, la spectroscopie de fluorescence. Une illustration est donnée par la figure 4.



**Fig.4 : Représentation des principales techniques utilisées pour étudier l'interaction entre un rayonnement X-UV et des ions.** (Champeaux, 2003)

- La spectrométrie d'absorption analyse le rayonnement transmis par les atomes ou ions cibles, en fonction de l'énergie du rayonnement incident. Elle permet de mesurer des sections efficaces de photoabsorption.
- La spectrométrie ionique consiste à détecter les ions ayant changé de charge, c'est-à-dire ceux ayant perdu au moins un électron pendant l'interaction avec le rayonnement incident. Cette technique spectroscopique permet de mesurer des sections efficaces totales de photoionisation simple et multiple.
- La spectrométrie d'électron permet de détecter le nombre, l'énergie et la distribution angulaire des photo-électrons qui sont émis lors des processus de photoionisation. Elle donne donc accès aux mesures de sections efficaces partielles de photoionisation, ainsi qu'aux paramètres d'asymétrie angulaire.

- Enfin, la spectroscopie de fluorescence consiste à étudier les propriétés spectrales du rayonnement émis par les ions cibles après leur interaction avec le rayonnement incident. Cette technique permet d'obtenir des informations sur les voies de désexcitation radiative.

Pour l'étude des processus de photoionisation dans des espèces ioniques, ce sont les spectroscopies d'absorption, électronique et ionique qui ont été utilisées :

Dans le cas de la spectroscopie d'absorption, les ions cibles et la source de rayonnement incident peuvent être produits par décharge ou par laser. Ces techniques sont limitées à la mesure globale de sections efficaces de photoabsorption de milieux (plasmas) où coexistent de nombreux états de charge pouvant occuper un grand nombre d'états d'énergie, suivant les conditions thermodynamiques du milieu considéré. Dans ces conditions, la mesure de données atomiques détaillées s'avère très délicat et ne peut être réalisée précisément que dans le cas de plasmas d'ions légers peu ionisés.

La spectroscopie d'électron a été très peu utilisée pour l'étude des processus de photoionisation dans les ions. Ce sont des expériences faisceau/faisceau où les ions sont produits dans des sources à décharge et où les photons proviennent du rayonnement synchrotron. Cette technique d'analyse est limitée à ce jour à l'étude des ions monochargés, du fait de la faible transmission des analyseurs (spectromètres, analyseur à miroir cylindrique CMA) qui sont utilisés.

En définitive, c'est la spectrométrie ionique offre une grande sensibilité de détection, et permet de mesurer des sections efficaces absolues de photoionisation. Comme pour la spectroscopie d'électron, il s'agit d'expériences où un faisceau d'ions et un faisceau de photons interagissent. Les premières expériences de ce type ont été réalisées par Lyon et al.,. La source d'ions utilisée était une source à décharge où à ionisation de surface, et la source de photons provenait du rayonnement synchrotron émis par un aimant de courbure du centre de rayonnement synchrotron de Daresbury. Cette expérience a fourni des sections efficaces de photoionisation dans les ions monochargées. Des expériences similaires ont par la suite vu le jour parallèlement au développement des onduleurs. Citons par exemple l'expérience menée sur l'onduleur de l'anneau de stockage de la « Photon Factory », l'expérience menée à ASTRID de l'Université d'Aarhus au Danemark ou encore celle menée aux Etats Unis à l'Advanced Light Source du Lawrence Berkley National Laboratory.

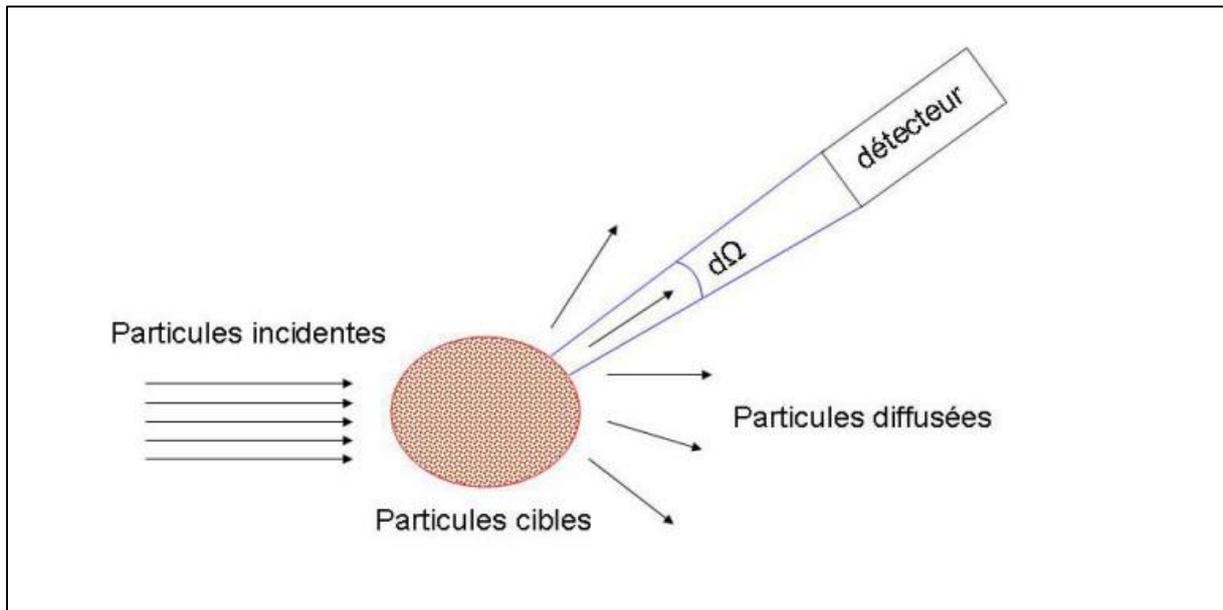
## **2.2 Méthodes théoriques**

Avant l'an 2000, les paramètres de la photoionisation pour les ions multichargés (énergies d'excitation, sections efficaces de photoionisation et recombinaison radiative, forces d'oscillateur des transitions...) étaient essentiellement connus grâce à des travaux théoriques, développés en particulier pour la modélisation des plasmas astrophysiques. Les premiers travaux ont reposé sur des modèles à électrons indépendants, dans lesquels l'effet des corrélations électroniques est considéré de façon globale par l'introduction d'un potentiel central d'écrantage de l'attraction nucléaire. Ces modèles ne peuvent décrire que le processus de photoionisation directe [Reilman et Manson, 1979 ; Verner et Yakovlev, 1995]. Des modèles plus élaborés, permettant également de décrire les processus de photoionisation résonante, ont été développés par la suite. Parmi eux, les approches de type multi-configuration Dirac-Fock (MCDF) [Bruneau, 1984] qui calculent séparément les sections efficaces de photoexcitation et de photoionisation directe, négligeant de ce fait le terme d'interférence entre ces deux voies. La méthode de la R-matrice, qui permet de décrire l'effet d'interférence, a été également intensément utilisé, en particulier par des collaborations internationales telles que l'Opacity Project [Seaton, 1987 ; Cunto et al. 1993] ou l'Iron Project [Hummer et al. 1993], mises en place pour la détermination de l'opacité des plasmas astrophysiques. Toutes ces méthodes étaient basées sur des codes de calcul comme le code Bruneau pour la MCDF, le GRAP2K code pour MCDHF et Dirac-Atomic-R-matrix pour l'approche R-matrix, ils avaient aussi recourt à des codes spécifiques de calcul via un programme informatique fastidieux (Sakho, 2013). Ces méthodes ne permettaient pas d'avoir des valeurs des énergies de résonances au-delà de  $n=30$  du fait des recouvrements des pics des sections efficaces.

L'expression de la section efficace dépend de la méthode mise en œuvre comme on le verra sur quelques exemples au paragraphe suivant.

## **2.3 Section efficace de photoionisation**

La notion de section efficace intervient dans les processus de diffusion d'un flux de particules incidentes par une particule cible. Dans cas particulier des processus de photoionisation, les particules incidentes sont des photons et la particule cible un système atomique que nous notons



**Fig.5. Processus de diffusion de photons incidents par une particule cible (atome ou ion)**  
(Sakho, 2013).

En désignant par  $j$  le flux des particules incidentes et par  $N_i$  le nombre de ces particules par unité de volume dans le faisceau incident et  $v$  leur vitesse par rapport à la cible X, il vient (Nouha, 2015)

$$j = N_i v \quad (2.1)$$

En négligeant les interactions mutuelles entre les particules incidentes, le nombre  $dN_d$  de particules diffusées par la cible par unité de temps dans l'angle solide  $d\Omega$  s'écrit :

$$dN_d = j \sum(\Omega) d\Omega \quad (2.2)$$

Dans cette expression,  $\sum(\Omega)$  est une grandeur caractéristique de l'interaction particule incidente – cible X. 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 dans certains cas comme celui de la diffraction dans les cristaux, la cible est constitué d'un grand nombre  $N_c$  de diffuseurs atomiques et les distances mutuelles de ces diffuseurs sont suffisamment grandes 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 (Nouha, 2010). Dans le cas des milieux dilués, les diffusions

multiples de particules incidentes sont négligeables de sorte que l'équation (2.2) peut se mettre sous la forme (Sakho, 2013):

$$dN_c = jN_c \sigma(\Omega) d\Omega \quad (2.3)$$

Avec  $\sigma(\Omega)$  la section efficace différentielle de diffusion de la particule par la cible dans la direction  $\Omega$ . En intégrant sur l'angle  $\Omega$ , on obtient le nombre total  $N_{tot}$  de particules diffusées par unité de temps :

$$N_{tot} = jN_c \int \sigma(\Omega) d\Omega \quad (2.4)$$

Par définition, on appelle section efficace totale de diffusion la grandeur notée  $\sigma_{tot}$  et donnée par la relation :

$$\sigma_{tot} = \int \sigma(\Omega) d\Omega \quad (2.5)$$

La section efficace totale de diffusion s'exprime en barn ( $1 \text{ barn} = 10^{-24} \text{ cm}^2$ ).

Comme nous l'avons souligné en haut l'expression de la section efficace dépend de la méthode expérimentale ou théorique utilisé.

Par exemple dans les travaux expérimentaux d'Hassan (2010) réalisés à SOLEIL, la section efficace de photoionisation est exprimée comme suit :

$$\sigma = S \times \frac{qe^2 \langle \nu \rangle \eta \delta x \delta y}{IJ\Omega \int_0^L \frac{dz}{F(z)}} \quad (2.6)$$

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  $\eta$  ;
- ❖  $V$  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 profileurs, et  $F(z)$  est le facteur de forme.

Tous les paramètres intervenant dans l'expression (2.6) sont mesurés en valeur absolue pendant l'enregistrement des spectres (Nouha, 2010). Du point de vue théorique, on peut citer les travaux de Simon et al., (2010) qui ont utilisé un rayonnement synchrotron et une approche relativiste de la méthode MCDF 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 :

$$\sigma_{i \rightarrow d \rightarrow f} = S_{i \rightarrow d \rightarrow f} \times \frac{\Gamma_d / 2\pi}{(\hbar\omega + E_i - E_d)^2 + \frac{\Gamma_d^2}{4}} \quad (2.7)$$

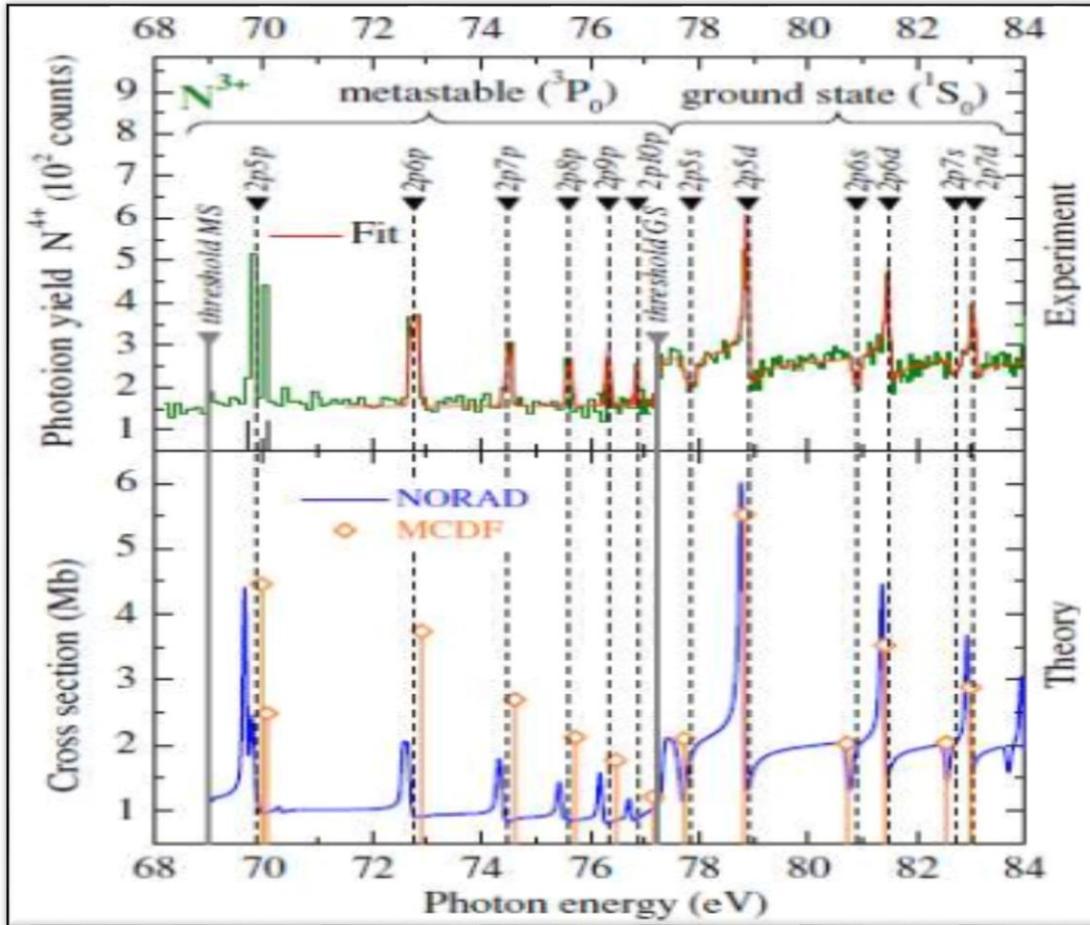
Dans cette expression :

- ❖  $S_{i \rightarrow d \rightarrow f}$  désigne la force de résonance ;
- ❖ L'indice  $i$  repère l'état initial de l'ion considéré ;
- ❖  $d$  repère l'état autoionisant obtenu à l'issue 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.

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:

$$S_{i \rightarrow d \rightarrow f} = \frac{2\pi^2 c^2 \hbar^4}{(\hbar\omega)^2} \times \frac{A_{i \rightarrow d}^{re} A_{d \rightarrow f}^a}{\Gamma_d} \quad (2.8)$$

La figure (6) ci-après montre la variation de la section efficace de photoionisation en fonction de l'énergie des photons du rayonnement synchrotron utilisé. Le spectre de photoionisation correspond à celui de l'ion  $N^{3+}$ , les énergies de résonance étant déterminées par rapport à l'état fondamental  $1s^2 2s^2 \ ^1S_0$  et par rapport à l'état métastable  $1s^2 2s 2p \ ^3P_0$  de  $N^{3+}$ . L'énergie du photon varie entre 68 eV et 84 eV. La section efficace de photoionisation expérimentale est comparée aux sections efficaces de photoionisation théoriques obtenues en utilisant l'approche MCDF (Simon et al., 2010) et des données fournies par l'équipe Nahar Ohio State University Radiative Atomic Database (NORAD) [Nahar et Pradhan., 1997 ; Nahar, 2009].



**Fig.6.Variation de la section efficace de photoionisation en fonction de l'énergie des photons utilisés** (Sakho, 2013).

L'exploitation du spectre des pics des sections efficaces de photoionisation expérimentale et théorique permet de déterminer les énergies de résonance des différents séries de Rydberg  $2pnp$ ,  $2pns$  et  $2pnd$  de l'ion  $N^{3+}$  observées et convergeant toutes vers le seuil d'excitation  $2p$  de l'ion résiduel  $N^{4+}$ .

#### **2.4 Analyse des énergies de résonance : formule standard du défaut quantique**

L'analyse des énergies de résonance est généralement faite en utilisant l'expression standard du développement du défaut quantique (Bizau et al., 2011) :

$$E_n = E_\infty - \frac{R \times Z_{core}^2}{(n - \delta)^2} \quad (2.9)$$

- ❖  $E_n$  : énergie de résonance en eV ;
- ❖  $n$  : nombre quantique principal ;

- ❖  $R$  : le Rydberg;  $R = 1 \text{ Ryd} = 13.60569 \text{ eV}$ ;
- ❖  $E_\infty$  : énergie limite en eV de la série de Rydberg ;
- ❖  $Z_{core}$  : charge en unité de charge élémentaire  $e$  de l'ion résiduel (obtenu après autoionisation) ;
- ❖  $\mathcal{D}$  : défaut quantique.

Du point de vue physique, le défaut quantique note  $\mathcal{D}$  caractérise la pénétration de l'électron excité dans le cœur d'un atome de Rydberg. Par conséquent, le défaut quantique est une estimation de l'écart énergétique entre la valeur exacte  $E_n$  de l'énergie de résonance et celle obtenue à partir des prédictions du modèle des systèmes hydrogénoïdes. Ainsi, le défaut quantique est donné par l'expression suivant obtenu par la déduction de l'équation (2.9) (Sakho, 2013).

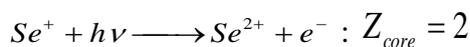
$$\delta = n - Z_{core} \sqrt{\frac{R}{(E_\infty - E_n)}} \quad (2.10)$$

Le  $Z_{core}$  est directement déterminé par la charge électrique en unité de charge élémentaire  $e$  de l'ion résiduel obtenu à l'issue du processus de photoionisation résonante. Par exemple, le processus d'autoionisation à partir de l'ion initial  $X^{n+}$  s'écrit:



Ce qui donne  $Z_{core} = (n+1)$ .

Exemple :



Pour l'analyse, des résultats à partir de l'expression (2.10), on impose au défaut quantique d'être constant ou de décroître légèrement et de façon monotone lorsque le nombre quantique principal  $n$  augmente. Dans ce cas, les valeurs de l'énergie de résonance mesurées ou calculées sont jugés acceptables. En aucun cas, le défaut quantique ne saurait croître avec l'accroissement du nombre quantique  $n$ . Ceci est justifié par le fait lorsque  $n \rightarrow \infty$ , on obtient un système hydrogénoïde de charge électrique  $Z_{core}$  pour lequel le défaut quantique est nul.

# **Chapitre 3:**

***Application de la théorie modifiée  
des orbitales atomiques à la  
photoionisation de l'ion  $Se^{2+}$***

### 3.1 : Brève description de la théorie modifiée des orbitales atomiques

La théorie modifiée des orbitales atomiques (TMOA) est obtenue par une modification de la théorie des orbitales de Slater.

#### 3.1.1 : La théorie des orbitales atomiques de Slater

En 1930, Slater a proposé une méthode de calcul approchée de l'énergie et du rayon ionique des systèmes contenant plusieurs électrons par la détermination du nombre de charges effectif  $Z^*$ .

$$Z^* = Z - \sum_j \sigma_{ij} = Z - \sigma_i$$

Où  $\sigma_{ij}$  désigne le coefficient d'écran de l'électron  $j$  sur l'électron  $i$  et le  $\sigma_i$  représente le coefficient d'écran par rapport à l'électron  $i$ .

La théorie des orbitales atomiques de Slater utilise des fonctions spéciales d'onde hydrogénoïde de type.

$$\Psi_{nlm} = N_n = \left( \frac{r}{a_0} \right)^{n^*-1} \exp\left( -\zeta \frac{r}{a_0} \right) Y_{lm}(\Theta, \varphi), \quad (3.1)$$

Où  $N_n = (2\zeta)^{n+1/2} [(2n)!]^{-1/2}$  est le facteur de normalisation,  $\zeta = \frac{Z - \sigma_i}{n^*}$  désigne l'orbitale exposante,  $n^*$  conçoit le nombre quantique effectif lié au nombre quantique principal  $n$  par une règle empirique établie par Slater,  $Y(\Theta, \varphi)$  sont les harmoniques sphériques.

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

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \hat{V}(r). \quad (3.2)$$

Dans cette équation, l'opérateur d'énergie potentielle est sous la forme.

$$\hat{V}(r) = -e^2 \frac{(Z - \sigma_i)}{r} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{n^*(n^*-1)}{r^2}. \quad (3.3)$$

La résolution de l'équation de Schrödinger (3.2) en utilisant la fonction d'onde de Slater (3.1) donne la valeur propre suivante.

$$E = -\frac{me^4 (z - \sigma_i)^2}{2\hbar^2 (n^*)^2}. \quad (3.4)$$

En Rydberg, ce résultat peut être écrit comme suit.

$$E = -\frac{(z - \sigma_i)^2}{(n^*)^2}. \quad (3.5)$$

La théorie des orbitales de Slater est valable que pour l'état fondamental, elle ne tient pas compte des états excités et dans les galaxies, les nébuleuses etc... la photoionisation est orientée vers ces états.

Ainsi en 2010, Sakho propose une modification de la théorie des orbitales atomiques de Slater en remplaçant dans les équations des fonctions d'ondes de Slater donnée par l'équation (3.1) et dans l'équation d'opérateur d'énergie potentielle donnée par l'équation (3.3), le nombre quantique effectif  $n^*$  par le nombre quantique principal  $n$  et en considérant les orbitales séparées notée ici  $\nu\ell$ . Cette modification a été appliquée pour la première fois pour les états excités et doublement excités.

### **3.1.2 Expression générale des énergies de résonance**

Dans le cadre de la théorie modifiée des orbitales atomiques (TMOA), l'énergie totale d'un orbital donné est exprimée sous la forme (SAKHO, 2010b).

$$E(\nu\ell) = -\frac{[Z - \sigma(\ell)]^2}{\nu^2} \quad (3.7)$$

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

$$E = -\sum_i^M \frac{[Z - \sigma_i(\ell)]^2}{\nu_i^2} \quad (3.8)$$

Par rapport à la notation spectroscopique habituelle  $(N\ell, n\ell')^{2s+1} L^\pi$ , cette équation devient :

$$E = -\sum_i^M \frac{[Z - \sigma_i(^{2s+1} L^\pi)]^2}{\nu_i^2} \quad (3.9)$$

Dans la photoionisation des atomes et des ions, les énergies de résonance sont généralement mesurées par rapport à l'énergie limite à l'infini notée  $E_\infty$  des séries Rydberg  $(^{2s+1} L_j)nl$ . Pour ces états, l'expression générale des énergies de résonances  $E_n$  est donnée par:

$$E_n = E_\infty - \frac{1}{n^2} \left\{ Z - \sigma_1(^{2s+1} L_j) - \sigma_2(^{2s+1} L_j) \times \frac{1}{n} - \sigma_2^\alpha(^{2s+1} L_j) \times (n-m) \times (n-q) \sum_k \frac{1}{f_k(n, m, q, s)} \right\}^2 \quad (3.10)$$

Dans cette équation,  $m$  et  $q$  ( $m < q$ ) désignent les nombres quantiques principaux de  $(^{2s+1} L_j)nl$  séries Rydberg considéré du système atomique utilisé pour la détermination empirique des

constantes d'écran  $\sigma_i(2s+1L_j)$ ,  $s$  représente le spin du  $nl$ -électron ( $s = 1/2$ ),  $E_\infty$  est la valeur de l'énergie limite de la série déterminée à partir de la base atomique NIST,  $E_n$  représente l'énergies de résonance correspondante et  $Z$  représente la charge nucléaire de l'élément considéré. Le seul problème que l'on peut rencontrer en utilisant le formalisme 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. (3.10) pour donner des données précises avec des valeurs de défauts quantiques constants le long de toutes les séries considérées. La valeur de  $\alpha$  est généralement fixée à 1 et ou 2 pendant l'itération. L'expansion de défaut quantique standard est donnée comme suit (SAKHO, 2013) :

$$E_n = E_\infty - \frac{R \times Z_{core}^2}{(n - \delta)^2} \quad (3.11)$$

Dans les équations  $R, E_\infty, Z_{core}$  et  $\delta$  sont la constante de Rydberg, la limite convergente, la charge électrique de l'ion cœur et le défaut quantique, respectivement.

### **3.1.3 Principe de détermination des constantes d'écran**

Les constantes d'écran  $\sigma_i$  dans les expressions générales (3.4) étant déduites des valeurs expérimentales, les paramètres  $\sigma_i$  sont alors déterminés empiriquement avec une certaine erreur absolue liée aux erreurs de mesures expérimentales. Nous déclinons dans ce qui suit le principe de détermination des erreurs absolues  $\Delta\sigma_i$  et  $\Delta E$  respectivement sur les constantes d'écran  $\sigma_i$  et sur les valeurs semi empiriques des paramètres de résonance (énergies et largeurs naturelles).

Dans le cadre de la méthode de la théorie modifiée des orbitales atomiques (TMOA), la constante d'écran  $\sigma_i$  est déterminée avec une erreur absolue  $\Delta\sigma_i$ . On écrit alors les constantes d'écran comme suit  $\sigma_i = \sigma_{i\text{exp}} \pm \Delta\sigma_i$ . Les erreurs absolues  $\Delta\sigma_i$  sont déterminées par l'expression

$$\Delta\sigma_i = \sqrt{\frac{(\sigma_i - \sigma_i^+)^2 + (\sigma_i - \sigma_i^-)^2}{2}} \quad (3.12)$$

Si l'énergie de résonance  $E_n = E_{\text{exp}} \pm \Delta E$ , on calcule les constantes d'écran  $\sigma_i$  comme suit :

$$\begin{cases} E_n^+ = E_{\text{exp}} + \Delta E \Rightarrow \sigma_i^+ \\ E_n^- = E_{\text{exp}} - \Delta E \Rightarrow \sigma_i^- \end{cases} \quad (3.13)$$

En utilisant les valeurs des énergies de résonance pour  $n = m$  et  $n = q$  des séries de Rydberg considérés pour déterminer les  $\sigma_i$ , il vient :

$$\begin{cases} E_m = E_{\text{exp}} \\ E_q = E_{\text{exp}} \end{cases} \Rightarrow \sigma_1 \text{ et } \sigma_2, \begin{cases} E_m^+ = E_{\text{exp}} + \Delta E \\ E_q^+ = E_{\text{exp}} + \Delta E \end{cases} \Rightarrow \sigma_1^+ \text{ et } \sigma_2^+, \begin{cases} E_m^- = E_{\text{exp}} - \Delta E \\ E_q^- = E_{\text{exp}} - \Delta E \end{cases} \Rightarrow \sigma_1^- \text{ et } \sigma_2^-$$

Une fois les constantes d'écrans trouvés on peut remplacer leurs expressions dans l'équation (3.4) pour pouvoir calculer les énergies de résonances des séries de Rydberg pour différents valeurs de  $n$ .

### 3.1.4 Principe de détermination des erreurs absolues

Quant aux paramètres de résonance  $X$  (énergie et largeurs naturelles) mais dans notre cas d'études nous intéressons aux énergies de résonances, les erreurs absolues sont estimées à partir de l'expression :

$$\Delta E = \frac{|E_n(\sigma_1, \sigma_2) - E_n(\sigma_1^+, \sigma_2^+)| + |E_n(\sigma_1, \sigma_2) - E_n(\sigma_1^-, \sigma_2^-)|}{2} \quad (3.14)$$

Avec

$$\begin{cases} E_n(\sigma_1, \sigma_2) = E_\infty - \frac{Z^2}{n^2} \left( 1 - \frac{\sigma_1}{Z} - \frac{\sigma_2}{n \times Z} \right)^2 \\ E_n(\sigma_1^+, \sigma_2^+) = E_\infty - \frac{Z^2}{n^2} \left( 1 - \frac{\sigma_1^+}{Z} - \frac{\sigma_2^+}{n \times Z} \right)^2 \\ E_n(\sigma_1^-, \sigma_2^-) = E_\infty - \frac{Z^2}{n^2} \left( 1 - \frac{\sigma_1^-}{Z} - \frac{\sigma_2^-}{n \times Z} \right)^2 \end{cases} \quad (3.15)$$

Ainsi les erreurs absolues sont obtenues en utilisant les équations (3.7) et (3.9). Elles permettent la fiabilité des résultats et de savoir si les résultats sont proches de la valeur expérimentale

## 3.2 Énergies de résonance des séries de Rydberg $4s4p^2 np$ et $4s^2 4p nd$ de l'ion $Se^{2+}$

### 3.2.1 Expressions des énergies

La comparaison du spectre de  $O^+$  et  $Se^+$  montre que ces ions ont respectivement, une configuration  $2P^3$  et  $4P^3$  dans leur couche extérieure donnant lieu à la même désignation de terme pour l'état fondamental  $^4S_{3/2}^0$  et les états métastables  $^2P_{1/2,3/2}^0$  et  $^2D_{3/2,5/2}^0$ . Dans le cas du  $Se^+$ , la région si le spectre gouvernant la gamme d'énergie du seuil  $^2P_{1/2,3/2}^0$  à l'état fondamental  $^4S_{3/2}^0$  indique des résonances fortes dues aux transitions  $4p \rightarrow nd$  (les transitions  $4p \rightarrow ns$  sont trop faibles pour être observées). A des énergies inférieures à 21,2 eV, les expériences et la théorie montrent des caractéristiques de résonance de Rydberg proéminentes résultant de la photoionisation des états métastables initiaux de l'ion  $Se^+$ . Pour l'état métastable initiale  $^2P_{1/2,3/2}^0$ , les deux séries  $4s^2 4p^2(^1D_2)nd$  et  $4s^2 4p^2(^1S_0)nd$  des séries de Rydberg convergeant respectivement vers les seuils  $4s^2 4p^2 D_2$  et  $4s^2 4p^2 S_0$ . Les ions résiduels de  $Se^+$  ont été observés avec des séries Rydberg supplémentaires associées à l'état métastable  $^2D_{3/2,5/2}^0$  (Sakho, 2013).

En utilisant l'équation (3.4), les énergies de résonances des séries de Rydberg  $4s4p^2 np$  et  $4s^2 4p nd$  de l'ion  $Se^{2+}$  sont données par les expressions suivantes (en Rydberg).

❖ Pour les transitions  $^2P_j^0 \rightarrow (^1D_2)ns, nd$  (pour  $j=3/2$  et  $1/2$ ) :

$$E_n = E_\infty - \frac{1}{n^2} \left\{ Z - \sigma_1(^2P_j^0, ^1D_2) - \sigma_2(^2P_j^0, ^1D_2) \times \frac{1}{n} - \sigma_2(^2P_j^0, ^1D_2)(n-m)(n-q) \right. \\ \left. \left[ \frac{1}{(n+q-m+s+1)^3} + \frac{1}{(n+q-m+s+2)^4} + \frac{1}{(n+q-m+s+3)^5} \right] \right\}^2 \quad (3.16)$$

❖ Pour les transitions  $^2P_j^0 \rightarrow (^1S_0)ns, nd$  (pour  $j=3/2$  et  $1/2$ )

$$E_n = E_\infty - \frac{1}{n^2} \left\{ Z - \sigma_1(^2P_j^0, ^1S_0) - \sigma_2(^2P_j^0, ^1S_0) \times \frac{1}{n} - \sigma_2(^2P_j^0, ^1S_0)(n-m)(n-q)^2 \right. \\ \left. \left[ \frac{1}{(n+q+s)^4} + \frac{1}{(n+q-m+s+2)^4} + \frac{1}{(n+m-q-s-1)^5} \right] \right\}^2 \quad (3.17)$$

❖ Pour les transitions  ${}^2P_{3/2}^0 \rightarrow ({}^3P_2)np$

$$E_n = E_\infty - \frac{1}{n^2} \left\{ Z - \sigma_1 ({}^2P_{3/2}^0, {}^1P_2) - \sigma_2 ({}^2P_{3/2}^0, {}^1P_2) \times \frac{1}{n} - \sigma_2 ({}^2P_{3/2}^0, {}^1P_2) (n-m)(n-q)^2 \right. \\ \left. \left[ \frac{1}{(n+q-m+s)^4} + \frac{1}{(n+q-m+s-1)^4} + \frac{1}{(n+m-q-s)^5} \right] \right\}^2 \quad (3.18)$$

Dans ces expressions  $m$  et  $q$  sont les valeurs du nombre quantique principal  $n$  des états  $4s4p^2np$  et  $4s^24p$  nd de l'ion  $\text{Se}^{2+}$ . Les constantes d'écran  $\sigma_i$  sont déterminées à partir des valeurs expérimentales (la détermination sera détaillée en dessous).

Les calculs d'énergies de résonances sur les états  $4s4p^2np$  et  $4s^24p$  nd de l'ion  $\text{Se}^{2+}$  qui est l'objet de notre études seront présenter sur en dessous (tableaux suivantes).

### 3.2.2 Valeurs des constantes d'écran

Pour évaluer les constantes d'écran  $\sigma_i$  dans les équations (3.16), (3.17) et (3.18), nous utilisons les données expérimentales ALS d'Esteves et de ces collaborateurs (2011). Les positions énergétiques expérimentales de la série de Rydberg utilisées et les résultats obtenus à partir des équations (3.16), (3.17) et (3.18) pour les paramètres  $\sigma_i$  ainsi que leurs incertitudes seront indiqués dans le tableau 1.

Considérons l'équation (3.16).

$$E_n = E_\infty - \frac{1}{n^2} \left\{ Z - \sigma_1 ({}^2P_j^0, {}^1D_2) - \sigma_2 ({}^2P_j^0, {}^1D_2) \times \frac{1}{n} - \sigma_2 ({}^2P_j^0, {}^1D_2) (n-m)(n-q) \right. \\ \left. \left[ \frac{1}{(n+q-m+s+1)^3} + \frac{1}{(n+q-m+s+2)^4} + \frac{1}{(n+q-m+s+3)^5} \right] \right\}^2$$

En posant  $n=m$  et  $n=q$  l'équation se réduit à

$$E_n = E_\infty - \frac{Z^2}{n^2} \left\{ 1 - \frac{\sigma_1}{Z} - \frac{\sigma_2}{n \times Z} \right\}^2 .$$

Avec  $E_n = E_{\text{exp}} \pm \Delta E$

Les paramètres des constantes d'écran sont ensuite exprimés avec les chiffres corrects comme suit (pour le détail des calculs, voit page annexe):

$$\sigma_1 = 32.022 \pm 0.127 \quad ; \quad \sigma_2 = -0.495 \pm 0.617$$

Les différentes valeurs constantes d'écran des séries de Rydberg  $4s4p^2np$  et  $4s^24pnd$  de l'ion  $\text{Se}^{2+}$  que nous avons calculé avec la méthode TMOA sont donnés dans le tableau 1.

**Tableau 1.** Valeurs des constantes d'écran obtenues en utilisant les équations (3.16), (3.17) et (3.18). Les énergies de résonance  $E_n$ - ALS pour la série  $(^1D_2)nd$  et  $(^1S_0)nd$  sont toutes calibrées à  $\pm 0.010$ eV et les énergies limites à  $\pm 0.050$ .

transitions	niveaux	$m$	$q$	$E_n$	$E_\infty$	$\sigma_1$	$\sigma_2$
$^2P_{3/2}^0 \rightarrow ^1D_2nd$	$(^1D_2)6d$	6	-	$18.249 \pm 0.010$	$19.853 \pm 0.050$	$32.022 \pm 0.092$	$-0.495 \pm 0.398$
	$(^1D_2)7d$	-	7	$18.688 \pm 0.010$			
$^2P_{3/2}^0 \rightarrow ^1S_0nd$	$(^1D_2)5d$	5	-	$19.320 \pm 0.010$	$21.703 \pm 0.050$	$32.013 \pm 0.065$	$-0.530 \pm 0.238$
	$(^1D_2)6d$	-	6	$20.076 \pm 0.010$			
$^2P_{1/2}^0 \rightarrow ^1S_0nd$	$(^1S_0)5d$	5	-	$19.468 \pm 0.010$	$21.805 \pm 0.050$	$32.004 \pm 0.065$	$-0.382 \pm 0.238$
	$(^1S_0)6d$	-	6	$20.202 \pm 0.010$			
$^2D_{3/2}^0 \rightarrow ^1D_2nd$	$(^1D_2)6d$	6	-	$19.572 \pm 0.010$	$21.176 \pm 0.050$	$32.010 \pm 0.091$	$-0.421 \pm 0.396$
	$(^1D_2)7d$	-	7	$20.009 \pm 0.010$			
$^2D_{5/2}^0 \rightarrow ^1D_2nd$	$(^1D_2)6d$	6	-	$19.501 \pm 0.010$	$21.100 \pm 0.050$	$32.003 \pm 0.091$	$-0.360 \pm 0.396$
	$(^1D_2)7d$	-	7	$19.935 \pm 0.010$			

### 3.3 Résultats et discussion

L'utilisation des équations (3.10), (3.11) et (3.12), nous ont permis de calculer les énergies de résonances et le défaut quantiques des séries de Rydberg  $4s4p^2np$  et  $4s^24pnd$  de l'ion  $Se^{2+}$ .

L'analyse des valeurs des énergies calculées est faite sur la base de l'expression standard du défaut quantique (3.5) suivante :

$$E_n = E_\infty - \frac{R \times Z_{core}^2}{(n - \delta)^2}$$

Les résultats obtenus dans le présent travail sont énumérés dans **les tableaux II - XI** et comparés aux calculs théoriques de la R-matrix et la procédure semi-empirique SCUNC (Screening Constant by Unit Nuclear Charge), aux données expérimentales de l'ALS (Advanced Light Source) de Esteves et al., (2011).

Dans **les tableaux II et III**, nous comparons nos résultats actuels sur le calcul des énergies de résonances  $E_n$  et du défaut quantique  $\delta$  de la série de Rydberg  $4s^24p^2(^1D_2)nd$  observée dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental  $4s^24p^3P_{3/2}^0$  de  $Se^+$  aux données expérimentales ALS, au calcul de R-matrix et aux résultats obtenue par la méthode SCUNC.

Sur le **tableau II**, la comparaison indique un très bon accord de nos résultats avec les résultats théoriques, mais aussi de très bons résultats sont notés avec celle de la mesure ALS avec un écart énergétique maximale par rapport à ALS qui est de 0.016 eV. Concernant le défaut quantique dans le **tableau III**, on constate un très bon accord de nos résultats avec celui des résultats SCUNC, R-matrix et ALS avec un défaut quantique presque constant tout au long de la série, on peut s'attendre à ce que nos résultats pour  $n > 15$  soient précis. Le signe négatif observé dans les mesures d'ALS est dû aux erreurs de mesure expérimentales.

Dans **les tableaux IV et V**, nous présenterons nos résultats actuels sur le calcul des énergies de résonances  $E_n$  et le défaut quantique  $\delta$  de la série de Rydberg  $4s^24p^2(^1S_0)nd$  observée dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental  $4s^24p^3P_{3/2}^0$  de  $Se^+$ .

Dans le **tableau IV**, on constate un très bon accord de nos résultats avec les résultats expérimentaux (ALS) et théoriques (SCUNC et R-matrix) jusqu'à  $n=13$ . L'écart énergétique maximal par rapport aux données expérimentales ALS est de 0.027 eV qui est supérieur à 0.01 eV, ceci peut être expliqué par le fait de la difficulté de détermination du facteur correctif.

Dans le **tableau V**, le défaut quantique est aussi pratiquement constant tout au long de la série pour  $n$  élevé, on peut s'attendre donc à des résultats précis pour  $n > 13$ .

**Les tableaux VI et VII**, indiquent les résultats sur le calcul des énergies de résonances  $E_n$  et le défaut quantique  $\delta$  de la série de Rydberg  $4s^24p^2(^1S_0)nd$  observée dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental  $4s^24p^3P_{1/2}^0$  de  $Se^+$ .

Dans le **tableau VI**, la comparaison montre un très bon accord de nos résultats avec ceux de la méthode SCUNC, R-matrix mais aussi avec ALS. L'écart énergétique maximal par rapport aux données expérimentales étant égal à 0.01 eV justifie le très bon accord de nos résultats. Concernant le défaut quantique listé dans le **tableau VII**, nous constatons qu'il est aussi constant tout au long de la série, et aussi un très bon accord de résultat est noté. On peut s'attendre à des résultats précis au-delà de  $n>12$ .

Les **tableaux VIII et IX**, nous présenterons nos résultats actuels sur le calcul des énergies de résonances  $E_n$  et le défaut quantique  $\delta$  de la série de Rydberg  $4s^2 4p^2(^1D_2)nd$  observée dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental  $4s^2 4p^3^2D_{3/2}^0$  de  $Se^+$ .

Cependant l'analyse de nos résultats consignés dans le **tableau VIII**, montre de très bon accord de nos résultats avec la théorie et les résultats théoriques et expérimentaux. Ces très bons résultats par rapport ALS est justifiés par le fait que l'erreur absolue maximale est inférieure à 0.01 eV. Dans le **tableau IX**, le défaut quantique est pratiquement constant tout au long de la séries (jusqu'à  $n=30$ ) et nous notons un très bon accord de nos résultats avec les résultats SCUNC et R-matrix et ALS.

Enfin les **tableaux X et XI**, nous comparons nos résultats sur le calcul des énergies de résonances  $E_n$  et le défaut quantique  $\delta$  de la série de Rydberg  $4s^2 4p^2(^1D_2)nd$  observée dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental  $4s^2 4p^3^2D_{5/2}^0$  de  $Se^+$ .

Dans le **tableau X** nous constatons que nos résultats sont en très bon accord avec ceux des autres résultats avec un écart énergétique inférieur à 0.01 eV. Ce qui permet de dire que nos résultats sont précis pour  $n > 23$ .

Nous notons aussi dans le **tableau XI**, un très bon accord de nos résultats avec les autres données telles que la méthode SCUNC, R-matrix mais aussi avec ALS. Nous constatons aussi que le défaut quantique est constant, justifiant la bonne précision de nos résultats.

Comme nous l'avons souligné en haut, les méthodes ab initio et expérimentales utilisant la mesure de la section efficace ne permettent pas d'avoir des valeurs des énergies de résonance pour des valeurs de  $n$  très élevé comme par exemple dans le tableau II, la R-matrix c'est arrêté à  $n=12$  et ALS à  $n=15$ , alors que nos résultats sont allés jusqu'à  $n=30$ . Ceci justifie l'efficacité de la théorie modifiée des orbitales atomiques.

Ces très bons résultats peuvent être observés en étudiant les figures suivantes traduisant la variation des énergies de résonance en fonction du nombre quantique principal.

Sur la **figure 7** nous avons tracés les courbes de comparaison de nos résultats sur le calcul des énergies de résonances  $E_n$  de la série de Rydberg  $4s^2 4p^2(^1D_2)nd$  observée dans le spectre de photoionisation de l'état fondamental  $4s^2 4p^3^1P_{3/2}^0$ . L'étude de cette figure montre une superposition des deux courbes qui traduit le très bon accord de nos résultats avec celle d'ALS.

Sur la **figure 8** nous avons tracés les courbes de comparaison de nos résultats sur le calcul des énergies de résonances  $E_n$  de la série de Rydberg  $4s^2 4p^2(^1S_0)nd$  observée dans le spectre de photoionisation de l'état fondamental  $4s^2 4p^3^1P_{3/2}^0$ . Nous notons aussi une superposition des deux courbes justifiant le bon accord de nos résultats. Nous notons aussi la légère divergence des écarts énergétique peuvent être vue ici.

Sur la **figure 9** nous avons tracés les courbes de comparaison de nos résultats sur le calcul des énergies de résonances  $E_n$  de la série de Rydberg  $4s^2 4p^2(^1S_0)nd$  observée dans le spectre de photoionisation de l'état fondamental  $4s^2 4p^3^1P_{1/2}^0$ . Ici aussi une superposition des deux courbes est notée traduisant le très bon accord de nos résultats avec celle d'ALS.

Sur la **figure 10** nous avons tracés les courbes de comparaison de nos résultats sur le calcul des énergies de résonances  $E_n$  de la série de Rydberg  $4s^2 4p^2(^1D_2)nd$  observée dans le spectre de photoionisation de l'état fondamental  $4s^2 4p^3^1D_{3/2}^0$ . Même ici on note une superposition des deux courbes qui traduise le très bon accord de nos résultats.

**Tableau II** : énergies de résonances  $E_n$  de la série de Rydberg  $4s^2 4p^2 ({}^1D_2) nd$  observée dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental  $4s^2 4p^3 {}^1P_{3/2}^0$  de  $\text{Se}^+$ . Les résultats actuels (MAOT) sont comparés aux données expérimentales [ALS], aux calculs théoriques [R-matrix] et à la méthode semi-empirique (SCUNC).

$n$	Théorie			Expérience	
	TMOA $E(\text{eV})$	SCUNC $E(\text{eV})$	R-matrix $E(\text{eV})$	ALS	
				$E_{exp}$	* $ \Delta E $
6	18,248	18,250	18,256	18,249	0,001
7	18,688	18,688	18,684	18,688	0,000
8	18,965	18,967	18,957	18,970	0,005
9	19,153	19,156	19,149	19,158	0,005
10	19,288	19,290	19,280	19,294	0,006
11	19,387	19,390	19,379	19,392	0,005
12	19,462	19,465	19,455	19,469	0,007
13	19,521	19,523		19,537	0,016
14	19,567	19,569		19,581	0,014
15	19,605	19,606		19,616	0,011
16	19,635	19,636			
17	19,660	19,661			
18	19,681	19,682			
19	19,699	19,700			
20	19,715	19,715			
21	19,728	19,728			
22	19,739	19,739			
23	19,749	19,749			
24	19,757	19,757			
25	19,765	19,765			
26	19,772	19,772			
27	19,778	19,777			
28	19,783	19,783			
29	19,788	19,788			
30	19,792	19,792			

$$|\Delta E| = |E(\text{TMOA}) - E_{exp}|$$

- TMOA : Théorie modifiée des orbitales atomiques, présent travail
- SCUNC : Screening Constant by Unit Nuclear charge (Sakho, 2012)
- R-matrix : Esteves et al (2011)
- ALS : Advanced Light Source, Esteves et al (2011)

**Tableau III** : Défaut quantique  $\delta$  de la série de Rydberg  $4s^2 4p^2 ({}^1D_2) nd$  observée dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental  $4s^2 4p^3 {}^1P_{3/2}^0$  de  $\text{Se}^+$ .

$n$	Théorie			Expérience
	TMOA $\delta$	SCUNC $\delta$	R-matrix $\delta$	*ALS $\delta$
6	0,176	0,174	0,14	0,175
7	0,166	0,164	0,15	0,165
8	0,173	0,164	0,16	0,150
9	0,181	0,164	0,14	0,150
10	0,189	0,164	0,16	0,130
11	0,194	0,164	0,15	0,130
12	0,197	0,163	0,14	0,100
13	0,199	0,163		-0,125
14	0,199	0,162		-0,150
15	0,197	0,162		-0,150
16	0,195	0,161		
17	0,191	0,161		
18	0,187	0,160		
19	0,182	0,160		
20	0,176	0,159		
21	0,170	0,159		
22	0,164	0,158		
23	0,157	0,158		
24	0,150	0,158		
25	0,142	0,157		
26	0,134	0,157		
27	0,126	0,156		
28	0,118	0,156		
29	0,109	0,156		
30	0,101	0,155		

- TMOA : Théorie modifiée des orbitales atomiques, présent travail
- SCUNC : Screening Constant by Unit Nuclear charge (Sakho, 2012)
- R-matrix : Esteves et al (2011)
- ALS : Advanced Light Source, Esteves et al (2011)

**Tableau IV** : Energies de résonances  $E_n$  de la série de Rydberg  $4s^2 4p^2 ({}^1S_0) nd$  observée dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental  $4s^2 4p^3 {}^1P_{3/2}^0$  de  $\text{Se}^+$ . Les résultats actuels (MAOT) sont comparés aux données expérimentales [ALS], aux calculs théoriques [R-matrix] et à la méthode semi-empirique (SCUNC).

$n$	Théorie			Expérience	
	TMOA $E(eV)$	SCUNC $E(eV)$	R-matrix $E(eV)$	ALS	
				$E_{exp}$	$ \Delta E $
5	19,319	19,320	19,350	19,320	0,001
6	20,075	20,076	20,118	20,076	0,001
7	20,513	20,521	20,556	20,530	0,017
8	20,795	20,806	20,851	20,816	0,021
9	20,988	20,999	21,044	21,009	0,021
10	21,126	21,135	21,181	21,149	0,023
11	21,228	21,236	21,283	21,255	0,027
12	21,305	21,311	21,359	21,325	0,020
13	21,365	21,370		21,383	0,018
14	21,412	21,417			
15	21,451	21,454			
16	21,482	21,485			
17	21,507	21,510			
18	21,529	21,531			
19	21,547	21,549			
20	21,563	21,564			
21	21,576	21,577			
22	21,587	21,588			
23	21,597	21,598			
24	21,606	21,607			
25	21,614	21,614			
26	21,621	21,621			
27	21,627	21,627			
28	21,632	21,632			
29	21,637	21,637			
30	21,641	21,642			

---

$|\Delta E| = |E(\text{TMOA}) - E_{exp}|$

- TMOA : Théorie modifiée des orbitales atomiques, présent travail
- SCUNC : Screening Constant by Unit Nuclear charge (Sakho, 2012)
- R-matrix : Esteves et al (2011)
- ALS : Advanced Light Source, Esteves et al (2011)

**Tableau V** : Défaut quantique  $\delta$  de la série de Rydberg  $4s^2 4p^2 ({}^1S_0) nd$  observée dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental  $4s^2 4p^3 {}^1P_{3/2}^0$  de  $\text{Se}^+$

$n$	Théorie			Expérience
	TMOA $\delta$	SCUNC $\delta$	R-matrix $\delta$	*ALS $\delta$
5	0,222	0,221	0,24	0,221
6	0,218	0,216	0,23	0,217
7	0,238	0,231	0,22	0,188
8	0,259	0,211	0,22	0,165
9	0,276	0,211	0,22	0,145
10	0,289	0,210	0,22	0,088
11	0,299	0,210	0,22	-0,025
12	0,306	0,211	0,22	0
13	0,312	0,212		-0,050
14	0,315	0,212		
15	0,318	0,213		
16	0,319	0,215		
17	0,319	0,216		
18	0,319	0,217		
19	0,317	0,219		
20	0,316	0,220		
21	0,314	0,222		
22	0,311	0,223		
23	0,308	0,225		
24	0,305	0,227		
25	0,301	0,228		
26	0,298	0,230		
27	0,294	0,232		
28	0,290	0,233		
29	0,285	0,235		
30	0,281	0,237		

- TMOA : Théorie modifiée des orbitales atomiques, présent travail
- SCUNC : Screening Constant by Unit Nuclear charge (Sakho, 2012)
- R-matrix : Esteves et al (2011)
- ALS : Advanced Light Source, Esteves et al (2011)

**Tableau VI :** Energies de résonances  $E_n$  de la série de Rydberg  $4s^2 4p^2 ({}^1S_0)nd$  observée dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental  $4s^2 4p^3 {}^1P_{1/2}^0$  de  $\text{Se}^+$ . Les résultats actuels (MAOT) sont comparés aux données expérimentales [ALS], aux calculs théoriques [R-matrix] et à la méthode semi-empirique (SCUNC).

$n$	Théorie			Expérience	
	TMOA $E(\text{eV})$	SCUNC $E(\text{eV})$	R-matrix $E(\text{eV})$	ALS $E_{\text{exp}}$	$ \Delta E $
5	19,468	19,469	19,469	19,468	0,000
6	20,202	20,203	20,227	20,202	0,000
7	20,637	20,638	20,673	20,637	0,000
8	20,917	20,918	20,958	20,922	0,005
9	21,107	21,107	21,151	21,116	0,009
10	21,242	21,242	21,288	21,238	0,004
11	21,341	21,341	21,389	21,331	0,010
12	21,416	21,416	21,465	21,422	0,006
13	21,475	21,475			
14	21,521	21,521			
15	21,558	21,558			
16	21,588	21,588			
17	21,613	21,613			
18	21,634	21,634			
19	21,652	21,652			
20	21,667	21,667			
21	21,680	21,680			
22	21,691	21,691			
23	21,701	21,701			
24	21,709	21,709			
25	21,717	21,717			
26	21,724	21,723			
27	21,730	21,729			
28	21,735	21,735			
29	21,740	21,740			
30	21,744	21,744			

$|\Delta E| = |E(\text{TMOA}) - E_{\text{exp}}|$

- TMOA : Théorie modifiée des orbitales atomiques, présent travail
- SCUNC : Screening Constant by Unit Nuclear charge (Sakho, 2012)
- R-matrix : Esteves et al (2011)
- ALS : Advanced Light Source, Esteves et al (2011)

**Tableau VII:** Défaut quantique  $\delta$  de la série de Rydberg  $4s^2 4p^2 ({}^1S_0) nd$  observée dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental  $4s^2 4p^3 {}^1P_{1/2}^0$  de  $\text{Se}^+$ .

$N$	Théorie			Expérience
	TMOA $\delta$	SCUNC $\delta$	R-matrix $\delta$	*ALS $\delta$
5	0,175	0,173	0,23	0,174
6	0,174	0,172	0,22	0,174
7	0,173	0,170	0,22	0,174
8	0,172	0,169	0,22	0,150
9	0,171	0,168	0,22	0,110
10	0,170	0,167	0,22	0,200
11	0,168	0,166	0,22	0,280
12	0,167	0,166	0,22	0,075
13	0,165	0,165		
14	0,164	0,165		
15	0,162	0,165		
16	0,160	0,165		
17	0,159	0,164		
18	0,157	0,164		
19	0,155	0,164		
20	0,153	0,164		
21	0,151	0,164		
22	0,149	0,164		
23	0,147	0,164		
24	0,145	0,164		
25	0,144	0,164		
26	0,142	0,164		
27	0,140	0,165		
28	0,138	0,165		
29	0,136	0,165		
30	0,134	0,165		

- TMOA : Théorie modifiée des orbitales atomiques, présent travail
- SCUNC : Screening Constant by Unit Nuclear charge (Sakho, 2012)
- R-matrix : Esteves et al (2011)
- ALS : Advanced Light Source, Esteves et al (2011)

**Tableau VIII :** énergies de résonances  $E_n$  de la série de Rydberg  $4s^2 4p^2 ({}^1D_2) nd$  observée dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental  $4s^2 4p^3 {}^2D_{3/2}^0$  de  $\text{Se}^+$ . Les résultats actuels (MAOT) sont comparés aux données expérimentales [ALS], aux calculs théoriques [R-matrix] et à la méthode semi-empirique (SCUNC).

$n$	Théorie			Expérience	
	TMOA $E(\text{eV})$	SCUNC $E(\text{eV})$	R-matrix $E(\text{eV})$	ALS	
				$E_{exp}$	$ \Delta E $
6	19,572	19,572	19,573	19,572	0,000
7	20,009	20,009	20,009	20,009	0,000
8	20,288	20,289	20,287	20,289	0,001
9	20,478	20,479	20,476	20,479	0,001
10	20,613	20,613	20,610	20,613	0,000
11	20,712	20,713	20,710	20,713	0,001
12	20,787	20,788	20,784	20,788	0,001
13	20,845	20,846		20,846	0,001
14	20,891	20,892		20,892	0,001
15	20,928	20,929		20,929	0,001
16	20,959	20,959		20,960	0,001
17	20,984	20,984		20,985	0,001
18	21,005	21,005		21,006	0,001
19	21,022	21,023		21,024	0,002
20	21,037	21,038		21,039	0,002
21	21,050	21,051		21,053	0,003
22	21,062	21,062		21,063	0,001
23	21,072	21,072		21,073	0,001
24	21,080	21,080		21,082	0,002
25	21,088	21,088		21,089	0,001
26	21,094	21,095			
27	21,100	21,100			
28	21,106	21,106			
29	21,111	21,111			
30	21,115	21,115			

$|\Delta E| = |E(\text{TMOA}) - E_{exp}|$

- TMOA : Théorie modifiée des orbitales atomiques, présent travail
- SCUNC : Screening Constant by Unit Nuclear charge (Sakho, 2012)
- R-matrix : Esteves et al (2011)

ALS : Advanced Light Source, Esteves et al (2011)

**Tableau IX :** défaut quantique  $\delta$  de la série de Rydberg  $4s^2 4p^2 ({}^1D_2) nd$  observée dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental  $4s^2 4p^3 {}^2D_{3/2}^0$  de  $\text{Se}^+$ .

$N$	Théorie			Expérience
	TMOA $\delta$	SCUNC $\delta$	R-matrix $\delta$	*ALS $\delta$
6	0,175	0,175	0,17	0,175
7	0,171	0,171	0,16	0,170
8	0,170	0,168	0,16	0,168
9	0,170	0,166	0,16	0,164
10	0,171	0,165	0,16	0,170
11	0,173	0,164	0,16	0,160
12	0,174	0,163	0,16	0,160
13	0,176	0,162		0,155
14	0,177	0,161		0,150
15	0,178	0,161		0,150
16	0,179	0,160		0,135
17	0,179	0,160		0,130
18	0,179	0,159		0,120
19	0,179	0,159		0,110
20	0,179	0,158		0,100
21	0,178	0,158		0
22	0,177	0,158		0
23	0,176	0,158		0
24	0,175	0,158		0
25	0,174	0,158		0
26	0,172	0,158		
27	0,170	0,157		
28	0,168	0,157		
29	0,166	0,157		
30	0,164	0,157		

- TMOA : Théorie modifiée des orbitales atomiques, présent travail
- SCUNC : Screening Constant by Unit Nuclear charge (Sakho, 2012)
- R-matrix : Esteves et al (2011)
- ALS : Advanced Light Source, Esteves et al (2011)

**Tableau X** : énergies de résonances  $E_n$  de la série de Rydberg  $4s^2 4p^2 ({}^1D_2) nd$  observée dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental  $4s^2 4p^3 {}^2D_{5/2}^0$  de  $\text{Se}^+$ . Les résultats actuels (MAOT) sont comparés aux données expérimentales [ALS], aux calculs théoriques [R-matrix] et à la méthode semi-empirique (SCUNC).

$n$	Théorie			Expérience	
	TMOA $E(eV)$	SCUNC $E(eV)$	R-matrix $E(eV)$	ALS	
				$E_{exp}$	$ \Delta E $
6	19,501	19,500	19,469	19,501	0,000
7	19,935	19,934	19,938	19,935	0,000
8	20,211	20,213	20,211	20,213	0,002
9	20,399	20,402	20,399	20,403	0,004
10	20,534	20,537	20,533	20,537	0,003
11	20,633	20,636	20,633	20,636	0,003
12	20,708	20,711	20,707	20,711	0,003
13	20,767	20,769		20,770	0,003
14	20,813	20,815		20,816	0,003
15	20,850	20,853		20,853	0,003
16	20,881	20,883		20,884	0,003
17	20,906	20,908		20,909	0,003
18	20,927	20,929		20,931	0,004
19	20,945	20,946		20,948	0,003
20	20,960	20,962		20,963	0,003
21	20,974	20,975		20,976	0,002
22	20,985	20,986		20,987	0,002
23	20,995	20,996		20,997	0,002
24	21,003	21,004			
25	21,011	21,012			
26	21,018	21,018			
27	21,024	21,024			
28	21,029	21,030			
29	21,034	21,035			
30	21,038	21,039			

$|\Delta E| = |E(TMOA) - E_{exp}|$

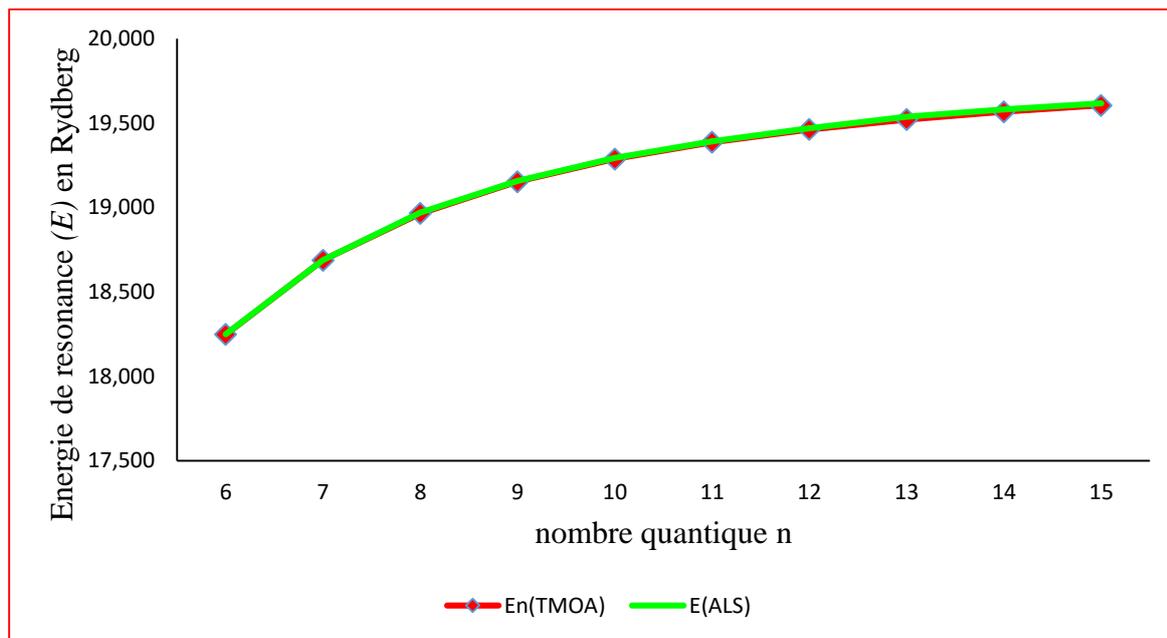
- TMOA : Théorie modifiée des orbitales atomiques, présent travail
- SCUNC : Screening Constant by Unit Nuclear charge (Sakho, 2012)
- R-matrix : Esteves et al (2011)
- ALS : Advanced Light Source, Esteves et al (2011)

**Tableau XI :** Défaut quantique  $\delta$  de la série de Rydberg  $4s^2 4p^2 ({}^1D_2) nd$  observée dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental  $4s^2 4p^3 {}^2D_{5/2}^0$  de  $\text{Se}^+$ .

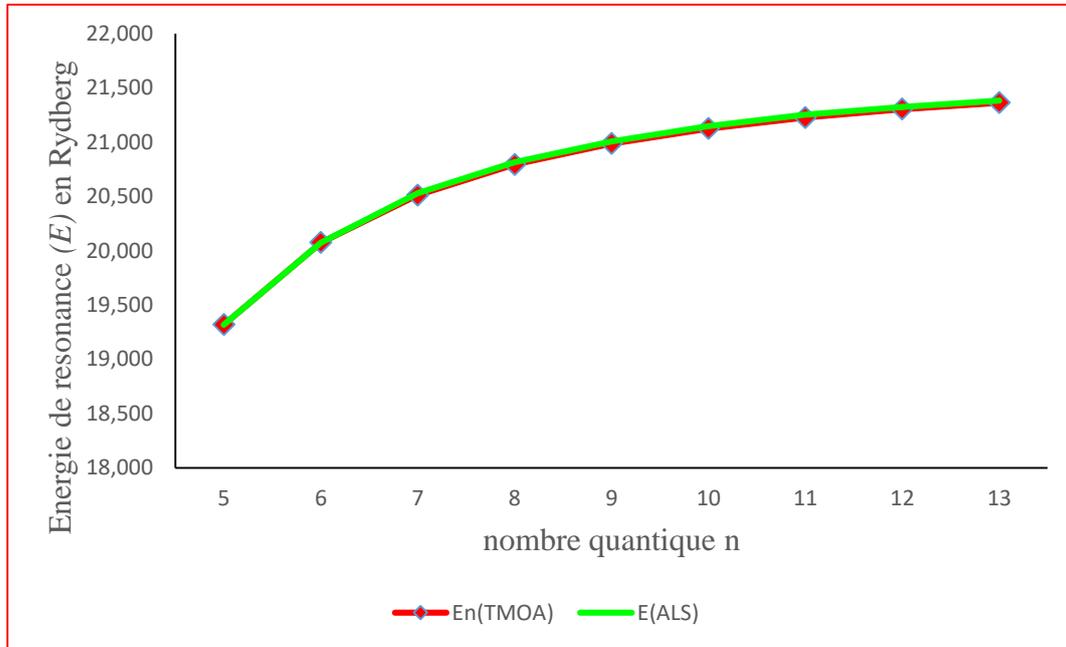
$n$	Théorie			Expérience
	TMOA $\delta$	SCUNC $\delta$	R-matrix $\delta$	*ALS $\delta$
6	0,166	0,167	0,17	0,166
7	0,165	0,167	0,15	0,166
8	0,175	0,167	0,16	0,166
9	0,186	0,167	0,16	0,166
10	0,197	0,168	0,16	0,166
11	0,207	0,168	0,16	0,166
12	0,216	0,169	0,16	0,166
13	0,224	0,170		0,156
14	0,230	0,170		0,150
15	0,235	0,171		0,146
16	0,240	0,171		0,135
17	0,244	0,171		0,110
18	0,248	0,171		0,080
19	0,251	0,172		0,050
20	0,253	0,172		0,050
21	0,256	0,172		0,050
22	0,257	0,172		0,050
23	0,259	0,172		0
24	0,260	0,172		
25	0,262	0,172		
26	0,262	0,172		
27	0,263	0,171		
28	0,264	0,171		
29	0,264	0,171		
30	0,265	0,171		

- TMOA : Théorie modifiée des orbitales atomiques, présent travail
- SCUNC : Screening Constant by Unit Nuclear charge (Sakho, 2012)
- R-matrix : Esteves et al (2011)
- ALS : Advanced Light Source, Esteves et al (2011)

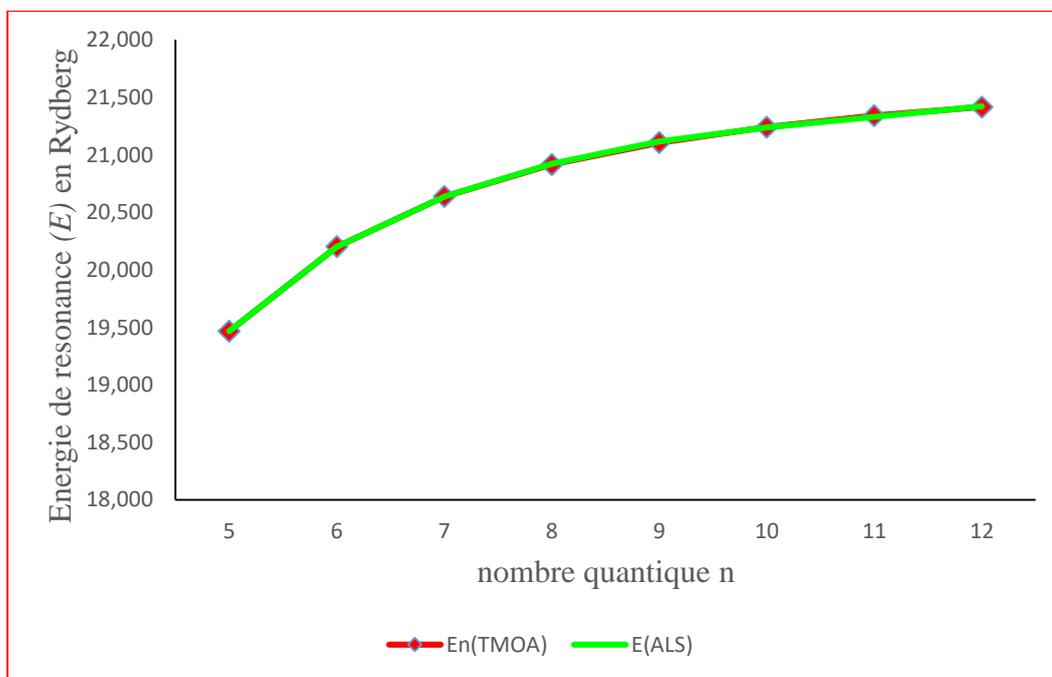
**Figure 7** : Courbes de comparaison de nos résultats sur le calcul des énergies de résonances  $E_n$  de la série de Rydberg  $4s^2 4p^2(^1D_2)nd$  observée dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental  $4s^2 4p^3^1P_{3/2}^0$  de  $Se^+$ .



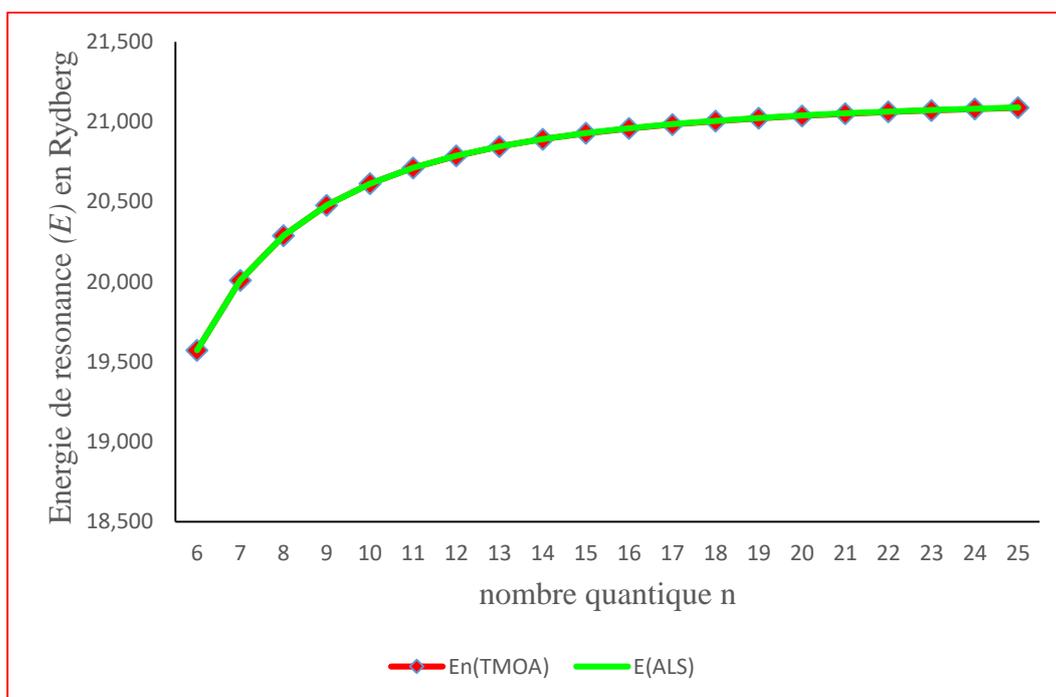
**Figure 8** : Courbes de comparaison de nos résultats sur le calcul des énergies de résonances  $E_n$  de la série de Rydberg  $4s^2 4p^2 ({}^1S_0) nd$  observée dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental  $4s^2 4p^3 {}^3P_{3/2}^0$  de  $\text{Se}^+$ .



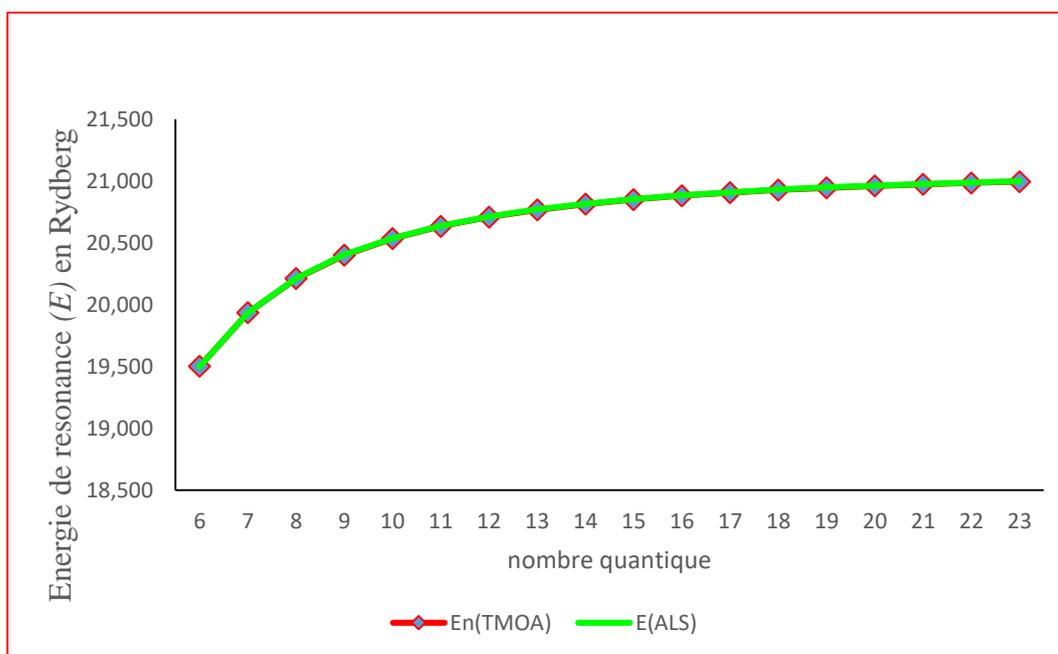
**Figure 9:** Courbes de comparaison de nos résultats sur le calcul des énergies de résonances  $E_n$  de la série de Rydberg  $4s^2 4p^2(^1S_0)nd$  observée dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental  $4s^2 4p^3^1P_{1/2}^0$  de  $\text{Se}^+$ .



**Figure 10:** Courbes de comparaison de nos résultats sur le calcul des énergies de résonances  $E_n$  de la série de Rydberg  $4s^2 4p^2 ({}^1D_2) nd$  observée dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental  $4s^2 4p^3 {}^2D_{3/2}^0$  de  $\text{Se}^+$ .



**Figure 11:** Courbes de comparaison de nos résultats sur le calcul des énergies de résonances  $E_n$  de la série de Rydberg  $4s^2 4p^2 ({}^1D_2) nd$  observée dans le spectre de photoionisation provenant de l'état fondamental  $4s^2 4p^3 {}^2D_{5/2}^0$  de  $\text{Se}^+$ .



### *Conclusion et perspectives*

Dans ce travail, les énergies résonances des séries de Rydberg  $4s4p^2np$  et  $4s^24pnd$  dans les spectres de photoionisation provenant à la fois de l'état  $^1P_{1/2,3/2}^0$  et  $^1D_{3/2,5/2}^0$  sont rapportés en utilisant la méthode de la théorie modifiée des orbitales atomiques (MAOT).

Sur l'ensemble des séries Rydberg étudiées, il est démontré que les résultats MOAT actuels concordent très bien avec les données expérimentales [ALS], les calculs théoriques [R-matrix] et de la méthode semi-empirique (SCUNC). Une foule de données précises jusqu'à  $n = 30$  sont citées dans le présent travail. Les très bons résultats obtenus dans ce travail soulignent les possibilités d'utilisation du formalisme MAOT dans l'étude des séries d'ions Rydberg à haute teneur contenant plusieurs électrons dans le cadre d'une procédure douce.

En outre le formalisme présenté dans ce travail est appliqué avec succès aux calculs des énergies de résonances des séries de Rydberg  $4s4p^2np$  et  $4s^24pnd$  de l'ion  $\text{Se}^+$ . Il présente aussi des avantages car permet d'avoir des valeurs des énergies de résonances pour  $n$  élevé contrairement aux méthodes théoriques et expérimentales. Il présente dans certains cas un inconvénient du fait qu'il utilise les valeurs des énergies de résonances expérimentales qui permettent de calculer les constantes d'écran  $\sigma_i$ . La détermination théorique  $\sigma_i$  serait la continuité de nos recherches.

## **Bibliographie**

1. Diop, B., Faye, M. Dieng, M., Sow, M., Guèye, M., Sakho, I., Biaye, M., and Wagué, A., *Modified Orbital Atomic Study of Dominant Rydberg series in the Photoionization Spectra of Halogen-like Kr<sup>+</sup> and Xe<sup>+</sup> ions*, 2014, Chin. J. Phys. **52**, 1223.

Thèse Diop

*Application des méthodes de la Constante d'Écran par Unité de Charge Nucléaire, de la Théorie Modifiée des Orbitales Atomiques et de la rotation complexe aux calculs des paramètres de résonances des séries de Rydberg de Mg, des ions Bérylliumoïdes, Kr<sup>+</sup>, Xe<sup>+</sup>, Ne<sup>+</sup> et des énergies de l'état fondamental et des états mono excités du lithium et de sa série isoélectronique. Thèse de Doctorat Unique, Université Cheikh Anta Diop de Dakar, (2018).*

2. Sakho, I., *A modification of atomic orbital theory and its application to (1snl)<sup>l</sup>L<sup>π</sup> and (nl<sup>2</sup>)<sup>l</sup>L<sup>π</sup> excited states of He-like ions*. 2010, J. At. Mol. Sci, **1**, 103.

3. Sakho, I., *Modified atomic orbital calculations for (1s, nl)<sup>3</sup>L<sup>π</sup> and <sub>2</sub>(1,0)<sub>n</sub><sup>±1,3</sup>S<sup>e</sup> excited states of He isoelectronic sequence*, 2010 J. At. Mol. Sci, **1**, 224.

4. Sakho, I., *Modified Atomic Orbital Theory applied to the calculation of high-lying <sub>2</sub>(K,T)<sub>n</sub><sup>±1,3</sup>P<sup>o</sup> Rydberg series of He-like ions*, 2012a Natural Science, **4**,73.

5. Sakho, I., *Nouvelle méthode de calcul des énergies de l'état fondamental et des états singulets et triplets doublement excités (Nℓnℓ';<sup>2S+1</sup>L<sup>π</sup>) des systèmes atomiques à deux électrons basée sur la détermination de la constante d'écran par unité de charge nucléaire β(Nnl' ; <sup>2S+1</sup>L<sup>π</sup>;Z)*. Thèse de Doctorat de Doctorat 3<sup>e</sup> cycle, Université Cheikh Anta Diop de Dakar, (2007).

6. Sakho, I., *Calculations of high lying energy resonances of the 4s<sup>2</sup>4p<sup>2</sup> (<sup>1</sup>D<sub>2</sub>)nd and 4s<sup>2</sup>4p<sup>2</sup> (<sup>1</sup>S<sub>0</sub>)nd Rydberg series of Se<sup>+</sup>*, 2012b, Phys, Rev **A86**, 052511,

7. Sakho. I., *Photoabsorption of H<sup>-</sup> and He via the Modified Atomic Orbital Theory: Application to the <sup>1</sup>P<sup>o</sup>- Rydberg states*, 2013, Chin. J. Phys, **51**, 209.

8. 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*. Thèse de Doctorat d'Etat Université Cheikh Anta Diop de Dakar, (2013).

9. Sakho, I., *General formalism of the modified atomic orbital theory for the Rydberg series of atoms and ions: application to the photoionization of Ne<sup>+</sup>*, 2014, J. At. Mol. Sci, **5**, 206.

10. Champeaux, J-P., Bizau, J-M., Cubaynes, D., Blancard, C., Nahar, S., Hitz, D., Bruneau, J., and Wuilleumier, F-J., *Measurements and Calculations of Photoionization Cross Sections*

*of Multiply Charged Ions in Ground and Metastable states along the Isonuclear Series of Oxygen :  $O^{2+}$  to  $O^{4+}$ .*, ApJS,148,583, (2003)

**11.** Simon, M,C., Schwarz, M., Epp, S,W., Beilmann, C., Schmitt, B,L., Harman, Z., Baumann, T,M., Mokler, P,H., Bernitt, S., Ginzler, R., Higgins, S,G., Keitel, C,H., Klawitter, R., Kubiček, K., Mäckel, V., Ullrich,J., Crespo López-Urrutia, J,R., 2010, *Photoionization of  $N^{3+}$  and  $Ar^{8+}$  in an electron beam ion trap by synchrotron radiation*, J, Phys, B: At, Mol, Opt, Phys, **43**, 065003,

**12.** Sow, M., Dieng, M., Tine, M., Faye, M., Diop, B., Guèye, M., Sakho, I., Biaye, M., and Wagué, A .Chin, *Calculations of high lying ( $2pns$ )  $^{1,3}P^o$  and ( $2pnd$ )  $^{1,3}P^o$  Rydberg states of Be atom via the Modified Atomic Orbital Theory*, 2014, J. Phys **52**, 1459.

**13.** Bruneau, J, 1984, *Correlation and relaxation effects in  $ns^2$ - $nsnp$  transitions* J, Phys, B, **17,3009**.

**14.** Covington, A. M., Aguilar, A., Covington, I. R., Hinojosa, G., Shirley, C. A., Phaneuf, R. A., Alvarez, I., Cisneros, C., Dominguez-Lopez, I., Sant'Anna, M. M., Schlachter, A. S., Ballance, C. P., McLaughlin, B. M., 2011. Valence-shell photoionization of chlorinelike  $Ar^+$  ions, Phys. Rev **A84**, 013413.

**15.** El Hassan, N, *Étude des processus de photoexcitation et de photoionisation dans les ions multichargés*, Thèse, Université Paris Sud, N° 9565 (2010),

**16.** Esteva, J, M, Mehlmán-Balloffet, G., et Romand, J., 1972, *Spectres d'absorption dans l'ultraviolet lointain de Be, B, C, N, Mg, Al et Si*, J, Quant, Spectrosc, Radiat, Transf, **12**, 1291,

**17.** Esteves, D, A., Bilodeau, R, C., Sterling, N, C., Phaneuf, R, A., Kilcoyne, A, L, D., Red, E, C., and Aguilar, A., 2011, *Absolute high-resolution  $Se^+$  photoionization cross-section measurements with Rydberg-series analysis*, Phys, Rev**A84**, 013406,

**18.** Esteves, D, A., Aguilar, A., Bilodeau, R, C., Phaneuf, R, A., Kilcoyne, A, L, D., Red, E, C., and Sterling, N, C., 2012, *Absolute single photoionization cross-section measurements of  $Se^{3+}$  and  $Se^{5+}$* , J, Phys, B: At, Mol, Opt, Phys, **45**, 115201,

**19.** Lewin, W., 2005 Chandra Proposal ID # 07500185

**20.** Liang, L., Gao, W.-J., Zhou, G., 2013. Photoionization of Ne-like Ca XI, Phys, Scr, 87015301.

**21.** Macaluso, D, A., Aguilar, A., Kilcoyne, A, L, D., Red, E, C., Bilodeau, R, C., Phaneuf, R, A., Sterling, N, C., , McLaughlin, B, M., 2015, *Absolute single-photoionization cross sections of  $Se^{2+}$ : Experiment and theory*, Phys, Rev**A 92**, 063424,

22. Sterling, N,C,, Harriet L,, Dinerstein, H,L,, and Kallman, T,R,, 2007, *The Abundances of Light Neutron-Capture Elements in Planetary Nebulae, I, Photoionization Modeling and Ionization Corrections*, *Astrophys, J, Suppl, Ser*, **169**, 37,
23. Sterling, N,C,, Harriet L,, and Dinerstein, H,L,, 2008, *The Abundances of Light Neutron-Capture Elements in Planetary Nebulae, II, s-Process Enrichments and Interpretation*, *Astrophys, J, Suppl, Ser*, **174**, 158,

## Annexe

### Calcul détaillé des valeurs des constantes d'écran

Pour évaluer les constantes d'écran  $\sigma_i$  dans les équations (3.10), (3.11) et (3.12), nous utilisons les données expérimentales ALS d'Esteves et de ses collègues [2,3]. Les positions énergétiques expérimentales de la série de Rydberg utilisées et les résultats obtenus à partir des équations (3.10), (3.11) et (3.12) pour les paramètres  $\sigma_i$  ainsi que leurs incertitudes seront indiqués dans le tableau 1.

Considérons l'équation (3.10).

$$E_n = E_\infty - \frac{1}{n^2} \left\{ Z - \sigma_1 \left( {}^2P_j^0, {}^1D_2 \right) - \sigma_2 \left( {}^2P_j^0, {}^1D_2 \right) \times \frac{1}{n} - \sigma_2 \left( {}^2P_j^0, {}^1D_2 \right) (n-m)(n-q) \right. \\ \left. \left[ \frac{1}{(n+q-m+s+1)^3} + \frac{1}{(n+q-m+s+2)^4} + \frac{1}{(n+q-m+s+3)^5} \right] \right\}^2$$

En posant  $n=m$  et  $n=q$  l'équation se réduit à

$$E_n = E_\infty - \frac{Z^2}{n^2} \left\{ 1 - \frac{\sigma_1}{Z} - \frac{\sigma_2}{n \times Z} \right\}^2 .$$

Avec  $E_n = E_{\text{exp}} \pm \Delta E$  pour le sélénium  $Z=34$  ;

En considérant les exemples des mesures de ALS pour la série  $4s^2 4p^2 ({}^1D_2) nd$  avec  $E_n = 18.249 \pm 0.010$  et  $E_\infty = 19.853 \pm 0.050$  :

Calcul de  $\sigma_1$  et  $\sigma_2$

$$\begin{cases} 18.249 = 19.853 - \frac{34^2}{6^2} \left( 1 - \frac{\sigma_1}{34} - \frac{\sigma_2}{6 \times 34} \right)^2 \times 13.60569 \\ 18.688 = 19.853 - \frac{34^2}{7^2} \left( 1 - \frac{\sigma_1}{34} - \frac{\sigma_2}{7 \times 34} \right)^2 \times 13.60569 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \sigma_1 = 32.0224018 \\ \sigma_2 = -0.4951487 \end{cases}$$

Calcul de  $\sigma_1^+$  ;  $\sigma_2^+$  et  $\sigma_1^-$  ;  $\sigma_2^-$

En utilisant l'équation (3.7)

$$\begin{cases} E_6^+ = 18.249 + 0.010 = 18.259 \\ E_7^+ = 18.688 + 0.010 = 18.698 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 18.259 = 19.903 - \frac{34^2}{6^2} \left( 1 - \frac{\sigma_1^+}{34} - \frac{\sigma_2^+}{6 \times 34} \right)^2 \times 13.60569 \\ 18.698 = 19.903 - \frac{34^2}{7^2} \left( 1 - \frac{\sigma_1^+}{34} - \frac{\sigma_2^+}{7 \times 34} \right)^2 \times 13.60569 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \sigma_1^+ = 31.93150226 \\ \sigma_2^+ = -0.10292626 \end{cases}$$

Même procédure pour  $\sigma_1^- ; \sigma_2^-$

$$\begin{cases} E_6^- = 18.249 - 0.01 = 18.239 \\ E_7^- = 18.688 - 0.01 = 18.678 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 18.239 = 19.803 - \frac{34^2}{6^2} \left( 1 - \frac{\sigma_1^-}{34} - \frac{\sigma_2^-}{6 \times 34} \right)^2 \times 13.60569 \\ 18.678 = 19.803 - \frac{34^2}{7^2} \left( 1 - \frac{\sigma_1^-}{34} - \frac{\sigma_2^-}{7 \times 34} \right)^2 \times 13.60569 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \sigma_1^- = 32.17836859 \\ \sigma_2^- = -1.275852445 \end{cases}$$

Comme on la préciser en haut les constantes d'écran sont écrites comme suit  $\sigma_i = \sigma_{i\text{exp}} \pm \Delta\sigma_i$

, tout en utilisant l'équation (3.6).

$$\Delta\sigma_1 = \sqrt{\frac{(32.0224018 - 31.93150226)^2 + (32.0224018 - 32.17836859)^2}{2}}$$

$$\Rightarrow \Delta\sigma_1 = 0.12764867$$

$$\Delta\sigma_2 = \sqrt{\frac{(-0.4951487 + 0.10292626)^2 + (-0.4951487 + 1.275852445)^2}{2}}$$

$$\Rightarrow \Delta\sigma_2 = 0.61779316$$