

# 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 constante d'écran par unité de charge nucléaire au calcul des énergies de résonance et des largeurs naturelles des séries de Rydberg  $3s^2 3p^4 ns, nd$  de l'ion  $Ar^+$  présent dans les supernovae**

Présenté par

**Momar Talla GNING**

Sous la direction de

**Ibrahima SAKHO**

Soutenu publiquement le **17 mars 2018** devant le jury composé de :

<b>Moctar CAMARA</b>	Maître de Conférences, UASZ	Président
<b>Moustapha THIAME</b>	Maître Assistant, UASZ	Rapporteur
<b>Samo DIATTA</b>	Maître Assistant, UASZ	Examineur
<b>Joseph S. DIATTA</b>	Assistant, UASZ	Examineur
<b>Ibrahima SAKHO</b>	Maître de Conférences, UASZ	Encadrant

## Résumé du mémoire

**Sujet :** Application de la méthode de la Constante d'écran par unité de charge nucléaire au calcul des énergies de résonance et des largeurs naturelles des séries de Rydberg  $3s^2 3p^4 ns, nd$  de l'ion  $Ar^+$  présent dans les supernovae.

**Nature :** Mémoire de Master Physique et applications

**Spécialité :** Physique atomique et nucléaire

**Présenté par :** Momar Talla GNING

**Date de soutenance :** Samedi 17 Mars 2018 à 11heure

**Lieu de soutenance :** UASZ

### Composition du jury

<b>Moctar CAMARA</b>	Maître de Conférences, UASZ	Président
<b>Moustapha THIAME</b>	Maître Assistant, UASZ	Rapporteur
<b>Samo DIATTA</b>	Maître Assistant, UASZ	Examineur
<b>Joseph S. DIATTA</b>	Assistant, UASZ	Examineur
<b>Ibrahima SAKHO</b>	Maître de Conférences, UASZ	Encadrant

### Résumé

Le présent travail, est consacré au calcul des énergies de résonance, des largeurs naturelles et du défaut quantique des séries de Rydberg  $3s^2 3p^4 ns, nd$  de l'ion  $Ar^+$  présent dans les supernovae.

Le choix de l'argon se justifie par le fait qu'il fait parti des éléments présents à l'état de traces dans les systèmes astrophysiques. De plus, des raies spectrales de l'argon ont été observées dans le spectre d'émission des étoiles et des nébuleuses planétaires. Ces observations stellaires témoignent de l'intérêt que revêt le calcul des paramètres de résonance (*énergies d'excitation, largeurs naturelles, longueurs d'onde, etc.*) de l'atome d'argon et de ses ions pour la modélisation des plasmas d'astrophysiques.

Après une revue des principales méthodes expérimentales et théoriques dans l'étude des résonances atomiques, nous calculons les énergies de résonance et les largeurs naturelles des séries de Rydberg  $3s^2 3p^4 ns, nd$  dominant dans le spectre de raies de l'ion  $Ar^+$ . Tous les calculs sont faits dans le cadre de la méthode de la **Constante d'Ecran par Unité de Charge Nucléaire (CEUCN)**.

Les résultats que nous avons obtenus sont en bon accord avec les résultats expérimentaux Covington et al (*Phys. Rev. A* **84**,013413 (2011)) disponibles dans la littérature et ont fait l'objet de plusieurs publications dans des revues internationales comme Radiation Physics and Chemistry, Chinese Journal of Physics, Physica Scripta, ....

**Mots-clés :** Constante d'Écran par Unité de Charge Nucléaire (CEUCN), photoionisation résonante, photoexcitation, énergie de résonance, largeur naturelle, série de Rydberg, supernova.

## Abstract

The present work is devoted to the computation of the resonance energies, the natural widths and the quantum defect of the Rydberg series  $3s^2 3p^4 ns, nd$  of the  $Ar^+$  ion present in the supernovae.

The choice of argon is justified by the fact that it is part of the elements present in trace states in astrophysical systems. In addition, spectral lines of argon have been observed in the emission spectrum of planetary stars and planetary nebulae. These stellar observations testify to the interest of calculating the resonance parameters (excitation energies, natural widths, wavelengths, etc.) of the argon atom and its ions for the modeling of plasma plasmas. astrophysical.

After a review of the main experimental and theoretical methods in the study of Atomic resonances, we calculate the resonance energies and natural widths of the Rydberg series  $3s^2 3p^4 ns, nd$  dominant in the line spectrum of the  $Ar^+$  ion. All calculations are done within the framework of Screening Constant by Unit Nuclear Charge (SCUNC) method.

The results we obtained are in good agreement with the experimental results Covington et al (Phys Rev A 84,013413 (2011) available in the literature and have been the subject of several publications in international journals such as Radiation Physics and Chemistry, Chinese Journal of Physics, Physica Scripta, ....

**Keywords:** Screening Constant by Unit Nuclear Charge (SCUNC), resonant photoionization, photoexcitation, resonance energy, natural width, Rydberg series, supernova.

## Dédicaces

*Je dédie ce travail*

*A mon père, un homme merveilleux, qui m'a appris les bonnes valeurs, le sens du devoir et du travail bien fait*

*A ma mère, une femme remarquable, qui m'a élevée dans la dignité, le respect de soi et de son prochain*

*A mon épouse, une femme pleine de générosité, de disponibilité et de joie de vivre, qui m'entoure de tout son amour et de son affection*

*A mes enfants qui me comblent de bonheur*

*A mes frères et à leurs femmes, à mes sœurs*

*A mes amis*

*A mes élèves*

## Remerciements

Ce travail a été conçu et réalisé au Laboratoire de Physique des Matériaux du Département de Physique de l'UFR Sciences et Technologies (UFR/ST) de l'Université Assane Seck de Ziguinchor (UASZ), sous la direction du Dr Ibrahima SAKHO. Je voudrais ici, lui témoigner mes sincères remerciements et ma profonde reconnaissance pour toute l'assistance qu'il m'a apportée. Tout le long de ce travail, Monsieur SAKHO a cherché à me faire posséder non seulement les qualités d'un bon chercheur mais aussi celles d'un bon citoyen. A ce titre, au terme de ce travail, je tiens à le remercier profondément pour tout ce que j'ai appris de lui au delà même de la physique.

Je remercie le Dr Moctar CAMARA du Département de Physique de l'UFR/ST/UASZ et Directeur de l'UFR Sciences et Technologies de l'Université Assane Seck de Ziguinchor pour m'avoir fait l'honneur de présider le jury de ce mémoire de Master malgré ses multiples charges. Qu'il en soit vivement remercié. Je voudrais encore une fois lui témoigner ma profonde gratitude.

J'adresse de même mes sincères remerciements au Dr Moustapha THIAME du Département de physique de l'UFR Sciences et Technologies de l'Université Assane Seck de Ziguinchor pour avoir aimablement accepté d'être le rapporteur du présent mémoire de Master.

Je voudrais également adresser mes remerciements au Dr Samo DIATTA du Département de physique de l'UFR/ST/UASZ pour avoir accepté de juger le travail présenté dans ce présent mémoire en sa qualité d'examinateur.

Mes remerciements sont aussi adressés au Dr Joseph S. DIATTA du Département de Physique de l'UFR/ST/UASZ pour m'avoir fait l'honneur de juger le travail présenté dans ce mémoire en sa qualité d'examinateur. Je lui témoigne aussi toute ma gratitude pour avoir participé à ma formation académique.

Je saisis cette occasion pour remercier très sincèrement tout le Personnel Enseignant et de Recherche du département de Physique qui ont participé à ma formation académique du Master 1 au Master 2.

Ces remerciements ne seraient pas complets, si j'omettais d'y inclure mes collègues du Lycée El Hadji Omar Lamine Badji de Ziguinchor qui m'ont permis de travailler dans un cadre professionnel très chaleureux.

Enfin, je tiens à adresser mes remerciements à tous mes camarades de promotion et à tous ceux qui de loin ou de près ont contribué par leur soutien à l'aboutissement de ce travail.

# Listes des figures et des tableaux

## A/ Liste des figures

<b>Figure 1.1.</b> Supernova SN 1994D (point blanc brillant en bas à gauche de l'image), dans la partie externe du disque de la galaxie spirale NGC 4526 (photo datant de 1994).....	5
<b>Figure 1.2.</b> Illustration des deux principaux processus de photoionisation directe (PID) et de photoionisation résonante (PIR).....	8
<b>Figure.1.3.</b> Variation typique de la section efficace de photoionisation en fonction de l'énergie du photon absorbé par le système atomique (Hassan, 2010) .....	9
<b>Figure.1.4.</b> Variation de la section efficace de photoionisation avec l'écart relatif $\epsilon$ pour trois valeurs arbitraires de l'index de profil $q = 0, 1$ et $3$ .....	10
<b>Figure 1.5.</b> Illustration schématique des processus de photoionisation directe (A), photoionisation résonante (B) et photoionisation multiple (C) sur un schéma de niveaux de l'atome de bore.....	12
<b>Figure .1.6.</b> Principe de l'analyse élémentaire d'un échantillon de matière par la spectroscopie sur plasma induit par laser (LIBS, Laser Induced Breakdown Spectroscopy).....	15
<b>Figure.2.1.</b> Processus de diffusion de photons incidents par une particule cible (atome ou ion).....	23
<b>Figure.2.2.</b> Variation de la section efficace de photoionisation en fonction de l'énergie des photons utilisés (Simon et al., 2010).....	26
<b>Figure 3.1.</b> Courbes de comparaison de nos résultats sur le calcul des énergies résonance ( $E_r$ en Rydberg) des séries de Rydberg $3s^2 3p^4(^1D_2)ns,nd$ ( $j = 1/2$ ) dominant dans le spectre de raies de l'ion $Ar^+$ avec quelques résultats théoriques.....	58
<b>Figure 3.2.</b> Courbes de comparaison de nos résultats sur le calcul des énergies résonance ( $E_r$ en Rydberg) des séries de Rydberg $3s^2 3p^4(^1D_2)ns,nd$ ( $j = 3/2$ ) dominant dans le spectre de raies de l'ion $Ar^+$ avec quelques résultats théoriques.....	59
<b>Figure 3.3.</b> Courbes de comparaison de nos résultats sur le calcul des énergies résonance ( $E_r$ en Rydberg) des séries de Rydberg $3s^2 3p^4(^1S_0)ns,nd$ ( $j = 1/2$ ) dominant dans le spectre de raies de l'ion $Ar^+$ avec quelques résultats théoriques.....	60
<b>Figure 3.4.</b> Courbes de comparaison de nos résultats sur le calcul des énergies résonance ( $E_r$ en Rydberg) des séries de Rydberg $3s^2 3p^4(^1D_2)ns,nd$ ( $j = 1/2$ ) dominant dans le spectre de raies de l'ion $Ar^+$ avec quelques résultats théoriques.....	61
<b>Figure 3.5.</b> Courbes de comparaison de nos résultats sur le calcul des énergies résonance ( $E_r$ en Rydberg) des séries de Rydberg $3s^2 3p^4(^1D_2)ns,nd$ ( $j = 3/2$ ) dominant dans le spectre de raies de l'ion $Ar^+$ avec quelques résultats théoriques.....	62
<b>Figure 3.6.</b> Courbes de comparaison de nos résultats sur le calcul des énergies résonance ( $E_r$ en Rydberg) des séries de Rydberg $3s^2 3p^4(^1D_2)ns,nd$ ( $j = 5/2$ ) dominant dans le spectre de raies de l'ion $Ar^+$ avec quelques résultats théoriques .....	63

## Liste de quelques acronymes

**MCDF** : Muticonfiguration Dirac- Fock.

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

**CEUCN** : Constante d'écran par unité de charge nucléaire.

**DARC**, Dirac R-matrix Atomic Code.

**PID**, Photoionisation directe.

**PIR**, Photoionisation résonante

**MRC**, Méthode de la Rotation Complexe.

## B/ Liste des tableaux

<p><b>Tableau 1 :</b> Energies de résonance (<math>E_r</math>, en eV) et défauts quantiques (<math>\delta</math>) pour la série de Rydberg <math>4s^2 4p^2 ({}^3P_2)nd</math> relativement à l'état fondamental <math>4s^2 4p^3 {}^4S_{3/2}</math> de l'ion <math>Se^+</math> (ALS: Esteves et al., 2011) ; pour la série de Rydberg <math>3s^2 3p^4 ({}^1S_0)ns</math> relativement à l'état fondamental <math>3s^2 3p^5 {}^2P_{3/2}^0</math> de l'ion <math>Ar^+</math> (ALS: Covington et al., 2011) et pour la série de Rydberg <math>4s^2 4p^4 ({}^1S_0)nd</math> prenant origine depuis l'état fondamental <math>4s^2 4p^5 {}^2P_{3/2}^0</math> de l'ion <math>Kr^+</math> (ASTRID/SOLEIL: Bizau et al., 2011 ; R-matrix : McLaughlin et Ballance, 2012) .....</p>	29
<p><b>Tableau 2 :</b> Valeurs des constantes d'écran <math>f_i</math> déterminées à partir des énergies de résonance <math>E_r</math> (en eV) des séries de Rydberg <math>3s^2 3p^4 ({}^1D_2)ns,nd</math> et <math>3s^2 3p^4 ({}^1S_0)ns,nd</math> dominant dans le spectre de raies de l'ion <math>Ar^+</math>, mesurées par Covington et al., (2011). La valeur de l'énergie limite <math>E_\infty</math> est tirée de NIST (Covington et al., 2011).....</p>	38
<p><b>Tableau 3 :</b> Valeurs des constantes d'écran <math>f_i</math> déterminées à partir des largeurs de résonance <math>\Gamma_n</math> (en meV) des séries de Rydberg <math>3s^2 3p^4 ({}^1D_2)ns,nd</math> et <math>3s^2 3p^4 ({}^1S_0)ns,nd</math> de l'ion <math>Ar^+</math>, mesurées par Covington et al., (2011).....</p>	40
<p><b>Tableau 4 :</b> Energie de résonance (<math>E_r</math>, en eV), défaut quantique (<math>\delta</math>) et largeurs (<math>\Gamma</math>, en meV) pour les série <math>3s^2 3p^4 ({}^1D_2)ns</math> dominante observée dans les spectres de photoionisation provenant de l'état métastable <math>3s^2 3p^5 {}^2P_{1/2}^0</math> du chlore comme <math>Ar^+</math>. Les résultats présents (SCUNC) sont comparés aux calculs de QB à matrice R- multicanaux de Covington et al. [2011]. Les incertitudes dans les présents calculs sont indiquées entre parenthèses et celle des largeurs de résonance est estimée à <math>\pm 0,1meV</math>.....</p>	45
<p><b>Tableau 5 :</b> Energie de résonance (<math>E_r</math>, en eV), défaut quantique (<math>\delta</math>) et largeurs (<math>\Gamma</math>, en meV) pour les série <math>3s^2 3p^4 ({}^1D_2)nd</math> dominante observée dans les spectres de photoionisation provenant de l'état métastable <math>3s^2 3p^5 {}^2P_{1/2}^0</math> du chlore comme ions <math>Ar^+</math>. Les résultats présents (SCUNC) sont comparés aux calculs de QB à matrice R- multicanaux de Covington et al. [2011]. Les incertitudes dans les présents calculs sont indiquées entre parenthèses et celle des largeurs de résonance est estimée à <math>\pm 0,1meV</math>.....</p>	46
<p><b>Tableau 6 :</b> Energie de résonance (<math>E_r</math>, en eV), défaut quantique (<math>\delta</math>) et largeurs (<math>\Gamma</math>, en meV) pour les série <math>3s^2 3p^4 ({}^1D_2)nd</math> dominante observée dans les spectres de photoionisation provenant de l'état métastable <math>3s^2 3p^5 {}^2P_{1/2}^0</math> du chlore comme <math>Ar^+</math>. Les résultats présents (SCUNC) sont comparés aux calculs de QB à matrice R- multicanaux de Covington et al. [2011]. Les incertitudes dans les présents calculs sont indiquées entre parenthèses et celle des largeurs de résonance est estimée à <math>\pm 0,1meV</math>.....</p>	47

**Tableau 7 :** Energie de résonance ( $E_r$ , en eV), défaut quantique ( $\delta$ ) et largeurs ( $\Gamma$ , en meV) pour les série  $3s^2 3p^4 (^1D_2)nd$  dominante observée dans les spectres de photoionisation provenant de l'état métastable  $3s^2 3p^5 ^2P_{1/2}^0$  du chlore comme  $Ar^+$ . Les résultats présents (SCUNC) sont comparés aux calculs de QB à matrice R-multicanaux de Covington et *al.* [2011]. Les incertitudes dans les présents calculs sont indiquées entre parenthèses et celle des largeurs de résonance est estimée à  $\pm 0,1meV$ ..... 48

**Tableau 8 :** Energie de résonance ( $E_r$ , en eV), défaut quantique ( $\delta$ ) et largeurs ( $\Gamma$ , en meV) pour les série  $3s^2 3p^4 (^1D_2)nd$  dominante observée dans les spectres de photoionisation provenant de l'état métastable  $3s^2 3p^5 ^2P_{1/2}^0$  du chlore comme  $Ar^+$ . Les résultats présents (SCUNC) sont comparés aux calculs de QB à matrice R-multicanaux de Covington et *al.* [2011]. Les incertitudes dans les présents calculs sont indiquées entre parenthèses et celle des largeurs de résonance est estimée à  $\pm 0,1meV$ ..... 49

**Tableau 9 :** Energie de résonance ( $E_r$ , en eV), défaut quantique ( $\delta$ ) et largeurs ( $\Gamma$ , en meV) pour les série  $3s^2 3p^4 (^1D_2)nd$  dominante observée dans les spectres de photoionisation provenant de l'état métastable  $3s^2 3p^5 ^2P_{1/2}^0$  du chlore comme  $Ar^+$ . Les résultats présents (SCUNC) sont comparés aux calculs de QB à matrice R-multicanaux de Covington et *al.* [2011]. Les incertitudes dans les présents calculs sont indiquées entre parenthèses et celle des largeurs de résonance est estimée à  $\pm 0,1meV$ ..... 50

**Tableau 10 :** Energie de résonance ( $E_r$ , en eV), défaut quantique ( $\delta$ ) et largeurs ( $\Gamma$ , en meV) pour les série  $3s^2 3p^4 (^1D_2)nd$  dominante observée dans les spectres de photoionisation provenant de l'état métastable  $3s^2 3p^5 ^2P_{1/2}^0$  du chlore comme  $Ar^+$ . Les résultats présents (SCUNC) sont comparés aux calculs de QB à matrice R-multicanaux de Covington et *al.* [2011]. Les incertitudes dans les présents calculs sont indiquées entre parenthèses et celle des largeurs de résonance est estimée à  $\pm 0,1meV$ ..... 51

**Tableau 11 :** Energie de résonance ( $E_r$ , en eV), défaut quantique ( $\delta$ ) et largeurs ( $\Gamma$ , en meV) pour les série  $3s^2 3p^4 (^1D_2)nd$  dominante observée dans les spectres de photoionisation provenant de l'état métastable  $3s^2 3p^5 ^2P_{1/2}^0$  du chlore comme  $Ar^+$ . Les résultats présents (SCUNC) sont comparés aux calculs de QB à matrice R-multicanaux de Covington et *al.* [2011]. Les incertitudes dans les présents calculs sont indiquées entre parenthèses et celle des largeurs de résonance est estimée à  $\pm 0,1meV$ ..... 52

**Tableau 12 :** Energie de résonance ( $E_r$ , en eV), défaut quantique ( $\delta$ ) et largeurs ( $\Gamma$ , en meV) pour les série  $3s^2 3p^4 (^1D_2)nd$  dominante observée dans les spectres de photoionisation provenant de l'état métastable  $3s^2 3p^5 ^2P_{1/2}^0$  du chlore comme  $Ar^+$ . Les résultats présents (SCUNC) sont comparés aux calculs de QB à matrice R-multicanaux de Covington et *al.* [2011]. Les incertitudes dans les présents calculs sont indiquées entre parenthèses et celle des largeurs de résonance est estimée à  $\pm 0,1meV$ ..... 53

**Tableau 13 :** Energie de résonance ( $E_r$ , en eV), défaut quantique ( $\delta$ ) et largeurs ( $\Gamma$ , en meV) pour les série  $3s^2 3p^4 (^1D_2)nd$  dominante observée dans les spectres de photoionisation provenant de l'état métastable  $3s^2 3p^5 ^2P_{1/2}^0$  du chlore comme  $Ar^+$ . Les résultats présents (SCUNC) sont comparés aux calculs de QB à matrice R-multicanaux de Covington et *al.* [2011]. Les incertitudes dans les présents calculs sont indiquées entre parenthèses et celle des largeurs de résonance est estimée à  $\pm 0,1meV$ ..... 54

**Tableau 14 :** Energie de résonance ( $E_r$ , en eV), défaut quantique ( $\delta$ ) et largeurs ( $\Gamma$ , en meV) pour les série  $3s^2 3p^4 (^1D_2)nd$  dominante observée dans les spectres de photoionisation provenant de l'état métastable  $3s^2 3p^5 ^2P_{1/2}^0$  du chlore comme  $Ar^+$ . Les résultats présents (SCUNC) sont comparés aux calculs de QB à matrice R-multicanaux de Covington et *al.* [2011]. Les incertitudes dans les présents calculs sont indiquées entre parenthèses et celle des largeurs de résonance est estimée à  $\pm 0,1meV$ ..... 55

**Tableau 15 :** Energie de résonance ( $E_r$ , en eV), défaut quantique ( $\delta$ ) et largeurs ( $\Gamma$ , en meV) pour les série  $3s^2 3p^4 (^1D_2)nd$  dominante observée dans les spectres de photoionisation provenant de l'état métastable  $3s^2 3p^5 ^2P_{1/2}^0$  du chlore comme  $Ar^+$ . Les résultats présents (SCUNC) sont comparés aux calculs de QB à matrice R-multicanaux de Covington et *al.* [2011]. Les incertitudes dans les présents calculs sont indiquées entre parenthèses et celle des largeurs de résonance est estimée à  $\pm 0,1meV$ ..... 56

**Tableau 16 :** Energie de résonance ( $E_r$ , en eV), défaut quantique ( $\delta$ ) et largeurs ( $\Gamma$ , en meV) pour les série  $3s^2 3p^4 (^1D_2)nd$  dominante observée dans les spectres de photoionisation provenant de l'état métastable  $3s^2 3p^5 ^2P_{1/2}^0$  du chlore comme  $Ar^+$ . Les résultats présents (SCUNC) sont comparés aux calculs de QB à matrice R-multicanaux de Covington et *al.* [2011]. Les incertitudes dans les présents calculs sont indiquées entre parenthèses et celle des largeurs de résonance est estimée à  $\pm 0,1meV$ ..... 57

# Table des matières

<b>Introduction générale.....</b>	<b>1</b>
<b>Chapitre 1 : Généralités sur la photoionisation des systèmes atomiques.....</b>	<b>7</b>
1.1. Principe de la photoionisation.....	8
1.2. Série de Rydberg.....	13
1.3. Énergie et largeur naturelle de résonance.....	14
<b>Chapitre 2 : Méthodes expérimentales et théoriques de photoionisation résonante.....</b>	<b>18</b>
<b>2.1. Méthodes expérimentales.....</b>	<b>19</b>
2.1.1. Montages de spectroscopie ionique en faisceaux colinéaires.....	19
2.1.2. Nouveaux montages de rayonnement synchrotron.....	20
<b>2.2. Méthodes théoriques .....</b>	<b>20</b>
2.2.1. Généralités.....	20
2.2.2. Méthodes de photoionisation résonante.....	22
<b>2.3. Section efficace de photoionisation.....</b>	<b>22</b>
<b>2.4. Analyse des énergies de résonance : défaut quantique.....</b>	<b>26</b>
2.4.1. Notion de défaut quantique.....	26
2.4.2. Formule standard du défaut quantique.....	26
<b>Chapitre 3 : Application de la théorie de la constante d'écran par unité de charge nucléaire à la photoionisation résonante de l'ion Ar<sup>+</sup>.....</b>	<b>31</b>
<b>3.1. Bref description de méthode de la constante d'écran par unité de charge nucléaire .....</b>	<b>32</b>
3.1.1. Expression des énergies de résonance.....	32
3.1.2. Expression des largeurs naturelles.....	33
3.1.3. Analyse des énergies de résonance.....	34
3.1.4. Principe de détermination des constantes d'écran.....	35
3.1.5. Principe de détermination des erreurs absolues.....	36

<b>3.2. Calculs des énergies de résonance et des largeurs naturelles des séries de Rydberg</b>	
<b>3s<sup>2</sup> 3p<sup>4</sup> ns,nd dominant dans le spectre de raies de l'ion Ar<sup>+</sup></b> .....	37
3.2.1. Valeurs des constantes d'écran.....	37
3.2.2. Expressions explicites des énergies totales et des largeurs naturelles.....	39
a) Expression explicite des énergies totales.....	39
b) Expression explicite des largeurs naturelles.....	40
3.2.3. Présentation et discussion des résultats obtenus.....	41
<b>Conclusion et perspectives</b> .....	64
<b>Bibliographique</b> .....	65

## Introduction générale

Aujourd'hui les études portant sur l'interaction du rayonnement électromagnétique avec les atomes et les ions revêtent une grande importance dans la description des propriétés structurales des systèmes atomiques. Grâce à l'utilisation des sources intenses de photons dans les expériences de spectroscopie des atomes et des ions, ces études concernent des régions de plus en plus étendues du spectre électromagnétique et s'intéressent particulièrement à la zone spectrale correspondant à l'excitation des résonance autoionisantes ou états d'autoionisation. La photoionisation (PI) des ions est un processus fondamental dans de nombreux environnements plasma à haute température, tels que ceux qui se produisent dans les étoiles et les nébuleuses et dans les expériences de fusion à inertie-confinement. Les mesures quantitatives des sections transversales de photoionisation pour ions fournissent des données de précision sur la structure ionique et les orientations pour le développement de modèles théoriques d'interactions multi-électrons. En outre, les bases de données d'opacité qui sont essentielles à la modélisation et à la diagnostics de plasmas chauds et denses se composent presque entièrement de calculs théoriques réalisés dans le couplage LS. 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. La plupart de ces expériences ont été réalisées dans les alcalins (Duong et al. 1978, Kollath 1980, Smith et al. 1980). Les valeurs de sections efficaces ainsi obtenues sont très peu nombreuses, les expériences n'étant souvent réalisées que pour quelques longueurs d'onde bien définies. 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). La seconde classe d'expériences mettant en jeu des processus d'ionisation à partir d'états atomiques excités ne donnent en général pas un accès direct aux sections efficaces de photoionisation. Par contre l'interprétation des expériences nécessite la connaissance préalable de ces grandeurs atomiques radiatives. Citons par exemple les expériences d'ionisation collisionnelle d'atomes de rubidium excités (Cheret et al. 1982).

En ce qui concerne la photoionisation des états excités des ions, les résultats expérimentaux sont très rares à cause des difficultés expérimentales encore non surmontées. Parallèlement à l'essor des méthodes expérimentales, il y a un regain d'intérêt considérable pour les études théoriques de photoionisation des états excités des atomes et des ions. Et ceci pour répondre à la demande des expérimentateurs mais aussi, d'un point de vue plus fondamental, pour mieux comprendre les phénomènes physiques mis en jeu. En effet si les caractéristiques générales de la photoionisation des atomes et des ions dans leur état fondamental sont bien connues grâce à de nombreuses études expérimentales et théoriques (Manson 1977, Starace 1982) il n'en est pas de même pour la photoionisation à partir de niveaux atomiques excités.

Le lancement au début des années 2000 de satellites (Chandra, XMM Newton...) pour l'observation des plasmas astrophysiques (Lewin, 2005 ; Müller *et al.*, 2014) dans le domaine des rayons X (d'énergies comprises entre 0,1 et 10 KeV) a été l'une des motivations pour la construction en laboratoire d'expériences visant à l'étude des processus d'interaction ions-photons dans cette gamme d'énergie. Le rayonnement synchrotron émis par les électrons circulant dans les anneaux de stockage constitue la source idéale de photons X grâce à sa forte intensité émise sur une très large gamme spectrale. Depuis lors, grâce à la mise au point de nouvelles techniques expérimentales à grand pouvoir de résolution, les études portant sur les processus de photoabsorption et photoionisation résonantes des atomes et des ions ont connu un développement considérable par l'utilisation des sources de rayonnement synchrotron et des lasers dans des expériences de spectroscopie. Avec le développement de ces techniques très avancées sur la spectroscopie des atomes et des ions il devient plus que jamais nécessaire d'avoir des modèles théoriques bien élaborés permettant une description détaillée des processus d'excitation et de désexcitation radiatives et non radiatives des résonances autoionisantes. L'étude des propriétés de ces résonances est très importante car elle concerne des applications très diversifiées dans plusieurs domaines de la physique contemporaine. Parmi ces domaines on peut citer : la physique des collisions atomiques et électroniques, la physique du solide, le diagnostic du plasma astrophysique ou de laboratoire. La description des résonances autoionisantes peut servir également dans l'interprétation des spectres d'Auger des ions multichargés. Une autre application importante des propriétés des résonances atomiques concerne la séparation des isotopes par photoionisation sélective à partir de partir des états d'autoionisation à l'aide de lasers accordables. En plus, avec de tels lasers l'étude des processus d'ionisation multiphoton est devenue une réalité dans les investigations sur la

dynamique de l'interaction des photons avec les atomes et les ions. Les études expérimentales et théoriques des états d'autoionisation ont permis d'obtenir beaucoup de données spectroscopiques sur les sections efficaces de photoionisation, les énergies d'excitation et largeurs naturelles pour divers atomes et ions. Notons que une des difficultés inhérentes à ces expériences réside dans la très faible densité d'ions cibles (typiquement  $10^3$  à  $10^5$  ions/cm<sup>3</sup>, comparable à la densité de l'ionosphère terrestre). Les faibles taux de comptage qui en résultent requièrent en compensation des temps d'acquisition des données excessivement longs, peu compatibles avec les temps d'expérience très limités disponibles dans les centres de rayonnement synchrotron (El Hassan, 2010). Il devient alors primordial de disposer avant la réalisation des expériences, d'une estimation aussi précise que possible des énergies de photon auxquelles rechercher les résonances de photoexcitation. C'est ainsi que plusieurs méthodes théoriques sont élaborées pour prédire les énergies de résonance à mesurer. Les premières méthodes *ab initio* (c'est-à-dire non empiriques) présentées sont principalement la méthode variationnelle de Hylleraas (Hylleraas, 1928) appliquée à l'étude de l'état fondamental des systèmes atomiques à deux électrons (appelés systèmes héliumoïdes), la méthode très sophistiquée de la rotation complexe appliquée à l'étude des états doublement excités des systèmes héliumoïdes (Ho, 1983 ; Ho and Bhatia, 1991), etc. Des méthodes plus élaborées ont également vues le jour avec le développement du rayonnement synchrotron, on peut citer principalement le formalisme des configurations multiples de type Dirac-Fock [Multiconfiguration Dirac-Fock (MCDF)] basée sur le code de Bruneau (Bruneau, 1984), le modèle de la matrice  $-R$  ( $R$ -matrix) le plus largement utilisé et basé sur le Dirac  $R$ -matrix Atomic Code (DARC) (Liang, 2013). Bien que conduisant à des résultats précis, toutes ces méthodes *ab initio* et tant d'autres sont basées sur des formalismes mathématiques complexes. De plus ces méthodes *ab initio* utilisent des ordinateurs superpuissants via des codes de calculs dont chacun dépend dans la nature du système atomique étudié. Parallèlement à ces méthodes *ab initio*, sont développées des méthodes analytiques plus souples dont la plus ancienne est la théorie des orbitales atomique de Salter (Slater, 1930). Dans un passé récent, une nouvelle méthode de résonance atomique connue sous le nom de méthode de la Constante d'Ecran par Unité de Charge Nucléaire (CEUCN) a été présentée (Sakho, 2007, Sakho 2013a). Contrairement aux méthodes *ab initio*, le formalisme de la CEUCN à l'avantage de conduire à des expressions analytiques simples sans faire recours ni à un développement mathématique excessif ni à l'utilisation de codes de calcul. Depuis 2006, le formalisme de la CEUCN a été appliqué avec succès au calcul des énergies de résonances aussi bien des

systèmes atomiques à deux électrons (Sakho *et al.*, 2006 – 2011 ; Sakho, 2017, 2018) qu'aux énergies de résonances des systèmes atomiques à plusieurs électrons (Sakho *et al.*, 2011-2016 ; Faye *et al.*, 2013 ; Diop *et al.*, 2013 ; Dieng *et al.*, 2014 ; Goyal *et al.*, 2016 ; Khatri *et al.*, 2016). De plus, le formalisme de la CEUCN a été utilisée en plus des méthodes *ab initio* MCDF et *R*-matrix pour prédire les énergies et largeurs de résonance de systèmes atomiques à plusieurs électrons lors de campagnes d'expériences au centre SOLEIL de rayonnement synchrotron en France (Al Shorman *et al.*, 2013 ; Gharabeh *et al.*, 2014 ; McLaughlin *et al.*, 2014, Bizau *et al.*, 2017). Dans tous ces travaux antérieurs, la procédure semi-empirique du formalisme de la CEUCN a été mise à profit excepté dans les travaux de Sakho *et al.*, (2006) où la procédure variationnelle combinant la théorie des perturbations stationnaires et le principe de variation de Ritz a été appliquée. Bien que très performante, la procédure semi-empirique de la méthode CEUCN est limitée car elle utilise incontestablement des données expérimentales existantes pour déterminer les constantes d'écran. Lorsqu'aucune donnée expérimentale n'est disponible, la procédure semi-empirique devient inopérante ; ce qui rend inapplicable le formalisme de la CEUCN. Pour plusieurs systèmes atomiques complexes multichargés ( $Z > 10$ ), il n'existe pas en général de données expérimentales pour un grand nombre d'états excités. D'où la nécessité de développer d'autres méthodes expérimentales ou théoriques plus sophistiquées et plus souples pour prédire des résonances au même titre que les méthodes *ab initio* MCDF et *R*-matrix. C'est dans ce cadre que la méthode de la CEUCN a été mise en place. Pour cette raison, nous avons jugé nécessaire dans ce travail d'initiation à la recherche, d'appliquer pour la première fois le formalisme de la CEUCN aux calculs des énergies de résonance et des largeurs naturelles des séries de Rydberg  $3s^2 3p^4 ns, nd$  dominant dans le spectre de raies de l'ion  $Ar^+$  présent dans les supernova. Qu'est-ce qu'une supernova ? Une supernova correspond à l'explosion d'une étoile et s'accompagne d'une augmentation de sa luminosité qui peut atteindre 10 milliards de fois celle du soleil pendant une dizaine de jours. Il s'agit donc de la disparition d'une étoile. Vue depuis la Terre, une supernova apparaît donc souvent comme une étoile nouvelle, alors qu'elle correspond en réalité à la disparition d'une étoile. La **figure 0** ci-dessous montre l'image de la supernova baptisée SN 1987A. La nomenclature des supernovae suit le format SN YYYYA ou SN YYYYaa où SN est l'abréviation de supernova, YYYY est l'année de découverte, A est une capitale latine et aa sont deux minuscules latines. Les 26 premières supernovas de l'année ont une lettre entre A et Z ; après Z, elles commencent par aa, ab, et ainsi de suite. Il est à noter qu'aucune supernova n'a été observée dans notre galaxie, la Voie lactée, depuis l'invention du télescope.

La plus rapprochée observée depuis est SN 1987A, survenue dans une galaxie voisine, le Grand Nuage de Magellan. Elles ont eu et jouent encore un rôle essentiel dans l'histoire de l'Univers, car c'est lors de son explosion en supernova que l'étoile libère les éléments chimiques qu'elle a synthétisés au cours de son existence et pendant l'explosion même, pour être diffusés dans le milieu interstellaire.



**Fig 1.1** : SN 1987A est une supernova du Grand Nuage de Magellan, une galaxie naine proche de la Voie lactée visible depuis l'hémisphère sud. Les premières observations du phénomène ont été faites quelques heures à peine après que son éclat eut atteint la Terre, dans la nuit du 23 février 1987 par plusieurs astronomes amateurs et professionnels d'Amérique du Sud, d'Australie et de Nouvelle-Zélande.

Ainsi les systèmes astrophysiques tels que les étoiles et les nébuleuses, émettent des spectres caractéristiques des éléments chimiques qui les composent. Mais si la lumière traverse de la matière froide, comme les couches extérieures des étoiles, on observe à la place un spectre d'absorption. Les raies sombres obtenues caractérisent alors les éléments présents dans la matière traversée. Parmi les systèmes atomiques ayant un intérêt majeur en astrophysique et qui font l'objet d'intenses recherches à l'échelle internationale tant au plan théorique qu'au plan expérimental, figurent les systèmes bérylliumoïdes, le magnésium, les ions du fluor F, du néon Ne, de l'argon Ar, du sélénium Se, etc. Parmi les éléments présents à l'état de traces dans les systèmes astrophysiques figure l'argon Ar. La surabondance de cet élément dans le spectre – X de jeunes supernovas est révélée par le satellite Chandra (Lewin, 2005). De plus, des raies spectrales de l'argon ont été observées dans le spectre d'émission des étoiles et des nébuleuses planétaires (Kraus *et al.*, 2005 ; Kniazev *et al.*, 2005) et son abondance fut déterminée à partir des spectres des raies des étoiles comme le Soleil (Anders et

Grevesse,1989). Ces observations stellaires témoignent de l'intérêt que revêt le calcul des paramètres de résonance (*énergies d'excitation, largeurs naturelles, longueurs d'onde, etc.*) de l'atome d'argon et de ses ions pour la modélisation des plasmas d'astrophysiques. Récemment, Covington *et al.*, (2011) ont réalisé les premières mesures expérimentales sur les énergies et largeurs de résonance des séries de Rydberg  $3s^23p^4(^1D_2)ns, nd$  et  $3s^23p^4(^1S_0)ns, nd$  de l'ion  $Ar^+$  en utilisant le rayonnement synchrotron. Seuls les résultats de ces auteurs existent à l'état actuel de la recherche.

Dans ce travail, d'initiation à la recherche on se fixe comme objectif de calculer les énergies et largeurs de résonance des séries de Rydberg  $3s^23p^4(^1D_2)ns, nd$  et  $3s^23p^4(^1S_0)ns, nd$  de l'ion  $Ar^+$  en utilisant cette fois une méthode purement théorique à savoir le formalisme de la CEUCN afin de les comparés aux résultats expérimentaux obtenus par Covington *et al* (2011).

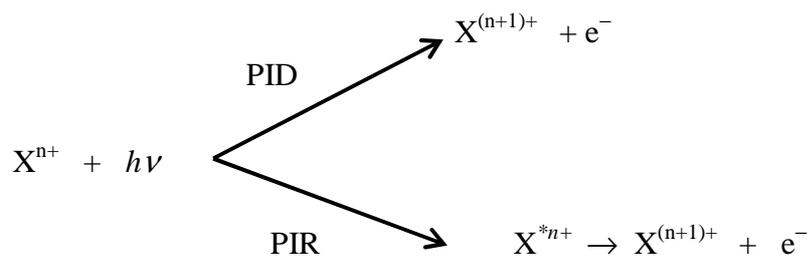
Ainsi, le présent travail, en plus de l'introduction, comprend trois chapitres et une conclusion suivie des annexes et de la bibliographie. Le premier chapitre est consacré aux généralités sur la photoionisation des systèmes atomiques. Le deuxième chapitre est réservé à une revue succincte de quelques méthodes expérimentales et théoriques de photoionisation résonante des systèmes atomiques à plusieurs électrons pour le calcul des énergies d'excitation et des largeurs naturelles. Enfin, le troisième chapitre est dédié à l'application de la théorie de la constante d'écran par unité de charge nucléaire à la photoionisation résonante de l'ion  $Ar^+$ . Dans ce chapitre, sont aussi présentés et discutés les résultats obtenus comparés aux données disponibles dans la littérature consultée. Enfin, nous tirons les principaux enseignements de ce travail et dégageons quelques perspectives.

# Chapitre 1

## Généralités sur la photoionisation des systèmes atomiques

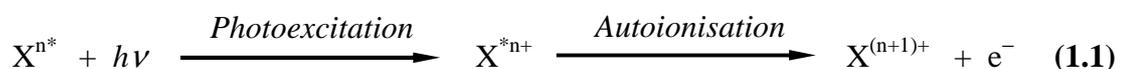
## 1.1. Principe de la photoionisation

Dans le cas général, on distingue principalement dans les plasmas constitués d'ions du type  $X^{n+}$ , deux processus de photoionisation: la photoionisation directe (PID) et la photoionisation résonante (PIR). Ces deux processus sont illustrés sur la figure 1.2 ci-après (Sakho, 2013 a). La PID correspond à la transition directe d'un des électrons de l'ion  $X^{n+}$  vers un état du continuum. C'est un processus à seuil, qui n'est possible que si l'énergie du photon du rayonnement lumineux est supérieure à l'énergie de liaison de l'électron ( $e^-$ ) dans l'ion  $X^{n+}$ . La PIR correspond à la transition directe d'un des électrons de l'ion  $X^{n+}$  vers un état du continuum de l'ion résiduel  $X^{(n+1)+}$ . La PIR est un processus évoluant en deux étapes : une photoexcitation suivie d'une autoionisation. Lorsque l'énergie du photon est supérieure au premier seuil d'ionisation de l'ion  $X^{n+}$  (*condition nécessaire pour l'autoionisation et non pour la photoexcitation*), l'absorption du photon par l'ion peut provoquer le transfert d'un ou de plusieurs électrons de l'ion  $X^{n+}$  vers ses orbitales liées vacantes.

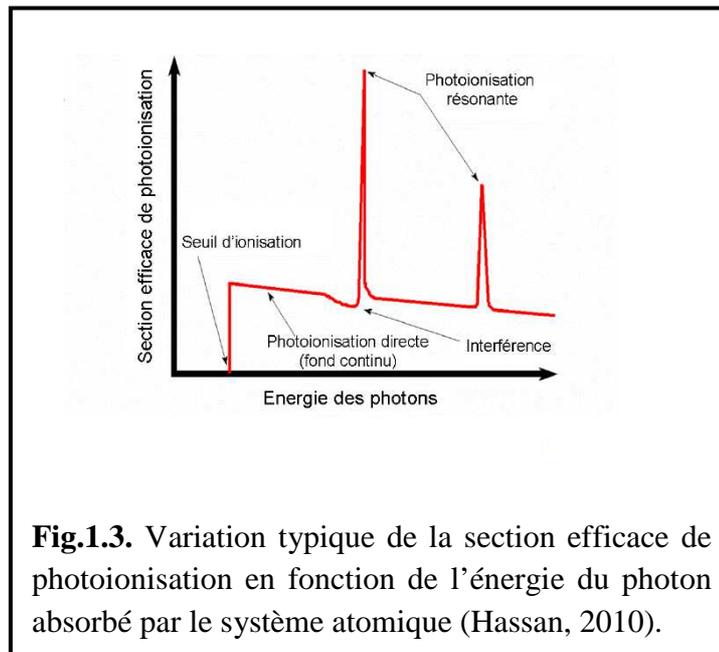


**Fig 1.2 : Illustration des deux principaux processus de photoionisation directe (PID) et de photoionisation résonante (PIR).**

Ce phénomène correspond au processus de photoexcitation et laisse l'ion dans un état excité  $X^{*n+}$ . 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  $X^{(n+1)+}$ . Le processus de photoionisation résonante peut alors être traduit formellement par le schéma :



Les processus de photoionisation directe et résonante peuvent être distingués en étudiant notamment la variation typique de la section efficace de photoionisation en fonction de l'énergie du photon absorbé. Comme l'indique la **figure 1.2**, la photoionisation directe est un processus à seuil (*ce processus n'est possible que si l'énergie du photon est supérieure à l'énergie de liaison de l'électron dans l'ion  $X^{n+}$* ). Ce processus est responsable du fond continu observé sur le spectre de l'énergie des photons. En général, la variation de la section efficace en fonction de l'énergie est lentement décroissante.



Par contre, la photoionisation résonante est responsable des raies observées (*caractérisées par les pics de la section efficace*) dans le spectre de la **figure 1.3**. On remarquera que les processus de photoionisation directe et résonante ont les mêmes états initial et final. Par conséquent, ils peuvent interférer et produire des raies de formes asymétriques appelées profils de Fano (Fano, 1961) comme l'indique la **figure1.3**. Ces formes asymétriques sont caractérisées par l'index de profil  $q$  qui est un paramètre intervenant dans la description des états autoionisants. Nous précisons brièvement ce à quoi renvoie ce concept.

Si  $E$  désigne l'énergie du spectre continu et  $E_\mu$  l'énergie de la résonance autoionisante, l'écart relatif  $\varepsilon$  par rapport à la résonance est défini par la relation:

$$\varepsilon = \frac{E - E_\mu}{(1/2)\Gamma_\mu^{tot}} \quad (1.2)$$

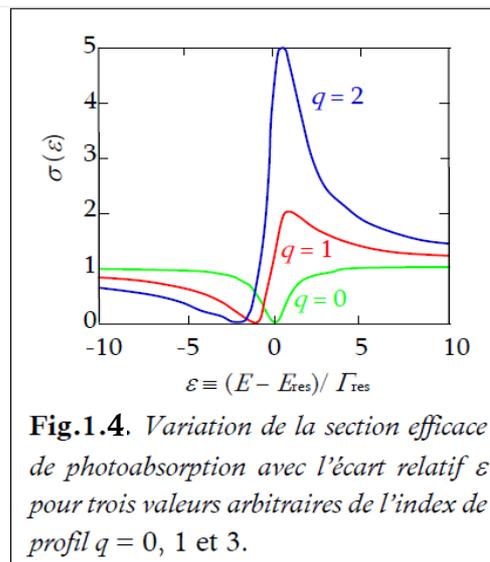
La section efficace de photoabsorption au voisinage de la résonance est alors définie par la formule de Fano (Fano, 1961):

$$\sigma = \sigma_b + \sigma_a \frac{(q + \varepsilon)}{\varepsilon^2 + 1} \quad (1.3)$$

Dans cette expression:

- $\sigma_a$  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 1.4** montre différents profils de raies pour trois valeurs de  $q$  d'après l'équation (1.3).

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.



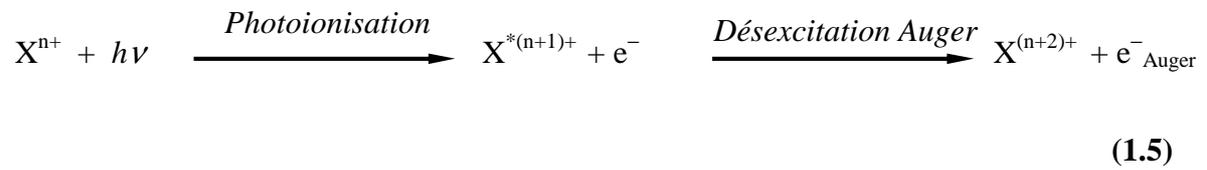
**Fig.1.4.** Variation de la section efficace de photoabsorption avec l'écart relatif  $\varepsilon$  pour trois valeurs arbitraires de l'index de profil  $q = 0, 1$  et  $3$ .

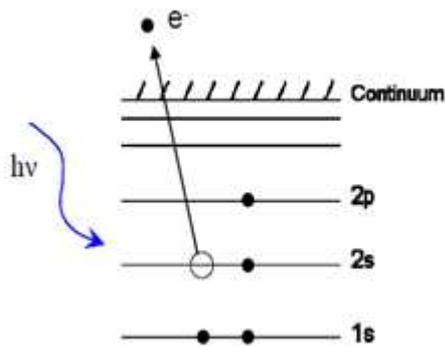
En plus des processus de photoionisation directe et résonante, on distingue la photoionisation dite multiple qui peut être directe ou résonante. La photoionisation multiple se manifeste à travers le processus du « Shake off » ou la désexcitation Auger. Le processus du Shake off se produit avec l'émission simultanée de deux ou de plusieurs électrons vers le continuum de l'ion résiduel (fig 1.4-B-a). Dans le cas de l'émission de deux électrons, ce processus peut être traduit par l'équation :



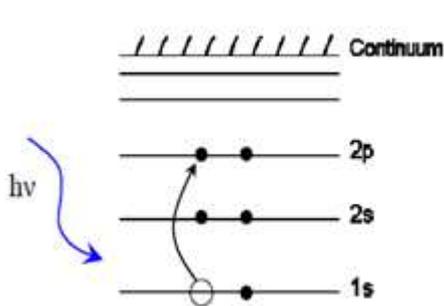
La désexcitation Auger est un mécanisme qui consiste à ioniser un atome (ou une molécule) en couche interne, laissant un ion résiduel dans un état excité. La lacune ainsi créée est comblée par une recombinaison d'un électron de la couche externe vers cette lacune.

L'énergie libérée est utilisée de nouveau par l'atome pour s'auto-ioniser en libérant, de ce fait, un électron appelé « électron Auger », d'énergie bien définie (fig 1.4-C-b). L'effet Auger peut être traduit par l'équation :

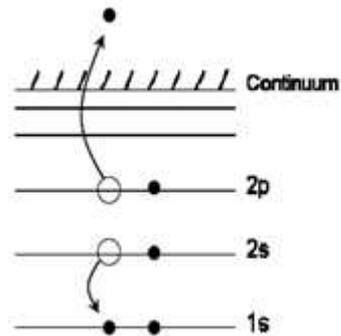




*A- Photoionisation directe*

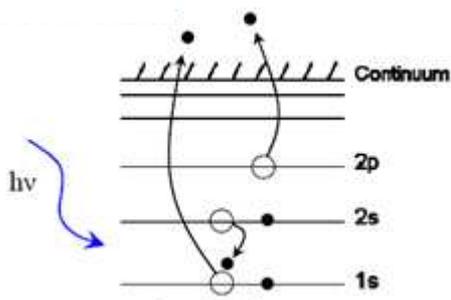


*a) Photoexcitation*

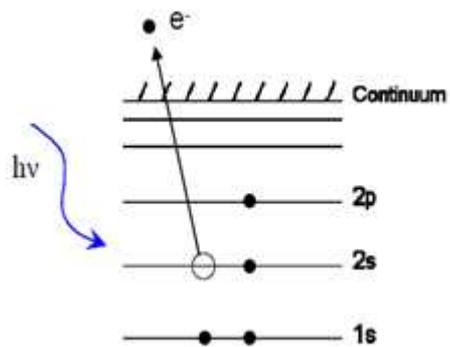


*b) autoionisation*

*B- Photoionisation résonante*



*a) « Shake off »*



*a) Effet Auger*

*C- Photoionisation multiple*

**Figure 1.5** : Illustration schématique des processus de photoionisation directe (A), photoionisation résonante (B) et photoionisation multiple (C) sur un schéma de niveaux de l'atome de bore.

## 1.2. Série de Rydberg

Les atomes de Rydberg contiennent un électron très excité avec un très grand nombre quantique principal. 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  $Z^*$ . Les atomes ou ions de Rydberg portent le nom du physicien suédois Johannes Rydberg qui les a définis en 1888. 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. Le spectre d'énergie dérivée de l'hamiltonien non relativiste des systèmes atomiques à deux électrons, est décrit pour chaque seuil d'excitation ( $N = 1, 2, 3, \dots$ ), par une enveloppe de séries de Rydberg.  $N$  et  $n$  représentent les nombres quantiques individuels des deux électrons avec  $n \geq N$ . L'enveloppe de plus basse énergie ( $N = 1$ ) contient les séries monoquantiques  $(\ell s n \ell)^{2S+1} L^\pi$  qui tendent vers le premier seuil d'ionisation. Les enveloppes de plus d'énergie supérieure contiennent les séries des états doublement excités, qui, dans la notation spectroscopique habituelle s'écrivent:  $(N \ell, n \ell')^{2S+1} L^\pi$  (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 :  $n = N, N+1, N+2, \dots$  ;  $\ell$  et  $\ell'$  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 (voir plus bas pour la définition de ce concept). 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  $^1P^0$  de Rydberg possible 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  $\ell$ . Notons que la configuration 4gnf est impossible puisque pour l'état g,  $N = 5$  et  $\ell = 4$ . Ce qui donnerait par exemple les configurations 5fng et 5gnf.

La parité «  $\pi$  » d'un système de particules (atome, ion, noyau, molécules...) dans l'état considéré est une propriété fondamentale liée à sa description quantique. En spectroscopie atomique, la notation d'un état quantique est déterminée par la valeur du nombre quantique du moment angulaire orbital  $\ell$ . On obtient ce qui suit.

Etat quantique	s	p	d	f	g	h
Valeur de $\ell$	0	1	2	3	4	5

Quant aux termes spectroscopiques notés par la lettre  $L$ , ils sont de même définis par la valeur de  $\sum_i \ell_i$ . Ce qui donne :

Terme spectroscopique	S	P	D	F	G	H
valeur de $\sum_i \ell_i$	0	1	2	3	4	5

Ainsi pour un système atomique à deux électrons se trouvant dans un état symétrique doublement excité  $(n\ell)^2L^\pi$ , les deux particules (électrons) ont la même valeur du nombre quantique orbital.

Parité d'un système se trouvant dans un état symétrique doublement excité du type  $(n\ell)^2L^\pi$ .

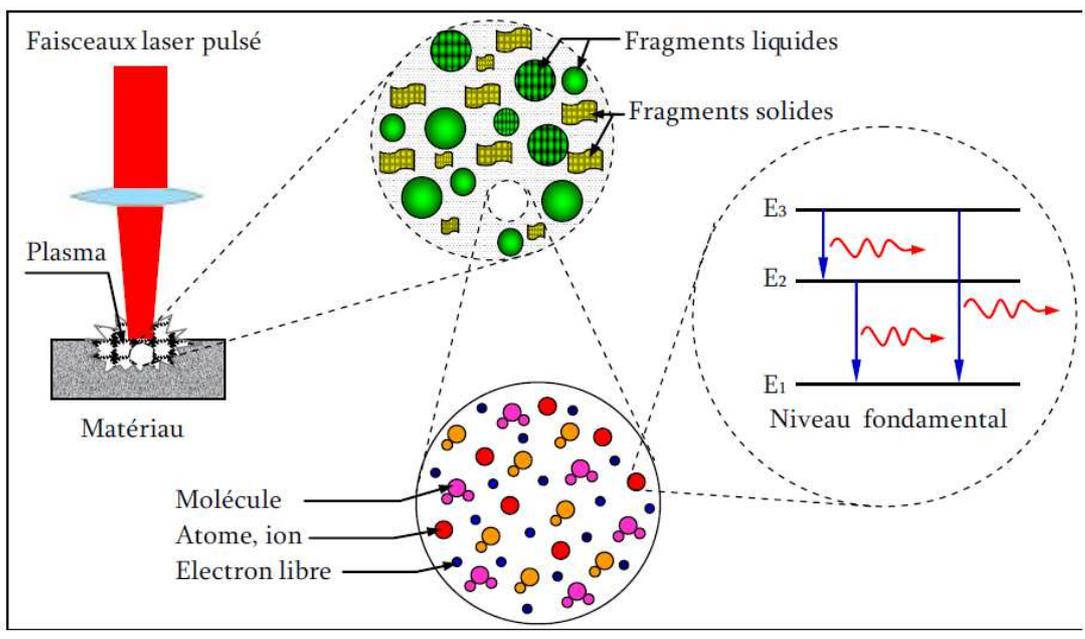
Valeur de $\ell$	0	1	2	3
valeur de $\sum_i \ell_i$	0	2	4	6
Parité du système	« e »	« e »	« e »	« e »
Terme spectroscopique	S	D	G	I
état excité doublement excité $(n\ell)^2L^\pi$	$(ns)^2 S^e$	$(np)^2 D^e$	$(nd)^2 G^e$	$(nf)^2 I^e$

### 1.3. Énergie et largeur naturelle de résonance

La photoionisation (PI) des ions est un processus fondamental dans de nombreux environnements plasma à haute température, tels que ceux qui se produisent dans les étoiles et les nébuleuses et dans les expériences de fusion à inertie-confinement. L'étude de la photoionisation résonante permet de déterminer les paramètres de résonance (*énergies, largeurs naturelles, forces d'oscillateurs, etc.*) des séries de Rydberg des systèmes atomiques multichargés constituant les plasmas stellaires et de laboratoire. La détermination des paramètres des séries de Rydberg permet entre autre de diagnostiquer les plasmas stellaires et de laboratoire (Kahn, 1999 ; Keller et Dreizler, 1999 ; Faenov *et al.*, 1999), de mettre au point

de nouveaux types de lasers (Harris, 1989), de réaliser la séparation d'isotopes par photoionisation sélective (Letokhov, 1987), etc.

À titre d'exemple, le diagnostic des plasmas de laboratoire créés par la spectroscopie sur plasma induit par laser (*LIBS, Laser Induced Breakdown Spectroscopy*) permet entre autre l'identification de la composition chimique d'un matériau à partir du calcul des énergies de résonance. La **figure 1.6** montre le principe de création d'un micro-plasma de laboratoire à l'aide d'un système LIBS (Sakho, 2013 a – Thèse d'état).



**Figure 1.6.** Principe de l'analyse élémentaire d'un échantillon de matière par la spectroscopie sur plasma induit par laser (*LIBS, Laser Induced Breakdown Spectroscopy*).

En envoyant le faisceau laser sur l'échantillon d'intérêt, qu'il soit solide, liquide ou gazeux, il se forme un micro-plasma constitué de gouttelettes liquides, de fragments solides, de molécules, d'atomes, d'ions et d'électrons. Les atomes et ions formés sont portés à des états excités. En se désexcitant vers le niveau fondamental 0 d'énergie  $E_0$ , ils émettent chacun un rayonnement lumineux caractéristique dont l'ensemble donne le spectre du plasma issu de l'échantillon analysé. La détermination des énergies de résonances  $E_2$  et  $E_1$  par rapport au niveau fondamental, permet le calcul des longueurs d'onde des raies émises lors des transitions  $2 \rightarrow 0$  et  $1 \rightarrow 0$ . Ce qui permet donc l'identification de l'élément chimique au sein duquel se produisent les transitions électroniques ainsi que de l'ensemble des éléments chimiques composant l'échantillon après analyse complète du spectre du plasma obtenu.

Par ailleurs, outre les paramètres de résonance tels que les énergies d'excitation et les largeurs naturelles, le développement des méthodes expérimentales et théoriques pour la détermination des forces d'oscillateurs résultent principalement du besoin grandissant des

astrophysiciens d'avoir des données fiables pour l'interprétation des spectres stellaires (McKenzie *et al.*, 1985).

Les forces d'oscillateur traduisent la probabilité de transition entre deux niveaux atomiques, et constituent un paramètre essentiel en spectroscopie atomique. Leur connaissance est fondamentale pour l'interprétation des spectres et le diagnostic du plasma astrophysique et du plasma de laboratoire. Ainsi, pour analyser les spectres provenant des nombreuses expériences dans le domaine spatial, déterminer la composition et l'abondance relative des divers éléments du milieu stellaire et interstellaire, un intérêt de plus en plus grandissant s'est développé autour de l'acquisition de données fiables sur les forces d'oscillateur. Pour l'interprétation des spectres, il est important d'avoir des valeurs aussi précises que possible des énergies et des forces d'oscillateur. De plus, les calculs sur les forces d'oscillateur sont extrêmement importants dans la compréhension et la création de nouveaux systèmes lasers. Du point de vue de la théorie quantique, les forces d'oscillateur notées  $f_{ij}$  sont liées à l'absorption d'un rayonnement de fréquence  $\nu_{ij}$  faisant passer les  $n_i$  atomes par l'unité de volume d'un niveau d'énergie inférieur  $E_i$  à un niveau d'énergie supérieur  $E_j$ . Les calculs montrent que la probabilité de l'émission spontanée  $A_{ji}$  peut donc s'écrire en fonction des forces d'oscillateur liées à l'émission  $f_{ji}$  par l'expression: (Sakho, 2013 a)

$$A_{ji} = \frac{2\pi e^2 \nu_{ji}^2}{\epsilon_0 m c^3} \times f_{ji} \quad (1.6)$$

Comme exemple d'obtention des forces d'oscillateur, considérons le cas des expériences où on mesure l'énergie totale absorbée. Dans ces expériences, on part de l'hypothèse habituelle d'un milieu homogène optiquement mince. L'énergie totale s'écrit alors dans ce cas :

$$E = \frac{1}{4\pi} B_{ij} n_i u_\nu h \nu L \quad (1.7)$$

Dans cette expression de l'énergie totale,  $n_i$  est la population du niveau  $i$ ,  $L$  est la longueur de la colonne d'absorption,  $u_\nu$  est la densité spectrale du rayonnement de la source continue, et  $B_{ij}$  est le coefficient d'Einstein qui s'exprime en fonction des forces d'oscillateur par l'expression suivante:

$$B_{ij} = \frac{e^2}{4\epsilon_0 m h \nu_{ij}} \times f_{ij} \quad (1.8)$$

A partir de l'expression de l'énergie totale, on peut obtenir la largeur naturelle  $\Gamma_\lambda$  de la raie d'absorption qui s'exprime également en fonction des forces d'oscillateur  $f_{ij}$  de la manière suivante:

$$\Gamma_\lambda = \frac{\pi e^2 \lambda^2 n_i f_{ij} L}{mc^2} \quad (1.9)$$

où  $\lambda$  est la longueur d'onde à laquelle on observe la raie d'absorption.

## Chapitre 2

### **Méthodes expérimentales et théoriques de photoionisation résonante**

## 2.1. Méthodes expérimentales

### 2.1.1. Montages de spectroscopie ionique en faisceaux colinéaires

L'avènement de la nouvelle génération de sources de rayonnement synchrotron et de nouvelles techniques de détection, ont permis d'améliorer sans cesse la résolution dans les spectres expérimentaux. Cette amélioration de la résolution a permis l'observation des détails les plus sensibles des résonances à travers la détermination de leurs indexes de profil, de leurs énergies et de leurs largeurs. Ainsi les premières expériences de photoabsorption utilisant le rayonnement synchrotron ont été l'œuvre de 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.

Un essor considérable a été connu par la production d'ions multichargés permettant de réaliser des expériences de collision lentes ions-ions et ions-atomes grâce à l'avènement des sources d'ions ECR (*Electron Cyclotron Resonance ion source*) qui ont permis la production d'ions multichargés. Les expériences de collisions lentes entre des ions multichargés et des atomes ou autres ions ont montré que les états doublement excités peuvent être obtenus par le biais de la double capture électronique. A titre d'exemple illustratif, réalisant une expérience de collision entre les ions  $N^{7+}$  et des cibles d'hélium et de dihydrogène, Bordenave-Montesquieu *et al.*, (1990) ont observé des états autoionisants correspondant aux séries de Rydberg  $nln'l'$  ( $n = 2,3,4$ , et  $n \geq n'$ ) des ions  $N^{5+}$ .

Dans les expériences de spectroscopie ionique en faisceaux colinéaires, un faisceau d'ions est mélangé à un faisceau de rayonnement synchrotron monochromatique. En mesurant le nombre d'ions ayant gagné une ou plusieurs charges dans l'interaction en fonction de l'énergie des photons (Peart *et al.*, 1987), on arrive à déterminer en valeur absolue, les sections efficaces de photoionisation simple et multiple. En 1991, l'équipe de recherche du Dr J.-M. Bizau a démontré la faisabilité d'étudier la photoionisation d'espèce ionique par spectrométrie électronique (Bizau *et al.*, 1991). Ce montage de faisceaux colinéaires, installé sur l'anneau de stockage Super-ACO d'Orsay à Paris et couplant une source d'ions avec un faisceau de rayonnement synchrotron issu d'un onduleur, permettait une analyse en énergie et en angle des électrons émis lors du processus de photoionisation à l'aide d'un spectromètre de type miroir cylindrique. Cette technique très performante, donne accès à de nombreux paramètres des processus de photoionisation et permet d'identifier les sous-couches

participant aux processus de photoionisation et de désexcitation non radiative des lacunes produites. Elle est cependant difficile à mettre en œuvre et est limitée à l'étude de processus de photoionisation résonante dans des ions de faible état de charge (Nouha, 2010).

### **2.1.2. Nouveaux montages de rayonnement synchrotron**

Le rayonnement synchrotron est le rayonnement électromagnétique émis par les particules chargées accélérées, comme les électrons qui se déplacent à des vitesses relativistes sur des trajectoires courbes dans les anneaux de stockage. L'utilisation de ce rayonnement présente plusieurs avantages pour nos expériences: une bonne intensité du flux de photons délivré, une grande stabilité et une large gamme spectrale qui permet d'étudier les processus de photoionisation dans les différentes sous-couches électroniques des ions. Grâce au développement de ce rayonnement, de nouveaux montages sont apparus à ASTRID au Danemark (Kjeldsen, *et al.*, 1999), SOLEIL en France (Bizau, *et al.*, 2011), ALS (Advanced Light Source) aux USA (Covington, *et al.*, 2011) et à Spring 8 au Japon (Oura, *et al.*, 2000). Le développement de ces sources de rayonnements synchrotron a fourni des données expérimentales de haute précision servant de base pour le perfectionnement des méthodes théoriques.

## **2.2. Méthodes théoriques**

### **2.2.1. Généralités**

Les études théoriques sur les états d'autoionisation sont devenues systématiques grâce à l'utilisation dans les expériences de spectroscopie atomique et ionique de sources intenses de photons comme les sources de rayonnement synchrotron et les lasers.

Concernant les méthodes appliquées au traitement des états autoionisants des systèmes atomiques à deux électrons, plusieurs techniques de calculs approchés ont été mises en œuvre. Parmi ces méthodes citons :

➤ La méthode de diagonalisation apparaît comme une simplification des méthodes de Fano et de Feschbach. Dans cette méthode, des simplifications liées à une prise en compte approximative de l'interaction des états autoionisants avec le continuum, sont introduites dans les équations générales de la théorie unifiée des réactions nucléaires de Feschbach. Cette méthode a été utilisée initialement par Balashov *et al* dans l'étude de la photoionisation résonante monocanale (interaction d'une ou plusieurs résonances avec un seul continuum) de l'hélium et des ions heliumoïdes sous le seuil d'excitation  $n = 2$  de l'ion résiduel. Senashenko et Wagué ont par la suite généralisé la méthode à l'étude de la photoionisation résonante

multicanale (interaction d'une ou plusieurs résonances avec plusieurs continua) pour la description de la résonance  $(3s3p) \ ^1P^0$  de l'hélium et dans l'étude des ions héliumoïdes multichargés sous les seuils d'excitation  $n = 2$  et  $n = 3$  de l'ion résiduel par Wagué. Du point de vue de la pratique, cette méthode consiste à résoudre des équations algébriques pour la détermination des fonctions d'onde et des énergies des résonances autoionisantes. La détermination de ces fonctions d'onde ainsi que de celle de l'état fondamental et du continuum permet de calculer les largeurs partielles et totales et la section efficace de photoionisation.

➤ La méthode variationnelle de Hylleraas a été appliquée avec succès dans le cas de l'état fondamental de l'hélium et de série isoélectrique par Hylleraas lui-même. La méthode est aussi très pratique pour le calcul des énergies totales des systèmes atomiques dans les états doublement excités. Ensuite, la méthode a été appliquée aux calculs des énergies des états symétriques doublement excités  $(2p^2)^1D$ ,  $(2d^2)^1G$  et  $(2f^2)^1I$  de l'hélium et des ions héliumoïdes de charge nucléaires  $Z \leq 12$  (Biaye *et al.*, 2001). Par la suite, en utilisant de nouvelles fonctions d'onde de formes spéciales de type Hylleraas (Biaye, 2005), la méthode variationnelle de Hylleraas a été employée dans la description des états doublement excités  $(nl)^2$  et  $(nl'nl')$   $n \leq 4$  de l'hélium et des ions héliumoïdes ( $Z \leq 12$ ) (Biaye *et al.*, 2005a, 2005b), de l'ion hydrogène négatif (Biaye *et al.*, 2009) et dans la description des états singlets et triplets des systèmes héliumoïdes (Dieng *et al.*, 2010).

➤ Parmi les diverses méthodes de calcul mise en œuvre pour la description des effets de corrélation électronique, la méthode des coordonnées hypersphériques a joué un rôle déterminant. Introduit par Macek, la méthode est très pratique pour rendre compte des effets de corrélation électronique liés aux mouvements radial et angulaire des deux électrons dans les états doublement excités. Cette méthode employée dans le calcul des énergies des états autoionisants  $(nl'nl')$  des systèmes atomiques à deux électrons a permis de mieux comprendre les phénomènes de corrélations électroniques, le classement des supermultiplets ou séries de Rydberg de l'hélium et des ions héliumoïdes (Lin, 1984 ; Herrick et Kellman, 1980ab] ;

➤ La méthode de rotation complexe consiste à observer le comportement de l'hamiltonien lors de l'extension de l'espace réel à l'espace complexe. Pour décrire l'état résonant, la plupart des auteurs ayant utilisé cette méthode, choisissent des fonctions d'onde de carrés intégrables du type Hylleraas. Le formalisme de la méthode de la rotation complexe et ses applications dans les processus de collisions atomiques a été développé par Ho (1983). Cette méthode a été largement utilisée notamment pour le calcul des énergies totales, des

largeurs et des énergies d'excitation des états autoionisants  $^1S^e$ ,  $^1P^o$  et  $^3P^o$  convergeant vers les seuils d'excitation  $n = 2 - 4$  (Ho, 1979 ; 1980) et  $n = 4$  et  $6$  (Ho, 1997).

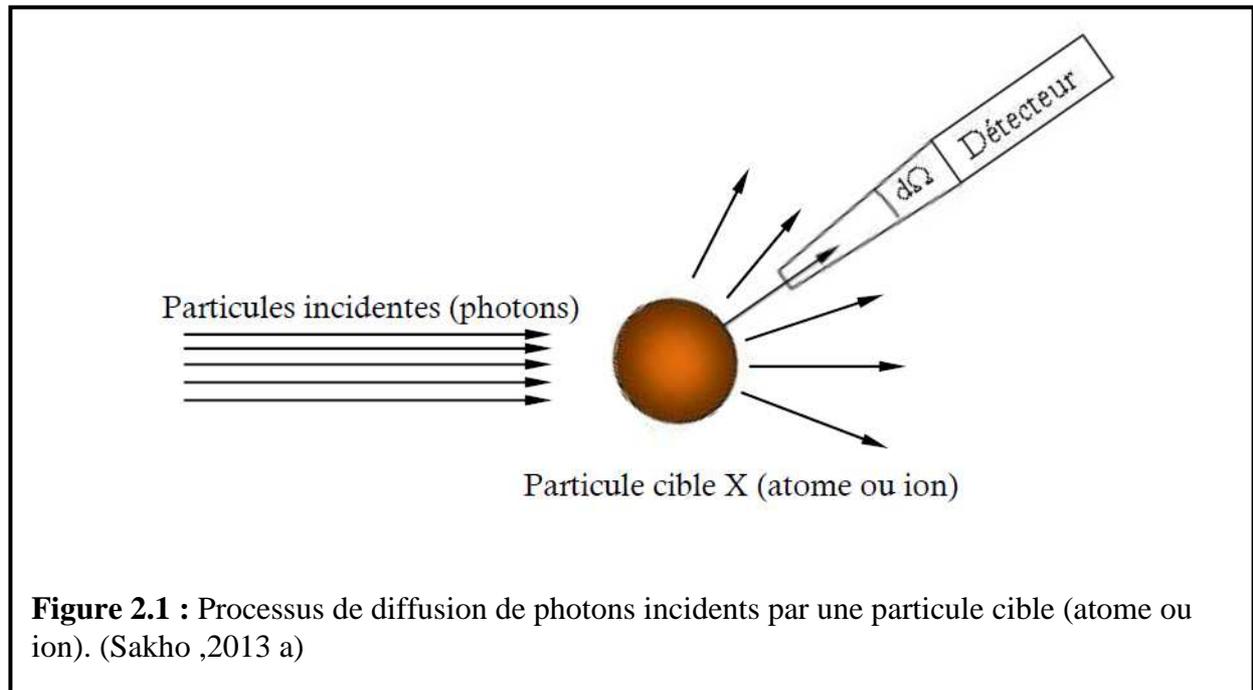
### 2.2.2. Méthodes de photoionisation résonante

Pour l'étude de la photoionisation résonante des systèmes atomiques à plus de deux électrons, il existe plusieurs approches parmi lesquels 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. La Méthode MCDF est souvent utilisée par l'équipe de recherches du Dr Jean-Marc Bizau pour faciliter l'interprétation des résonances observées dans les spectres de raies expérimentales de plusieurs ions multichargés (Bizau *et al.*, 2000ab ; Bizau *et al.*, 2001ab; Bizau *et al.*, 2003 ; Champeaux *et al.*, 2003 ; Bizau *et al.*, 2004 ; Bizau *et al.*, 2005 ; Hassan *et al.*, 2009 ; Bizau *et al.*, 2011 ; Bizau *et al.*, 2012 ; Al Shorman *et al.*, 2013).

Dans le cas général, les méthodes expérimentales utilisant le rayonnement synchrotron et les méthodes *ab initio* sont basées sur la détermination des sections efficaces de photoionisation. 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

En physique nucléaire ou en physique des particules, la section efficace est une grandeur physique reliée à la probabilité d'interaction d'une particule pour une réaction donnée. La section efficace intervient dans les processus de diffusion d'un flux de particules incidentes par une particule cible. Dans le cas particulier des processus de photoionisation, les particules incidentes sont des photons et la particule cible un système atomique que nous notons X (**figure 2.1**).



**Figure 2.1** : Processus de diffusion de photons incidents par une particule cible (atome ou ion). (Sakho ,2013 a)

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, on a :

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

Si on néglige 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 :

$$dN_d = J \Sigma(\Omega) d\Omega \quad (2.2)$$

Dans cette expression,  $\Sigma(\Omega)$  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 constituée 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 :

$$dN_d = JN_c \sigma(\Omega) d\Omega \quad (2.3)$$

où  $\sigma(\Omega)$  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 :

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

avec

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

$\sigma_{tot}$  est appelée section efficace totale de diffusion. Elle est exprimée en barn (1barn =  $10^{-24}$  cm<sup>2</sup>).

Comme nous l'avons expliqué plus haut, l'expression de la section efficace de photoionisation dépend de la méthode expérimentale ou théorique utilisée. Par exemple, dans les travaux expérimentaux de Hassan (2010) réalisés à SOLEIL, la section efficace de photoionisation est exprimée comme suit :

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

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  $J/\eta$  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 ;
- $E_{\text{res}} = E_d - E_i$  correspond à l'énergie de résonance ;
- $\hbar\omega$  est l'énergie du photon absorbé.

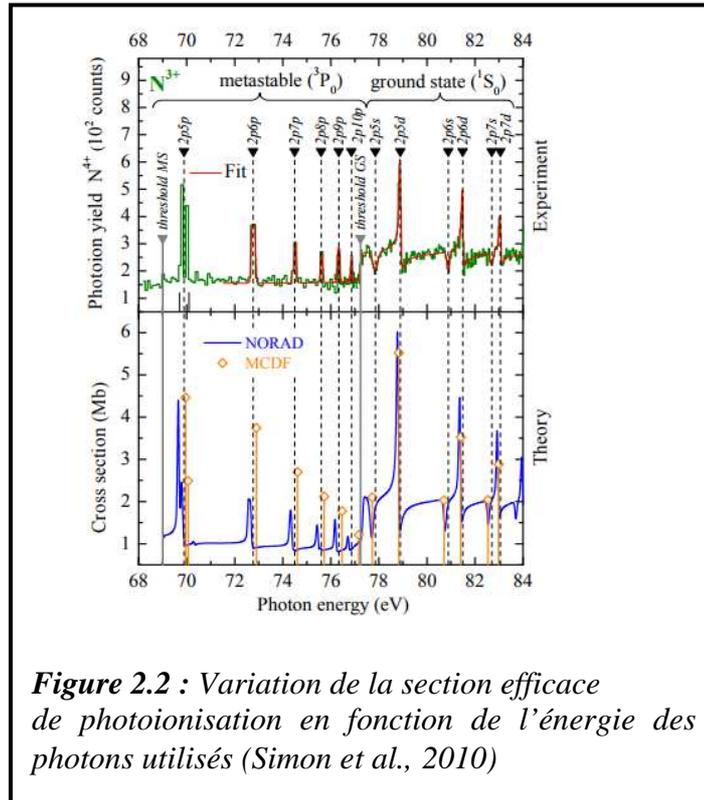
La force de résonance dépend des probabilités de transitions spontanées par unité de temps  $A_{i \rightarrow d}^{re}$  relative au processus de photoexcitation radiative et  $A_{i \rightarrow f}^a$  relative au processus d'autoionisation par désexcitation Auger et de la largeur de résonance, soit :

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

La **figure 2.2** ci-contre 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]. A partir du spectre des pics des sections efficaces de photoionisation expérimentale et théorique il est possible 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 : défaut quantique

### 2.4.1. Notion de défaut quantique

L'interprétation des données expérimentales et /ou théoriques, des valeurs des énergies de résonance obtenues se termine par une analyse des valeurs de ce que l'on appelle le défaut quantique. Quel est la signification physique de ce concept ?

Du point de vue physique, le défaut quantique noté  $\delta$  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 nul pour un état pur de type hydrogénoïde.

### 2.4.2. Formule standard du défaut quantique

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

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

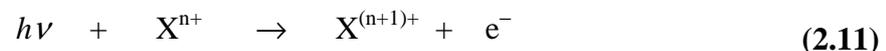
Avec:

- $E_n$ : 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*) ;
- $\delta$ : défaut quantique.

Par la suite d'une détermination expérimentalement ou théorique des énergies de résonance, la valeur du défaut quantique  $\delta$  peut être déduite de l'équation (2.9) puisque :

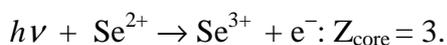
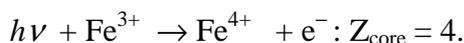
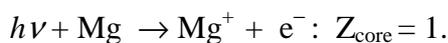
$$\delta = n - Z_{core} \sqrt{\frac{R}{(E_\infty - E_n)}} \quad (2.10)$$

Théoriquement,  $Z_{core}$  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 alors  $Z_{core} = (n+1)$ .

Par exemple, dans le cas particulier du magnésium Mg et des ions  $Fe^{3+}$  et  $Se^{2+}$ , on obtient respectivement d'après (2.11) :



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.

Du point de vue Théorique, le défaut quantique peut être calculé pour une série d'atomes isoélectroniques si on l'exprime en fonction de l'inverse du numéro atomique  $Z$ . En effet, le défaut quantique  $\delta$  est nul pour  $Z$  infini. Par conséquent,  $\delta$  doit décroître lorsque le numéro atomique  $Z$  augmente. Dans les travaux de Lin (1989), pour obtenir une très bonne précision dans les calculs, le défaut quantique est incorporé dans l'expression de la formule de Rydberg (en unité atomique) comme suit (Lin, 1989) :

$$E = -\frac{(Z - \sigma)^2}{(N - \delta)^2} \quad (2.12)$$

où le paramètre  $\sigma$  joue le rôle de constant d'écran et est relié à la valeur moyenne  $\langle \cos\theta_{12} \rangle$ , avec  $\theta_{12}$  l'angle que font entre elles les directions des rayons vecteurs des deux électrons relativement au noyau.

À titre d'exemple illustratif, le **tableau 1** ci-dessous (Sakho, 2013 a) montre le comportement correct du défaut quantique pour différentes mesures expérimentales à très haute résolution réalisées à ASTRID/SOLEIL (Bizau *et al.*, 2011) et à ALS (Covington *et al.*, 2011 ; Esteves *et al.*, 2011) et pour des calculs théoriques obtenus à l'aide de la R-matrix (McLaughlin and Ballance, 2012).

**Tableau 1:** Energies de résonance ( $E$ , en eV) et défauts quantiques ( $\delta$ ) pour la série de Rydberg  $4s^2 4p^2 ({}^3P_2)nd$  relativement à l'état fondamental  $4s^2 4p^3 {}^4S_{3/2}^{\circ}$  de l'ion  $Se^+$  (ALS: Esteves et al., 2011) ; pour la série de Rydberg  $3s^2 3p^4 ({}^1S_0)ns$  relativement à l'état fondamental  $3s^2 3p^5 {}^2P_{3/2}^0$  de l'ion  $Ar^+$  (ALS: Covington et al., 2011) et pour la série de Rydberg  $4s^2 4p^4 ({}^1S_0)nd$  prenant origine depuis l'état fondamental  $4s^2 4p^5 {}^2P_{3/2}^0$  de l'ion  $Kr^+$  (ASTRID/SOLEIL: Bizau et al., 2011 ; R-matrix : McLaughlin et Ballance, 2012).

ion	Se <sup>+</sup>		Ar <sup>+</sup>		Kr <sup>+</sup>			
	ALS		ALS		ASTRID/SOLEIL		R-matrix	
	$E$	$\delta$	$E$	$\delta$	$E$	$\delta$	$E$	$\delta$
4	-	-	-	-	24.501	<b>0.29</b>	24.520	<b>0.28</b>
5	-	-	-	-	25.910	<b>0.38</b>	25.954	<b>0.34</b>
6	-	-	-	-	26.740	<b>0.38</b>	26.761	<b>0.34</b>
7	-	-	29.822	<b>1.692</b>	27.230	<b>0.35</b>	27.235	<b>0.34</b>
17	21.489	<b>0.210</b>	-	-	-	-	-	-
18	21.510	<b>0.210</b>	-	-	-	-	-	-
19	21.528	<b>0.210</b>	-	-	-	-	-	-
20	21.543	<b>0.210</b>	-	-	-	-	-	-
21	21.556	<b>0.210</b>	-	-	-	-	-	-
22	21.567	<b>0.210</b>	-	-	-	-	-	-
23	21.577	<b>0.210</b>	-	-	-	-	-	-
24	21.586	<b>0.210</b>	-	-	-	-	-	-
25	21.593	<b>0.210</b>	-	-	-	-	-	-
...	...	...	...	...	...	...	...	...
$\infty$	21.682		31.774		28.461		28.461	

Quant au défaut quantique, il est exprimé sous la forme d'un développement en  $1/Z$  soit (Lin, 1989) :

$$\delta = \frac{a}{Z} + \frac{b}{Z^2} + \frac{c}{Z^3} \quad (2.13)$$

Pour déterminer les paramètres  $a$ ,  $b$  et  $c$  dans l'équation (2.13), Lin (1989) a utilisé les valeurs des énergies des séries de Rydberg  $2lnl'$  et  $3lnl'$  pour  $Z = 2, 3$ , et  $4$  et calculées par Lipsky *et al.* (1977). Les valeurs de  $a$ ,  $b$  et  $c$  sont déterminées pour chaque série de Rydberg considéré et dépendent entre autre des nombres quantiques de corrélations  $K$ ,  $T$  et  $A$ . Par exemple, pour les états  $2l3l' (K, T, A) {}^{2S+1}L^{\pi}$ , ces paramètres ont pour valeurs (Lin, 1989)

- $a = 0.904$ ,  $b = 0.220$ ,  $c = 0.880$  pour les états  $(1, 1, 0) {}^1S^{\circ}$  ;
- $a = -0.080$ ,  $b = 0.598$ ,  $c = 0.572$  pour les états  $(1, 0, 1) {}^1P^{\circ}$  ;
- $a = -0.050$ ,  $b = -0.459$ ,  $c = -0.559$  pour les états  $(0, -1, 0) {}^3P^{\circ}$ .

Ainsi, la connaissance des paramètres  $a$ ,  $b$  et  $c$  permet de calculer le défaut quantique pour divers systèmes atomiques en faisant varier  $Z$  selon (2.13).

## Chapitre 3

**Application de la théorie de la constante d'écran par unité de charge nucléaire à la photoionisation résonante de l'ion  $\text{Ar}^+$**

### 3.1. Bref description de la méthode de la constante d'écran par unité de charge nucléaire

#### 3.1.1. Expression des énergies de résonance

Dans le cadre de la méthode de la constante d'écran par unité de charge nucléaire (CEUCN), l'énergie de résonance d'une série de Rydberg est donnée par l'expression générale (Sakho 2013 a)

$$E_n = E_\infty - \frac{Z^2}{n^2} \left\{ 1 - \beta(nl, s, \mu, \nu, {}^{2s+1}L^\pi, Z) \right\}^2 \quad (3.1)$$

$\beta$  est appelé constante d'écran par unité de charge nucléaire et est donnée:

$$\beta(nl, s, \mu, \nu, {}^{2s+1}L^\pi, Z) = \frac{f_1(nl, {}^{2s+1}L^\pi)}{Z} + \frac{f_2({}^{2s+1}L^\pi)}{Z} \pm \sum_{k=1}^q \sum_{k'=1}^{q'} f_1^{k'} F(n, \mu, \nu, s) \times \left( \frac{1}{Z} \right)^k \quad (3.2)$$

La quantité  $\pm \sum_{k=1}^q \sum_{k'=1}^{q'} f_1^{k'} F(n, \mu, \nu, s) \times \left( \frac{1}{Z} \right)^k$  est un terme correctif introduit pour

stabiliser les valeurs des énergies de résonance de sorte que le défaut quantique soit constant lorsque  $n$  augmente, les termes correctifs étant exprimés en fonction de la constante d'écran  $f_k$  ayant la plus petite valeur (ici  $f_1$ ). Dans les expressions (3.1) et (3.2),  $s$  désigne le spin de l'électron occupant l'orbitale  $nl$  ( $s = 1/2$ ) et  $\mu$  et  $\nu$  ( $\nu > \mu$ ) sont les valeurs du nombre quantique principal  $n$  utilisées pour déterminer empiriquement les constantes d'écran  $f_1$  et  $f_2$  dans l'expression (3.2). On remarquera alors que deux valeurs expérimentales sont suffisantes pour déterminer les constantes d'écran dans le développement (3.2) puisque qu'il n'y a plus que deux inconnues  $f_1$  et  $f_2$ . En utilisant (3.2) l'énergie de résonance des séries de Rydberg des systèmes atomiques à plusieurs électrons s'écrit alors ;

$$E_n = E_\infty - \frac{Z^2}{n^2} \left\{ 1 - \frac{f_1(nl, {}^{2s+1}L^\pi)}{Z} - \frac{f_2({}^{2s+1}L^\pi)}{Z} \pm f_1 \times \sum_{k=1}^q F(n, \mu, \nu, s) \times \left( \frac{1}{Z} \right)^k \right\}^2 \quad (3.3)$$

Dans la pratique, de très bons résultats sont obtenus en posant :

$$f_1(nl, {}^{2s+1}L^\pi) = \frac{f_1({}^{2s+1}L^\pi)}{(n-1)}$$

L'expression (3.3) s'écrit alors sous la forme définitive :

$$E_n = E_\infty - \frac{Z^2}{n^2} \left\{ 1 - \frac{f_1(2S+1)L^\pi}{Z(n-1)} - \frac{f_2(2S+1)L^\pi}{Z} \pm \sum_{k=1}^q \sum_{k'=1}^{q'} f_1^{k'} F(n, \mu, \nu, s) \times \left( \frac{1}{Z} \right)^k \right\}^2 \quad (3.4)$$

De plus, dans certains cas, on a besoin de calculer les énergies de résonance pour toute une série isoélectronique de systèmes atomiques, par exemple systèmes héliumoïdes, lithiumoïdes, bérylliumoïdes, etc. Dans ce cas, les constantes d'écran  $f_1$  et  $f_2$  sont déterminées à partir des valeurs expérimentales des énergies de résonance d'un des systèmes atomiques de la série isoélectronique considéré. Par exemple on peut considérer He ou  $\text{Li}^+$ , ou..., pour les systèmes héliumoïdes, Li ou  $\text{Be}^+$ , ou..., pour les systèmes lithiumoïdes, Be ou  $\text{B}^+$ , ou..., pour les systèmes bérylliumoïdes, etc. On désigne alors par  $Z_0$  la charge nucléaire du système atomique X considéré pour déterminer empiriquement  $f_1$  et  $f_2$  et par  $Z$  la charge nucléaire de la série isoélectronique de X. Dans ce cas, l'énergie de résonance s'écrit d'après (3.4) :

$$E_n = E_\infty - \frac{Z^2}{n^2} \left\{ 1 - \frac{f_1(2S+1)L^\pi}{Z(n-1)} - \frac{f_2(2S+1)L^\pi}{Z} \pm \sum_{k=1}^q \sum_{k'=1}^{q'} f_1^{k'} F(n, \mu, \nu, s, Z_0) \times \left( \frac{1}{Z} \right)^k \right\}^2 \quad (3.5)$$

Comme l'indique les expressions générales (3.4) et (3.5), la seule difficulté réside dans la construction du facteur correctif

$$\pm \sum_{k=1}^q \sum_{k'=1}^{q'} f_1^{k'} F(n, \mu, \nu, s, Z_0) \times \left( \frac{1}{Z} \right)^k$$

Dans la pratique, l'expression correcte de ce facteur est recherchée par itération. On teste expression après expression et on arrête l'itération à partir de la dernière expression qui donne un défaut quantique constant lorsqu'on fait croître le nombre quantique  $n$  le long de la série de Rydberg considérée.

### 3.1.2. Expression des largeurs naturelles

Pour les largeurs de résonance, on peut avoir besoin de les calculer pour des états de résonance différents par la nature du terme spectral  $2S+1L^\pi$ . C'est le cas par exemple des états de résonance ( $1s2s^22p^2\ ^2P^\circ$ ,  $1s2s^22p^2\ ^2D$ ,  $1s2s^22p^2\ ^2S$ ) et ( $1s2s\ (^3S)\ 2p^3\ ^4P^\circ$ ,  $1s2s\ (^3S)\ 2p^3\ ^4D$ ,  $1s2s\ (^3S)\ 2p^3\ ^4S$ ) résultant respectivement des processus de photoexcitation de l'ion  $\text{N}^{2+}$  depuis l'état fondamental  $1s^22s^22p\ ^2P^\circ$  (Sakho 2013 a) :

$$h\nu + N^{2+}(1s^2 2s^2 2p^2 \ ^2P^\circ) \rightarrow N^{2+}(1s^2 2s^2 2p^2 \ ^2P^\circ, \ ^2D, \ ^2S)$$

$$h\nu + N^{2+}(1s^2 2s^2 2p^2 \ ^2P^\circ) \rightarrow N^{2+}(1s^2 2s^2 (3S) 2p^3 \ ^4P^\circ, \ ^4D, \ ^4S)$$

Pour ces états, les largeurs de résonance sont données par l'expression générale (en Rydberg):

$$\Gamma = Z^2 \left\{ 1 - \sum_q f_q \left( \frac{1}{Z} \right)^q \right\}^2 \quad (3.6)$$

Les constantes d'écran  $f_q$  dans l'expression (3.6) sont déterminées empiriquement. On notera que si le calcul concerne une série isoélectronique, les  $f_q$  seront exprimés en fonction du numéro atomique  $Z_0$  du système atomique considéré pour les déterminer.

Pour les séries de Rydberg convergeant vers le seuil d'excitation  $Nl$ , les largeurs de résonance sont données par l'expression générale (en Rydberg):

$$\Gamma = \frac{Z^2}{n^2} \left\{ 1 - \frac{f_1(2S+1L\pi)}{Z(n-1)} - \frac{f_2(2S+1L\pi)}{Z} \pm \sum_{k=1}^q \sum_{k'=1}^{q'} f_1^{k'} F(n, \mu, \nu, s, Z_0) \times \left( \frac{1}{Z} \right)^k \right\}^2 \quad (3.7)$$

### 3.1.3. Analyse des énergies de résonance

Comme nous l'avons précisé au chapitre 2, l'analyse des énergies de résonance est généralement faite en utilisant l'expression standard du développement du défaut quantique (2.9) que nous rappelons:

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

Dans ce travail, nous présentons une nouvelle méthode d'analyse des énergies de résonance basée sur le calcul de la charge effective  $Z^*$  (Sakho 2013 a). Pour définir  $Z^*$ , réécrivons l'expression générale (3.5) sous une forme analogue à l'expression standard du développement du défaut quantique (2.9). On obtient en y introduisant le Rydberg  $Ryd = R$ :

$$E_n = E_\infty - \frac{Z^{*2}}{n^2} R \quad (3.8)$$

La charge effective  $Z^*$  est alors définie par l'expression générale (Sakho 2013 a) :

$$Z^* = Z \left\{ 1 - \frac{f_1(2^{2S+1}L^\pi)}{Z(n-1)} - \frac{f_2(2^{2S+1}L^\pi)}{Z} \pm \sum_{k=1}^q \sum_{k'=1}^{q'} f_1^{k'} F(n, \mu, \nu, s, Z_0) \times \left( \frac{1}{Z} \right)^k \right\}^2 \quad (3.9)$$

En comparant les expressions (2.9) et (3.3), on établit la relation entre la charge effective  $Z^*$  et le défaut quantique comme suit :

$$Z^* = \frac{Z_{core}}{\left( 1 - \frac{\delta}{n} \right)} \quad (3.10)$$

Cette équation montre que :

$$\begin{cases} Z^* \geq Z_{core} & \text{si } \delta \geq 0 \\ Z^* \leq Z_{core} & \text{si } \delta \leq 0 \\ \lim_{n \rightarrow \infty} Z^* = Z_{core} \end{cases} \quad (3.11)$$

Ainsi, dans le cadre de la méthode de la constante d'écran par unité de charge nucléaire, les énergies de résonance mesurées ou calculées sont précises si les conditions d'analyse CEUCN/SCUCN (3.6) sont satisfaites. De plus, les conditions (8) montrent que le calcul de  $Z^*$  permet de connaître directement  $Z_{core}$  (*ce qui permet de connaître la charge de l'ion résiduel après le processus de photoionisation résonante*) et de préciser le signe du défaut quantique sans avoir à le calculer ou le mesurer.

### 3.1.4. Principe de détermination des constantes d'écran

Les constantes d'écran  $f_i$  dans les expressions générales (3.5) et (3.2) étant déduites des valeurs expérimentales, les paramètres  $f_i$  sont alors déterminés empiriquement avec une certaine erreur absolue liée aux erreurs de mesures expérimentales.

Dans le cadre de la méthode de la constante d'écran par unité de charge nucléaire, la constante d'écran  $f_i$  est déterminée avec une erreur absolue  $\Delta f_i$ . On écrit alors les constantes d'écran comme suit :  $f_i = f_{iexp} \pm \Delta f_i$ .

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

$$\begin{cases} E_n^+ = E_{exp} - \Delta E \Rightarrow f_i^+ \\ E_n^- = E_{exp} + \Delta E \Rightarrow f_i^- \end{cases} \quad (3.12)$$

En utilisant les valeurs des énergies de résonance pour  $n = \nu$  et  $n = \mu$  des séries de Rydberg considérés pour déterminer les  $f_i$ , il vient :

$$\begin{cases} E_{\nu}^{+} = E_{\text{exp}} + \Delta E \\ E_{\mu} = E_{\text{exp}} + \Delta E \end{cases} \Rightarrow f_1^{+} \text{ et } f_2^{+} ; \begin{cases} E_{\nu}^{-} = E_{\text{exp}} - \Delta E \\ E_{\mu}^{-} = E_{\text{exp}} - \Delta E \end{cases} \Rightarrow f_1^{-} \text{ et } f_2^{-} \quad (3.13)$$

Soit sous une forme condensée:

$$\begin{cases} E_{\nu}^{\pm} = E_{\text{exp}} \pm \Delta E \\ E_{\mu} = E_{\text{exp}} \pm \Delta E \end{cases} \Rightarrow f_1^{\pm} \text{ et } f_2^{\pm} \quad (3.14)$$

Nous déclinons dans ce qui suit le principe de détermination des erreurs absolues  $\Delta f_i$  et  $\Delta X$  respectivement sur les constantes d'écran  $f_i$  et sur les valeurs semi-empiriques des paramètres de résonance (énergies et largeurs naturelles).

### 3.1.5. Principe de détermination des erreurs absolues

Les erreurs absolues  $\Delta f_i$  sur les constantes d'écran  $f_i$  sont déterminées par l'expression :

$$\Delta f_i = \sqrt{\frac{(f_i - f_i^{+})^2 + (f_i - f_i^{-})^2}{2}} \quad (3.15)$$

Quant aux paramètres de résonance  $X$  (énergie et largeurs naturelles), les erreurs absolues sont estimées à partir de l'expression :

$$\Delta X_n = \frac{|X_n(f_1, f_2) - X_n(f_1^{+}, f_2^{+})| + |X_n(f_1, f_2) - X_n(f_1^{-}, f_2^{-})|}{2} \quad (3.16)$$

Cette expression générale permet d'estimer les erreurs absolues  $\Delta E$  et  $\Delta \Gamma$  respectivement pour les énergies de résonance ( $X = E_n$ ) et les largeurs de résonance ( $X = \Gamma$ ) des séries de Rydberg des systèmes atomiques à plusieurs électrons.

Pour plus de clarifications, nous allons maintenant calculer les incertitudes ( $\Delta f_i$ ) dans les constantes d'écran et celles ( $\Delta E$ ) dans les résonances d'énergie pour la série  $3s^2 3p^4 ({}^1D_2)ns$ , ( $j = 1/2$ ) de Rydberg.

A partir des mesures ALS de *Covington et al(2011)*, on obtient (en eV)

$$E_{\text{exp}}[({}^1D_2)8s] = 27,830 \pm 0,030 \text{ eV } (\nu = 8) \text{ et } E_{\text{exp}}[({}^1D_2)9s] = 28,173 \pm 0,030 \text{ eV } (\mu = 9).$$

En utilisant  $E_{\infty} = 29,189 \text{ eV}$ ,

1 Ry = 13,60569 eV pour la conversion d'énergie, l'Eq, (3.17) donne :

$$f_1 = -3,81619575 \quad \text{et} \quad f_2 = 16,0233452$$

Pour les paramètres  $f_1^{\pm}$ ,  $f_2^{\pm}$  nous obtenons en prenant en compte de l'équation (3.13)

$$\begin{cases} E_8(f_1^+, f_2^+) = 27,830 + 0,030 \\ E_9(f_1^+, f_2^+) = 28,173 + 0,030 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} f_1^+ = -4,33904950 \\ f_2^+ = 16,11956380 \end{cases} \quad (3.17)$$

$$\begin{cases} E_8(f_1^-, f_2^-) = 27,830 - 0,030 \\ E_9(f_1^-, f_2^-) = 28,173 - 0,030 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} f_1^- = -3,3976429 \\ f_2^- = 15,92926000 \end{cases}$$

En utilisant les résultats (3.17), on obtient de l'équation (3.15)

$$\Delta f_1 = 0,474 \quad \text{et} \quad \Delta f_2 = 0,095$$

Les constantes d'écran  $f_1$  et  $f_2$  sont ensuite exprimés avec les chiffres corrects comme suit

$$f_1 = -3,816 \pm 0,474 \quad \text{et} \quad f_2 = 16,023 \pm 0,095$$

## 3.2. Calculs des énergies de résonance et des largeurs naturelles des séries de Rydberg $3s^2 3p^4 ns, nd$ dominant dans le spectre de raies de l'ion $\text{Ar}^+$

### 3.2.1. Valeurs des constantes d'écran

L'expression stabilisée des énergies de résonance de la série  $3s^2 3p^4 ({}^1D_2) ns, nd$  de l'ion argon  $\text{Ar}^+$  est la suivante :

$$E_n = E_{\infty} - \frac{Z_0^2}{n^2} \left\{ 1 - \frac{f_1({}^1D_2)}{Z_0(n-1)} - \frac{f_2({}^1D_2)}{Z_0} \right\}^2 \quad (3.18)$$

Les constants d'écran  $f_i$  dans (3.17) sont déterminées en utilisant les valeurs expérimentales des énergies de résonance obtenues par *Covington et al.*, (2011) pour les états de Rydberg  $3s^2 3p^4 ({}^1D_2) ns, nd$  et  $3s^2 3p^4 ({}^1S_0) ns, nd$  dominant dans le spectre de raies de l'ion  $\text{Ar}^+$ .

Les résultats trouvés sur la base des expressions (3.17) sont consignés dans le **tableau 2** ci-dessous.

**Tableau 2 :** Valeurs des constantes d'écran  $f_i$  déterminées à partir des énergies de résonance  $E_r$  (en eV) des séries de Rydberg  $3s^2 3p^4(^1D_2)ns,nd$  et  $3s^2 3p^4(^1S_0)ns,nd$  dominant dans le spectre de raies de l'ion  $Ar^+$ , mesurées par Covington et al., (2011). La valeur de l'énergie limite  $E_\infty$  est tirée de NIST (Covington et al., 2011).

Etats	$\nu$	$\mu$	$E_n$	$E_\infty$	$f_1$	$f_2$
$3s^2 3p^4(^1D_2)ns(j=1/2)$						
$(^1D_2)8s$	8	–	27,830 (30)	29,189	– 3,817 (20)	16,022 (30)
$(^1D_2)9s$	–	9	28,173 (30)			
$3s^2 3p^4(^1D_2)nd (j = 1/2)$						
$(^1D_2)8d$	8	–	28,211 (30)	29,189	– 2,833(20)	16,260 (30)
$(^1D_2)9d$	–	9	28,426(30)			
$3s^2 3p^4(^1D_2)ns (j = 3/2)$						
$(^1D_2)8s$	8	–	27,821(30)	29,189	– 4,1945(20)	16,0625(30)
$(^1D_2)9s$	–	9	28,171(30)			
$3s^2 3p^4(^1D_2)nd (j = 3/2)$						
$(^1D_2)7s$	7	–	27,855(30)	29,189	–0,2096(20)	15,7732(30)
$(^1D_2)8s$	–	8	28,163(30)			
$3s^2 3p^4(^1S_0)ns (j = 1/2)$						
$(^1S_0)7s$	7	–	29,645(30)	31,596	–4,0512(20)	16,0244(30)
$(^1S_0)8s$	–	8	30,209(30)			
$3s^2 3p^4(^1S_0)nd (j = 3/2)$						
$(^1S_0)6d$	6	–	29,615(30)	31,596	–1,0564(20)	15,9218(30)
$(^1S_0)7d$	–	7	30,185(30)			
$3s^2 3p^4(^1D_2)ns (j = 1/2)$						
$(^1D_2)8s$	8	–	28,007(30)	29,367	–3,9140(20)	16,0298(30)
$(^1D_2)9s$	–	9	28,351(30)			
$3s^2 3p^4(^1D_2)nd (j = 1/2)$						
$(^1D_2)7d$	7	–	28,070(30)	31,367	– 0,689 (20)	15,9535(30)
$(^1D_2)8d$	–	8	28,389(30)			
$3s^2 3p^4(^1D_2)ns (j = 3/2)$						
$(^1D_2)8s$	8	–	27,999(30)	29,367	– 4,1268(20)	16,0528(30)
$(^1D_2)9s$	–	9	28,348(30)			
$3s^2 3p^4(^1D_2)nd (j = 3/2)$						
$(^1D_2)8d$	8	–	28,341(30)	29,367	–0,2096(20)	15,7732(30)
$(^1D_2)9d$	–	9	28,573(30)			

$3s^2 3p^4 ({}^1D_2) ns (j = 5/2)$						
$({}^1D_2) 8s$	8	–	27,999(30)	29,367	– 4,1268(20)	16,0528(30)
$({}^1D_2) 9s$	–	9	28,348(30)			
$3s^2 3p^4 ({}^1D_2) nd (j = 5/2)$						
$({}^1D_2) 7d$	7	–	27,983(30)	31,367	–1,3303(20)	15,9724(30)
$({}^1D_2) 8d$	–	8	28,335(30)			
$3s^2 3p^4 ({}^1S_0) nd (j = 5/2)$						
$({}^1S_0) 6d$	6	–	29,790(30)	31,596	–1,0605(20)	15,9209(30)
$({}^1S_0) 7d$	–	7	30,361(30)			

### 3.2.2. Expressions explicites des énergies totales et des largeurs naturelles

#### a) Expression des énergies totales

En utilisant l'expression générale (3.5) de l'énergie de résonance, on obtient pour les séries de Rydberg  $3s^2 3p^4 ({}^1D_2) ns, nd$  pour l'ion  $Ar^+(Z = Z_0 = 18)$  :

$$E_{n, j=1/2} = E_{\infty} - \frac{Z_0^2}{n^2} \left\{ 1 - \frac{f_1({}^1D_2, j=1/2)}{Z_0(n-1)} - \frac{f_2({}^1D_2, j=1/2)}{Z_0} + \frac{f_1({}^1D_2, j=1/2)}{Z_0^2} \times \frac{(n-\nu)(n-\mu)}{(n-\nu+s+1)(n-\mu/2)} \right\}^2 \quad (3.19)$$

$$E_{n, j=3/2} = E_{\infty} - \frac{Z_0^2}{n^2} \left\{ 1 - \frac{f_1({}^1D_2, j=3/2)}{Z_0(n-1)} - \frac{f_2({}^1D_2, j=3/2)}{Z_0} + \frac{f_1({}^1D_2, j=3/2)}{Z_0^2} \times \frac{(n-\nu)(n-\mu)}{(n+\nu-s-1)(n+\mu/2+1)^2} \right\}^2 \quad (3.20)$$

$$E_{n, j=5/2} = E_{\infty} - \frac{Z_0^2}{n^2} \left\{ 1 - \frac{f_1({}^1D_2, j=5/2)}{Z_0(n-1)} - \frac{f_2({}^1D_2, j=5/2)}{Z_0} + \frac{f_1({}^1D_2, j=5/2)}{Z_0^2} \times \frac{(n-\nu)(n-\mu)}{(n+\nu-2s-1)(n+\mu/2-s)^2} \right\}^2 \quad (3.21)$$

Dans ces expressions,  $\nu$  et  $\mu$  avec ( $\mu > \nu$ ) sont les valeurs du nombre quantique principal  $n$  des états  $3s^2 3p^4 ({}^1D_2) ns, nd$  de  $Ar^+$  utilisées pour évaluer empiriquement les constants d'écran  $f_i$  dans les formules (3.12) et (3.15). De plus,  $E_{\infty}$  est l'énergie limite de la série et obtenue à partir de la base de données atomiques NIST, National Institute of Standards and Technology (Covington *et al.*, 2011).

## b) Expressions des largeurs

En utilisant la formule générale (3.7), l'expression des largeurs de résonance des séries de Rydberg  $3s^2 3p^4 ({}^1D_2) ns, nd$  et  $3s^2 3p^4 ({}^1S_0) ns, nd$  de l'ion  $Ar^+$  s'écrit sous la forme (en Rydberg)

$$\Gamma[({}^1L_J)nl, j] = \frac{Z_0^2}{n^2} \left\{ 1 - \frac{f_1({}^1L_J, l, j)}{Z_0(n-1)} - \frac{f_2({}^1L_J, l, j)}{Z_0} - \frac{f_1({}^1L_J, l, j)}{Z_0^2} \times \frac{(n-\nu)(n-\mu)}{(n+\nu+\mu)^2} \right\}^2 \quad (3.21)$$

Comme pour les énergies de résonance, les constantes d'écran  $f_i$  dans l'expression (3.20) sont déterminées en utilisant les résultats expérimentaux de Covington *et al.*, (2011). Les résultats trouvés sur la base de l'expression (3.20) sont consignés dans le **tableau 3** suivant.

**Tableau 3 :** Valeurs des constantes d'écran  $f_i$  déterminées à partir des largeurs de résonance  $\Gamma_n$  (en meV) des séries de Rydberg  $3s^2 3p^4 ({}^1D_2) ns, nd$  et  $3s^2 3p^4 ({}^1S_0) ns, nd$  de l'ion  $Ar^+$ , mesurées par Covington et al., (2011).

Etats	$\nu$	$\mu$	$\Gamma_n$	$f_1$	$f_2$
<b><math>3s^2 3p^4 ({}^1D_2) ns (j=1/2)</math></b>					
$({}^1D_2)8s$	8	–	$103,4 \pm 10$	$-4,2728 \pm 0,8032$	$17,9129 \pm 0,1485$
$({}^1D_2)9s$	–	9	$64,8 \pm 10$		
<b><math>3s^2 3p^4 ({}^1D_2) nd (j = 1/2)</math></b>					
$({}^1D_2)8d$	8	–	$0,16 \pm 0,01$	$-0,1306 \pm 0,0152$	$17,9959 \pm 0,0114$
$({}^1D_2)9d$	–	9	$0,11 \pm 0,01$		
<b><math>3s^2 3p^4 ({}^1D_2) ns (j = 3/2)</math></b>					
$({}^1D_2)8s$	8	–	$0,44 \pm 0,01$	$-0,5210 \pm 0,0171$	$18,0293 \pm 0,0023$
$({}^1D_2)9s$	–	9	$0,22 \pm 0,01$		
<b><math>3s^2 3p^4 ({}^1D_2) nd (j = 3/2)</math></b>					
$({}^1D_2)7s$	7	–	$83,4 \pm 10$	$-8,4150 \pm 1,5366$	$18,8544 \pm 0,2888$
$({}^1D_2)8s$	–	8	$25,7 \pm 10$		
<b><math>3s^2 3p^4 ({}^1S_0) ns (j = 1/2)</math></b>					
$({}^1S_0)7s$	7	–	$1,36 \pm 0,01$	$-1,1405 \pm 0,0200$	$18,1201 \pm 0,0113$
$({}^1S_0)8s$	–	8	$0,39 \pm 0,01$		
<b><math>3s^2 3p^4 ({}^1S_0) nd (j = 3/2)</math></b>					
$({}^1S_0)6d$	6	–	$28,9 \pm 10$	$-1,0049 \pm 0,0003$	$17,9245 \pm 0,0030$
$({}^1S_0)7d$	–	7	$16,4 \pm 10$		

$3s^23p^4(^1D_2)ns (j = 1/2)$					
$(^1D_2)8s$	8	–	$103,4 \pm 10$	$-4,2728 \pm 0,8033$	$17,9129 \pm 0,1485$
$(^1D_2)9s$	–	9	$64,8 \pm 10$		
$3s^23p^4(^1D_2)nd (j = 1/2)$					
$(^1D_2)7d$	7	–	$0,16 \pm 0,01$	$-0,1306 \pm 0,0152$	$17,9959 \pm 0,0113$
$(^1D_2)8d$	–	8	$0,11 \pm 0,01$		
$3s^23p^4(^1D_2)ns (j = 3/2)$					
$(^1D_2)8s$	8	–	$0,44 \pm 0,01$	$-0,3445 \pm 0,0150$	$18,0037 \pm 0,2887$
$(^1D_2)9s$	–	9	$0,26 \pm 0,01$		
$3s^23p^4(^1D_2)nd (j = 3/2)$					
$(^1D_2)8d$	8	–	$25,7 \pm 10$	$-1,0881 \pm 0,0156$	$17,8077 \pm 0,1465$
$(^1D_2)9d$	–	9	$18,1 \pm 10$		
$3s^23p^4(^1D_2)ns (j = 5/2)$					
$(^1D_2)8s$	8	–	$0,27 \pm 0,01$	$-0,4989 \pm 0,0255$	$18,0356 \pm 0,0043$
$(^1D_2)9s$	–	9	$0,12 \pm 0,01$		
$3s^23p^4(^1D_2)nd (j = 5/2)$					
$(^1D_2)7d$	7	–	$2,25 \pm 0,01$	$-0,3724 \pm 0,0038$	$17,9720 \pm 0,0032$
$(^1D_2)8d$	–	8	$1,40 \pm 0,01$		
$3s^23p^4(^1S_0)nd (j = 5/2)$					
$(^1S_0)6d$	6	–	$25,2 \pm 10$	$-0,9385 \pm 0,0124$	$17,9294 \pm 0,0045$
$(^1S_0)7d$	–	7	$14,3 \pm 10$		

### 3.2.3. Présentation et discussion des résultats obtenus

Les résultats obtenus pour le calcul des énergies et largeurs de résonance sont regroupés dans les tableaux **2 – 14** et comparés aux quelques résultats expérimentaux (Covington *et al.*, 2011) disponibles dans la littérature. L'analyse des valeurs des énergies calculées est faite sur la base de l'expression générale (2.10) du défaut quantique et sur les conditions d'analyse SCUNC (3.11) préconisées par le présent formalisme. Nous rappelons ces expressions :

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

$$\begin{cases} Z^* \geq Z_{core} & \text{si } \delta \geq 0 \\ Z^* \leq Z_{core} & \text{si } \delta \leq 0 \\ \lim_{n \rightarrow \infty} Z^* = Z_{core} \end{cases}$$

Dans le tableau 4, nous comparons nos résultats sur le calcul des énergies de résonance ( $E$ ), du défaut quantique ( $\delta$ ) et des largeurs naturelles ( $\Gamma$  en meV) des séries de Rydberg  $3s^2 3p^4(^1D_2)ns$  ( $j=1/2$ ) de l'ion  $Ar^+$  avec les résultats expérimentaux ALS (Advanced Light Source) obtenus par Covington *et al.*, (2011) qui ont utilisé la méthode QB à matrice R- multicanaux (multichannel *R-matrix* QB). La comparaison montre que nos résultats sont généralement en très bon accord avec ceux obtenus par les auteurs précités. On peut souligner le très bon accord entre nos résultats SCUNC et les résultats obtenus en utilisant le rayonnement synchrotron (Covington *et al.*, 2011) jusqu'aux valeurs très élevées  $n = 30$ . De plus, comparativement aux valeurs expérimentales, de très bonnes concordances sont observées puisque les écarts énergétiques entre nos résultats et les valeurs ALS (Covington *et al.*, 2011) sont plus petits que 0.01 eV jusqu'à  $n = 30$ . Concernant le défaut quantique, on remarquera  $\delta$  est pratiquement constant sur l'ensemble des états lorsque  $n$  augmente et une valeur moyenne de 1.68 est obtenue. Ce bon comportement du défaut quantique permet de considérer nos résultats jusqu'à  $n = 30$  comme précis. Par ailleurs, La comparaison de nos résultats sur le calcul des largeurs de résonance ( $\Gamma$ ) avec ceux obtenus par ces mêmes auteurs montre que nos résultats (SCUNC) sont généralement en bon accord. Pour mieux apprécier la précision de nos calculs SCUNC, nous avons tracé sur la **figure 3.1**, les courbes de comparaison de nos résultats sur le calcul des énergies résonance ( $E_r$  en Ryd) des séries de Rydberg  $3s^2 3p^4(^1D_2)nd$  ( $j = 1/2$ ) avec quelques résultats expérimentaux trouvés dans la littérature consultée. Ces figures confirment les bonnes concordances entre nos résultats avec ceux des auteurs cités dans les **tableaux 4 et 5**.

Dans le tableau 5, nous avons listé les valeurs des énergies de résonance ( $E_r$  en eV), défaut quantique ( $\delta$ ) et les largeurs naturelles ( $\Gamma$  en meV) des séries de Rydberg  $3s^2 3p^4(^1D_2)nd$  ( $j = 1/2$ ). Nos résultats SCUNC: sont comparés aux résultats expérimentaux ALS (Advanced Light Source) de Covington *et al.*, (2011). On peut attirer l'attention sur le très bon accord entre nos résultats et ceux de Covington *et al.*, (2011) jusqu'à  $n = 30$ . L'accord entre nos résultats SCUNC et les résultats expérimentaux ALS (Covington *et al.*, 2011) est excellent remarquant que les écarts énergétiques entre nos résultats et les valeurs ALS n'ont jamais dépassé 0.005 eV. Jusqu'à  $n = 30$ , le défaut quantique  $\delta$  est pratiquement constant sur l'ensemble des états lorsque  $n$  augmente avec une valeur moyenne de 0.5715 en excellent accord avec la valeur moyenne expérimentale 0.561 obtenue par (Covington *et al.*, 2011). De plus, on peut noter des accords très satisfaisants entre nos résultats sur le calcul des largeurs de résonance ( $\Gamma$ ) et les résultats expérimentaux obtenus par Covington et al (2011). Ces bonnes concordances sont confirmées par les courbes de comparaison indiquées sur la **figure 3.1**.

Dans les tableaux 6 et 7 nous avons regroupé nos résultats sur le calcul des énergies de résonance ( $E_r$  en eV), le défaut quantique ( $\delta$ ) et les largeurs naturelles ( $\Gamma$  en meV) des séries de Rydberg  $3s^2 3p^4(^1D_2)ns,nd$  ( $j=3/2$ ). Nos résultats SCUNC sont comparés aux résultats expérimentaux ALS (Covington *et al.*, 2011). De très bons accords sont obtenus jusqu'à  $n = 30$  comme le confirme les courbes de comparaison la **figure 3.2**.

Le tableau 8 indiquent nos résultats sur le calcul des énergies de résonance ( $E_r$ , en eV), des défauts quantiques ( $\delta$ ) et des largeurs naturelles ( $\Gamma$  en meV) des séries de Rydberg  $3s^2 3p^4(^1S_0)ns$  ( $j=1/2$ ). Une lecture comparée des résultats consignés dans ce tableau montre un bon accord entre nos résultats et ceux des auteurs précités et cela jusqu'à  $n = 30$ . L'observation des courbes de comparaison de la **figure 3.3** affirme ces accords très satisfaisants.

Dans le tableau 9 nous présentons nos résultats sur le calcul des énergies ( $E_r$ , en eV) du défaut quantique ( $\delta$ ) et des largeurs naturelles des séries de Rydberg  $3s^2 3p^4(^1S_0)ns$  ( $j = 3/2$ ). A l'état actuel des connaissances, aucun résultat théorique n'est disponible. Cependant, l'analyse des résultats consignés dans ce tableau à partir du défaut quantique montre de très bons comportements de ce paramètre. Ce qui peut justifier la bonne précision de nos calculs. Sur la **figure 3.3** nous avons illustré cet accord avec le tracé de la courbe de comparaison de nos résultats avec ceux de Covington et al (2011).

Dans les tableaux 10 et 11, nous avons comparé nos résultats sur le calcul des énergies de résonance ( $E_r$  en eV), du défaut quantique ( $\delta$ ) et des largeurs naturelles ( $\Gamma$  en meV) des états de Rydberg  $3s^2 3p^4(^1D_2) ns,nd$  ( $j=1/2$ ) de l'ion  $Ar^+$  avec ceux obtenus par Covington et *al.*, (2011) qui ont appliqué la méthode *R-matrix*. Une lecture comparée des résultats consignés dans ces tableaux montre un bon accord entre nos résultats et ceux des auteurs précités, le défaut quantique  $\delta$  est pratiquement constant sur l'ensemble des états lorsque  $n$  augmente. Les courbes de comparaison de la **figure 3.4** mettent en évidence le bon accord entre nos résultats et les résultats expérimentaux de Covington et *al.*

Dans les tableaux 12 et 13, nous présentons nos résultats sur le calcul des énergies ( $E_r$ , en eV), du défaut quantique ( $\delta$ ) et des largeurs naturelles ( $\Gamma$  en meV) des séries de Rydberg  $3s^2 3p^4(^1D_2) ns,nd$  ( $j=3/2$ ) de l'ion  $Ar^+$  comparés aux seuls résultats expérimentaux disponibles de Covington *et al.*, (2011). De très bons accords sont obtenus jusqu'à  $n = 30$  pour l'ensemble de ces séries. De plus comparativement aux valeurs expérimentales, de très bonnes concordances sont observées puisque les écarts énergétiques entre nos résultats SCUNC sont minimales jusqu'à  $n = 30$  comparés aux valeurs obtenues par Covington *et al.*,

(2011) qui ont utilisé la méthode QB de la *R-matrix*. Ce parfait accord est confirmé par les courbes de comparaison de la **figure 3.5**

Dans les tableaux 14 et 15, nous comparons nos résultats sur le calcul des énergies de résonance ( $E_r$  en eV), du défaut quantique ( $\delta$ ) et des largeurs naturelles ( $\Gamma$  en meV) des séries de Rydberg  $3s^2 3p^4(^1D_2) ns, nd$  ( $j=5/2$ ) aux résultats expérimentaux de Covington et al (2011). La comparaison des résultats listés dans ces tableaux montre que les énergies de résonance ( $E_r$ ) SCUNC sont en très bon accord avec les valeurs expérimentales obtenues par Covington et al., (2011). On peut remarquer que le présent formalisme reproduit exactement nombre de valeurs expérimentales (Covington et al., 2011). Pour quelques séries, l'écart énergétique maximum relatif aux données expérimentales vaut 0,002 eV. Ce qui témoigne de l'excellent accord entre les résultats SCUNC et expérimentaux (Covington et al., 2011) pour l'ensemble des séries de Rydberg étudiées. Par ailleurs, les courbes de comparaison de la **figure 3.6** révèlent un léger écart entre nos résultats et ceux de Covington et al sur le calcul des énergies de résonance.

Enfin dans le tableau 16 nous avons regroupé nos résultats sur le calcul des énergies de résonances ( $E_r$  en eV), du défaut quantique ( $\delta$ ) et des largeurs de résonance ( $\Gamma$  en meV) des séries de Rydberg  $3s^2 3p^4(^1S_0)nd$  ( $j=5/2$ ) de l'ion  $Ar^+$ . Nos résultats SCUNC sont comparés aux résultats expérimentaux ALS (Covington et al., 2011). La comparaison montre que nos résultats sont généralement en bon accord avec ceux obtenus par Covington et al (2011) jusqu'à  $n = 30$  avec défaut quantique pratiquement constant. En plus les courbes de comparaison de la **figure 3.6** témoigne le bon accord entre nos résultats sur le calcul des énergies de résonance à l'égard des résultats expérimentaux de Covington et al.

**Tableau 4 :** Energie de résonance ( $E_r$ , en eV), défaut quantique ( $\delta$ ) et largeurs ( $\Gamma$ , en meV) pour les série  $3s^2 3p^4 ({}^1D_2)ns$  dominante observée dans les spectres de photoionisation provenant de l'état métastable  $3s^2 3p^5 {}^2P_{1/2}^0$  du chlore comme  $Ar^+$ . Les résultats présents (SCUNC) sont comparés aux calculs de QB à matrice R- multicanaux de Covington et al. [13]. Les incertitudes dans les présents calculs sont indiquées entre parenthèses et celle des largeurs de résonance est estimée à  $\pm 0,1\text{meV}$ .

Série de Rydberg $3s^2 3p^4 ({}^1D_2)ns (j = 1/2)$								
$n$	SCUNC		QB method			SCUNC		QB method
	$E_r$	$\delta$	$E_r$	$\delta$	$ \Delta E_r $	$\Gamma$	$\Gamma$	$ \Delta \Gamma $
8	27,8298	1,672	27,830	1,673	0,0002	103,40	103,4	0,00
9	28,1728	1,682	28,173	1,682	0,0002	64,80	64,8	0,00
10	28,4013	1,688	28,401	1,688	0,0003	43,06	43,0	0,06
11	28,5609	1,692	28,561	1,692	0,0001	30,00	30,0	0,00
12	28,6767	1,693	28,677	1,695	0,0003	21,72	21,8	0,08
13	28,7632	1,694	28,763	1,698	0,0002	16,26	16,3	0,04
14	28,8296	1,694	28,829	1,699	0,0006	12,51	12,5	0,01
15	28,8817	1,693	28,881	1,701	0,0007	9,85	9,8	0,05
16	28,9232	1,691	28,923	1,702	0,0002	7,93	7,8	0,13
17	28,9569	1,689				6,49		
18	28,9845	1,686				5,40		
19	29,0075	1,684				4,56		
20	29,0268	1,681				3,89		
21	29,0432	1,678				3,36		
22	29,0573	1,675				2,93		
23	29,0694	1,671				2,58		
24	29,0799	1,668				2,29		
25	29,0891	1,665				2,04		
26	29,0971	1,661				1,84		
27	29,1043	1,658				1,66		
28	29,1106	1,654				1,51		
29	29,1162	1,651				1,38		
30	29,1213	1,647				1,27		
...	...		...					
$\infty$	29,189		29,189					

- ✓  $|\Delta E_r| = |E^{SCUNC} - E^{exp}|$ : écart énergétique entre nos résultats SCUNC et les valeurs expérimentales ALS de Covington et al (2011)
- ✓  $|\Delta \Gamma| = |\Gamma^{SCUNC} - \Gamma^{exp}|$ : écart sur les largeurs naturelles entre nos résultats SCUNC et les valeurs expérimentales ALS de Covington et al (2011)

**Tableau 5 :** Energie de résonance ( $E_r$ , en eV), défaut quantique ( $\delta$ ) et largeurs ( $\Gamma$ , en meV) pour les série  $3s^2 3p^4 ({}^1D_2)nd$  dominante observée dans les spectres de photoionisation provenant de l'état métastable  $3s^2 3p^5 {}^2P_{1/2}^0$  du chlore comme ions  $Ar^+$ . Les résultats présents (SCUNC) sont comparés aux calculs de QB à matrice R- multicanaux de Covington et al. [13]. Les incertitudes dans les présents calculs sont indiquées entre parenthèses et celle des largeurs de résonance est estimée à  $\pm 0,1\text{meV}$ .

Séries de Rydberg $3s^2 3p^4 ({}^1D_2)nd (j = 1/2)$								
$n$	SCUNC		QB method		$ \Delta E_r $	SCUNC	QB method	$ \Delta \Gamma $
	$E_r$	$\delta$	$E_r$	$\delta$		$\Gamma$	$\Gamma$	
8	28,211	0,540	28,211	0,540	0,000	0,110	0,11	0,000
9	28,426	0,555	28,426	0,554	0,000	0,070	0,07	0,000
10	28,581	0,542	28,576	0,574	0,005	0,049	0,05	0,001
11	28,690	0,554	28,691	0,546	0,001	0,037	0,04	0,003
12	28,772	0,570	28,773	0,562	0,001	0,028	0,03	0,002
13	28,836	0,586	28,837	0,568	0,001	0,023	0,02	0,003
14	28,886	0,604	28,887	0,572	0,001	0,018	0,02	0,002
15	28,926	0,621	28,922	0,574	0,004	0,015	0,02	0,005
16	28,958	0,639				0,013		
17	28,985	0,656				0,011		
18	29,008	0,674				0,010		
19	29,027	0,691				0,008		
20	29,043	0,709				0,007		
21	29,057	0,727				0,007		
22	29,069	0,744				0,006		
23	29,079	0,762				0,005		
24	29,088	0,780				0,005		
25	29,096	0,797				0,004		
26	29,103	0,815				0,004		
27	29,110	0,833				0,004		
28	29,115	0,851				0,003		
29	29,120	0,868				0,003		
30	29,125	0,886				0,003		
...	...		...					
$\infty$	29.189		29.189					

- ✓  $|\Delta E| = |E^{SCUNC} - E^{exp}|$ : écart énergétique entre nos résultats SCUNC et les valeurs expérimentales ALS de Covington et al (2011)
- ✓  $|\Delta \Gamma| = |\Gamma^{SCUNC} - \Gamma^{exp}|$ : écart sur les largeurs naturelles entre nos résultats SCUNC et les valeurs expérimentales ALS de Covington et al (2011)

**Tableau 6 :** Energie de résonance ( $E_r$ , en eV), défaut quantique ( $\delta$ ) et largeurs ( $\Gamma$ , en meV) pour les série  $3s^23p^4 (^1D_2)ns$  dominante observée dans les spectres de photoionisation provenant de l'état métastable  $3s^2 3p^5 ^2P_{1/2}^0$  du chlore comme  $Ar^+$ . Les résultats présents (SCUNC) sont comparés aux calculs de QB à matrice R- multicanaux de Covington et al. [13]. Les incertitudes dans les présents calculs sont indiquées entre parenthèses et celle des largeurs de résonance est estimée à  $\pm 0,1meV$ .

Séries de Rydberg $3s^23p^4 (^1D_2)ns (j = 3/2)$								
SCUNC			QB method			SCUNC QB method		
$n$	$E_r$	$\delta$	$E_r$	$\delta$	$ \Delta E_r $	$\Gamma$	$\Gamma$	$ \Delta\Gamma $
8	27,8210	1,693	27,821	1,692	0,0000	0,441	0,44	0,001
9	28,1710	1,688	28,171	1,691	0,0000	0,220	0,22	0,001
10	28,4012	1,689	28,401	1,690	0,0002	0,133	0,13	0,003
11	28,5612	1,689	28,561	1,689	0,0002	0,088	0,08	0,008
12	28,6771	1,689	28,677	1,688	0,0001	0,062	0,08	0,018
13	28,7637	1,688	28,764	1,688	0,0003	0,045	0,04	0,005
14	28,8301	1,686	28,830	1,688	0,0001	0,033	0,02	0,013
15	28,8822	1,682	28,882	1,687	0,0002	0,025	0,02	0,005
16	28,9237	1,677	28,923	1,687	0,0007	0,020	0,02	0,000
17	28,9574	1,671				0,015		
18	28,9851	1,664				0,012		
19	29,0081	1,656				0,010		
20	29,0274	1,648				0,008		
21	29,0428	1,638				0,007		
22	29,0579	1,628				0,006		
23	29,0700	1,616				0,005		
24	29,0805	1,605				0,004		
25	29,0897	1,592				0,003		
26	29,0977	1,579				0,003		
27	29,1049	1,566				0,003		
28	29,1112	1,552				0,002		
29	29,1168	1,537				0,002		
30	29,1219	1,552				0,002		
...	...		...					
$\infty$	29.189		29.189					

- ✓  $|\Delta E| = |E^{SCUNC} - E^{exp}|$ : écart énergétique entre nos résultats SCUNC et les valeurs expérimentales ALS de Covington et al (2011)
- ✓  $|\Delta\Gamma| = |\Gamma^{SCUNC} - \Gamma^{exp}|$ : écart sur les largeurs naturelles entre nos résultats SCUNC et les valeurs expérimentales ALS de Covington et al (2011)

**Tableau 7 :** Energie de résonance ( $E_r$ , en eV), défaut quantique ( $\delta$ ) et largeurs ( $\Gamma$ , en meV) pour les série  $3s^2 3p^4 (^1D_2)nd$  dominante observée dans les spectres de photoionisation provenant de l'état métastable  $3s^2 3p^5 ^2P_{1/2}^0$  du chlore comme  $Ar^+$ . Les résultats présents (SCUNC) sont comparés aux calculs de QB à matrice R- multicanaux de Covington et al. [13]. Les incertitudes dans les présents calculs sont indiquées entre parenthèses et celle des largeurs de résonance est estimée à  $\pm 0,1meV$ .

Series $3s^2 3p^4 (^1D_2)nd (j = 3/2)$								
SCUNC			QB method			SCUNC QB method		
$n$	$E_r$	$\delta$	$E_r$	$\delta$	$ \Delta E_r $	$\Gamma$	$\Gamma$	$ \Delta \Gamma $
7	27,855	0,613	27,855	0,613	0,000	83,41	83,4	0,01
8	28,163	0,717	28,163	0,716	0,000	25,71	25,7	0,01
9	28,393	0,733	28,395	0,720	0,002	18,14	18,1	0,04
10	28,556	0,731	(28,590)	(0,442)	0,030	11,35	33,8	
11	28,673	0,726	28,672	0,738	0,089	6,71	3,8	
12	28,761	0,721	28,760	0,745	0,001	3,83	5,3	
13	28,828	0,718	28,827	0,744	0,001	2,12	44	
14	28,881	0,715	28,879	0,744	0,002	1,11	3,6	
15	28,922	0,715	28,921	0,744	0,001	0,55	2,9	
16	28,956	0,715				0,24		
17	28,984	0,716				0,08		
18	29,007	0,718				0,01		
19	29,026	0,721				0,00		
20	29,043	0,724				0,02		
21	29,057	0,728				0,05		
22	29,069	0,732				0,08		
23	29,079	0,737				0,12		
24	29,088	0,742				0,16		
25	29,096	0,747				0,19		
26	29,104	0,753				0,22		
27	29,110	0,759				0,25		
28	29,116	0,765				0,27		
29	29,121	0,771				0,29		
30	29,125	0,777	...			0,30		
...								
$\infty$	29,189		29,189					

**Tableau 8 :** Energie de résonance ( $E_r$ , en eV), défaut quantique ( $\delta$ ) et largeurs ( $\Gamma$ , en meV) pour les série  $3s^2 3p^4 ({}^1D_2)nd$  dominante observée dans les spectres de photoionisation provenant de l'état métastable  $3s^2 3p^5 {}^2P_{1/2}^0$  du chlore comme  $Ar^+$ . Les résultats présents (SCUNC) sont comparés aux calculs de QB à matrice R- multicanaux de Covington et al. [13]. Les incertitudes dans les présents calculs sont indiquées entre parenthèses et celle des largeurs de résonance est estimée à  $\pm 0,1\text{meV}$ .

Séries de Rydberg $3s^2 3p^4 ({}^1S_0)ns (j = 1/2)$								
$n$	SCUNC		QB method			SCUNC		QB method
	$E_r$	$\delta$	$E_r$	$\delta$	$ \Delta E_r $	$\Gamma$	$\Gamma$	$ \Delta \Gamma $
7	29,645	1,718	29,645	1,692	0,000	1,360	1,36	0,000
8	30,209	1,736	30,209	1,691	0,000	0,390	0,39	0,000
9	30,561	1,748	30,558	1,690	0,003	0,139	0,14	0,001
10	30,795	1,755	30,789	1,689	0,006	0,050	0,06	0,010
11	30,959	1,760	30,949	1,688	0,010	0,016	0,03	0,014
12	31,077	1,762	31,065	1,688	0,012	0,004	0,01	0,006
13	31,165	1,763	31,151	1,688	0,014	0,000	$< 10^{-2}$	
14	31,233	1,761	31,217	1,688	0,016	0,001	$< 10^{-2}$	
15	31,286	1,759	31,269	1,688	0,017	0,003	$< 10^{-2}$	
16	31,328	1,756	31,311	1,687	0,017	0,005	$< 10^{-2}$	
17	31,362	1,752				0,007		
18	31,390	1,747				0,009		
19	31,413	1,742				0,011		
20	31,433	1,736				0,012		
21	31,449	1,729				0,013		
22	31,464	1,722				0,014		
23	31,476	1,715				0,015		
24	31,486	1,708				0,015		
25	31,496	1,700				0,015		
26	31,504	1,692				0,015		
27	31,511	1,684				0,015		
28	31,517	1,676				0,015		
29	31,523	1,667				0,015		
30	31,528	1,658	...			0,015		
...								
$\infty$	31,596		31,596					

**Tableau 9 :** Energie de résonance ( $E_r$ , en eV), défaut quantique ( $\delta$ ) et largeurs ( $\Gamma$ , en meV) pour les série  $3s^2 3p^4 ({}^1D_2)nd$  dominante observée dans les spectres de photoionisation provenant de l'état métastable  $3s^2 3p^5 {}^2P_{1/2}^0$  du chlore comme  $Ar^+$ . Les résultats présents (SCUNC) sont comparés aux calculs de QB à matrice R- multicanaux de Covington et al. [13]. Les incertitudes dans les présents calculs sont indiquées entre parenthèses et celle des largeurs de résonance est estimée à  $\pm 0,1\text{meV}$ .

Séries de Rydberg $3s^2 3p^4 ({}^1S_0)ns (j = 3/2)$								
$n$	SCUNC		QB method		$ \Delta E_r $	SCUNC		QB method
	$E_r$	$\delta$	$E_r$	$\delta$		$\Gamma$	$\Gamma$	$ \Delta\Gamma $
6	29,615	0,759	29,615	0,732	0,000	28,91	28,9	0,01
7	30,185	0,789	30,185	0,746	0,000	16,41	16,4	0,01
8	30,540	0,822	30,540	0,754	0,000	10,14	10,1	0,04
9	30,775	0,856	30,775	0,759	0,000	6,68	6,6	0,08
10	30,940	0,890	30,938	0,763	0,002	4,61	4,6	0,01
11	31,060	0,925	31,057	0,766	0,003	3,31	3,3	0,01
12	31,149	0,961	31,145	0,767	0,004	2,44	2,5	0,06
13	31,218	0,996	31,213	0,769	0,005	1,85	1,9	0,05
14	31,272	1,032	31,266	0,770	0,006	1,43	1,5	0,07
15	31,316	1,068	31,308	0,771	0,008	1,13	1,2	0,07
16	31,351	1,105				0,91		
17	31,380	1,141				0,74		
18	31,404	1,177				0,61		
19	31,424	1,214				0,50		
20	31,441	1,250				0,42		
21	31,456	1,287				0,36		
22	31,469	1,324				0,31		
23	31,480	1,361				0,26		
24	31,489	1,397				0,23		
25	31,498	1,434				0,20		
26	31,506	1,471				0,17		
27	31,512	1,508				0,15		
28	31,518	1,545				0,14		
29	31,524	1,582	...			0,12		
30	31,528	1,619				0,11		
...								
$\infty$	31,596		31,596					

**Tableau 10 :** Energie de résonance ( $E_r$ , en eV), défaut quantique ( $\delta$ ) et largeurs ( $\Gamma$ , en meV) pour les série  $3s^23p^4 (^1D_2)nd$  dominante observée dans les spectres de photoionisation provenant de l'état métastable  $3s^2 3p^5 ^2P_{1/2}^0$  du chlore comme  $Ar^+$ . Les résultats présents (SCUNC) sont comparés aux calculs de QB à matrice R- multicanaux de Covington et al. [13]. Les incertitudes dans les présents calculs sont indiquées entre parenthèses et celle des largeurs de résonance est estimée à  $\pm 0,1meV$ .

Séries de Rydberg $3s^23p^4 (^1D_2)ns (j = 1/2)$								
$n$	SCUNC		QB method		$ \Delta E_r $	SCUNC		QB method
	$E_r$	$\delta$	$E_r$	$\delta$		$\Gamma$	$\Gamma$	$ \Delta\Gamma $
8	28,008	1,672	28,007	1,673	0,001	103,4	103,4	0,00
9	28,352	1,679	28,351	1,682	0,001	64,8	64,8	0,00
10	28,580	1,683	28,579	1,688	0,001	43,1	43,0	0,10
11	28,740	1,686	28,739	1,692	0,001	30,0	30,0	0,00
12	28,855	1,688	28,854	1,696	0,001	21,7	21,8	0,10
13	28,942	1,688	28,941	1,698	0,001	16,3	16,3	0,00
14	29,008	1,688	29,007	1,700	0,001	12,5	12,5	0,00
15	29,060	1,688	29,059	1,701	0,001	9,9	9,8	0,10
16	29,101	1,688	29,100	1,072	0,001	7,9	7,8	0,10
17	29,135	1,687				6,5		
18	29,163	1,686				5,4		
19	29,185	1,685				4,6		
20	29,205	1,684				3,9		
21	29,221	1,683				3,4		
22	29,235	1,681				2,9		
23	29,247	1,679				2,6		
24	29,258	1,678				2,3		
25	29,267	1,676				2,0		
26	29,275	1,674				1,8		
27	29,282	1,672				1,7		
28	29,289	1,669				1,5		
29	29,294	1,667				1,4		
30	29,299	1,664				1,3		
...	...		...					
$\infty$	29,367		29,367					

**Tableau 11 :** Energie de résonance ( $E_r$ , en eV), défaut quantique ( $\delta$ ) et largeurs ( $\Gamma$ , en meV) pour les série  $3s^2 3p^4 ({}^1D_2)nd$  dominante observée dans les spectres de photoionisation provenant de l'état métastable  $3s^2 3p^5 {}^2P_{1/2}^0$  du chlore comme  $Ar^+$ . Les résultats présents (SCUNC) sont comparés aux calculs de QB à matrice R- multicanaux de Covington et al. [13]. Les incertitudes dans les présents calculs sont indiquées entre parenthèses et celle des largeurs de résonance est estimée à  $\pm 0,1\text{meV}$ .

Séries de Rydberg $3s^2 3p^4 ({}^1D_2)nd (j = 1/2)$								
$n$	SCUNC		QB method			SCUNC		QB method
	$E_r$	$\delta$	$E_r$	$\delta$	$ \Delta E_r $	$\Gamma$	$\Gamma$	$ \Delta \Gamma $
7	28,070	0,529	28,070	0,521	0,000	0,19	0,16	0,03
8	28,389	0,548	28,389	0,540	0,000	0,11	0,11	0,00
9	28,604	0,537	28,603	0,554	0,001	0,07	0,07	0,00
10	28,756	0,524	28,754	0,574	0,002	0,05	0,05	0,00
11	28,867	0,517	28,869	0,546	0,002	0,04	0,04	0,00
12	28,950	0,515	28,951	0,562	0,001	0,03	0,03	0,00
13	29,014	0,517	29,014	0,568	0,000	0,02	0,02	0,00
14	29,064	0,523	29,065	0,572	0,001	0,02	0,02	0,00
15	29,104	0,532	29,105	0,574	0,001	0,02	0,02	0,00
16	29,137	0,543				0,01	$< 10^{-2}$	
17	29,164	0,556				0,01		
18	29,186	0,571				0,01		
19	29,205	0,586				0,01		
20	29,221	0,603				0,01		
21	29,235	0,621				0,01		
22	29,247	0,639				0,01		
23	29,257	0,658				0,01		
24	29,266	0,677				0,01		
25	29,274	0,697				0,01		
26	29,282	0,718				0,01		
27	29,288	0,739				0,01		
28	29,293	0,760				0,01		
29	29,298	0,781				0,01		
30	29,303	0,802	...			0,01		
...								
$\infty$	31,367		31,367					

**Tableau 12 :** Energie de résonance ( $E_r$ , en eV), défaut quantique ( $\delta$ ) et largeurs ( $\Gamma$ , en meV) pour les série  $3s^2 3p^4 (^1D_2)nd$  dominante observée dans les spectres de photoionisation provenant de l'état métastable  $3s^2 3p^5 ^2P_{1/2}^0$  du chlore comme  $Ar^+$ . Les résultats présents (SCUNC) sont comparés aux calculs de QB à matrice R- multicanaux de Covington et al. [13]. Les incertitudes dans les présents calculs sont indiquées entre parenthèses et celle des largeurs de résonance est estimée à  $\pm 0,1\text{meV}$ .

Séries de Rydberg $3s^2 3p^4 (^1D_2)ns (j = 3/2)$								
$n$	SCUNC		QB method			SCUNC		QB method
	$E_r$	$\delta$	$E_r$	$\delta$	$ \Delta E_r $	$\Gamma$	$\Gamma$	$ \Delta\Gamma $
8	27,998	1,701	27,999	1,692	0,001	0,44	0,44	0,00
9	28,347	1,701	28,348	1,691	0,001	0,26	0,26	0,00
10	28,579	1,701	28,579	1,690	0,000	0,13	0,13	0,00
11	28,740	1,699	28,739	1,689	0,001	0,07	0,08	0,01
12	28,857	1,696	28,855	1,688	0,002	0,04	0,06	0,02
13	28,944	1,693	28,941	1,688	0,001	0,02	0,04	0,02
14	29,010	1,690	29,098	1,688	0,080	0,01	0,03	0,02
15	29,062	1,686	29,060	1,687	0,002	0,01	0,02	0,01
16	29,104	1,681	29,101	1,687	0,003	0,00	0,02	0,02
17	29,137	1,676				0,00		
18	29,165	1,671				0,00		
19	29,188	1,665				0,00		
20	29,207	1,659				0,00		
21	29,223	1,652				0,00		
22	29,237	1,645				0,00		
23	29,249	1,638				0,00		
24	29,260	1,630				0,00		
25	29,269	1,622				0,00		
26	29,277	1,613				0,00		
27	29,284	1,604				0,00		
28	29,290	1,595				0,00		
29	29,296	1,586				0,00		
30	29,301	1,576				0,00		
...	...		...					
$\infty$	29,367		29,367					

**Tableau 13 :** Energie de résonance ( $E_r$ , en eV), défaut quantique ( $\delta$ ) et largeurs ( $\Gamma$ , en meV) pour les série  $3s^2 3p^4 ({}^1D_2)nd$  dominante observée dans les spectres de photoionisation provenant de l'état métastable  $3s^2 3p^5 {}^2P_{1/2}^0$  du chlore comme  $Ar^+$ . Les résultats présents (SCUNC) sont comparés aux calculs de QB à matrice R- multicanaux de Covington et al. [13]. Les incertitudes dans les présents calculs sont indiquées entre parenthèses et celle des largeurs de résonance est estimée à  $\pm 0,1\text{meV}$ .

Séries de Rydberg $3s^2 3p^4 ({}^1D_2)nd (j = 3/2)$								
$n$	SCUNC		QB method			SCUNC		
	$E_r$	$\delta$	$E_r$	$\delta$	$ \Delta E_r $	$\Gamma$	$\Gamma$	$ \Delta\Gamma $
8	28,341	0,717	28,341	0,716	0,000	25,7	25,7	0,00
9	28,573	0,721	28,573	0,720	0,000	18,1	18,1	0,00
10	28,736	0,712	(28,774)	0,422	0,038	10,2	33,8	23,6
11	28,853	0,709	28,850	0,738	0,003	7,2	3,8	3,40
12	28,940	0,710	28,937	0,745	0,003	5,4	5,3	0,01
13	29,007	0,713	29,004	0,744	0,003	4,2	4,4	0,02
14	29,059	0,718	29,047	0,744	0,012	3,4	3,6	0,02
15	29,100	0,723	29,099	0,744	0,001	2,8	2,9	0,01
16	29,134	0,729				2,3		
17	29,161	0,735				1,9		
18	29,184	0,741				1,7		
19	29,204	0,748				1,4		
20	29,220	0,755				1,3		
21	29,234	0,761				1,1		
22	29,246	0,768				1,0		
23	29,257	0,775				0,9		
24	29,266	0,783				0,8		
25	29,274	0,790				0,7		
26	29,281	0,797				0,6		
27	29,288	0,804				0,6		
28	29,293	0,811				0,5		
29	29,298	0,819				0,5		
30	29,303	0,826				0,4		
...	...		...					
$\infty$	29,367		29,367					

**Tableau 14 :** Energie de résonance ( $E_r$ , en eV), défaut quantique ( $\delta$ ) et largeurs ( $\Gamma$ , en meV) pour les série  $3s^2 3p^4 (^1D_2)nd$  dominante observée dans les spectres de photoionisation provenant de l'état métastable  $3s^2 3p^5 ^2P_{1/2}^0$  du chlore comme  $Ar^+$ . Les résultats présents (SCUNC) sont comparés aux calculs de QB à matrice R- multicanaux de Covington et al. [13]. Les incertitudes dans les présents calculs sont indiquées entre parenthèses et celle des largeurs de résonance est estimée à  $\pm 0,1\text{meV}$ .

Séries de Rydberg $3s^2 3p^4 (^1D_2)ns (j = 5/2)$								
$n$	SCUNC		QB method		$ \Delta E_r $	SCUNC	QB method	$ \Delta \Gamma $
	$E_r$	$\delta$	$E_r$	$\delta$		$\Gamma$	$\Gamma$	
8	27,998	1,694	27,999	1,692	0,001	0,27	0,27	0,00
9	28,347	1,694	28,348	1,691	0,001	0,12	0,12	0,00
10	28,579	1,690	28,579	1,690	0,000	0,05	0,07	0,02
11	28,740	1,683	28,739	1,689	0,001	0,02	0,04	0,02
12	28,857	1,674	28,855	1,688	0,002	0,01	0,03	0,02
13	28,944	1,663	28,941	1,688	0,003	0,00	0,02	0,02
14	29,010	1,650	29,008	1,688	0,002	0,00	0,01	0,01
15	29,062	1,636	29,060	1,687	0,002	0,00	<0,01	0,01
16	29,104	1,621	29,101	1,687	0,003	0,00	<0,01	
17	29,137	1,604				0,00		
18	29,165	1,587				0,00		
19	29,188	1,569				0,00		
20	29,207	1,551				0,01		
21	29,223	1,532				0,01		
22	29,237	1,512				0,01		
23	29,249	1,492				0,01		
24	29,260	1,472				0,01		
25	29,269	1,451				0,01		
26	29,277	1,429				0,01		
27	29,284	1,408				0,01		
28	29,290	1,386				0,01		
29	29,296	1,364				0,01		
30	29,301	1,341				0,01		
...	...		...					
$\infty$	29,367		29,367					

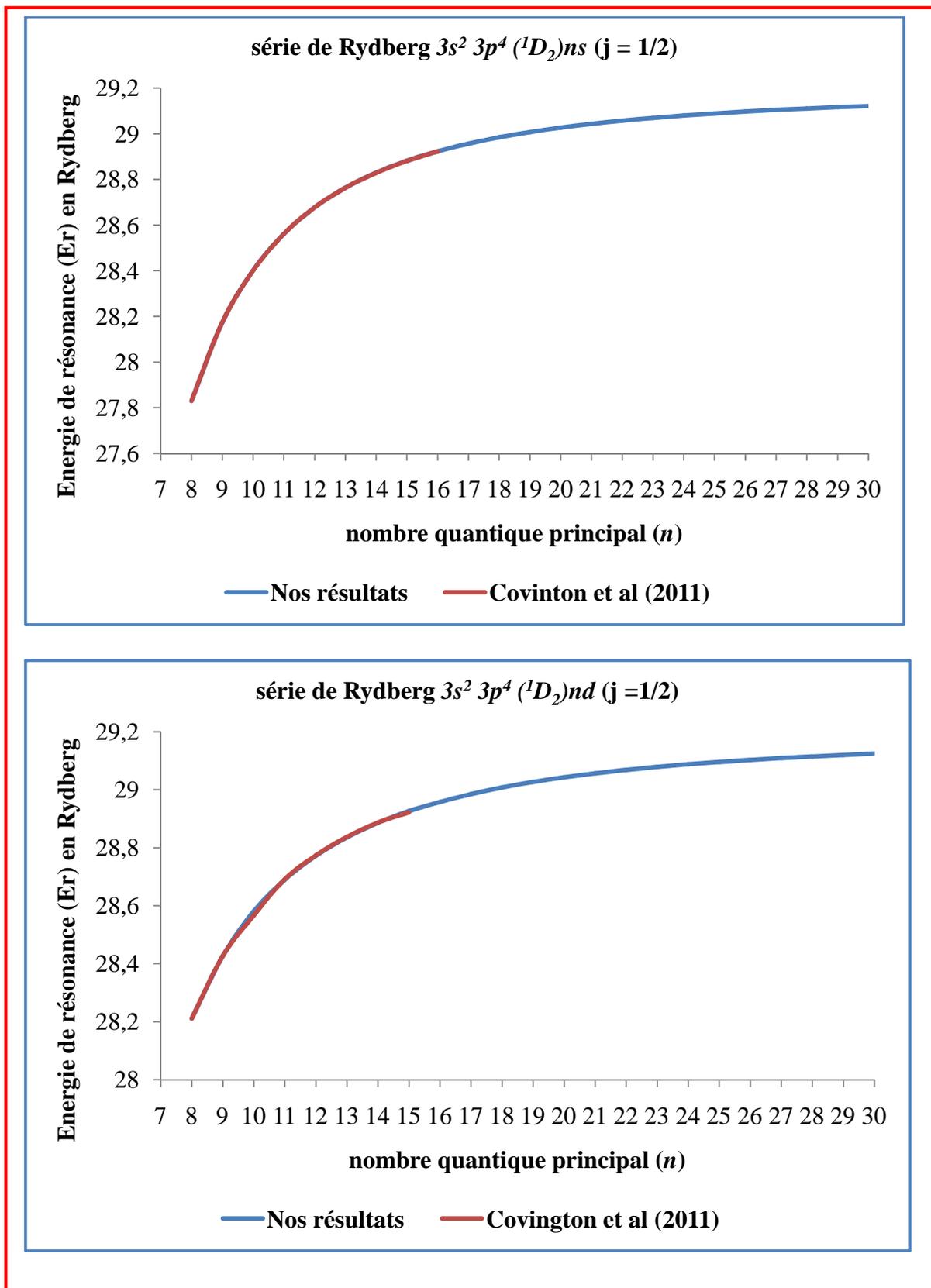
**Tableau 15 :** Energie de résonance ( $E_r$ , en eV), défaut quantique ( $\delta$ ) et largeurs ( $\Gamma$ , en meV) pour les série  $3s^23p^4 (^1D_2)nd$  dominante observée dans les spectres de photoionisation provenant de l'état métastable  $3s^2 3p^5 ^2P_{1/2}^0$  du chlore comme  $Ar^+$ . Les résultats présents (SCUNC) sont comparés aux calculs de QB à matrice R- multicanaux de Covington et al. [13]. Les incertitudes dans les présents calculs sont indiquées entre parenthèses et celle des largeurs de résonance est estimée à  $\pm 0,1\text{meV}$ .

Séries de Rydberg $3s^23p^4 (^1D_2)nd$ ( $j = 5/2$ )								
$n$	SCUNC		QB method		$ \Delta E_r $	SCUNC	QB method	$ \Delta \Gamma $
	$E_r$	$\delta$	$E_r$	$\delta$		$\Gamma$	$\Gamma$	
7	27,983	0,729	27,983	0,729	0,000	2,25	2,25	0,00
8	28,335	0,738	28,335	0,737	0,000	1,40	1,40	0,00
9	28,569	0,742	28,569	0,742	0,000	0,93	0,94	0,01
10	28,731	0,749	28,731	0,745	0,000	0,65	0,66	0,01
11	28,848	0,757	28,849	0,748	0,001	0,47	0,40	0,07
12	28,936	0,767	28,937	0,750	0,001	0,36	0,33	0,03
13	29,003	0,777	29,004	0,751	0,001	0,27	0,26	0,01
14	29,055	0,788	29,057	0,752	0,002	0,22	0,20	0,02
15	29,097	0,800	29,099	0,753	0,002	0,17	0,16	0,01
16	29,131	0,811				0,14	$< 10^{-2}$	
17	29,159	0,823				0,12		
18	29,182	0,835				0,10		
19	29,202	0,848				0,08		
20	29,218	0,860				0,07		
21	29,233	0,873				0,06		
22	29,245	0,885				0,05		
23	29,256	0,898				0,05		
24	29,265	0,911				0,04		
25	29,273	0,924				0,04		
26	29,280	0,936				0,03		
27	29,287	0,949				0,03		
28	29,293	0,962				0,03		
29	29,298	0,976				0,02		
30	29,302	0,989	...			0,02		
...								
$\infty$	31,367		31,367					

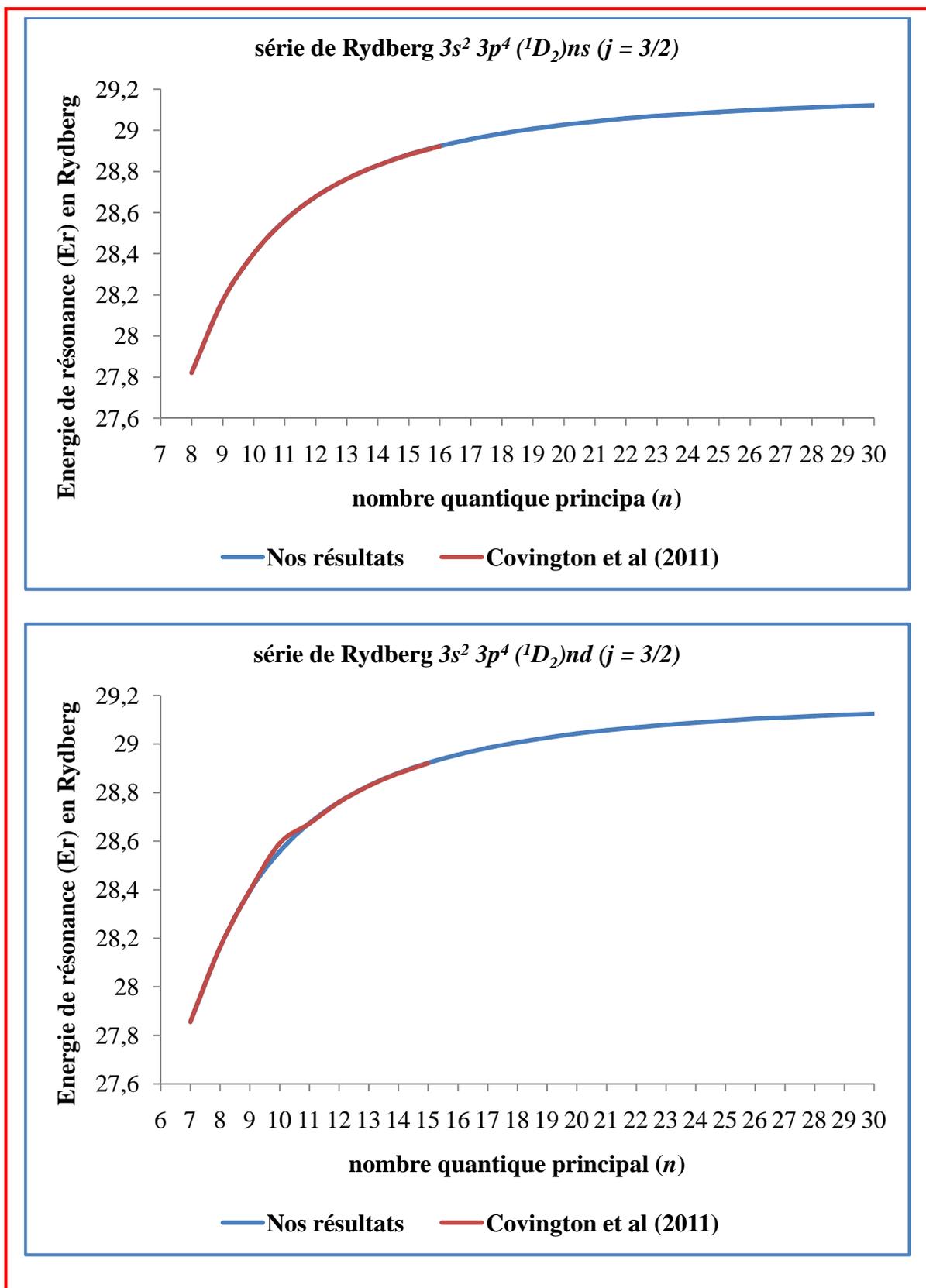
**Tableau 16 :** Energie de résonance ( $E_r$ , en eV), défaut quantique ( $\delta$ ) et largeurs ( $\Gamma$ , en meV) pour les série  $3s^23p^4 (^1D_2)nd$  dominante observée dans les spectres de photoionisation provenant de l'état métastable  $3s^2 3p^5 ^2P_{1/2}^0$  du chlore comme  $Ar^+$ . Les résultats présents (SCUNC) sont comparés aux calculs de QB à matrice R- multicanaux de Covington et al. [13]. Les incertitudes dans les présents calculs sont indiquées entre parenthèses et celle des largeurs de résonance est estimée à  $\pm 0,1\text{meV}$ .

Séries de Rydberg $3s^23p^4 (^1S_0)nd (j = 5/2)$								
$n$	SCUNC		QB method		$ \Delta E_r $	SCUNC		QB method
	$E_r$	$\delta$	$E_r$	$\delta$		$\Gamma$	$\Gamma$	$ \Delta\Gamma $
6	29,790	0,735	29,790	0,763	0,000	25,2	25,2	0,00
7	30,361	0,749	30,361	0,794	0,000	14,3	14,3	0,00
8	30,717	0,757	30,717	0,825	0,000	8,3	8,8	0,50
9	30,954	0,763	30,952	0,855	0,002	5,5	5,8	0,30
10	31,119	0,766	31,116	0,884	0,003	3,8	4,0	0,20
11	31,239	0,769	31,234	0,912	0,005	2,8	2,9	0,10
12	31,329	0,771	31,322	0,939	0,007	2,1	2,2	0,10
13	31,398	0,773	31,390	0,964	0,008	1,6	1,7	0,10
14	31,453	0,774	31,443	0,989	0,010	1,3	1,3	0,00
15	31,496	0,775	31,485	1,012	0,011	1,1	1,0	0,10
16	31,531	1,105		1,035		0,9		
17	31,560	1,141		1,057		0,7		
18	31,584	1,177		1,078		0,6		
19	31,604	1,214		1,098		0,5		
20	31,621	1,250		1,118		0,5		
21	31,636	1,287		1,137		0,4		
22	31,649	1,324		1,156		0,4		
23	31,660	1,361		1,174		0,3		
24	31,669	1,397		1,192		0,3		
25	31,678	1,434		1,209		0,2		
26	31,685	1,471		1,226		0,2		
27	31,692	1,508		1,242		0,2		
28	31,698	1,545		1,258		0,2		
29	31,703	1,582	...	1,274		0,2		
30	31,708	1,619		1,290		0,2		
...								
$\infty$	31,596		31,596					

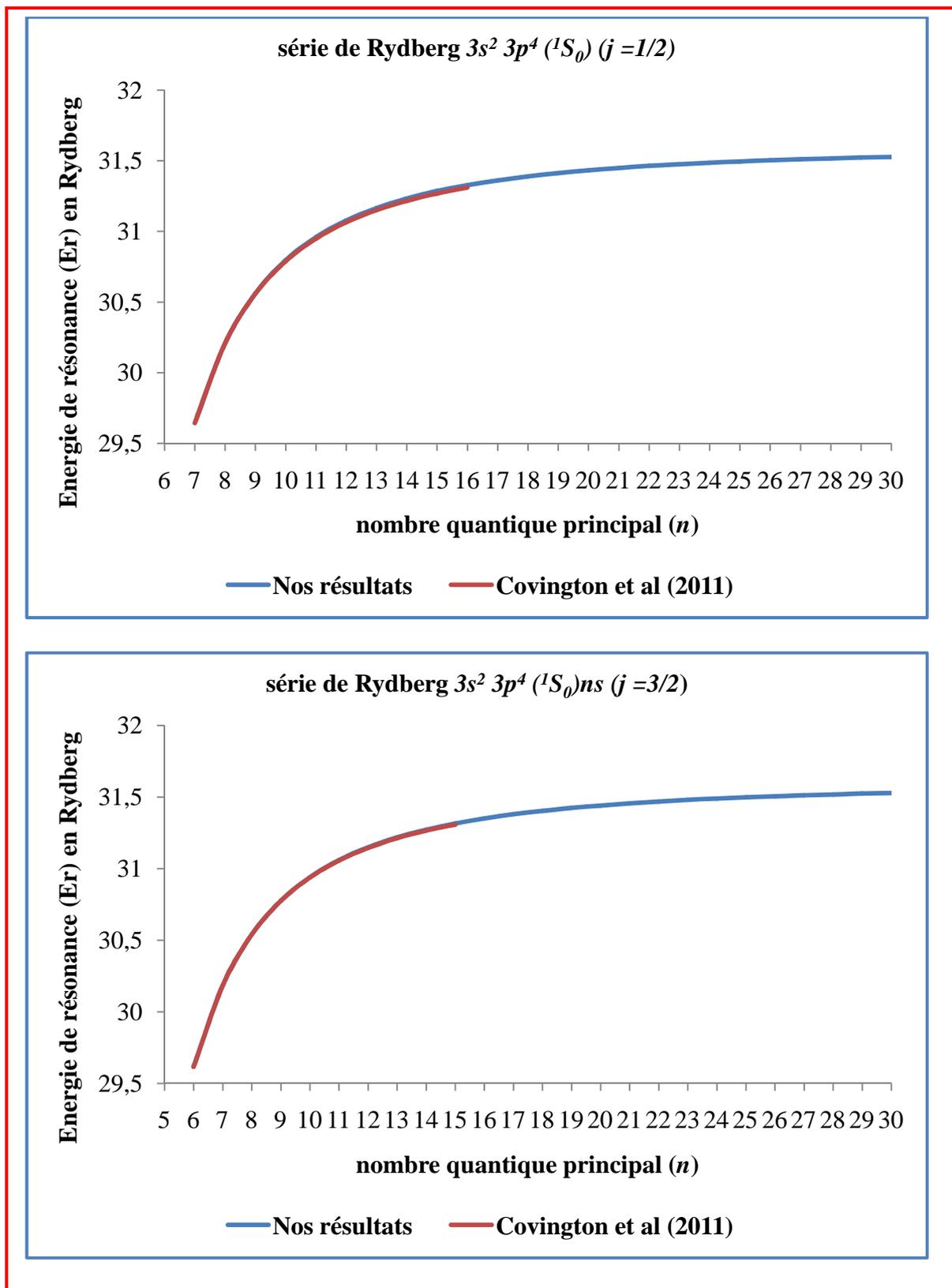
**Figure 3.1.** Courbes de comparaison de nos résultats sur le calcul des énergies résonance ( $E_r$  en Rydberg) des séries de Rydberg  $3s^2 3p^4 ({}^1D_2)ns, nd$  ( $j = 1/2$ ) dominant dans le spectre de raies de l'ion  $Ar^+$  avec quelques résultats théoriques.



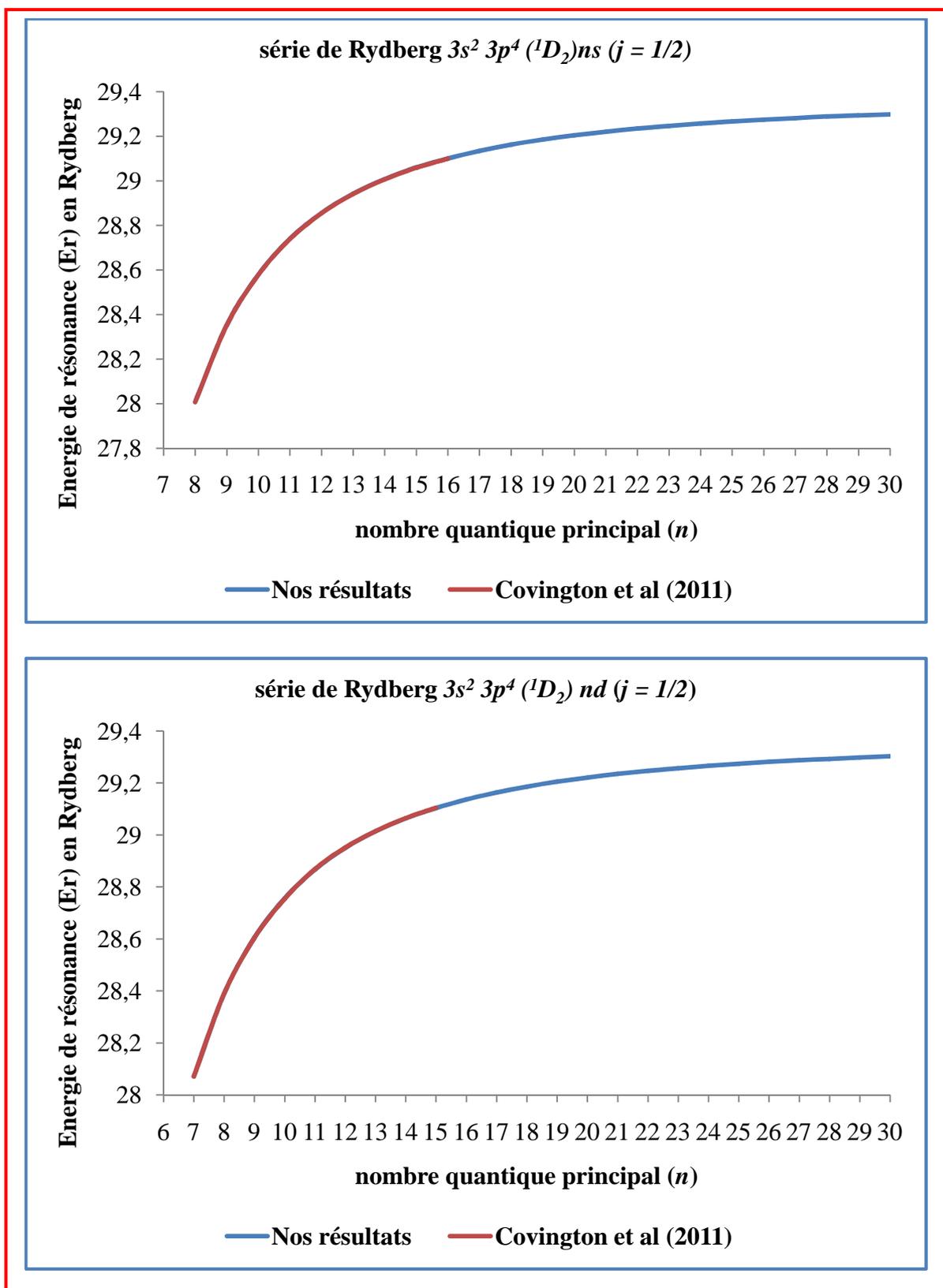
**Figure 3.2.** Courbes de comparaison de nos résultats sur le calcul des énergies résonance ( $E_r$  en Rydberg) des séries de Rydberg  $3s^2 3p^4 ({}^1D_2)ns, nd$  ( $j = 3/2$ ) dominant dans le spectre de raies de l'ion  $Ar^+$  avec quelques résultats théoriques.



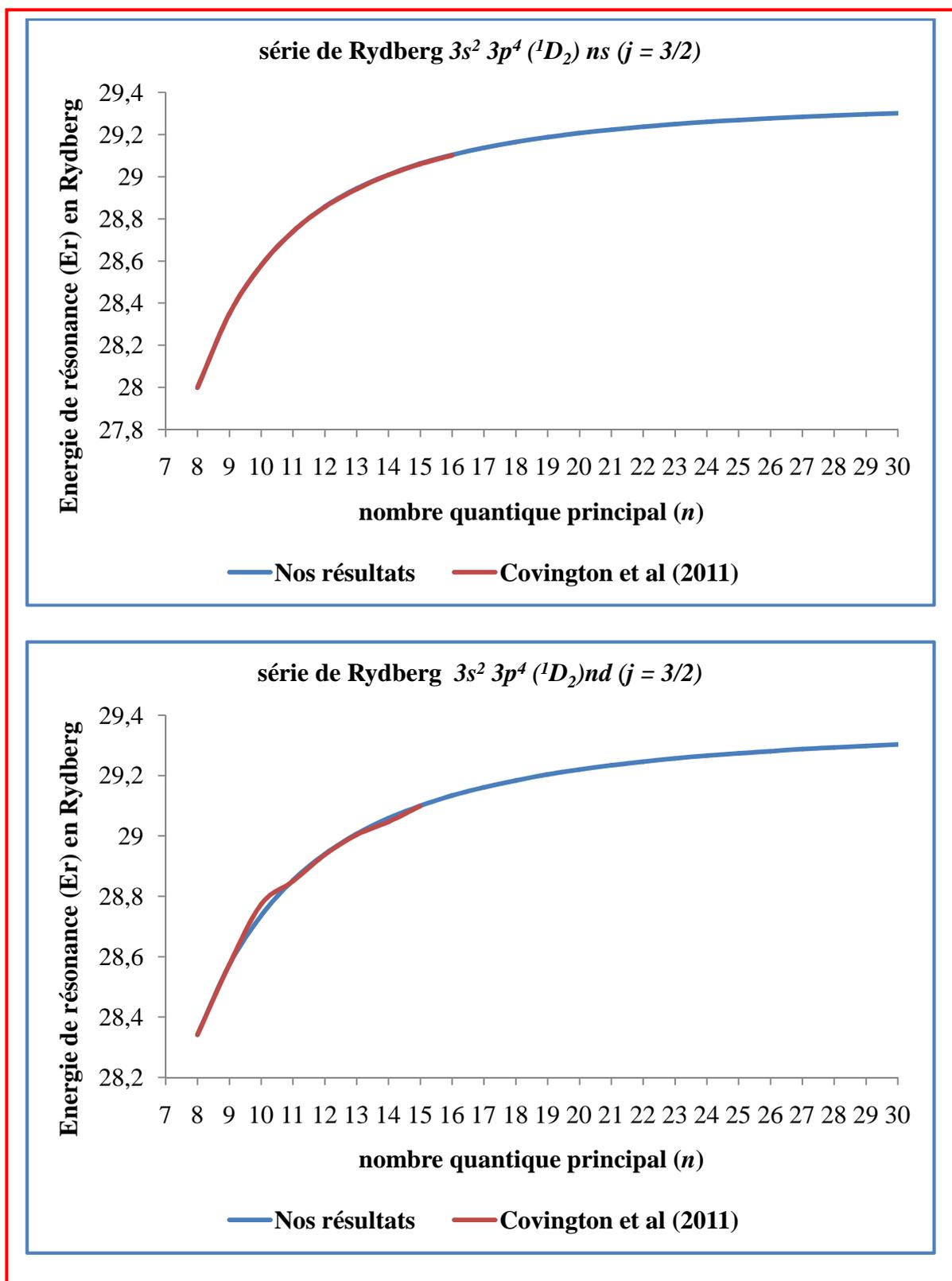
**Figure 3.3.** Courbes de comparaison de nos résultats sur le calcul des énergies résonance ( $E_r$  en Rydberg) des séries de Rydberg  $3s^2 3p^4 ({}^1S_0)ns, nd$  ( $j = 1/2$ ) dominant dans le spectre de raies de l'ion  $Ar^+$  avec quelques résultats théoriques.



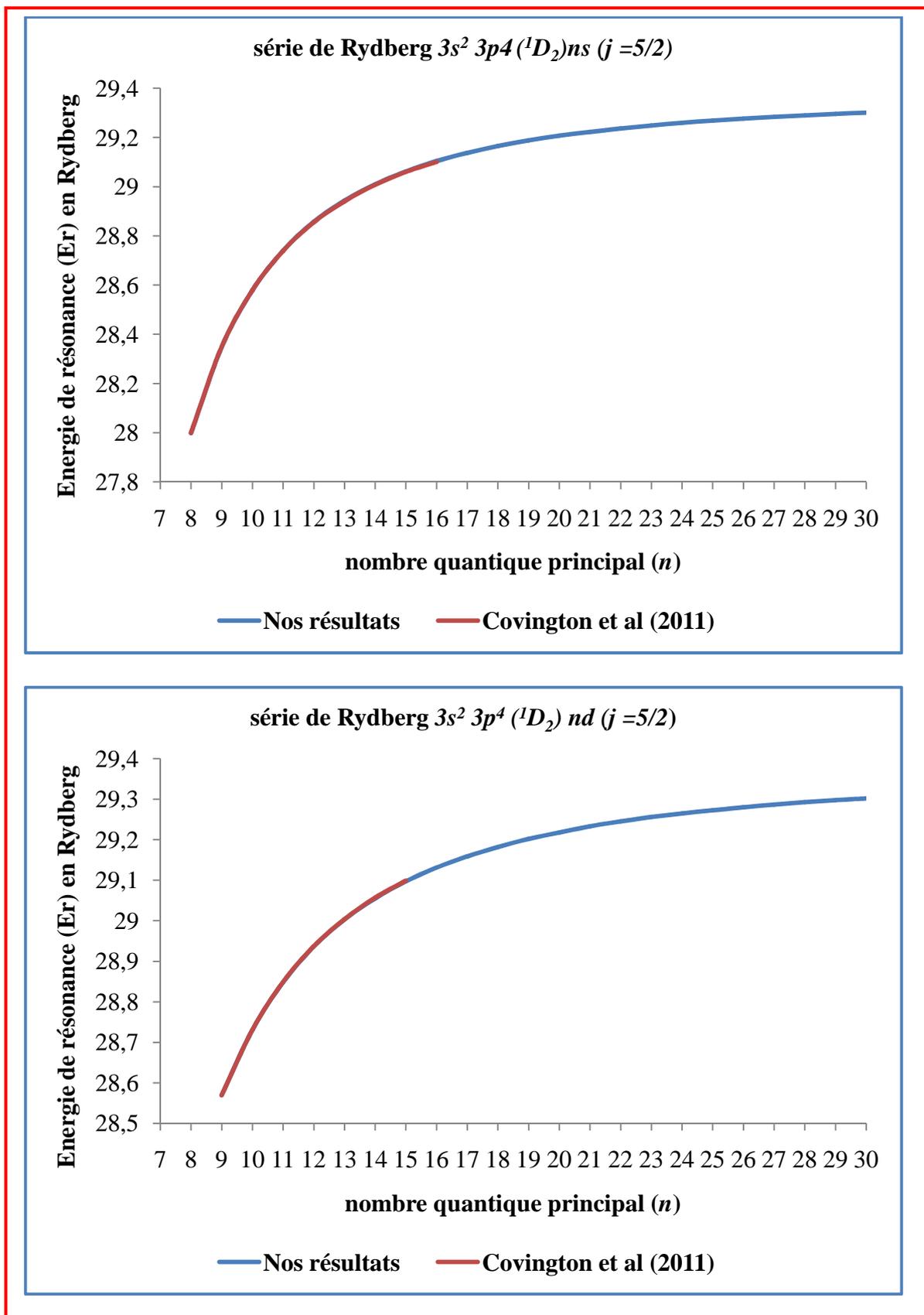
**Figure 3.4.** Courbes de comparaison de nos résultats sur le calcul des énergies résonance (Er en Rydberg) des séries de Rydberg  $3s^2 3p^4 ({}^1D_2)ns, nd$  ( $j = 1/2$ ) dominant dans le spectre de raies de l'ion  $Ar^+$  avec quelques résultats théoriques.



**Figure 3.5.** Courbes de comparaison de nos résultats sur le calcul des énergies résonance ( $E_r$  en Rydberg) des séries de Rydberg  $3s^2 3p^4 ({}^1D_2)ns, nd$  ( $j = 3/2$ ) dominant dans le spectre de raies de l'ion  $Ar^+$  avec quelques résultats théoriques.



**Figure 3.6.** Courbes de comparaison de nos résultats sur le calcul des énergies résonance ( $E_r$  en Rydberg) des séries de Rydberg  $3s^2 3p^4 ({}^1D_2)ns, nd$  ( $j = 5/2$ ) dominant dans le spectre de raies de l'ion  $Ar^+$  avec quelques résultats théoriques.



# Conclusion et perspectives

Dans le présent travail, nous avons appliqué pour la première fois, la méthode de la Constante d'écran par unité de charge nucléaire (CEUCN) aux calculs des énergies de résonance et des largeurs naturelles des séries de Rydberg  $3s^2 3p^4 ns, nd$  dominant dans le spectre de raies de l'ion  $Ar^+$  présent dans les supernova. Les résultats que nous avons obtenus avec l'application de ce formalisme de CEUNC ont fait l'objet de comparaison avec les résultats théoriques et/ ou expérimentaux disponibles. Généralement, les résultats que nous avons obtenus sur le calcul des énergies résonance et des largeurs naturelles sont en bon accord avec les résultats retrouvés dans la littérature consultée.

Les principaux renseignements que nous pouvons tirer de cette étude les suivants :

- ✓ On a de bons résultats qui concordent avec les autres résultats théoriques et expérimentaux.
- ✓ La méthode de la constante d'écran par unité de charge nucléaire utilisée dans ce présent travail est une méthode simple et qui permet d'obtenir des valeurs très précises des énergies de résonance et des largeurs naturelles jusqu'à des états de Rydberg hautement excités avec un défaut quantique pratiquement constant jusqu'à  $n = 100$  que les techniques expérimentales et théoriques les plus sophistiquées ne permettent pas d'avoir des valeurs de ces énergies au-delà de  $n = 30$  du fait du recouvrement des pics des sections efficace de photoionisation pour les valeurs élevées de  $n$ .
- ✓ La méthode CEUCN/SCUNC souffre au moins de deux inconvénients. Jusqu'à présent, il n'a pas été possible de calculer les forces d'oscillateur  $f_{ij}$  qui sont des paramètres de résonance liés aux processus d'absorption d'un rayonnement électromagnétique de fréquence  $\nu_{ij}$  faisant transiter  $n_i$  systèmes atomiques d'un niveau inférieur d'énergie  $E_i$  à un niveau supérieur d'énergie  $E_j$ . La connaissance des forces d'oscillateur permet de calculer  $A_{ji}$  (formule, 1.6) et donc de connaître la durée de vie de l'état excité  $j$ . Ce qui permet d'en déduire la largeur naturelle  $\Gamma_j$ .

Cependant, dans des travaux futurs, il est possible de mener d'autres études dans le sens de résoudre ses imperfections citées plus haut.

# Bibliographie

- [1]. Al Mousallami S., 1998, thèse de doctorat, Université Paris Sud XI
- [2]. A. M. Covington, *et al.*, 2002, *Photoionization of Ne<sup>+</sup> using synchrotron radiation*, Phys. Rev. A **66** 062710.
- [3]. A Wagué., 1990, *Resonance photoionisation of the metastable 2<sup>1,3</sup>S helium near the n = 2 and n = 3 excitation thresholds of He*, Z.Phys.D: Atoms,Molecules and Clusters.**15**, 337
- [4]. A Wagué., 1987, *Application of the diagonalization approximation to the n=3 resonant photoionization of helium-like systems*, Z.Phys.D : Atoms,Molecules and Clusters.**6**, 337
- [5]. Bautista M.A. and Pradhan A.K., 1998, *Ionization Structure and Spectra of Iron in Gaseous Nebulae*, Astrophys. J. **492**, 650
- [6]. Berrington K. A. et Ballance C., 2001, *Inner-shell photoionization of the 3dx ground state Fe ions* J Phys B **34**, 2697
- [7]. C.D.Lin., 1984, *Photoionization and Photodetachment*, Phys.Rev.A**29**, 1019
- [8]. Chpolski E., 1978, *Fondement de la mécanique quantique et structure de l'enveloppe électronique de l'atome*, Éditions Mir. Moscou, **Ch.8**, p.311.
- [9]. Champeaux J.P., 2003, thèse de doctorat, Université Paris Sud XI
- [10]. Covington A.M. et al., 2000, Phys. Rev. Lett. **87**, 243002
- [11]. Covington A.M. et al., 2002, *Photoionization of Ne<sup>+</sup> using synchrotron radiation*, Phys.Rev.A **66**, 062710
- [12]. Covington, A. M., Aguilar, A., Covington, I. R., Hinojosa, G., Shirley, C. A., Phaneuf, R. A., Álvarez, 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<sup>+</sup> ions*, Phys. Rev A**84**, 013413.
- [13]. E.Biemont, *Atomic transition probabilities and radiatives lifetimes*, Institute of astrophysics, University of Liège
- [14]. El Hassan. N., 2010, *Étude des processus de photoexcitation et de photoionisation dans les ions multichargés*. Thèse, Université Paris Sud, N° **9565**.
- [15]. Fano U., 1961, *Effects of Configuration Interaction on Intensities and Phase Shifts*, Phys. Rev. **124**, 1866
- [16]. Faye, M., 2011, *Application de la méthode de la Constante d'Écran par Unité de Charge Nucléaire aux calculs des énergies de résonance des états doublement excités (Isnsnl) <sup>2S+1</sup>L<sup>π</sup> (n ≤ 4 et l ≠ l' ≤ 1) des systèmes atomiques à trois électrons de charge nucléaire Z ≤ 50*. Mémoire de DEA en Physique Atomique et Nucléaire, Institut de Technologie Nucléaire Appliquée, Université Cheikh Anta Diop de Dakar.
- [17]. Faye, M., Diop, B., Guèye, M., Sakho, I., Ndao, A. S., Biaye, M., and Wagué, A., 2013, *Calculations of high lying energy resonances in the photoionization spectra of Ne<sup>+</sup> using the Screening Constant by Unit Nuclear Charge method*. Rad. Phys. Chem. **85**, 1.
- [18]. G.A.Doschek, I.F.Meekins, R.W.Kreplin, TACHubb and H.Friedman., 1971, *Heliumlike Calcium Emission Observed during a Solar Flare*, Astrophys.J.**164**, 165

- [19]. Gharaibeh, M. F., El Hassan, N., Al Shorman, M. M., Bizau, J.-M., Cubaynes, D., Guilbaud, S., Sakho, I., Blancard, C., and McLaughlin, B. M., 2014, *K-Shell Photoionization of B-like Atomic Nitrogen Ions: Experiment and Theory*. J. Phys. B. At. Mol. Opt. Phys, **47**, 065201.
- [20]. Goyal, A., Khatri, I., Sow, M., Sakho, I., Aggarwal, S., Singh, A. K., and Mohan, M., 2016, *Photoionization of Ne-like  $K^{9+}$ ,  $Ca^{10+}$ ,  $Sc^{11+}$ ,  $Ti^{12+}$ ,  $V^{13+}$ ,  $Cr^{14+}$ ,  $Mn^{15+}$ , and  $Fe^{16+}$  ions using the Screening constant by unit nuclear charge method*, Rad. Phys. Chem. **125**, 50.
- [21]. Guèye, M., 2011, *Application de la méthode de la Constante d'Écran par Unité de Charge Nucléaire aux calculs des énergies des états autoionisants  $2pnl^{2S+1}L^\pi$ ,  $3pnp^{2S+1}L^\pi$  et  $4pnp^{2S+1}L^\pi$  des systèmes héliumoides de charge nucléaire  $Z \leq 46$  avec  $0 < l \leq 3$  et  $n \leq 5$* . Mémoire de DEA en Physique Atomique et Nucléaire, Institut de Technologie Nucléaire Appliquée, Université Cheikh Anta Diop de Dakar.
- [22]. Khatri, I., Goyal, A., Ba, M. D., Faye, M., Sow, M., Sakho, I., Singh, A. K., Mohan, M., and Wagué, A., 2016, *Screening constant by unit nuclear charge calculations of resonance energies and widths of the  $3pns\ 1,3P^\circ$  and  $3pnd\ 1P^\circ$  Rydberg series of Mg-like ( $Z = 13-26$ ) ions*, Rad. Phys. Chem. **130**, 208.
- [23]. M.KODling,-Smee, E.Skoell, P.Hammond, and M.AMac-Donald., 2000, *Radiative Decay of Doubly Excited States in Helium below the  $He^+$  ( $N=2$ ) Ionization Threshold*, Phys.Rev.Lett. **84**,2598.
- [24]. P. Benoit-Cattin, A Bordenave-Montesquieu, M. Boudjema, A Gleizes, A 1. Marrakchi, S. Dousson and D. Hitz., 1988, *Multiple capture in  $N^{7+} + Ar$  investigated by electron spectroscopy ( $70\ keV, \theta_{lab}=10^\circ$ )*, J Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. **21**,3387.
- [25]. Sakho, I., 2012. *Calculations of high lying energy resonances of the  $4s^24p^2\ (^1D_2)nd$  and  $4s^24p^2\ (^1S_0)nd$  Rydberg series of  $Se^+$* . Phys. Rev A**86**, 052511.
- [26]. Sakho, I., Ndao, A.S., Biaye, M., and Wague, A., 2006, *Calculation of the ground-state energy, the first ionization energy and the radial correlation expectation value for He-like atoms*. Phys. Scr. **74**, 180.
- [27]. Sakho, I., 2007, *Nouvelle méthode de calcul des énergies de l'état fondamental et des états doublement excités ( $Nlnl ; ^{2S+1}L^\pi$ ) des systèmes atomiques à deux électrons basée sur la détermination de la constante d'écran par unité de charge nucléaire  $\beta$* . Thèse de Doctorat 3<sup>e</sup> cycle, Université Cheikh Anta Diop de Dakar.
- [28]. Sakho, I., Ndao, A.S., Biaye, M., and Wague, A., 2008, *Screening Constant by Unit Nuclear Charge calculations for  $(ns^2)^1Se$ ,  $(np^2)^1De$  and  $(Nsnp)^1P^\circ$  excited states of He-like systems*. Eur. Phys. J. D. **47**, 37.
- [29]. Sakho, I., Konté, A., Ndao, A.S., Biaye, M., and Wague, A., 2008, *Investigation of  $2snp\ ^{\pm 1,3}P^\circ$  resonances of two-electron systems using Screening Constant by Unit Nuclear Charge method*. Phys. Scr. **77**, 055303.
- [30]. Sakho, I., Konté, A., Ndao, A.S., Biaye, M., and Wague, A., 2010, *Calculations of  $(nl)^2$  and  $(3lnl')$  autoionizing states in two electron systems* . Phys. Scr. **82**, 035301.
- [31]. Sakho, I., 2010. *High-lying  $^1P^\circ$  doubly-excited states of  $H^-$  and He below the  $N = 3 -13$  hydrogenic thresholds*. Eur. Phys. J. D. **59**, 171.

- [32]. Sakho, I., and Wague, A., 2010. *Energies for the ground-state and for the  $ns (1s^2ns)^2S^e$ ,  $np (1s^2np)^2P^o$ ,  $(1sns^2)^2S^e$ ,  $(1s2sns)^2S^e$  and  $(1s2snp)^2P^o$  excited states of Li-like ions.* Chin. J. Phys, **48**, 567.
- [33]. Sakho, I., 2011a. *Screening Constant by Unit Nuclear Charge calculations of  $^{1,3}S^e$ ,  $^{1,3}P^o$  and  $^{1,3}D^e$  Intershell Rydberg states of the helium – like ions below the  $N = 2$  hydrogenic threshold.* Eur. Phys. J. D. **61**, 267.
- [34]. Sakho, I., 2011b. *High lying energy resonances of doubly excited states  $(2pns) 1,3P^o$  and  $(2pnd) 1,3P^o$  of the beryllium atom.* Rad. Phys. Chem. **80**, 1295.
- [35]. Sakho, I., 2011c, *Energy resonances for  $^1P^o$ ,  $^1D^e$ ,  $^1F^o$ ,  $^1G^e$ , and  $^1H^o$  autoionizing states of helium isoelectronic series below the  $n = 2-4$  hydrogenic thresholds.* J. At. Mol. Sci. **2**, 20.
- [36]. Sakho, I., 2012a, *Relativistic theory of one – and two electron systems: valley of stability in the helium-like ions.* J. At. Mol. Sci **3**.
- [37]. Sakho, I., 2012b. *Calculations of high lying energy resonances of the  $4s^24p^2 (^1D_2)nd$  and  $4s^24p^2 (^1S_0)nd$  Rydberg series of  $Se^+$ .* Phys. Rev A**86**, 052511.
- [38]. Sakho, I., Tine, M., Dieng, M., Sow, M., Faye, M., Diop, B., Guèye, M., Biaye, M., and Wagué, A., 2013b, *Energy resonances and Widths of the  $(2pns) ^1P^o$  and  $(2pnd) ^1P^o$  Rydberg series of Be-like ions.* Phys. Scr **88**, 035302.
- [39]. Sakho, I., Diop, B., M. Faye., Sène, A., Guèye, M., Ndao, A. S., Biaye, M., and Wagué, A., 2013c *Screening Constant by Unit Nuclear Charge calculations of high lying  $(2pns) ^{1,3}P^o$  and  $(2pnd) ^{1,3}P^o$  states of the  $B^+$  ion.* At. Data. Nuc. Data Tables **99**, 447.
- [40]. Sakho, I., Tine, M., Dieng, M., Diop, B., Faye, M., M., Sow, M., Guèye, M., Biaye, M., and Wagué, A., 2014a, *Investigations of Rydberg series from photoionization processes of  $N^{3+}$ ,  $O^{4+}$ , and  $Ar^{8+}$  ions.* Rad. Phys. Chem. **101**, 8.
- [41]. Sakho, I., 2014b, *Screening Constant by Unit Nuclear Charge Calculations of High lying Energy resonances in the Photoionization Spectra of Halogen-like  $Kr^+$  ion.* At. Data. Nuc. Data Tables **100**, 297.
- [42]. Sakho, I., 2014c, *Screening Constant by Unit Nuclear Charge Calculations of Energies and Fine Structure Splitting for Li-Like Ions,* Chin. J. Phys. **52**, 1471.
- [43]. Sakho, I., Sow, M., and Wagué, 2015a A., *K-shell X-ray energy and width resonances of nitrogen and oxygen atoms,* Rad. Phys. Chem. **110**, 82.
- [44]. Sakho, I., Sow, M., and Wagué, 2015b A., *X-ray wavelengths and Auger transition energy of  $1s2p4 (^2S, ^2P, ^2D)$  resonances in B-like (6-18) ions,* 2015, Phys. Scr. **90**, 045401.
- [45]. Sakho, I., 2016, *Photoabsorption of the ground state of Ne and of Ne-like  $Na^+$ ,  $Mg^{2+}$ ,  $Al^{3+}$ ,  $Si^{4+}$ ,  $P^{5+}$ ,  $S^{6+}$ , and  $Cl^{7+}$ .* At. Data. Nuc. Data Tables **108**, 57.
- [46]. Sakho, I., 2017, *Energies of doubly excited  $^{1,3} P^o$  resonances in He - like ( $Z = 2 - 40$ ) systems below the  $N = 3$  hydrogenic threshold.* At. Data. Nuc. Data Tables **117**, 425.
- [47]. Sakho I., 2018, *Energy resonances of the  $2s2p6np ^1P$  Rydberg series of the Ne-like ions ( $Z = 27-56$ ) ions:* Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena (in press) At.Data.Nuc.tables **222**, 40;