

THÈSE

DE DOCTORAT D'ÉTAT ÈS-SCIENCES PHYSIQUES

PRÉSENTÉE À L'UNIVERSITÉ DE PARIS-SUD

CENTRE D'ORSAY

PAR

Paul LUC

LABORATOIRE AIMÉ COTTON

C. N. R. S.

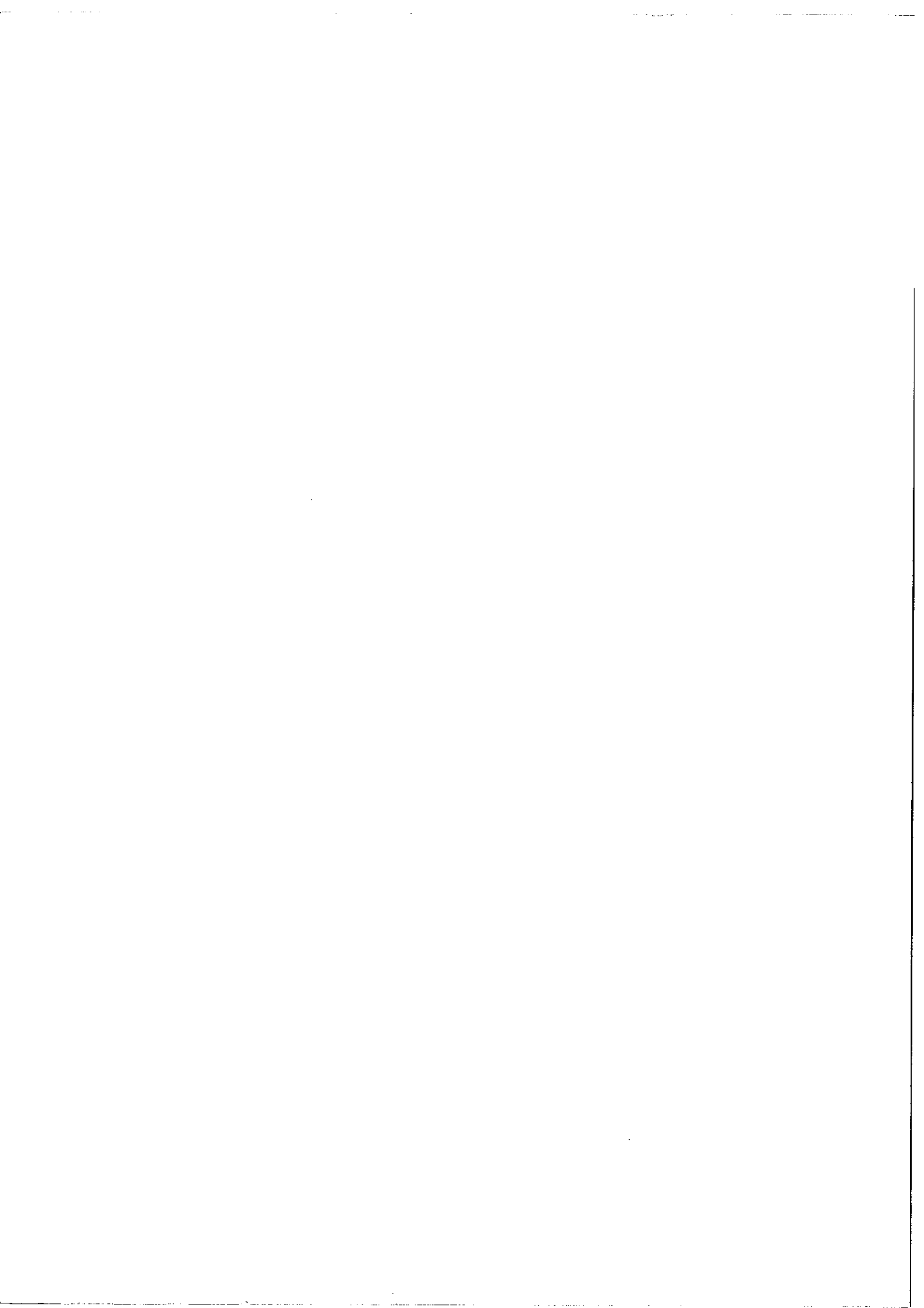
POUR OBTENIR

LE GRADE DE DOCTEUR ÈS-SCIENCES

Sujet: ETUDES EXPERIMENTALE ET THEORIQUE DES STRUCTURES
HYPERFINES DU MULTIPLLET $e^6D - y^6P$ DU MANGANESE I.

SOUTENUE LE 27 Juin 1972 DEVANT LA COMMISSION D'EXAMEN

M. P. JACQUINOT.....	: Président
MM. R. LENNUIER.....	} Examineurs
J. L. COJAN.....	
S. GERSTENKORN..	
M. H. H. STROKE.....	Invité



Ce travail a été effectué au Laboratoire Aimé Cotton. Je prie Messieurs les Professeurs P. Jacquino et R. Chabbal d'accepter l'expression de mes remerciements pour l'accueil chaleureux qu'ils m'y ont réservé et pour les nombreux conseils et encouragements qu'ils ont bien voulu me prodiguer.

Je tiens à exprimer ma profonde reconnaissance au Docteur S. Gerstenkorn, directeur de recherche, qui m'a dirigé et conseillé pendant toute la durée de ce travail.

Je voudrais également remercier Monsieur le Professeur Lennuier, mon parrain au C.N.R.S., avec qui j'ai eu à plusieurs reprises de fructueuses discussions.

Monsieur J. Bauche a bien voulu m'aider pour la partie théorique de ce travail; qu'il trouve ici l'assurance de toute ma reconnaissance.

Mes remerciements vont également à Madame C. Bauche-Arnoult qui m'a initié à la programmation et aidé dans mes premiers travaux.

Je voudrais associer à ce travail tous mes camarades, chercheurs et techniciens, du laboratoire Aimé Cotton qui m'ont constamment conseillé ou aidé.

Les calculs sur ordinateur ont été effectués au Centre de l'Université Paris XI; que tout son personnel trouve ici l'expression de ma reconnaissance.

el. unctio. Nisi arboribus...
-oia iudicab. d. ca. p. 10. 11. 12. 13. 14. 15. 16. 17. 18. 19. 20. 21. 22. 23. 24. 25. 26. 27. 28. 29. 30. 31. 32. 33. 34. 35. 36. 37. 38. 39. 40. 41. 42. 43. 44. 45. 46. 47. 48. 49. 50. 51. 52. 53. 54. 55. 56. 57. 58. 59. 60. 61. 62. 63. 64. 65. 66. 67. 68. 69. 70. 71. 72. 73. 74. 75. 76. 77. 78. 79. 80. 81. 82. 83. 84. 85. 86. 87. 88. 89. 90. 91. 92. 93. 94. 95. 96. 97. 98. 99. 100. 101. 102. 103. 104. 105. 106. 107. 108. 109. 110. 111. 112. 113. 114. 115. 116. 117. 118. 119. 120. 121. 122. 123. 124. 125. 126. 127. 128. 129. 130. 131. 132. 133. 134. 135. 136. 137. 138. 139. 140. 141. 142. 143. 144. 145. 146. 147. 148. 149. 150. 151. 152. 153. 154. 155. 156. 157. 158. 159. 160. 161. 162. 163. 164. 165. 166. 167. 168. 169. 170. 171. 172. 173. 174. 175. 176. 177. 178. 179. 180. 181. 182. 183. 184. 185. 186. 187. 188. 189. 190. 191. 192. 193. 194. 195. 196. 197. 198. 199. 200. 201. 202. 203. 204. 205. 206. 207. 208. 209. 210. 211. 212. 213. 214. 215. 216. 217. 218. 219. 220. 221. 222. 223. 224. 225. 226. 227. 228. 229. 230. 231. 232. 233. 234. 235. 236. 237. 238. 239. 240. 241. 242. 243. 244. 245. 246. 247. 248. 249. 250. 251. 252. 253. 254. 255. 256. 257. 258. 259. 260. 261. 262. 263. 264. 265. 266. 267. 268. 269. 270. 271. 272. 273. 274. 275. 276. 277. 278. 279. 280. 281. 282. 283. 284. 285. 286. 287. 288. 289. 290. 291. 292. 293. 294. 295. 296. 297. 298. 299. 300. 301. 302. 303. 304. 305. 306. 307. 308. 309. 310. 311. 312. 313. 314. 315. 316. 317. 318. 319. 320. 321. 322. 323. 324. 325. 326. 327. 328. 329. 330. 331. 332. 333. 334. 335. 336. 337. 338. 339. 340. 341. 342. 343. 344. 345. 346. 347. 348. 349. 350. 351. 352. 353. 354. 355. 356. 357. 358. 359. 360. 361. 362. 363. 364. 365. 366. 367. 368. 369. 370. 371. 372. 373. 374. 375. 376. 377. 378. 379. 380. 381. 382. 383. 384. 385. 386. 387. 388. 389. 390. 391. 392. 393. 394. 395. 396. 397. 398. 399. 400. 401. 402. 403. 404. 405. 406. 407. 408. 409. 410. 411. 412. 413. 414. 415. 416. 417. 418. 419. 420. 421. 422. 423. 424. 425. 426. 427. 428. 429. 430. 431. 432. 433. 434. 435. 436. 437. 438. 439. 440. 441. 442. 443. 444. 445. 446. 447. 448. 449. 450. 451. 452. 453. 454. 455. 456. 457. 458. 459. 460. 461. 462. 463. 464. 465. 466. 467. 468. 469. 470. 471. 472. 473. 474. 475. 476. 477. 478. 479. 480. 481. 482. 483. 484. 485. 486. 487. 488. 489. 490. 491. 492. 493. 494. 495. 496. 497. 498. 499. 500. 501. 502. 503. 504. 505. 506. 507. 508. 509. 510. 511. 512. 513. 514. 515. 516. 517. 518. 519. 520. 521. 522. 523. 524. 525. 526. 527. 528. 529. 530. 531. 532. 533. 534. 535. 536. 537. 538. 539. 540. 541. 542. 543. 544. 545. 546. 547. 548. 549. 550. 551. 552. 553. 554. 555. 556. 557. 558. 559. 560. 561. 562. 563. 564. 565. 566. 567. 568. 569. 570. 571. 572. 573. 574. 575. 576. 577. 578. 579. 580. 581. 582. 583. 584. 585. 586. 587. 588. 589. 590. 591. 592. 593. 594. 595. 596. 597. 598. 599. 600. 601. 602. 603. 604. 605. 606. 607. 608. 609. 610. 611. 612. 613. 614. 615. 616. 617. 618. 619. 620. 621. 622. 623. 624. 625. 626. 627. 628. 629. 630. 631. 632. 633. 634. 635. 636. 637. 638. 639. 640. 641. 642. 643. 644. 645. 646. 647. 648. 649. 650. 651. 652. 653. 654. 655. 656. 657. 658. 659. 660. 661. 662. 663. 664. 665. 666. 667. 668. 669. 670. 671. 672. 673. 674. 675. 676. 677. 678. 679. 680. 681. 682. 683. 684. 685. 686. 687. 688. 689. 690. 691. 692. 693. 694. 695. 696. 697. 698. 699. 700. 701. 702. 703. 704. 705. 706. 707. 708. 709. 710. 711. 712. 713. 714. 715. 716. 717. 718. 719. 720. 721. 722. 723. 724. 725. 726. 727. 728. 729. 730. 731. 732. 733. 734. 735. 736. 737. 738. 739. 740. 741. 742. 743. 744. 745. 746. 747. 748. 749. 750. 751. 752. 753. 754. 755. 756. 757. 758. 759. 760. 761. 762. 763. 764. 765. 766. 767. 768. 769. 770. 771. 772. 773. 774. 775. 776. 777. 778. 779. 780. 781. 782. 783. 784. 785. 786. 787. 788. 789. 790. 791. 792. 793. 794. 795. 796. 797. 798. 799. 800. 801. 802. 803. 804. 805. 806. 807. 808. 809. 810. 811. 812. 813. 814. 815. 816. 817. 818. 819. 820. 821. 822. 823. 824. 825. 826. 827. 828. 829. 830. 831. 832. 833. 834. 835. 836. 837. 838. 839. 840. 841. 842. 843. 844. 845. 846. 847. 848. 849. 850. 851. 852. 853. 854. 855. 856. 857. 858. 859. 860. 861. 862. 863. 864. 865. 866. 867. 868. 869. 870. 871. 872. 873. 874. 875. 876. 877. 878. 879. 880. 881. 882. 883. 884. 885. 886. 887. 888. 889. 890. 891. 892. 893. 894. 895. 896. 897. 898. 899. 900. 901. 902. 903. 904. 905. 906. 907. 908. 909. 910. 911. 912. 913. 914. 915. 916. 917. 918. 919. 920. 921. 922. 923. 924. 925. 926. 927. 928. 929. 930. 931. 932. 933. 934. 935. 936. 937. 938. 939. 940. 941. 942. 943. 944. 945. 946. 947. 948. 949. 950. 951. 952. 953. 954. 955. 956. 957. 958. 959. 960. 961. 962. 963. 964. 965. 966. 967. 968. 969. 970. 971. 972. 973. 974. 975. 976. 977. 978. 979. 980. 981. 982. 983. 984. 985. 986. 987. 988. 989. 990. 991. 992. 993. 994. 995. 996. 997. 998. 999. 1000.

...

...

...

...

...

...

...

...

...

...

...

...

...

...

...

...

INTRODUCTION	1
I - TECHNIQUES EXPERIMENTALES UTILISEES	7
1°) <u>Sources et détecteurs.</u>	7
2°) <u>Hypéac.</u>	10
a) Description de l'appareil.	10
b) Etude du balayage par pression d'un inter- feromètre Fabry-Perot.	14
c) Corrections a posteriori des défauts de luminosité des enregistrements Fabry-Perot.	19
c-1) Présentation du problème.	19
c-2) Etude des fluctuations.	22
c-3) Exemples concrets de linéarisation a posteriori d'un spectre obtenu au Fabry-Perot.	29
c-4) Possibilité de faire la somme de plusieurs ordres d'un même enregistrement Fabry-Perot.	33
c-5) Conclusions	33
d) Erreurs introduites par l'emploi d'un mono- chromateur, corrections a posteriori.	36
3°) <u>Spectrométrie de Fourier.</u>	38
4°) <u>Dépouillement des enregistrements.</u>	
a) Méthode analogique.	41
b) Méthode digitale.	44

II - RESULTATS (articles)

Etude en laboratoire des structures hyperfines des raies du multiplet $c^6D - y^6P$ du manganèse I. Comparaison avec les structures de ce multiplet détectées dans le spectre solaire.

Interprétation théorique de la structure hyperfine dipolaire magnétique des termes z^8P, z^6P, y^6P de la configuration $3d^5 4s 4p$ du manganèse I.

Déplacement isotopique dans la raie de résonance D_2 du rubidium. Inversion des valeurs de $\langle r^2 \rangle$ des isotopes ^{85}Rb et ^{87}Rb .

INTRODUCTION

Le manganèse appartient au groupe des dix éléments de transition ^{21}Sc , ^{22}Ti , ^{23}V , ^{24}Cr , ^{25}Mn , ^{26}Fe , ^{27}Co , ^{28}Ni , ^{29}Cu et ^{30}Zn . Il ne possède qu'un seul isotope stable de nombre de masse 55.

La classification du spectre I établie par CATALAN, MEGGERS et GARCIA-RIQUELME [1] permet de montrer que le couplage Russell-Saunders constitue une excellente approximation.

Les premières mesures des structures hyperfines de quelques raies de résonance de MnI ont été obtenues par JANICKI [2] 1909, WALI-MOHAMMED [3] 1914, WHITE et RITSCHL [4] 1930. Ces deux derniers auteurs purent ainsi préciser la valeur du spin nucléaire ($I = 5/2$) de l'isotope $^{25}_{55}\text{Mn}$. Toutes ces mesures ont été obtenues par spectrométrie classique: étalon Fabry-Perot associé à un spectrographe à prisme.

La figure I représente les niveaux les plus bas de la configuration $3d^5 4s 4p$ de MnI, et les transitions les plus intenses dans lesquelles ils interviennent.

Les structures hyperfines des transitions $z^8 P \rightarrow a^6 S$ et $z^6 P \rightarrow a^6 S$ ont été étudiées avec une grande précision par croisement de niveaux et jet atomique (WALTHER [5] 1962, 1969).

Mn I

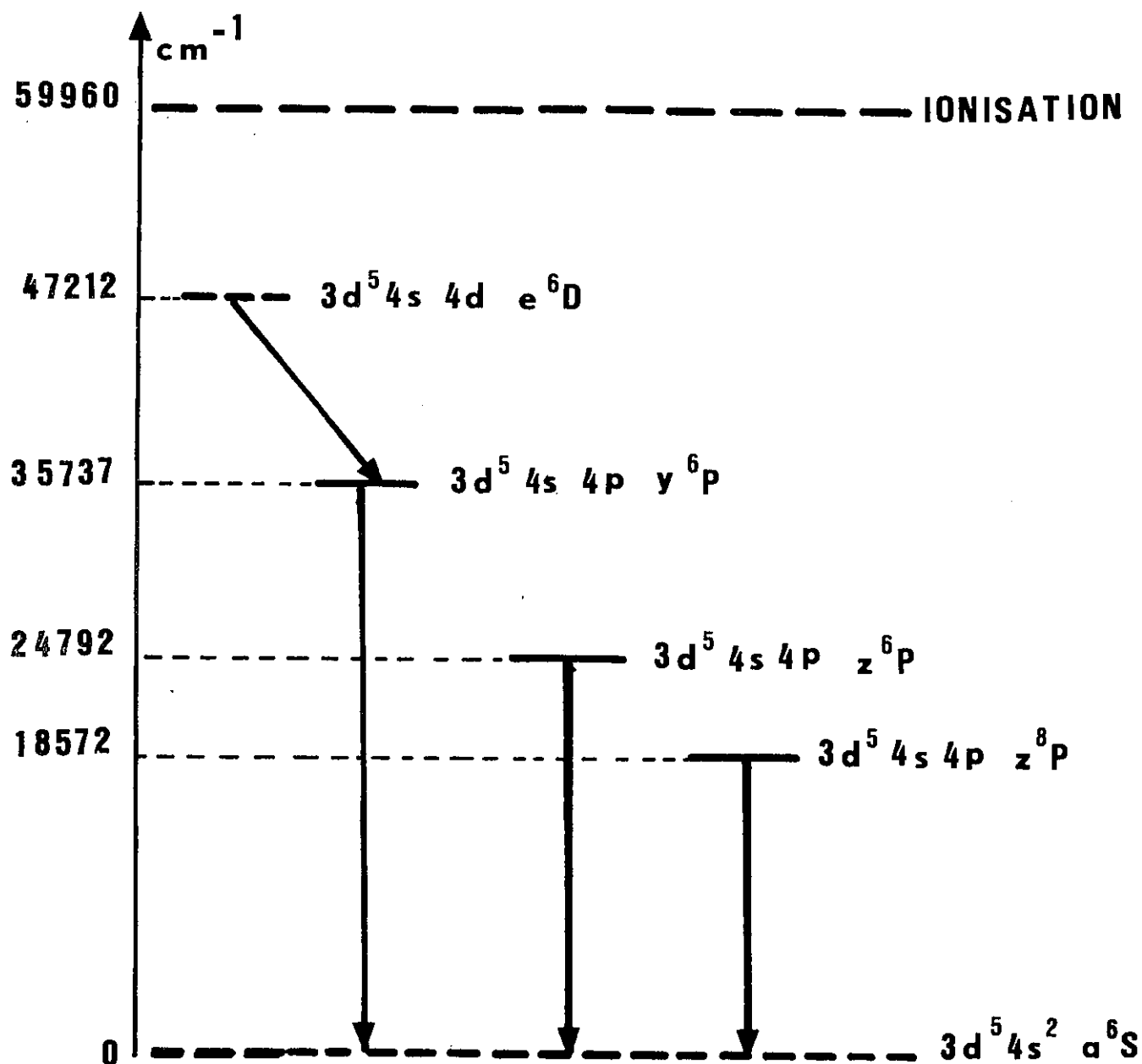


Fig. 1

La détermination des constantes de structure hyperfine des niveaux du terme y^6P peut se faire par deux voies différentes présentant chacune d'importantes difficultés.

La première suivie par ROTTMAN [6] consiste à étudier à l'aide d'un spectrographe Fabry-Perot la structure des raies ultraviolettes du multiplet $y^6P \rightarrow a^6S$. Ces mesures sont rendues délicates d'une part par l'autoabsorption toujours présente dans les raies de résonance, d'autre part par la finesse réflectrice relativement faible du Fabry-Perot dans cette région spectrale.

La seconde possibilité est la mesure à haute résolution dans le proche infrarouge (8740 Å) des structures des raies du multiplet $e^6D \rightarrow y^6P$. Jusqu'à présent aucune mesure n'avait été faite en laboratoire sur ce multiplet en raison des difficultés que présente l'excitation des niveaux e^6D , niveaux situés vers 47216 cm^{-1} et proches de la limite d'ionisation. Par contre, trois raies d'absorption faisant partie de ce multiplet sont présentes dans le spectre solaire enregistré par DELBOUILLE et ROLAND [7]: 8740.9 Å ($e^6D_{9/2} \rightarrow y^6P_{7/2}$), 8703.7 Å ($e^6D_{7/2} \rightarrow y^6P_{5/2}$) et 8701.0 Å ($e^6D_{5/2} \rightarrow y^6P_{5/2}$). Ceci a permis à Swensson [8] de déduire les distances entre les composantes les plus intenses de chacune de ces trois raies. Cependant la très faible intensité de ces raies d'absorption dans le spectre solaire ainsi que leur largeur rendent difficile l'analyse de ces structures complexes (Fig.2). Cette situation a conduit

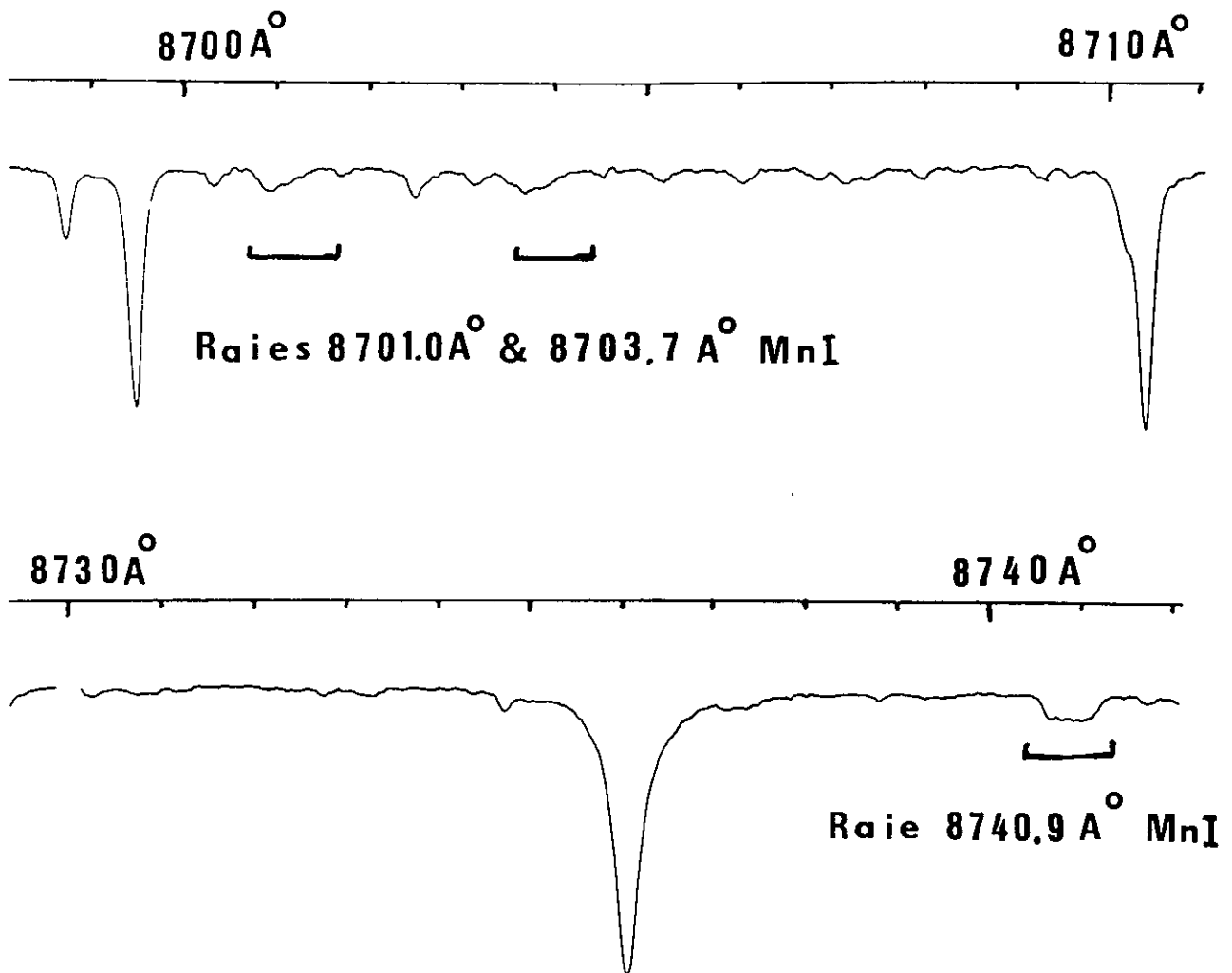


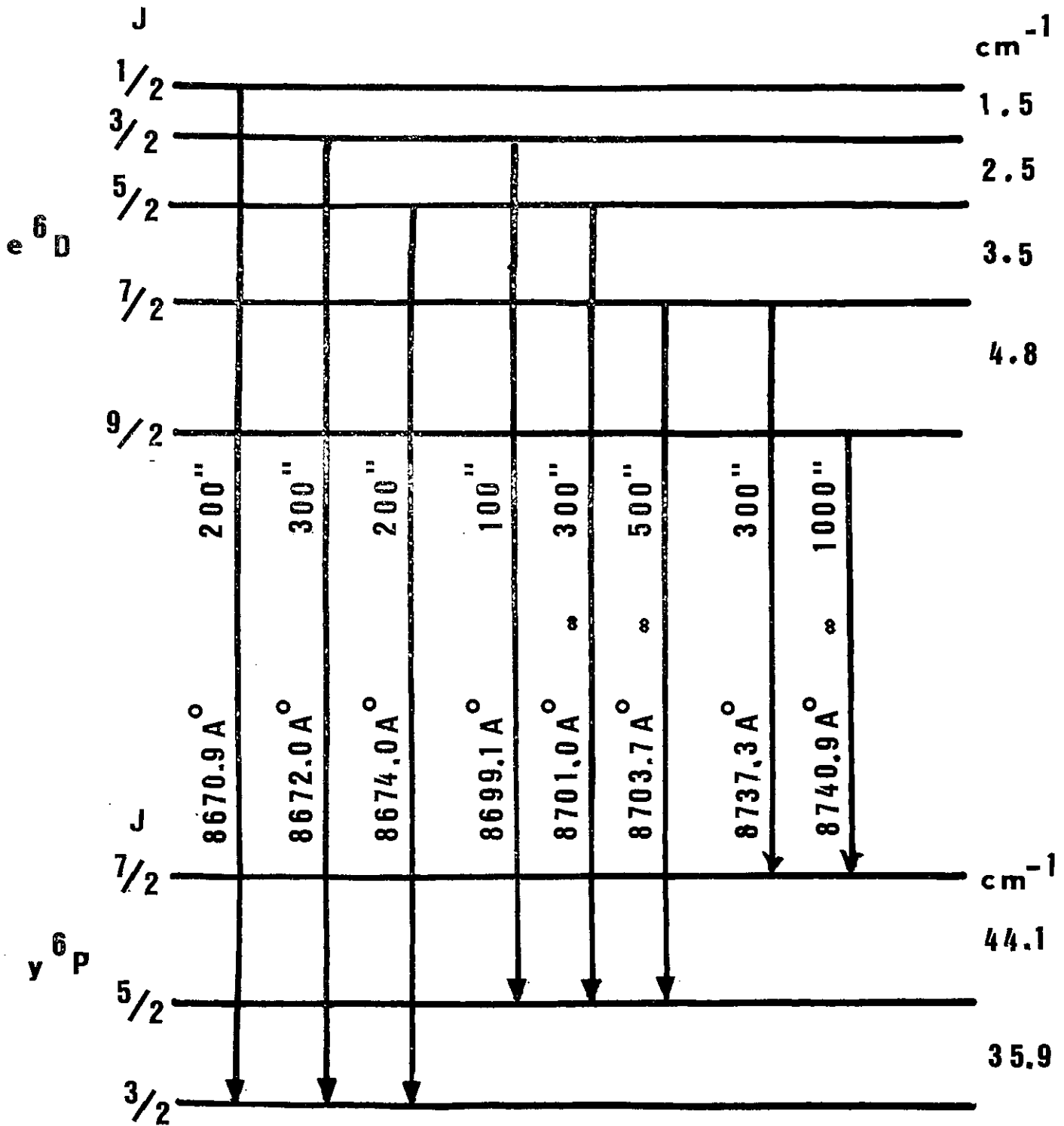
FIG. 2

SWENSSON [8] à exprimer le désir que des mesures concernant ces mêmes structures soient reprises en laboratoire.

Ces mesures n'avaient pu être effectuées jusqu'ici devant la difficulté rencontrée pour reproduire ces raies en laboratoire. Après de nombreux efforts nous avons réussi à enregistrer les structures hyperfines correspondant à huit transitions du multiplet considéré, ($e^6D \rightarrow y^6P$), à l'aide de deux dispositifs expérimentaux différents: un spectromètre photoélectrique et un spectromètre de Fourier. (fig.3)

Ces résultats nous ont permis:

- d'améliorer considérablement les mesures astronomiques de Swensson;
- d'obtenir des valeurs précises pour les constantes de structure hyperfine des niveaux des termes e^6D , y^6P et de comparer dans certains cas particuliers les possibilités des deux dispositifs;
- du point de vue théorique une étude paramétrique nous a permis d'interpréter de façon satisfaisante les constantes de structure hyperfine dipolaire magnétique des niveaux et d'obtenir les valeurs des constantes de structure hyperfine des électrons 3d, 4s et 4p. Ces calculs ont mis en évidence un important phénomène de polarisation des électrons s par les électrons 3d, phénomène que nous avons retrouvé dans un calcul a priori Hartree-Fock avec polarisation de spin.



" Intensités relatives
 * Raies solaires

Fig. 3

I - TECHNIQUES EXPERIMENTALES UTILISEES.

Les mesures de structure hyperfine et de déplacement isotopique nécessitent l'emploi de dispositifs à la fois très résolvants et très lumineux. Nous avons successivement utilisé un spectromètre Fabry-Perot photoélectrique (HYPEAC) [9] [10] et un spectromètre de Fourier [11] [12]. Nous donnerons une description des deux appareils et nous montrerons comment l'utilisation de programmes de calcul écrits en Fortran pour un ordinateur Univac 1108 permet de tirer le meilleur parti des enregistrements fournis par ces deux dispositifs. Auparavant nous exposerons les difficultés rencontrées pour obtenir une source lumineuse à la fois stable et suffisamment intense.

1°) Sources et Détecteurs.

A priori deux sources pouvaient convenir: un tube sans électrode contenant un halogénure de manganèse excité par haute fréquence, et une cathode creuse classique.

Le premier type de source a été abandonné après maints essais par suite de la présence à proximité des raies d'émission à étudier de

bandes moléculaires probablement dues au chlore.

Nous avons donc été contraints d'utiliser une cathode creuse, en principe moins lumineuse qu'un tube sans électrode. Les divers essais effectués avec une cathode creuse en aluminium contenant soit un sel de manganèse soit des morceaux de manganèse électrolytique n'ont donné aucun résultat utilisable en structure hyperfine (absence d'intensité ou raies intenses mais trop larges).

Les seuls résultats exploitables, c'est à dire l'obtention d'une stable et émission à la fois [suffisamment intense, mais avec des largeurs de raies raisonnables ont été obtenus avec une cathode creuse en manganèse massif fabriquée par trépanage d'un morceau de métal obtenu par aluminothermie (pureté 99.87%) (Fig.4). Il fut toutefois nécessaire d'y faire circuler un courant de 0.5 à 1 A. Malgré cette forte intensité il demeurait absolument nécessaire de refroidir cette source à l'azote liquide, pour obtenir une émission à la fois stable et intense.

Le récepteur est un photomultiplicateur R.C.A. 7102 refroidi à l'azote liquide dont la couche photosensible (AgOCs) présente un maximum de rendement quantique dans la région spectrale qui nous intéresse (8000 - 9000 Å).

CATHODE CREUSE

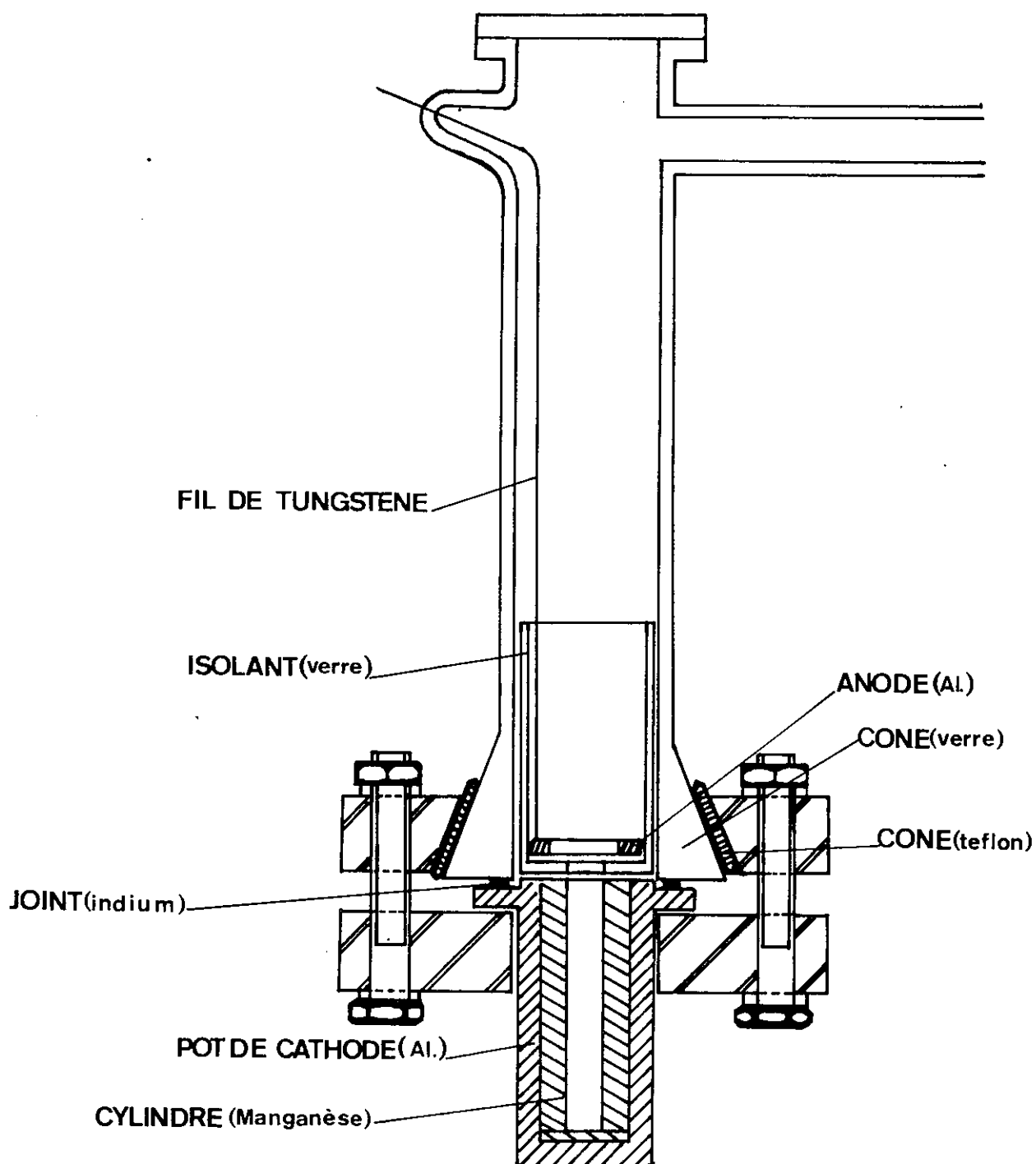


FIG. 4

2°) Hypeac.

(a) Description de l'appareil.

Cet appareil, dont le schéma est présenté sur la Figure 5 est constitué principalement par un monochromateur Ebert Fastie suivi d'un étalon Fabry-Perot.

La méthode la plus généralement utilisée pour mesurer, à l'aide d'un spectromètre Fabry-Perot, les distances entre les composantes hyperfines ou isotopiques des raies spectrales consiste à faire varier la pression (donc l'indice) à l'intérieur de l'enceinte contenant le Fabry-Perot et à enregistrer le signal fourni par le photomultiplicateur analyseur. Les enregistrements se présentent alors comme une succession d'ordres identiques, comme le montre la Figure 6 qui donne un exemple d'enregistrement des raies 8740.9 \AA et 8674 \AA de Mn I.

Le balayage par pression s'effectue par remplissage progressif de l'enceinte contenant le Fabry-Perot; celle-ci, préalablement vidée, est ensuite remplie avec de l'air ou un gaz tel que le gaz carbonique ou le freon. Ces deux derniers gaz à indice de réfraction élevé permettent d'augmenter l'intervalle spectral explorable. Le débit de rentrée du gaz dans l'enceinte est contrôlé par une fuite réglable. Les fuites que nous avons utilisées sont de deux sortes: une fuite à aiguille fabriquée par Edwards et une fuite régulée de fabrication américaine.

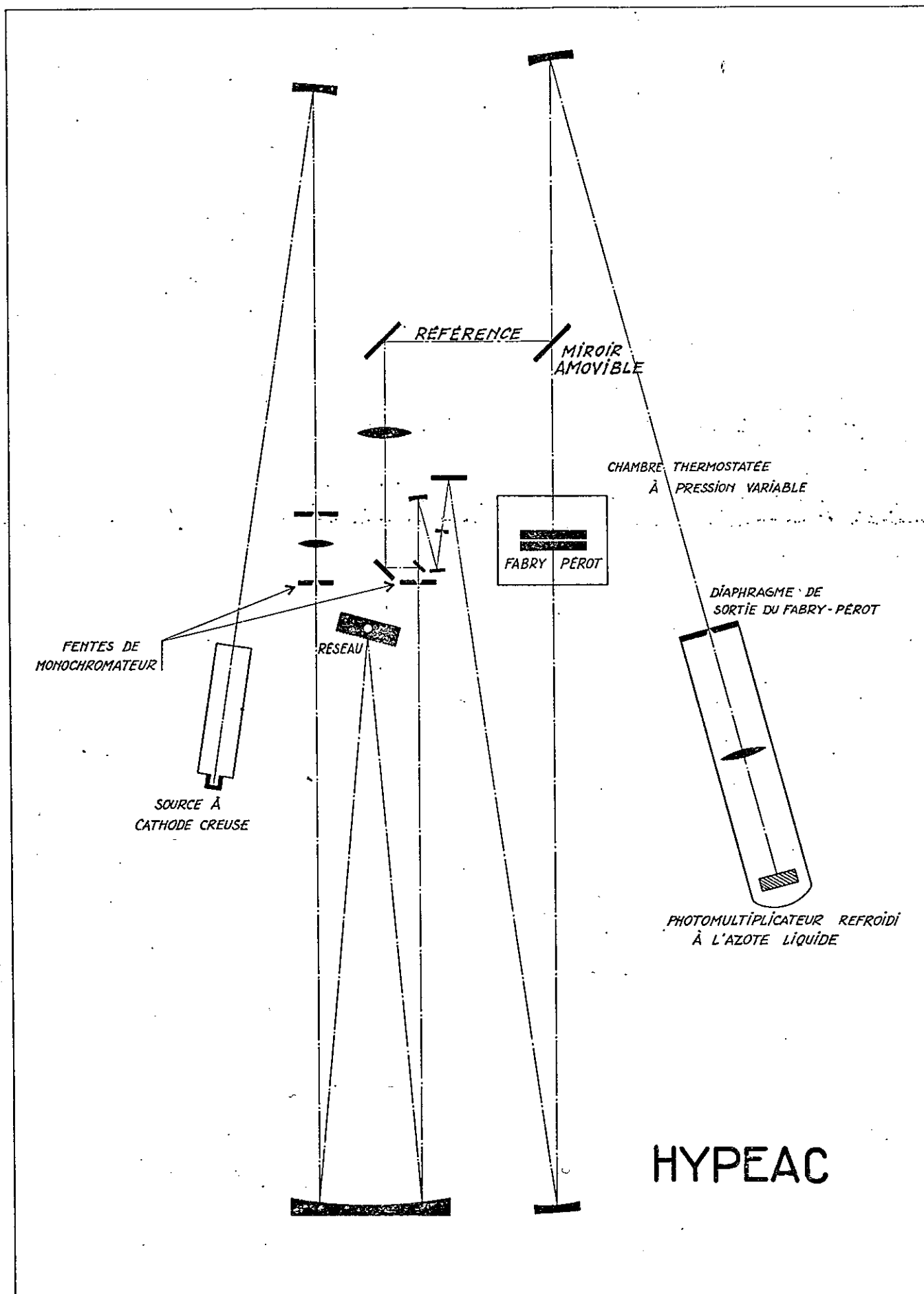


Fig. 5

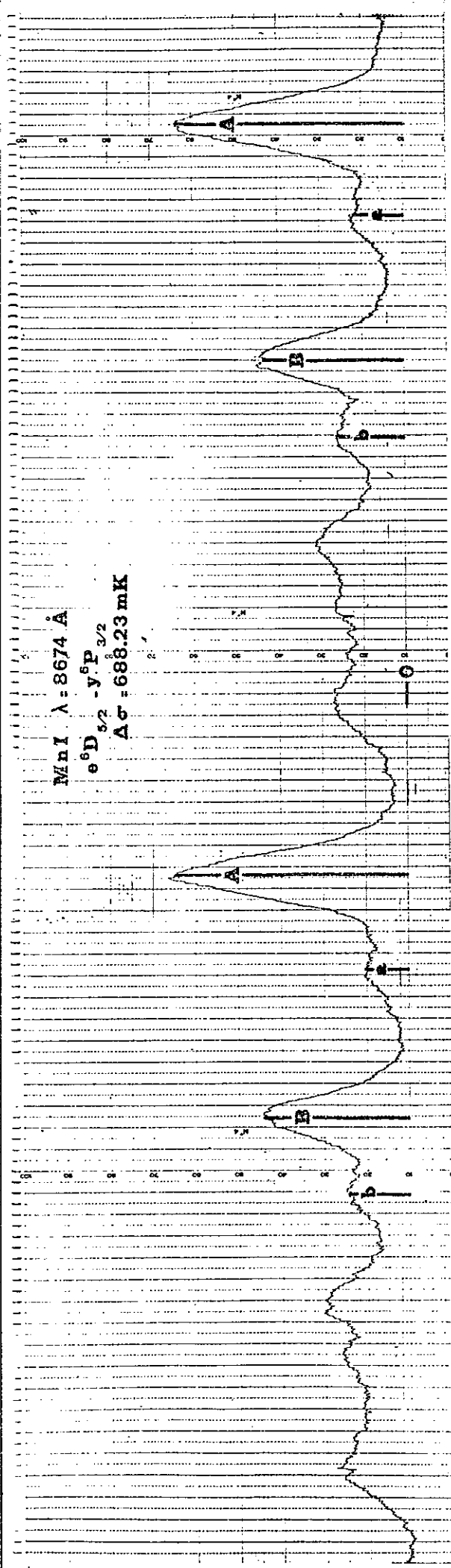
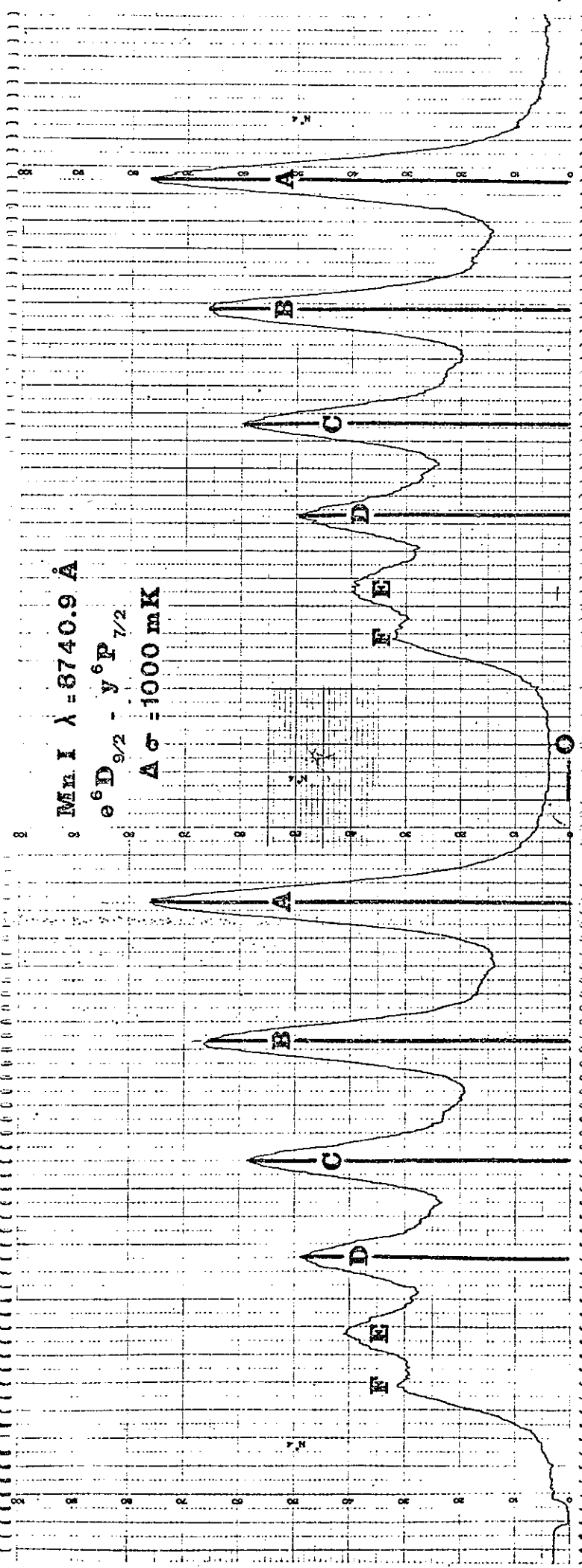


Fig. 6

Nous avons utilisé un système d'enregistrement potentiométrique x, y où l'ordonnée y traduit l'intensité du signal reçu par le photomultiplicateur (profil spectral) et l'abscisse x une fonction linéaire du temps.

Un système d'enregistrement digital peut être également connecté sur ces montages. Il permet de mesurer à l'aide d'un voltmètre électronique le signal fourni par le photomultiplicateur et de perforer cette information sur un ruban papier à intervalles réguliers (de $1/10$ de seconde à 4 secondes), cet intervalle constituant le pas d'échantillonnage.

La précision des mesures dépend principalement du rapport signal sur bruit des enregistrements, c'est à dire de la précision avec laquelle il est possible d'effectuer le pointé des composantes hyperfines. Un problème est constitué par la loi de balayage gouvernant l'échantillonnage. On peut contrôler l'échantillonnage à l'aide d'un interféromètre de Michelson auxiliaire décrit ci-dessous. Nous avons entrepris une étude systématique de ce dernier problème et proposé des solutions qui permettent de s'affranchir en grande partie de la non-linéarité des fuites.

b) Etude du balayage par pression d'un interféromètre Fabry-Perot.

En mesurant sur un enregistrement les intervalles entre ordres successifs (distance entre deux pics correspondant à une même composante dans les ordres d'interférence n et $n+1$) on rend bien compte des défauts globaux de linéarité des fuites à tester.

Le tableau I contient les intervalles entre ordres successifs mesurés sur un enregistrement de la raie $\lambda = 8740.9 \text{ \AA}$ du Mn I (Fig.6). La fuite utilisée dans ce cas était du type Edwards.

Tableau I

Composante	A	B	C	D
intervalles	300.4	302.7	304.8	306.0
entre ordres successifs	310.5	311.3	311.8	312.8
mesurés en mm	315.5	316.4	317.8	318.8
	320.5	321.8	321.6	322.2
	325.3	325.8	327.8	328.8
	333.3	335.7	337.9	339.2

Pour mettre en évidence des fluctuations rapides au cours des variations de pression à l'intérieur de l'enceinte du Fabry-Perot un étalonnage plus serré s'impose.

Un étalonnage théoriquement aussi serré que l'on veut peut être obtenu en utilisant un interféromètre de Michelson. Nous rappellerons ici le principe de ce montage réalisé au Laboratoire Aimé Cotton par H.T. DUONG, S. GERSTENKORN et J.M. HELBERT [13].

Un des bras de l'interféromètre de Michelson communique directement avec l'enceinte contenant le Fabry-Perot, l'autre bras est maintenu à une pression fixe.

Le nombre de franges qu'il est possible d'enregistrer pendant une variation d'indice correspondant à un ordre du Fabry-Perot est:

$$N = \frac{L}{\ell} \frac{\lambda_{FP}}{\lambda_M} \quad (1) \quad \begin{array}{l} (\lambda_{FP} = \text{longueur d'onde analysée au Fabry-Perot}) \\ (\lambda_M = \text{longueur d'onde traversant le Michelson}) \end{array}$$

Pratiquement pour une longueur de bras de Michelson L de 50 cm et une épaisseur de Fabry-Perot ℓ de 0,5 cm (intervalle entre ordre 1000 mK), une centaine de franges de Michelson correspondent à un ordre du Fabry-Perot.

Dans la pratique les franges du Michelson et le signal fourni par le Fabry-Perot sont enregistrés simultanément par le même ensemble électronique (voltmètre digital et perforatrice).

Pour faire une étude systématique des systèmes de balayage nous avons enregistré la raie $4058 \overset{\circ}{\text{Å}}$ du plomb naturel. Cette raie de résonance très intense permet d'obtenir des enregistrements avec un excellent rapport signal sur bruit. La figure 7 représente

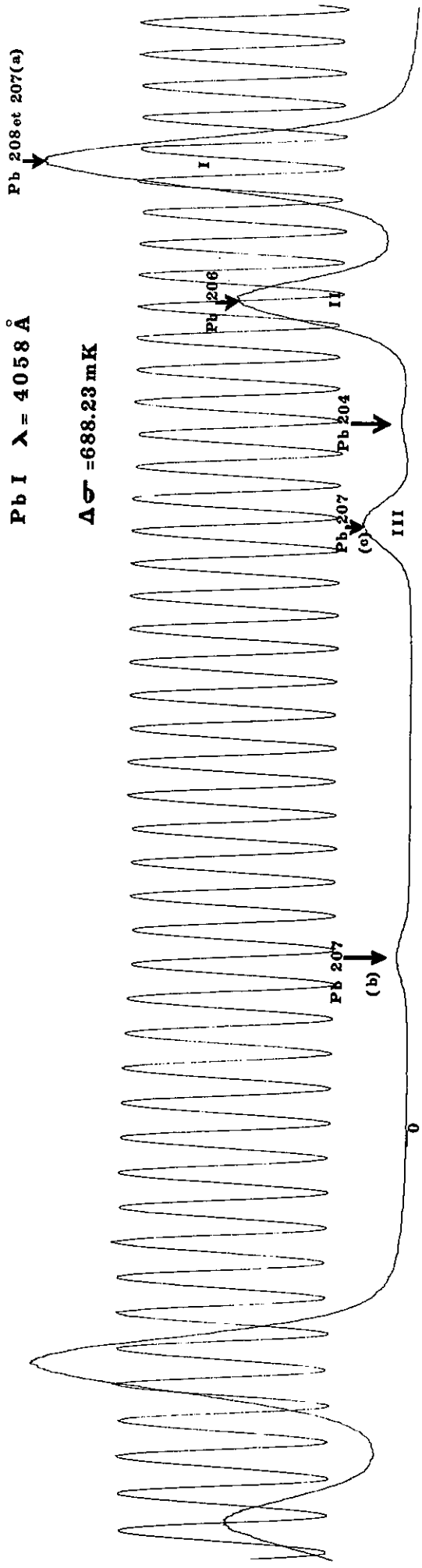


Fig. 7

un tel enregistrement.

Un programme de calcul écrit pour ordinateur permet à partir des données stockées sur bandes perforées de préciser les positions des centres de gravité des franges de Michelson et celles des pics enregistrés au Fabry-Perot.

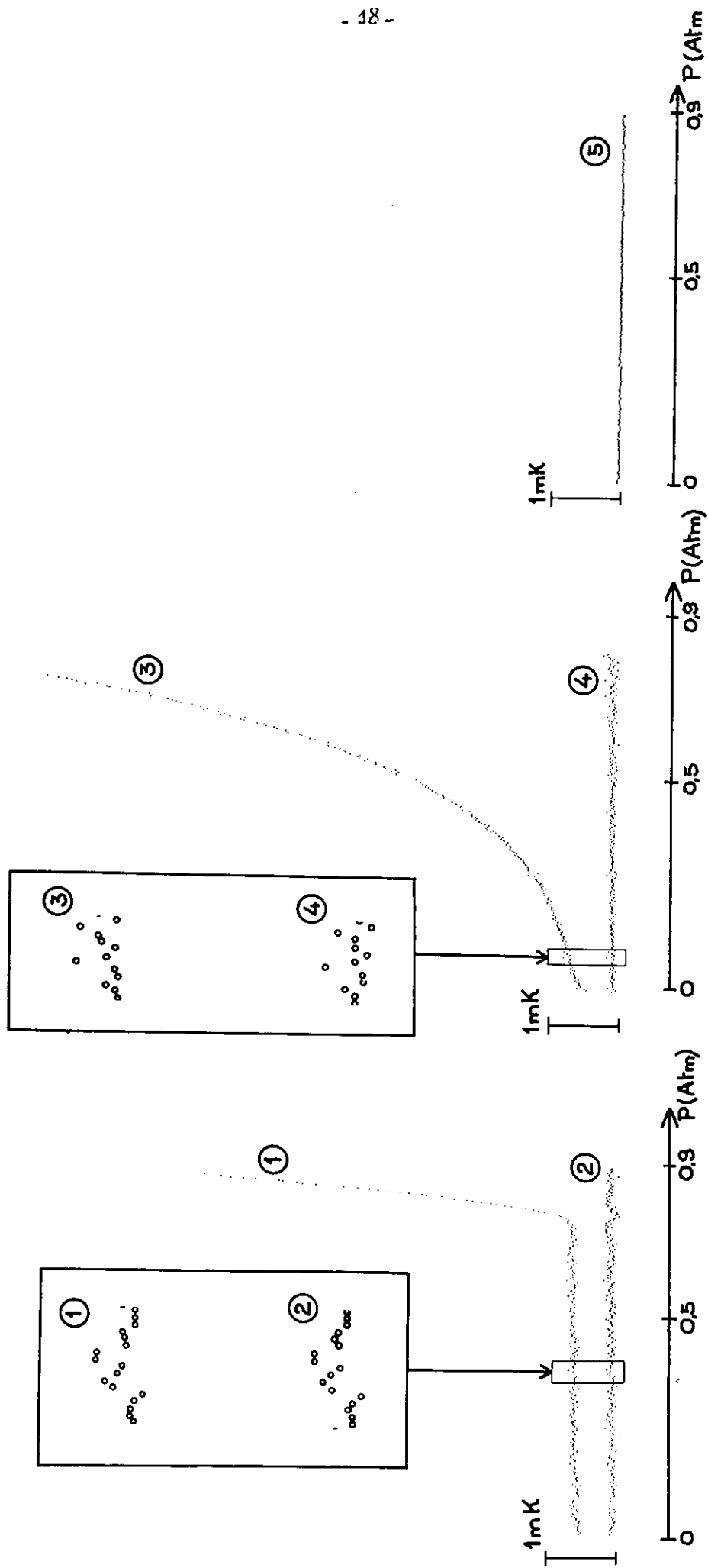
Dans tous les tableaux suivants les distances seront données en nombre de pas d'échantillonnage. Une correspondance en mK sera également fournie.

La figure 8 représente sous forme graphique la variation de la distance séparant les centres de gravité de deux franges de Michelson successives quand la pression dans l'enceinte du Fabry-Perot varie jusqu'à 0,9 atmosphère environ.

On constate pour la fuite Edwards une variation lente et continue de l'interfrange.

Les franges enregistrées par balayage pression avec la fuite régulée sont pratiquement équidistantes jusqu'à 0,8 atmosphère. A partir de cette pression la distance entre deux franges successives croit rapidement.

VARIATION DE L'INTERFRANGE (MICHELSON) EN FONCTION DE LA PRESSION



- ① Fuite réglée avant linéarisation. Pression en amont 1 Atm.
- ② Fuite réglée après linéarisation. Pression en amont 1 Atm.
- ③ Fuite Edwards avant linéarisation. Pression en amont 1 Atm.
- ④ Fuite Edwards après linéarisation. Pression en amont 1 Atm.
- ⑤ Fuite réglée après linéarisation. Pression en amont 4 Atm.

Fig. 8

(c) Correction a posteriori des défauts de linéarité des enregistrements Fabry-Perot.

(c - 1) Présentation du problème.

Dans le cas d'un balayage linéaire la position X_n du centre de gravité de la $n^{\text{ème}}$ frange sur l'enregistrement est donnée par la relation simple:

$$X_n = a_0 + a_1 n \quad (2)$$

Les X_n sont généralement mesurés en mm et dans le cas d'enregistrements digitaux en pas d'échantillonnage (fonction linéaire du temps).

En général quand la pression augmente les interfranges mesurés se dilatent (fig.8). Pour rendre compte de ce phénomène la relation simple (2) peut être remplacée par un polynôme de degré variable k .

$$X_n = a_0 + a_1 n + a_2 n^2 + \dots + a_k n^k$$

Les paramètres $a_0, a_1, a_2, \dots, a_k$ ayant été ajustés par moindres carrés, il est alors possible de recalculer par ordinateur, à partir de l'enregistrement brut, un nouveau spectre correspondant à un balayage linéaire. Le tableau II contient les interfranges mesurés de 5 en 5 franges après et avant linéarisation.

Les X_n peuvent être à volonté les positions des centres de gravité des franges de Michelson ou celles des centres de gravité d'une composante enregistrée au Fabry-Perot dans les différents ordres, pourvu

que le rapport signal sur bruit de cette composante soit suffisant. Les enregistrements ne comportant pas l'enregistrement simultané des franges de Michelson pourront donc être également linéarisés.

Grâce aux franges fournies par l'interferomètre de Michelson nous disposons d'un système d'étalonnage des spectres enregistrés au Fabry-Perot qui permet de nous affranchir de la non linéarité du balayage. Cette méthode est utilisable avec les réserves suivantes: le défaut de linéarité doit avoir une amplitude suffisamment faible pour ne pas perturber localement de façon sensible la symétrie des franges étalon. Toutes les fluctuations de quelque origine que ce soit doivent être pratiquement inexistantes ou d'amplitude extrêmement faible, l'enregistrement des franges doit se faire continuellement avec un rapport signal sur bruit supérieur à cent.

Après linéarisation des enregistrements par le procédé décrit ci-dessus il est possible de rendre compte conjointement de la non linéarité résiduelle et des fluctuations par la déviation moyenne

$$D_M = \frac{\sum_{i=1}^N |X_i - \bar{X}|}{N} \quad \text{et l'écart quadratique moyen}$$

$$\text{E.Q.M.} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (X_i - \bar{X})^2}{N}} \quad . \quad \text{Dans ces expressions } X_i \text{ représente la}$$

distance (en pas d'échantillonnage) entre les franges i et $i+1$ et \bar{X} la valeur moyenne de l'interfrange.

Tableau II

Interfrange (Michelson) en fonction de la pression pour
une fuite régulée et une fuite Edwards.

Pression (atm.)	N° de la frange	Fuite Edwards		Fuite régulée	
		interfrange brut	interfrange après linéar.	interfrange brut	interfrange après linéar.
0.015	5	19.84	17.38	17.41	17.27
0.045	15	20.08	17.37	17.28	17.29
0.075	25	20.28	17.41	17.47	17.51
0.105	35	20.33	17.33	17.32	17.33
0.134	45	20.44	17.40	17.49	17.50
0.164	55	20.69	17.43	17.37	17.40
0.193	65	20.82	17.29	17.33	17.41
0.223	75	20.91	17.44	17.36	17.45
0.253	85	21.35	17.33	17.45	17.50
0.283	95	21.55	17.32	17.42	17.47
0.313	105	21.88	17.40	17.36	17.41
0.343	115	21.29	17.37	17.41	17.48
0.373	125	21.69	17.40	17.38	17.46
0.402	135	22.36	17.47	17.44	17.51
0.432	145	23.86	17.37	17.35	17.40
0.462	155	23.47	17.44	17.33	17.36
0.491	165	24.38	17.42	17.34	17.39
0.521	175	25.98	17.44	17.36	17.46
0.551	185	27.18	17.44	17.41	17.57
0.580	195	28.42	17.31	17.36	17.48
0.611	205	29.63	17.21	17.44	17.52
0.640	215	31.30	17.41	17.48	17.53
0.670	225	33.20	17.52	17.50	17.57
0.700	235	35.14	17.37	17.61	17.44
0.730	245	38.42	17.39	17.59	17.50
0.759	255	41.08	17.39	17.48	17.52
0.789	265	45.23	17.44	17.67	17.28
0.819	275	49.65	17.42	19.41	17.48
0.849	285	53.32	17.41	22.14	17.50
0.878	295	58.02	17.40	25.66	17.37

On remarquera (figure 8) que les fluctuations se retrouvent après linéarisation, tant pour la fuite Edwards que pour la fuite régulée.

Dans le but de trouver la condition optimum de balayage, nous avons entrepris une étude systématique de la déviation moyenne dans diverses conditions expérimentales.

(c-2) Etude des fluctuations.

Dans les tableaux suivants se trouvent rassemblés les résultats d'une étude systématique des fluctuations après linéarisation des enregistrements. Les fuites sont en communication soit avec l'atmosphère de la salle soit avec une réserve d'azote à la pression de quatre atmosphères.

Dans le cas où les fuites sont en communication avec la réserve d'azote à la pression de quatre atmosphères les résultats fournis par les deux types de fuite sont pratiquement identiques. Nous ne donnerons donc que ceux obtenus avec la fuite régulée. L'écart quadratique moyen et la déviation moyenne étant dans tous les cas des grandeurs comparables, nous ne donnerons toujours que cette dernière quantité.

Tableau III

Déviatiion moyenne des franges de Michelson pour
une variation de pression dans l'enceinte du
Fabry-Perot comprise entre 0 et 0,9 atmosphère.

Type de fuite	Pression en amont	Valeur moyenne de l'interfrange L_M en mK	D_M mK *	D_M/L_M %
Edwards	1 atm.	19.130	0.052	0.27
Régulée	1 atm.	19.130	0.072	0.38
	4 atm.	19.130	0.012	0.063

Tableau IV

Etude de la déviation moyenne en fonction de la pression dans l'enceinte du Fabry-Perot.

Fuite régulée avant linéarisation.

Pression dans l'enceinte du F.P. Atm.	Pression en amont Atm.	Valeur moyenne ** de l'interfrange I_M en mK	D_M * en mK	D_M/I_M %
0.060	1	19.130	0.084	0.44
0.178	1	19.188	0.068	0.36
0.293	1	19.196	0.068	0.36
0.417	1	19.194	0.066	0.35
0.536	1	19.246	0.066	0.35
0.655	1	19.239	0.076	0.39
0.774	1	19.741	0.668	7.67

Fuite régulée après linéarisation.

Pression dans l'enceinte du F.P. Atm.	Pression en amont Atm.	Valeur moyenne ** de l'interfrange I_M en mK	D_M * en mK	D_M/I_M %
0.060	1	19.144	0.067	0.35
0.178	1	19.137	0.061	0.32
0.293	1	19.141	0.056	0.37
0.417	1	19.131	0.066	0.34
0.536	1	19.127	0.059	0.31
0.655	1	19.136	0.070	0.37
0.774	1	19.133	0.103	0.54

* La valeur moyenne de l'interfrange et la déviation moyenne sont calculées sur quarante franges situées de part et d'autre de la frange correspondant à la pression indiquée.

** La valeur de l'interfrange exprimée en mK varie comme le montre la relation 1 avec la longueur d'onde de la radiation analysée au Fabry-Perot.

Fuite Edwards après linéarisation.

Pression dans l'enceinte du F.P. Atm.	Pression en amont Atm.	Valeur moyenne ** de l'interfrange en mK	D _M * en mK	D _M /I _M %
0.060	1	19.137	0.044	0.23
0.178	1	19.138	0.037	0.19
0.293	1	19.138	0.037	0.19
0.417	1	19.133	0.049	0.26
0.536	1	19.136	0.060	0.32
0.655	1	19.132	0.063	0.33
0.774	1	19.142	0.091	0.48

Fuite régulée après linéarisation (résultats identiques pour la fuite Edwards)

Pression dans l'enceinte du F.P. Atm.	Pression en amont Atm.	Valeur moyenne ** de l'interfrange en mK	D _M * en mK	D _M /I _M %
0.060	4	19.137	0.016	0.086
0.178	4	19.139	0.013	0.069
0.293	4	19.136	0.0096	0.050
0.417	4	19.139	0.0079	0.041
0.536	4	19.136	0.016	0.086
0.655	4	19.137	0.0086	0.045
0.774	4	19.138	0.011	0.057

* La valeur moyenne de l'interfrange et la déviation moyenne sont calculées sur quarante franges situées de part et d'autre de la frange correspondant à la pression indiquée.

** La valeur de l'interfrange exprimée en mK varie comme le montre la relation 1 avec la longueur d'onde de la radiation analysée au Fabry-Perot.

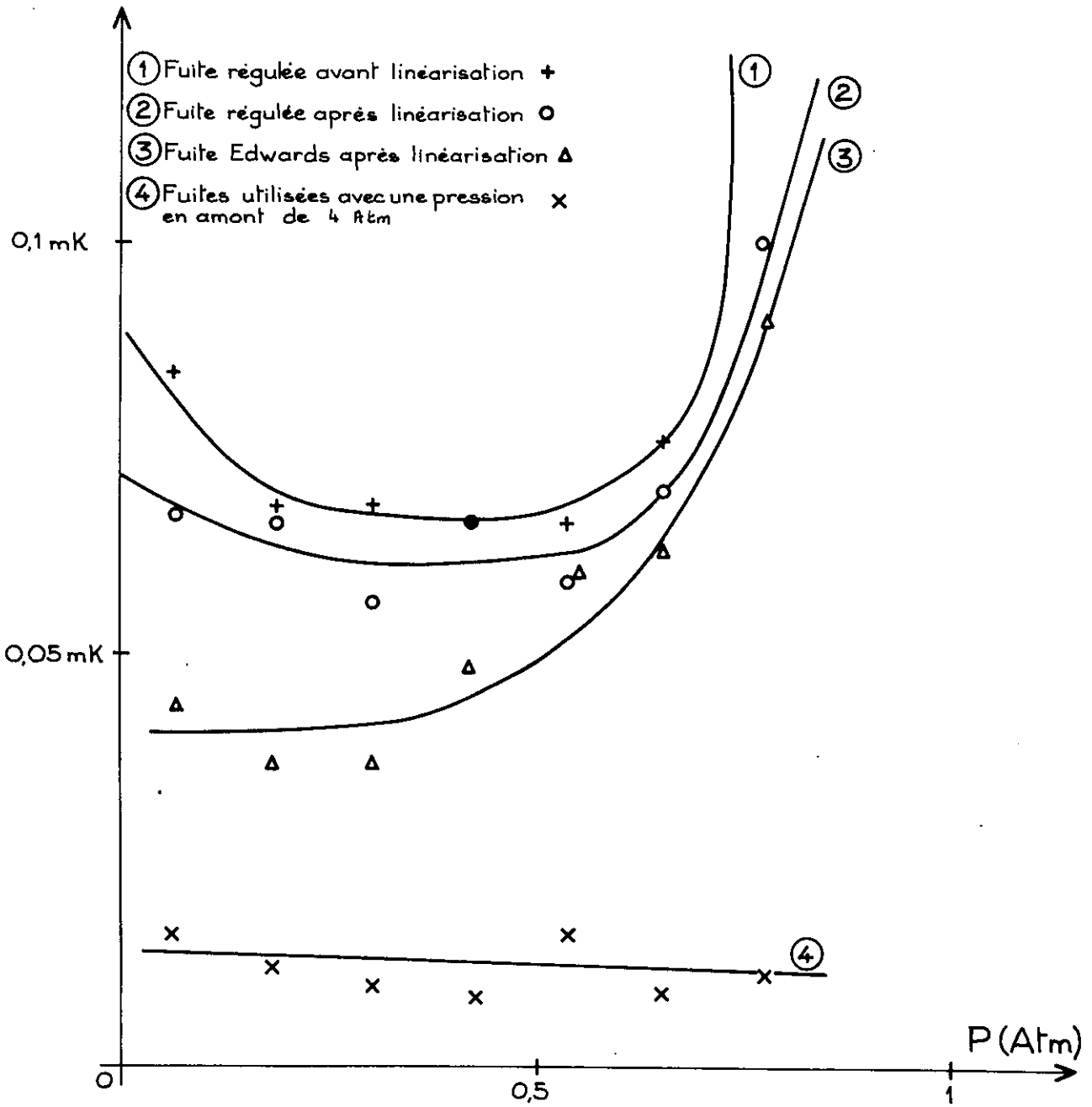


Fig.9

Nous avons représenté graphiquement la variation de la déviation moyenne en fonction de la pression dans les divers cas considérés (fig. 9).

On peut également mettre en évidence le phénomène de fluctuations en étudiant la variation de la déviation moyenne en fonction du degré du polynome traduisant la non linéarité du balayage (tableau V, fig. 10).

Tableau V

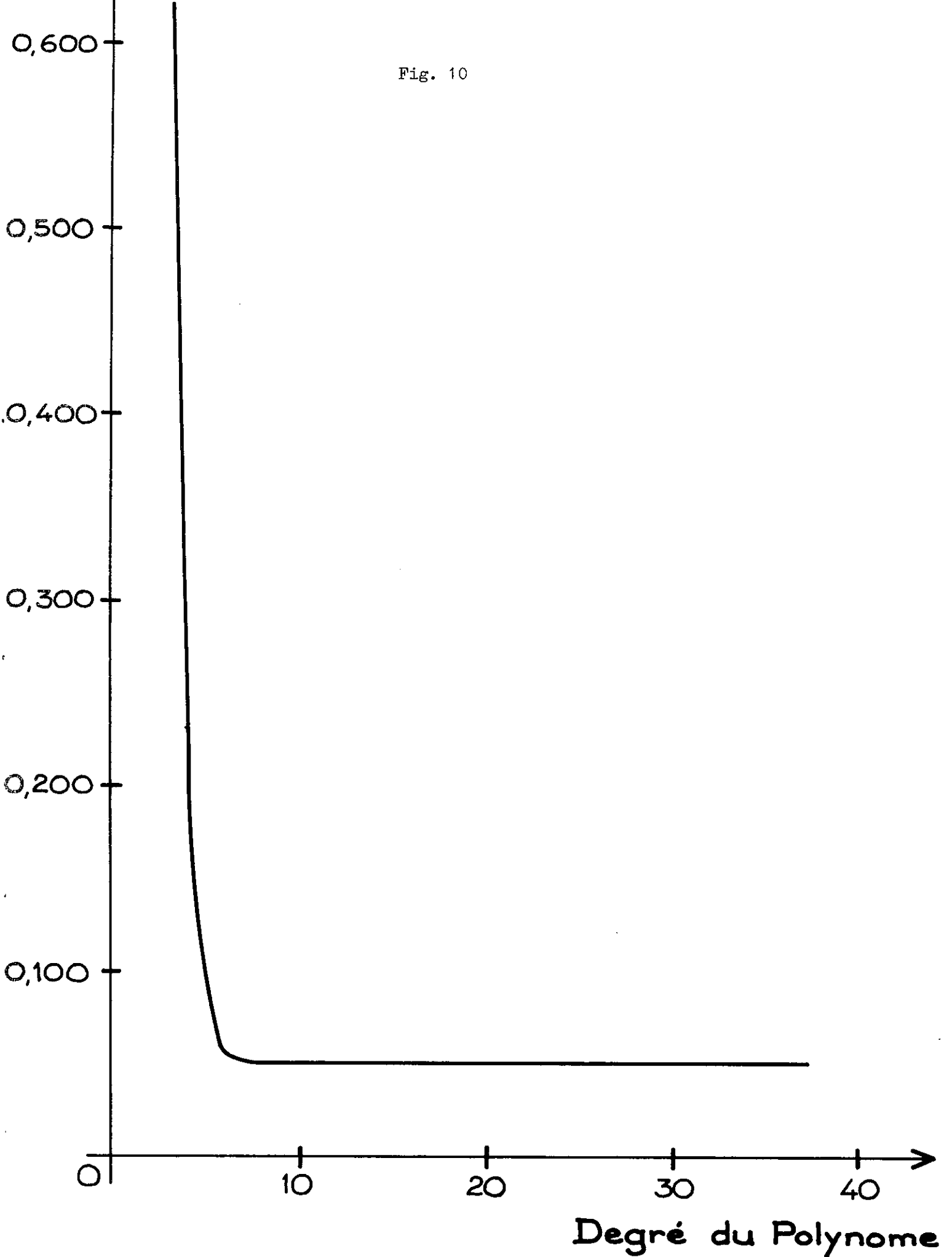
Variation de la déviation en fonction du degré du polynome.

Fuite Edwards, pression en amont 1 atmosphère.

Degré du Polynome	D_M en mK	Degré du Polynome	D_M en mK
2	2.105	12	0.052
3	0.612	14	0.052
4	0.216	16	0.052
5	0.103	18	0.052
6	0.053	20	0.052
7	0.053	25	0.052
8	0.052	30	0.052
10	0.052	35	0.052

ΔD_M en mK

Fig. 10

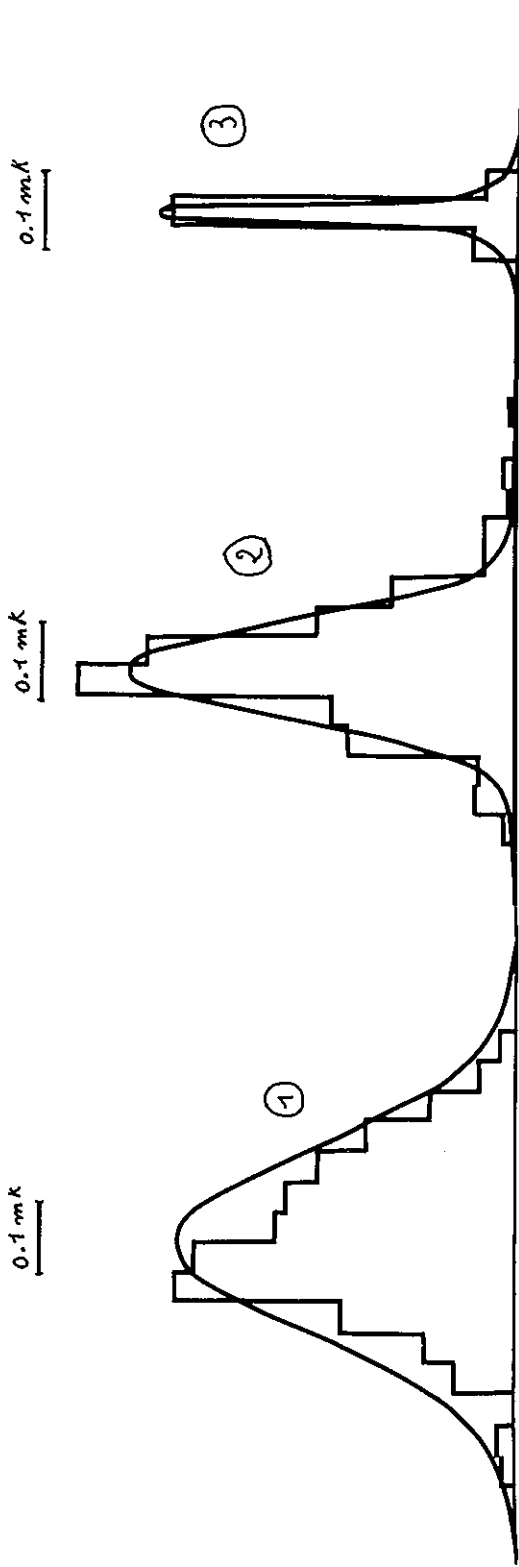


En pratique un polynome de degré 6 ou 7 permet de rendre compte parfaitement de la non linéarité globale. L'emploi de polynomes de degré très supérieur n'amène aucune diminution de la déviation moyenne. Cette quantité traduit alors les fluctuations présentes de caractère aléatoire, et non dues à un phénomène continu qui serait pris en compte par un polynome de degré supérieur.

Une étude de la répartition des interfranges de Michelson autour de leur valeur moyenne montre (fig. 11) que la loi de distribution est avec une bonne approximation normale.

(c - 3) Exemples concrets de linéarisation a posteriori d'un spectre obtenu au Fabry-Perot.

Nous présentons dans ce paragraphe trois linéarisations a posteriori d'enregistrements Fabry-Perot obtenus par balayage pression avec une fuite Edwards. Les tableaux suivants contiennent (exprimés en pas d'échantillonnage): d'une part les intervalles entre ordre mesurés pour les pics les plus intenses, d'autre part les distances entre les principales composantes des structures étudiées.



- 1 Fuite régulée
- 2 Fuite Edwards
- 3 Fuite régulée pression en amont 4 Atm.

Répartition de l'interfrange autour de sa valeur moyenne.

Fig. 11

Tableau VI

Raie $\lambda = 4058 \text{ \AA}$ Pb avant linéarisation. Fig.9

Composantes Ordres	Intervalle entre ordre			Distance entre les composantes		
	I	II	III	II-I	III-II	III-I
1	641.92	644.20	647.58	75.95	123.33	199.29
2	665.09	668.83	675.94	78.22	126.72	204.94
3	706.52	713.14	724.40	81.96	133.83	215.79
4	774.23	784.59	802.81	89.44	136.39	234.54
5	884.07	901.52	932.55	98.93	163.32	262.26
6	1075.15	1106.84	1163.55	116.38	144.35	310.74

Raie $\lambda = 4058 \text{ \AA}$ Pb après linéarisation à partir des franges de Michelson

Composantes Ordres	Intervalle entre ordre			Distance entre les composantes		
	I	II	III	II-I	III-II	III-I
1	625.03	625.02	625.78	74.85	121.04	195.89
2	624.50	624.42	624.52	74.84	120.54	195.38
3	624.47	625.46	624.79	74.76	120.91	195.67
4	624.73	624.76	624.45	74.84	120.81	195.65
5	625.25	625.19	624.96	74.94	120.41	195.84
6	624.20	624.09	624.04	74.70	120.89	195.59
Valeur moyenne	624.70	624.82	624.75	74.82	120.85	195.67

Raie $\lambda = 4058 \text{ \AA}$ Pb après linéarisation sans utilisation des franges de Michelson.

Composantes Ordres	Intervalle entre ordre			Distance entre les composantes		
	I	II	III	II-I	III-II	III-I
1	624.72	624.39	623.77	75.10	121.11	196.21
2	624.51	624.56	625.13	74.79	120.47	195.26
3	624.92	624.56	624.60	74.84	121.04	195.88
4	624.29	624.92	624.29	74.84	120.72	195.56
5	624.83	624.21	625.16	74.76	120.80	195.56
6	624.44	624.92	623.65	74.85	121.04	195.89

Valeur moyenne 624.61 624.59 624.44 74.86 120.86 195.72

Raie $\lambda = 8740.9 \text{ \AA}$ Mn après linéarisation sans utiliser les franges de Michelson.
(fig. 6, tableau I).

Composantes Ordres	A	B	C	D	A-B	B-C	C-D
1	293.8	294.0	294.4	294.3	54.9	46.7	37.4
2	294.4	293.9	293.3	293.7	55.1	46.3	37.3
3	293.5	293.6	294.4	294.7	54.6	45.7	37.7
4	294.3	294.6	293.8	293.8	54.7	46.5	38.0
5	294.0	293.4	294.1	294.2	55.0	45.7	38.0
6	294.0	294.4	294.6	294.3	54.4	46.4	38.1

Valeur moyenne 294.0 293.9 294.2 294.2 54.8 46.05 37.8

(c - 4) Possibilité de faire la somme de plusieurs ordres d'un même enregistrement Fabry-Perot.

Un spectre enregistré au Fabry-Perot se présente comme une succession d'ordres identiques (§ 2-a); après linéarisation il sera possible de recalculer point par point un nouveau spectre ne comportant qu'un seul ordre et correspondant à la somme de tous les ordres enregistrés. Le gain en rapport signal sur bruit sera \sqrt{N} où N représente le nombre d'ordres entrant dans la somme.

Cette opération ne peut se faire que si la valeur de l'intervalle entre ordre est bien connue, afin de fixer avec précision le début de chaque ordre, origine de la sommation des points de l'enregistrement correspondant à la même différence de marche. Ceci présente, comme nous le verrons au chapitre 4, un avantage très important quand les structures étudiées sont très complexes et qu'il devient nécessaire d'utiliser des programmes de dépouillement très performants.

A titre d'exemple la figure 12 représente sur le même graphique le tracé d'un ordre de la raie $\lambda = 4058 \text{ \AA}$ Pb et celui correspondant à la somme de six ordres.

(c - 5) Conclusion.

Comme nous l'avons vu, il est pratiquement toujours possible de linéariser a posteriori les enregistrements Fabry-Perot, soit directement quand le rapport signal sur bruit est convenable, soit en

Raie $\lambda = 4058 \text{ \AA}$ Pb

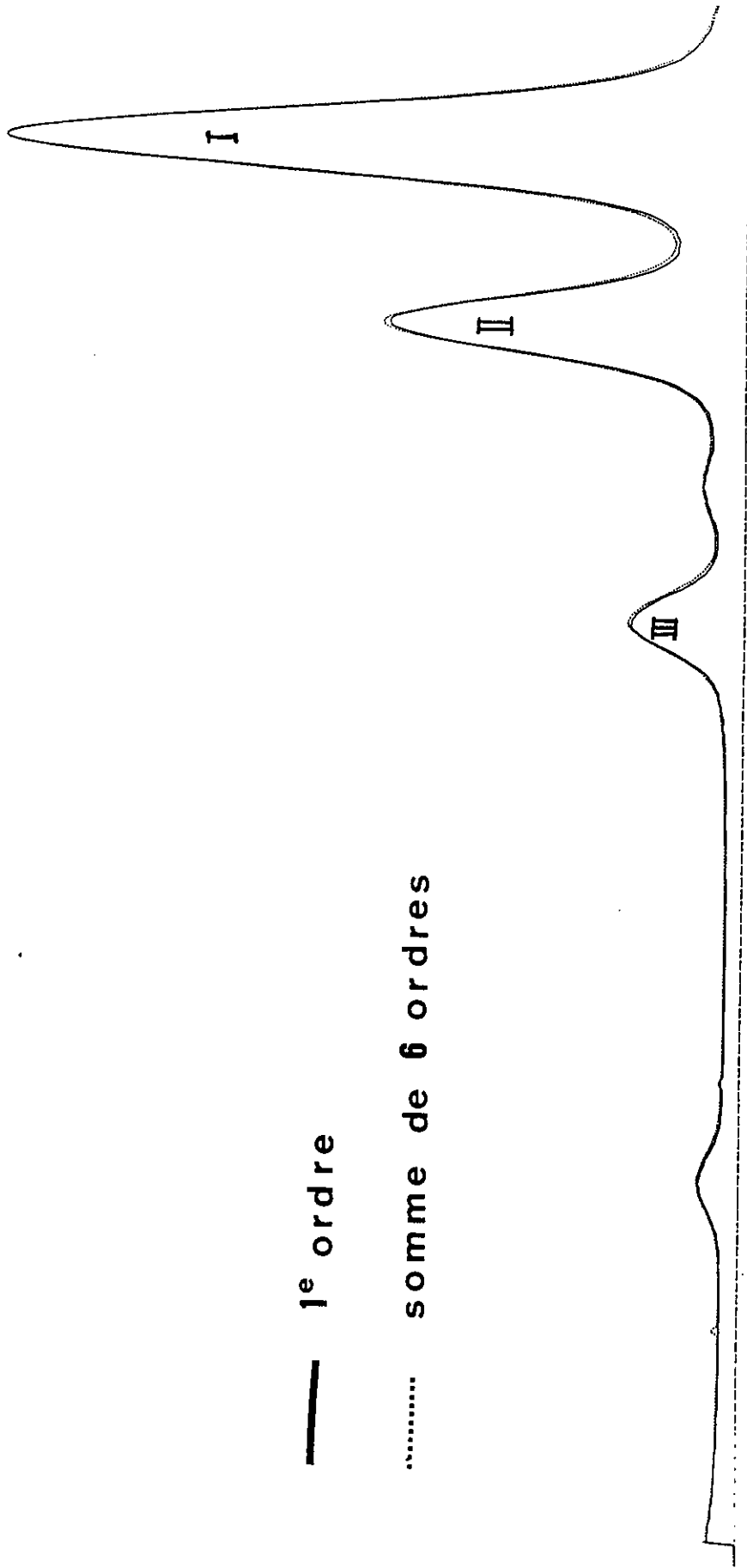


Fig. 12

utilisant le système d'étalonnage fourni par les franges de Michelson. Dans ce dernier cas, si cette opération apporte des facilités de dépouillement certaines, elle ne permet pas de gagner en précision.

Toutefois, dans un cas comme dans l'autre la possibilité de faire point par point la somme de plusieurs ordres présente des avantages considérables quand les structures étudiées sont très complexes (dépouillement moins longs à précision égale) ou quand le rapport signal sur bruit de l'enregistrement brut est faible (localisation des petites composantes).

L'étude systématique des fluctuations montre que les conditions optima d'utilisation des fuites de balayage consistent à relier ces dernières à une réserve d'azote à la pression de quelques atmosphères. La précision du pointé de franges atteint alors 0.01 mK entre 0 et 1 Atmosphère.

Chacune des opérations: linéarisation, dépouillement simple ou somme de plusieurs ordres, nécessite des temps de calculs inférieurs à 30 secondes sur Univac 1108.

Contrairement aux appareils effectuant les sommations en temps réel (analyseurs multicanaux) le nombre de points d'entrée dans le cas du calculateur est pratiquement illimité.

(d) Erreurs introduites par l'emploi d'un monochromateur
corrections a posteriori.

Le monochromateur à fente est l'appareil le plus couramment utilisé pour éliminer les bandes parasites dans le cas où le spectromètre analyseur est un Fabry-Perot. La fonction d'appareil d'un tel dispositif, qui est en général un triangle, peut apporter des erreurs importantes sur l'intensité et la position mesurées des composantes des structures enregistrées.

Nous avons tracé des abaques (figure 13) permettant d'effectuer des correction a posteriori quand la position approximative de la structure dans la bande passante du monochromateur est connue. Cette série de courbes donne la correction relative $\frac{\delta\sigma}{D\sigma}$ à apporter

$$\frac{\delta\sigma}{D\sigma} = f \left(\frac{\Delta\sigma}{D\sigma}, \frac{d\sigma}{D\sigma} \right)$$

La bande passante du monochromateur centrée sur σ_0 a une largeur $D\sigma$, la composante à corriger a pour nombre d'onde mesuré $\sigma_0 + \Delta\sigma$ et pour largeur $d\sigma$.

Quand la largeur de la composante n'est pas trop grande $d\sigma \ll D\sigma/10$ la correction d'intensité est donnée par la relation

simple
$$I_{\text{vraie}} = \frac{I_{\text{mesurée}}}{1 - \frac{\Delta\sigma}{D\sigma}}$$

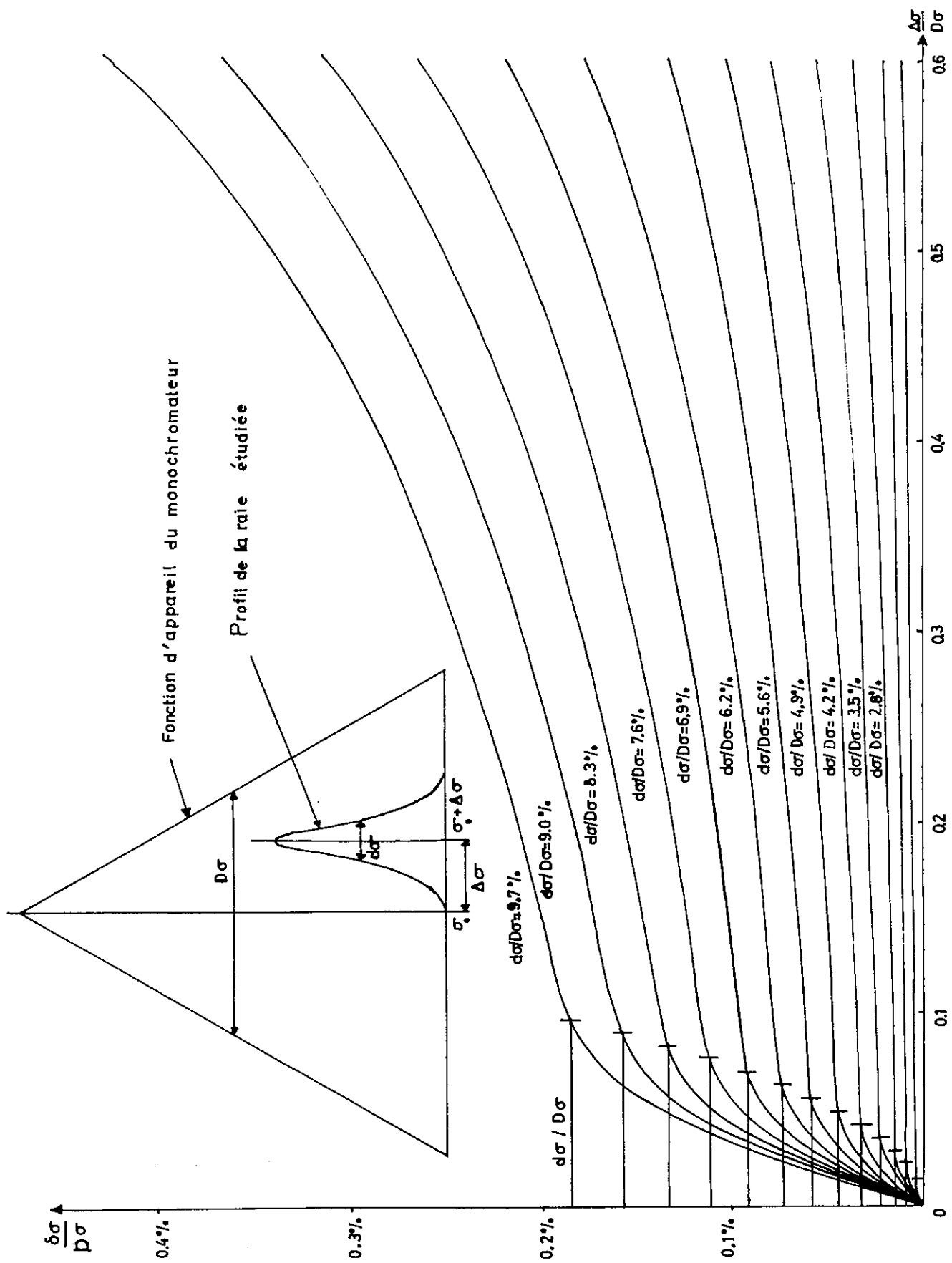


Fig. 13

3°) Spectrométrie de Fourier.

Nous avons utilisé un spectromètre de Fourier conçu pour travailler vers 2μ par P. Connes et J. Pinard [11] [12]. La cellule au sulfure de plomb utilisée couramment comme détecteur sur ce type d'appareil ayant une sensibilité pratiquement nulle à 8740 \AA , nous avons remplacé ce détecteur par un photomultiplicateur (fig.14). Pour la première fois, ce type d'appareil a été employé dans une région spectrale où le bruit de photon est très supérieur au bruit du récepteur. Cette dernière considération nous a amené à éliminer de façon rigoureuse toute lumière parasite pouvant tomber sur le photomultiplicateur. Comme dans le cas de l'hypéac, un monochromateur précède l'instrument. La possibilité d'analyser par cette méthode un domaine spectral contenant plusieurs raies permet de travailler avec une bande passante du monochromateur beaucoup plus étendue que dans le cas du spectromètre Fabry-Perot. Ceci augmente dans des proportions importantes le flux disponible à l'entrée de l'interferomètre. Un autre avantage était attendu par rapport au Fabry-Perot: en spectrométrie de Fourier la résolution ne dépend que de la différence de marche et non, comme dans le cas du Fabry-Perot, de la finesse. Ce dernier avantage se rencontre principalement dans le cas de structures étendues et des raies faibles (nécessité de travailler avec une finesse reflective relativement faible pour obtenir une bonne transparence du Fabry-Perot).

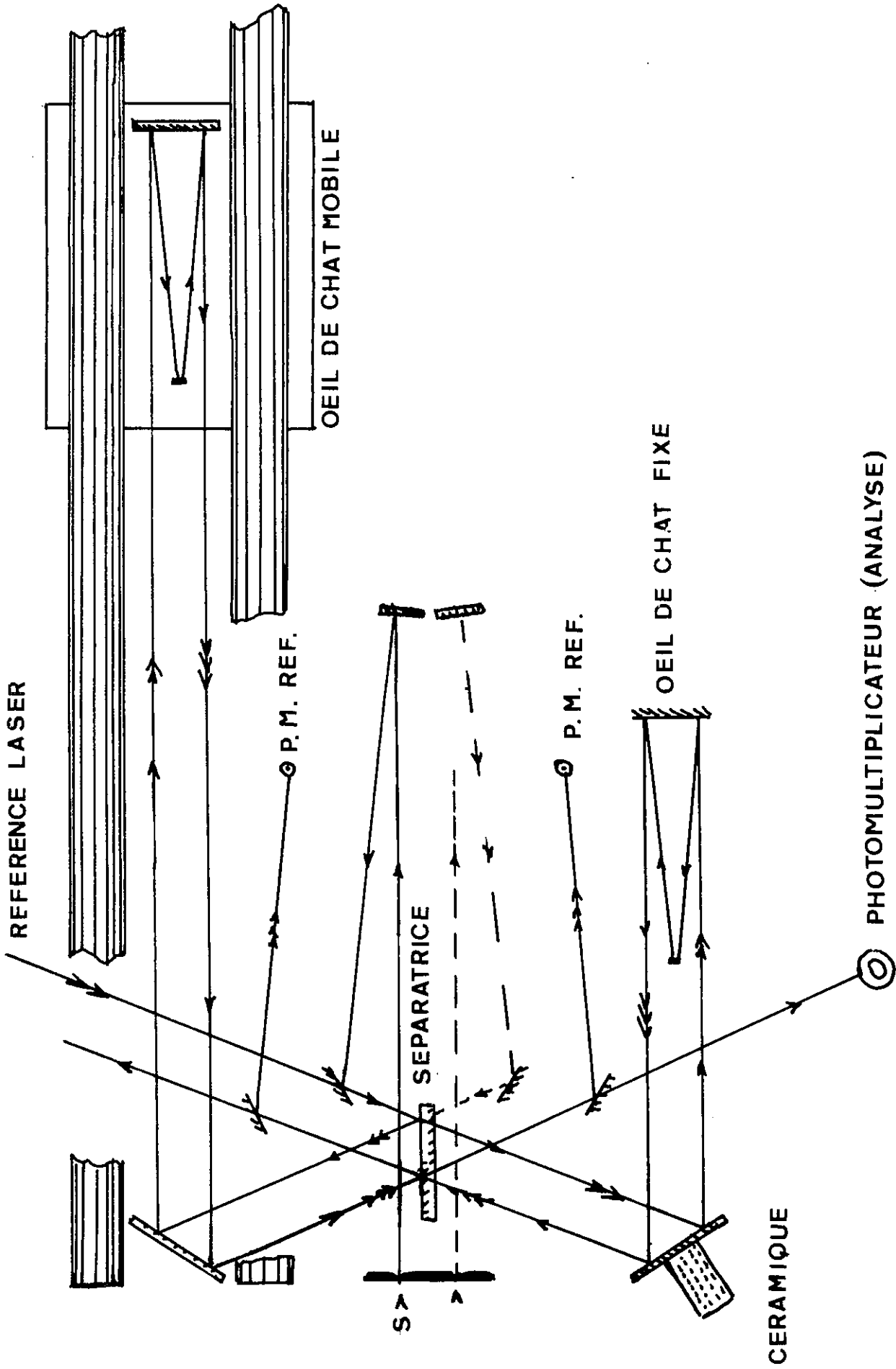
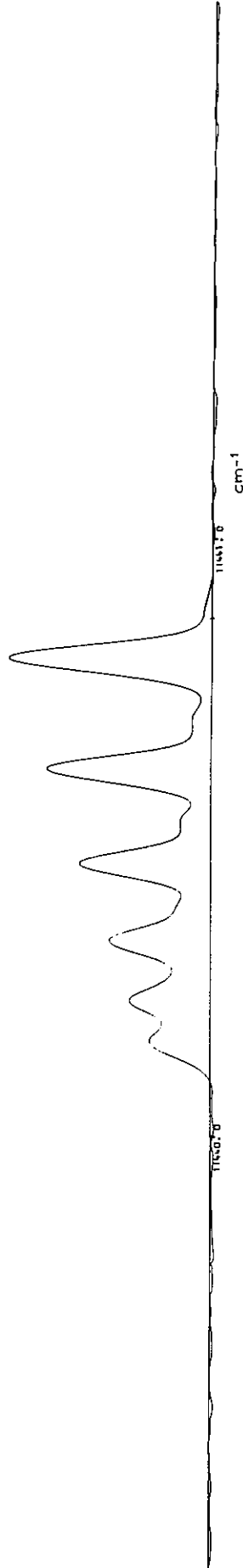


Fig. 14



Portion du spectre de Mn I obtenu par spectrométrie de Fourier vers 8740 Å

Fig. 15

Un spectromètre de Fourier ne fournit pas directement le spectre, mais un interferogramme sur bande perforée ou magnétique. Le spectre est calculé sur ordinateur (transformée de Fourier de l'interferogramme) et tracé ensuite sur un traceur électronique du type Benson.

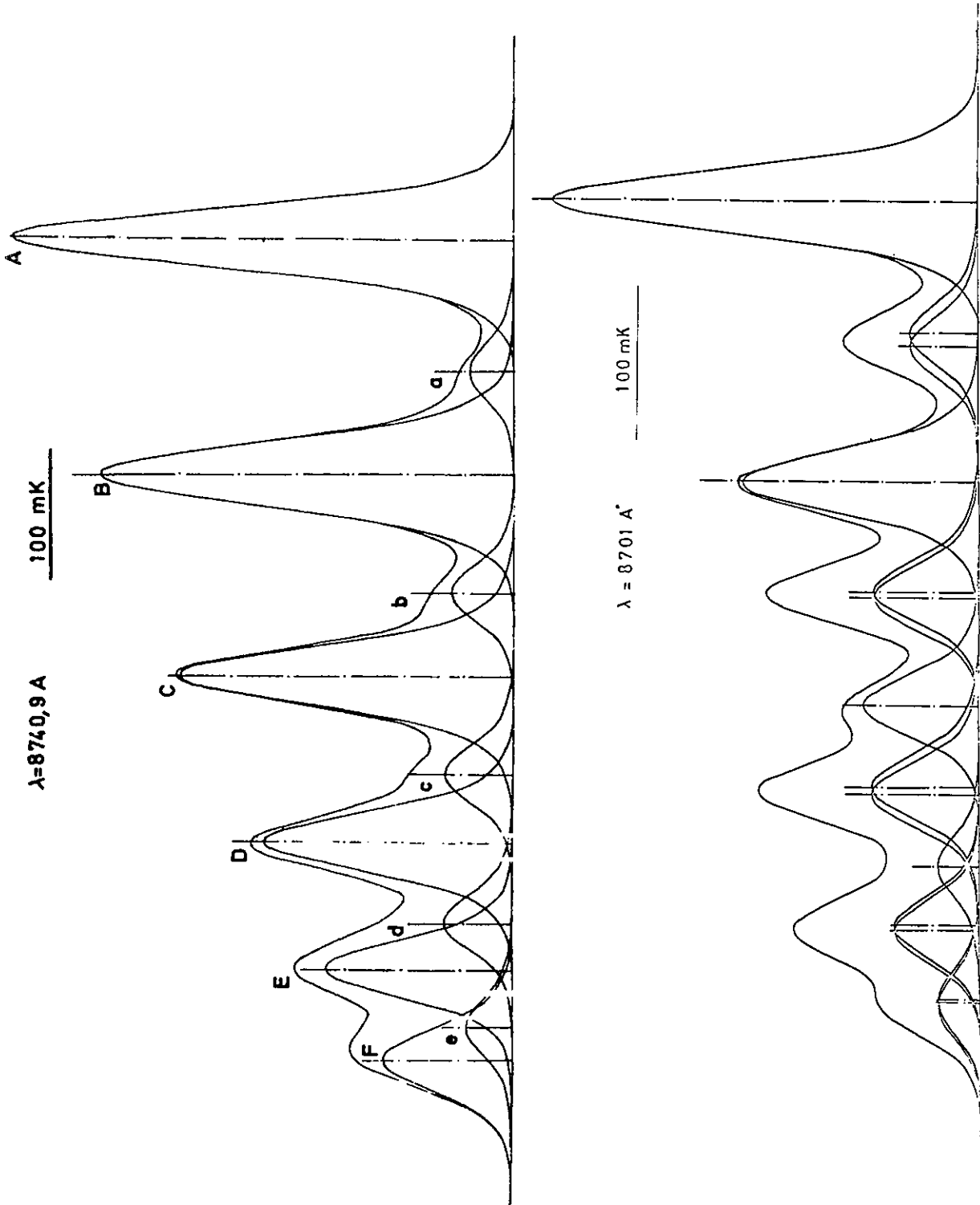
Les programmes de calcul ont été adaptés pour le calculateur Univac 1108 et fournissent directement le spectre étalonné en nombre d'onde.

La figure 15 représente une portion de spectre renfermant la raie $\lambda = 8740,9 \overset{\circ}{\text{Å}}$ du Mn I.

Cet enregistrement, qui correspond à une prise d'enregistrement de vingt minutes, est à comparer avec celui de la figure 6 représentant la même structure enregistrée au Fabry-Perot et qui nécessitait un balayage d'environ 60 minutes par ordre.

4°) Dépouillement des enregistrements.

Chaque structure hyperfine comporte toujours un certain nombre de composantes qui, dans le cas du manganèse, peut aller jusqu'à seize. Toutes ces composantes ne sont jamais entièrement résolues (fig. 6). Pour déterminer avec précision leurs positions, nous avons



Dépouillements a l'aide d'un 310 CURVE RESOLVER

Fig. 16

utilisé deux méthodes: une méthode analogique (310 CURVE resolver) et une méthode digitale.

a) Méthode analogique.

Le 310 CURVE resolver est un appareil analogique qui permet de faire apparaître sur l'écran d'un type cathodique une courbe complexe comportant jusqu'à dix composantes. Le profil, la position et l'intensité de chaque composante sont des paramètres que peut faire varier l'expérimentateur.

Un système optique permet de superposer l'image de la courbe obtenue sur l'oscilloscope et l'enregistrement à dépouiller. Quand l'accord entre les deux courbes est jugé satisfaisant, un dispositif permet de tracer sur papier chaque composante et la courbe résultante.

Dans notre cas les profils de toutes les composantes sont identiques et leurs intensités relatives sont connues. Les fonctions génératrices ont été obtenues en symétrisant la composante la plus intense. La figure 16 montre un exemple de dépouillement des deux raies du Mn I.

b) Méthode digitale.

La fonction génératrice, obtenue comme pour le 310 Curve resolver par symétrisation de la composante la plus intense et le profit enregistré sont fournis point par point au calculateur. Le principe des programmes utilisés sur un calculateur Univac 1108 est de rendre minimum l'écart quadratique moyen entre les ordonnées des points de la courbe enregistrée et celles des points de la courbe calculée en faisant varier l'intensité et la position des composantes.

L'écart quadratique moyen a été minimisé par la méthode du "Simplex", la fonction génératrice est approchée par une série de Fourier dont le nombre d'harmoniques est variable suivant l'étendue des pieds de cette fonction.

En plus d'une grande souplesse d'emploi, ces programmes permettent de tenir compte des différentes relations théoriques reliant entre elles les intensités et les positions des composantes (règle de Casimir par exemple).

Le temps de calcul pour dépouiller une structure est d'environ quatre à cinq minutes (Univac 1108). Dès lors on comprend l'intérêt de faire la somme point par point de plusieurs ordres et de n'effectuer qu'un seul dépouillement sur la courbe résultante, plutôt que de dépouiller ordre par ordre ce qui est en principe équivalent.

La figure 17 donne un exemple de dépouillement effectué sur calculateur.

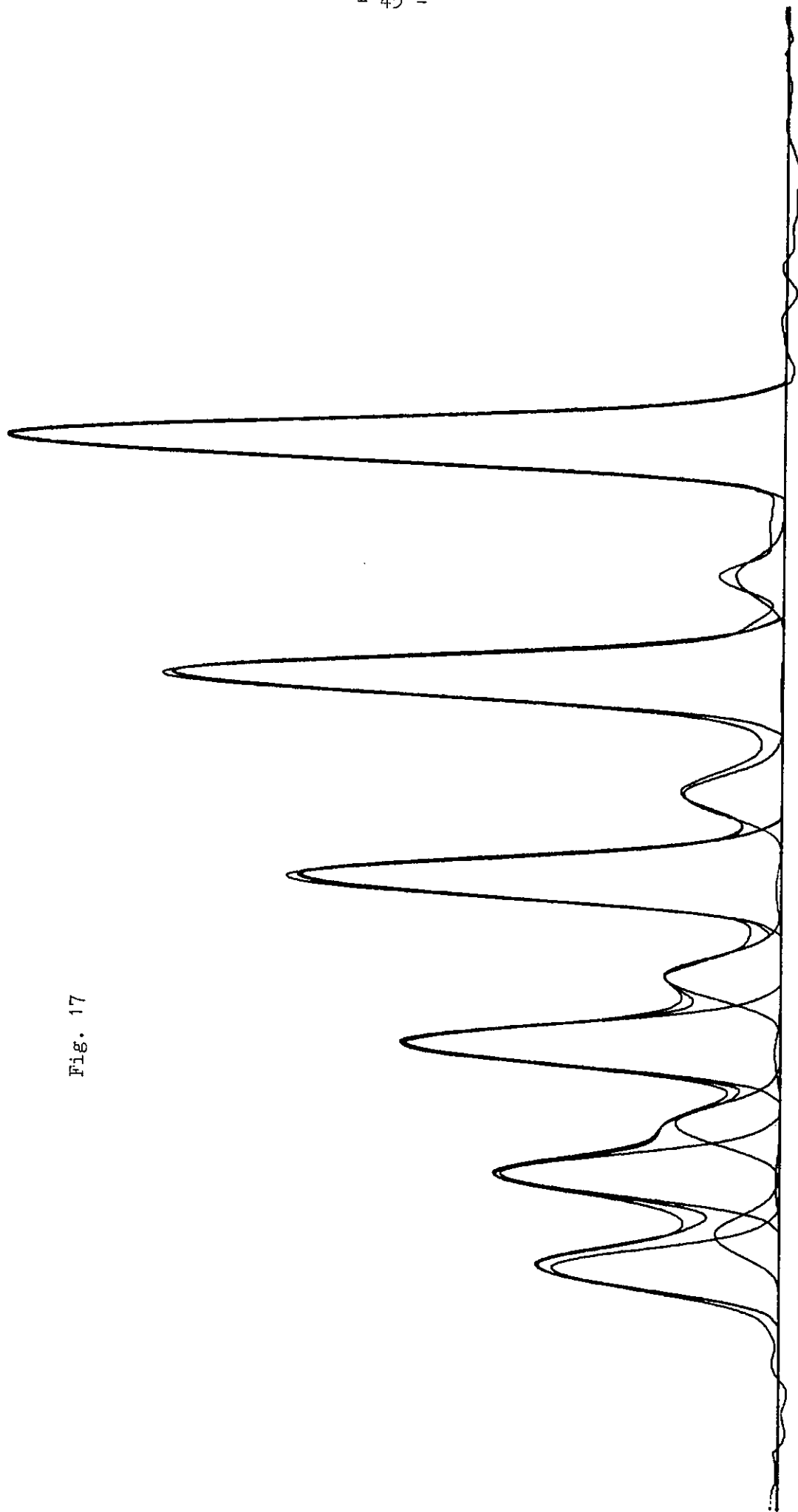
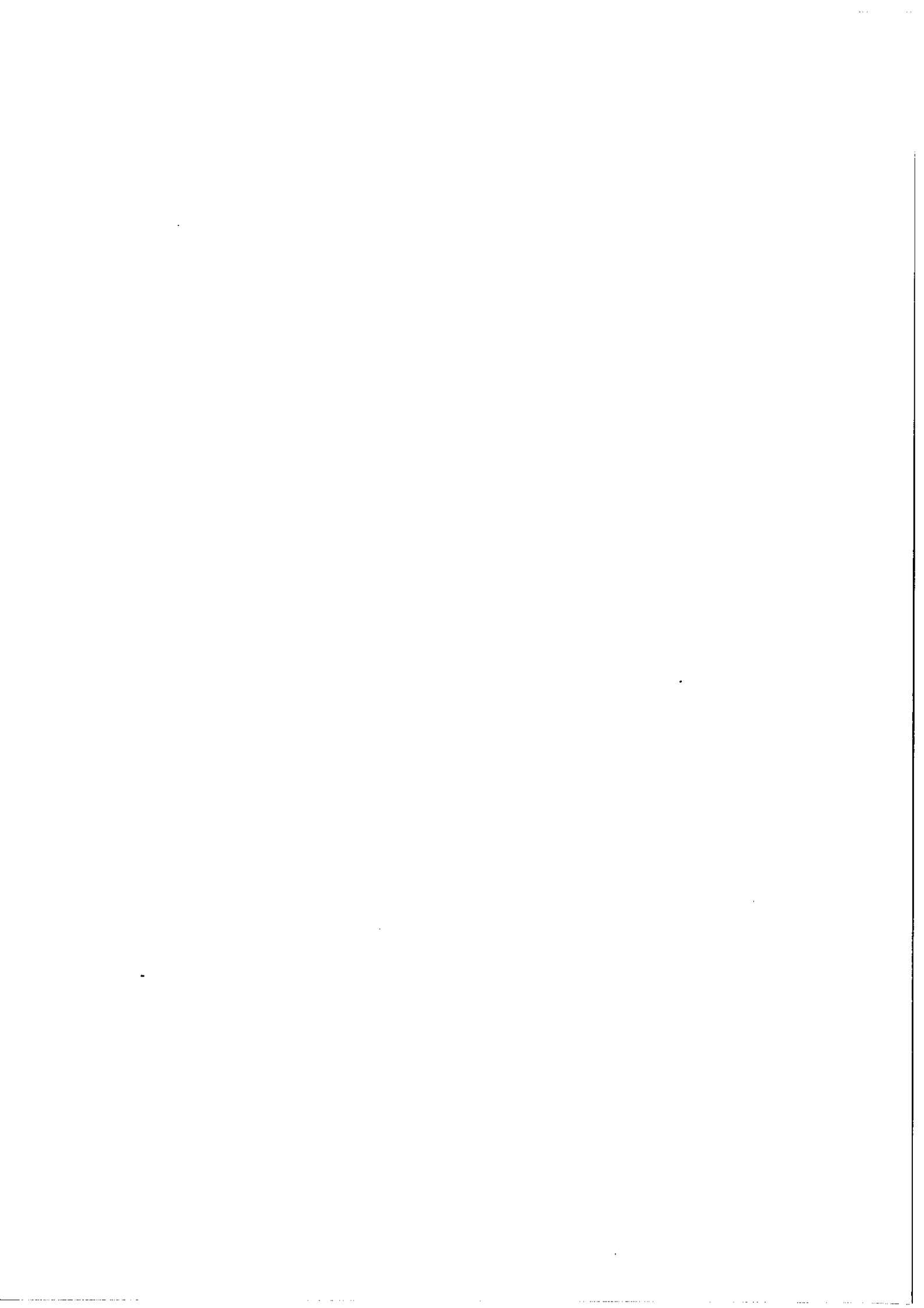
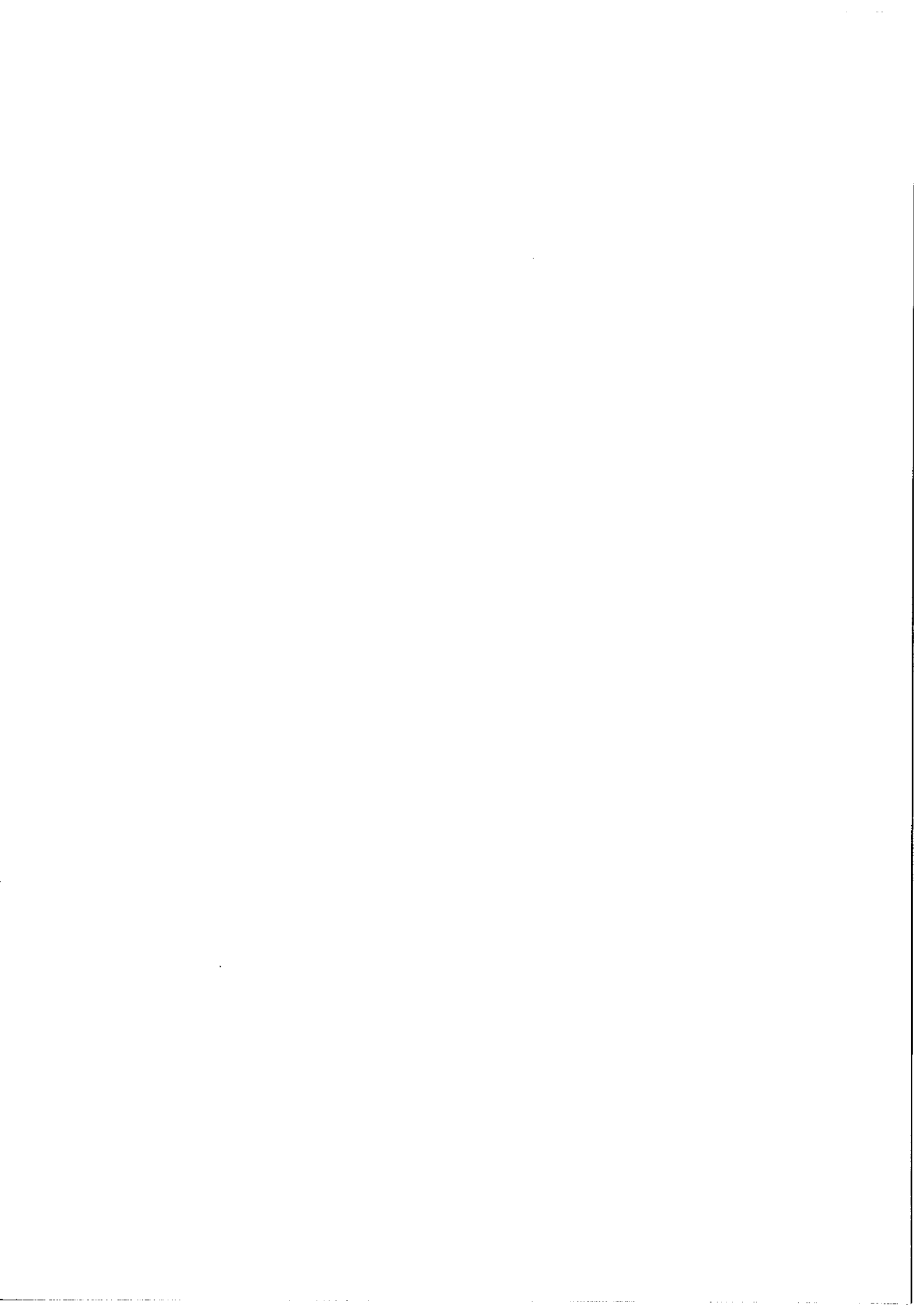
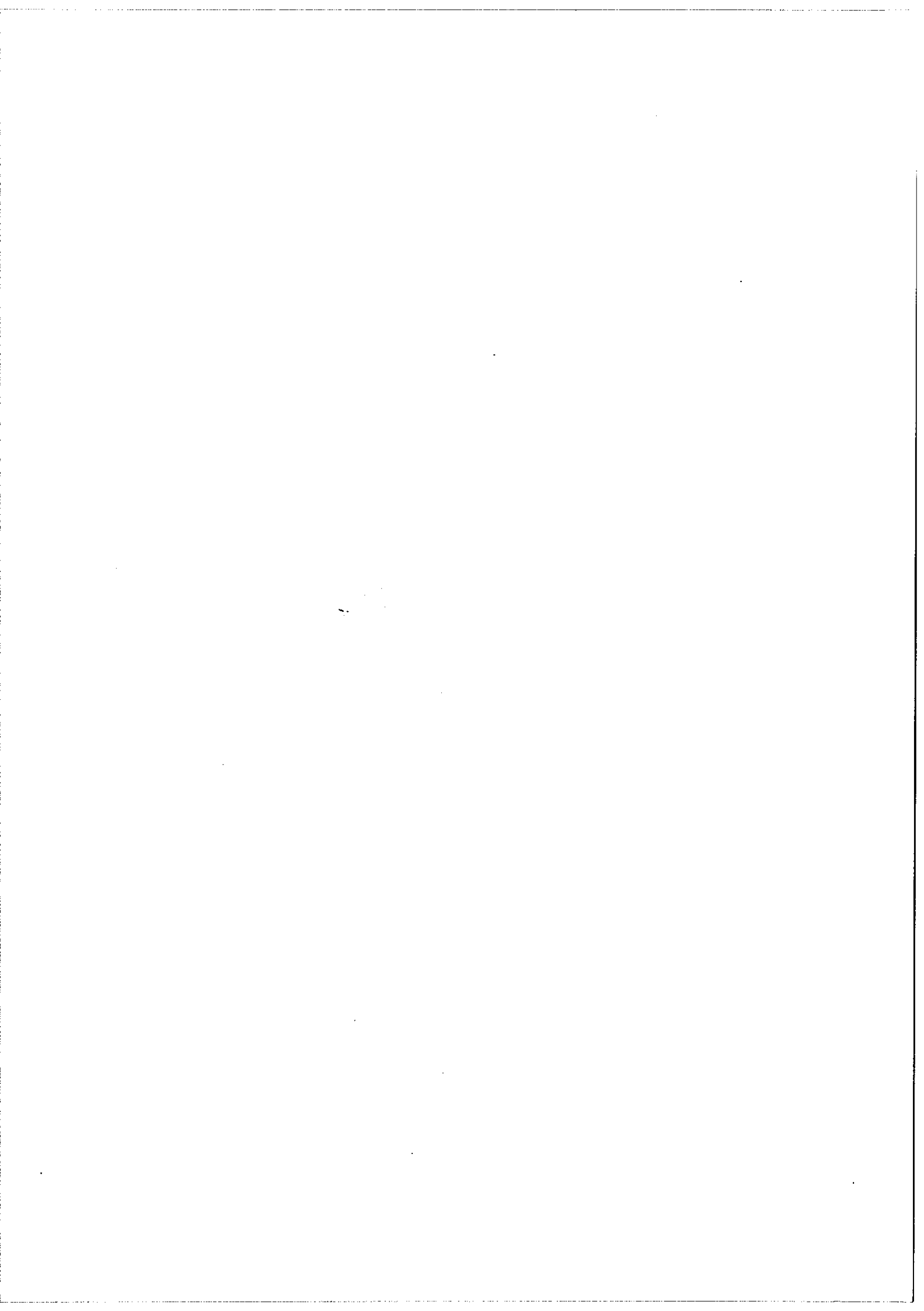


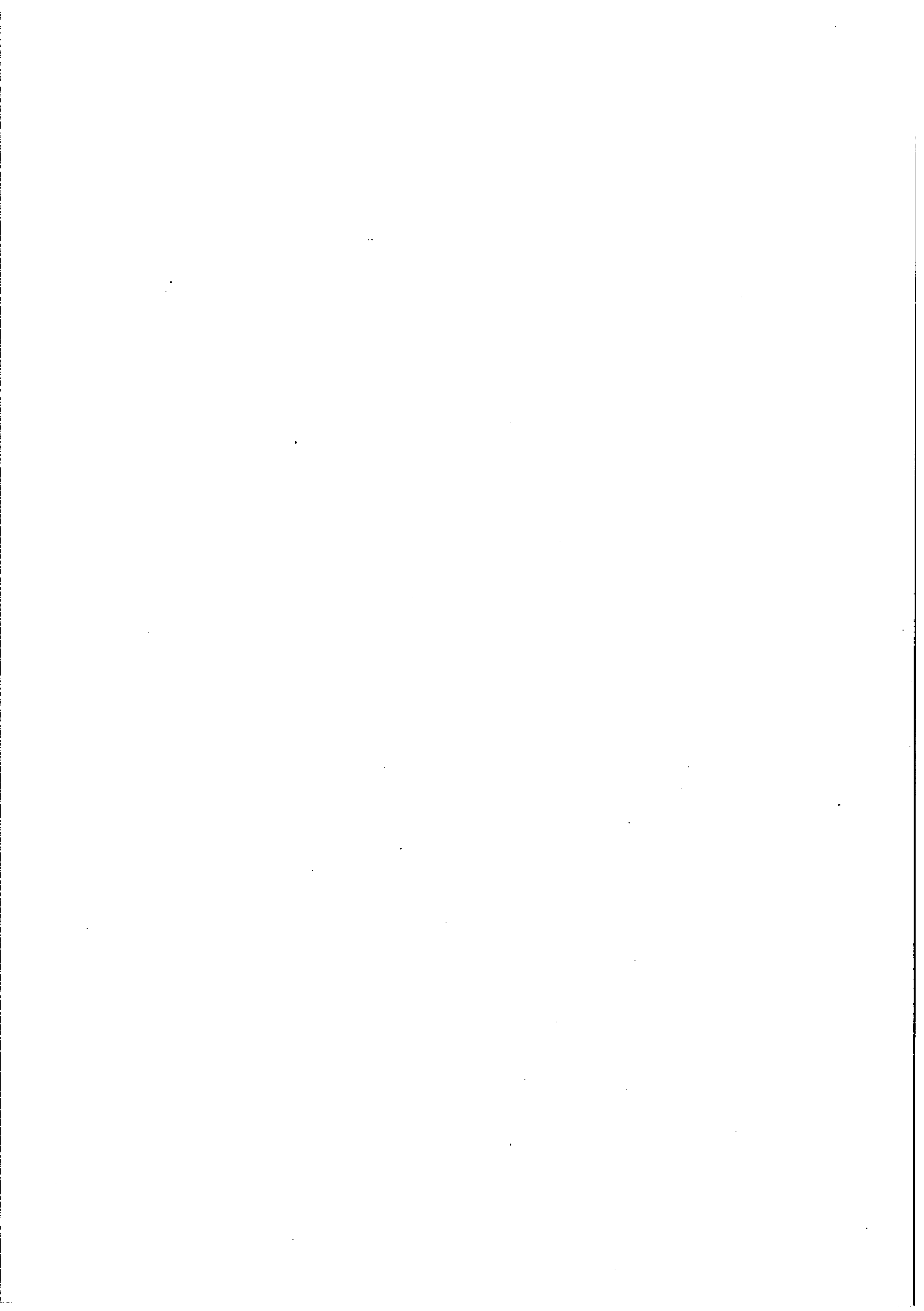
Fig. 17



- (1) Catalan, M., Meggers, W., Garcia-Riquelme, O., (1964), J. Research
N.B.S. 68A, 9.
- (2) Janicki, L., (1909), Ann. d. Physik 29, 833.
- (3) Wali-Mohammed, (1914), Astrophys. J. 39, 185.
- (4) White, H.E., Ritschl, R., (1930), Phys. Rev. 35, 1146.
- (5) Walther, H., (1962), Z. Phys. 170, 507.
Walther, H., (1969), Première Réunion Annuelle de l'Association
Européenne de Spectroscopie Atomique (E.G.A.S.)
Paris-Orsay P.33.
- (6) Rottmann, H., (1958), Z. Phys. 153, 158.
- (7) Delbouille, L., Roland, G., (1963), Photometric atlas of solar
spectrum from $\lambda = 7498 \text{ \AA}$ to $\lambda = 12016 \text{ \AA}$ -
Imprimerie George Michels - Liège.
- (8) Swenson, J.A., (1966), Ark. Fys. 32, 463.
- (9) Chabbal, R., (1957), Thèse Paris.
- (10) Chabbal, R., Jacquinet, P., (1956), J. Opt. Soc. Am. 16, 556.
- (11) Connes, P., (1969), Optical Instruments and techniques - Oriel
Press - Londres, p. 1.
Connes, P., (1970), A. Rev. Astr. Astrophys. 8, 209.
- (12) Connes, J., Connes, P., (1966), J. Opt. Soc. Am. 56, 896.
Connes, J., Connes, P., Maillard, J.P., (1967), J. Phys. 28,
suppl. 3 et 4, 120
- (13) Duong, H.T., Gerstenkorn, S., Helbert, J.M., (1967), Revue Phys.
Appl. 2, 249.







Étude en laboratoire des structures hyperfines des raies du multiplet $e^6D - y^6P$ du manganèse I. Comparaison avec les structures de ce multiplet détectées dans le spectre solaire

P. LUC et S. GERSTENKORN
Laboratoire Aimé Cotton

Reçu le 22 décembre 1971

Hyperfine Structure of Multiplet Lines $e^6D - y^6P$ of Manganese I.

Three lines belonging to the $e^6D - y^6P$ multiplet of manganese I exhibit hyperfine structures measurable in the solar spectrum between 8650 Å and 8750 Å. This exceptional possibility has partially its origin in the polarisation of the s electrons by the $3d$ electrons. Indeed, this phenomenon leads to an important extension of the hyperfine structure, but the measurements issued from the solar spectrum are limited by the width of absorption lines. The lines of the multiplet $e^6D - y^6P$ were recorded, in emission, using two different high-resolution apparatus; first the Fabry-Perot spectrometer (Hypéac), and second the Fourier transform spectrometer. This study enables us to confirm the astronomical measurements, to determine the hyperfine constants of the terms e^6D and y^6P and to compare the performance of the high-resolution spectrometers in this particular case.

Key words: hyperfine structure — manganese — Sun

Trois raies du multiplet $e^6D - y^6P$ du manganèse I présentent des structures hyperfines mesurables dans le spectre solaire entre 8650 Å et 8750 Å. Cette possibilité exceptionnelle de mesures est due en partie à la polarisation des électrons s par les électrons $3d$. En effet ce phénomène amène un agrandissement important des structures hyperfines considérées. Bien que ces structures soient très étendues, la précision des mesures astronomiques est limitée par la largeur des composantes des raies en absorption. Nous avons repris en émission l'analyse à haute résolution de ce multiplet ($e^6D - y^6P$) à l'aide de deux dispositifs interférentiels différents: spectromètre Fabry-Perot (Hypéac) et spectromètre de Fourier.

Cette étude a permis de confirmer les mesures astronomiques, d'obtenir les constantes hyperfines des niveaux des termes e^6D et y^6P et de comparer les performances des deux dispositifs expérimentaux dans ce cas particulier.

1. Introduction

De nombreux travaux ont été consacrés à l'étude des structures hyperfines des niveaux les plus bas de la configuration $3d^54s4p$ du seul isotope stable du manganèse I. (Masse 55). La Fig. 1 représente les niveaux les plus profonds de cette configuration et les transitions les plus intenses dans lesquelles ils interviennent.

Les constantes de structure hyperfine dipolaire magnétique A et quadrupolaire électrique B des termes z^6P et y^6P ont été mesurées avec une grande précision par croisement de niveaux et jets atomiques (Walther, 1962, 1969). Par contre, la détermination de ces grandeurs pour les termes y^6P et e^6D peut se faire par deux voies différentes présentant chacune des difficultés importantes.

La première suivie par Rottmann (1958) consiste à étudier à l'aide d'un spectrographe Fabry-Perot la structure des raies ultraviolettes du multiplet $y^6P - a^6S$. Ces mesures sont rendues délicates, d'une part par l'autoabsorption toujours présente dans les raies de résonance; d'autre part par la finesse réfléchissante relativement faible des Fabry-Perot dans cette région spectrale.

La seconde possibilité offerte est la mesure à haute résolution dans le proche infrarouge (8740 Å), des structures des raies du multiplet $e^6D - y^6P$.

Aucune mesure n'avait été faite en laboratoire jusqu'à présent sur ce multiplet en raison des difficultés que présente l'excitation des niveaux e^6D , niveaux situés vers 47216 cm^{-1} proches de la limite d'ionisation.

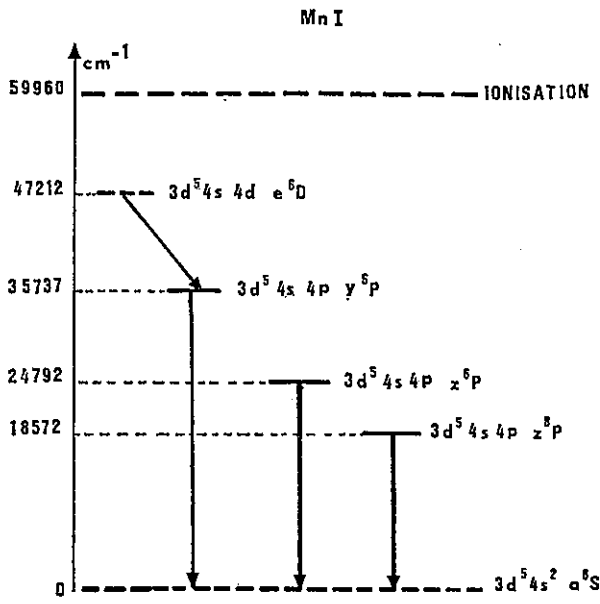


Fig. 1. Niveaux d'énergie du manganèse I

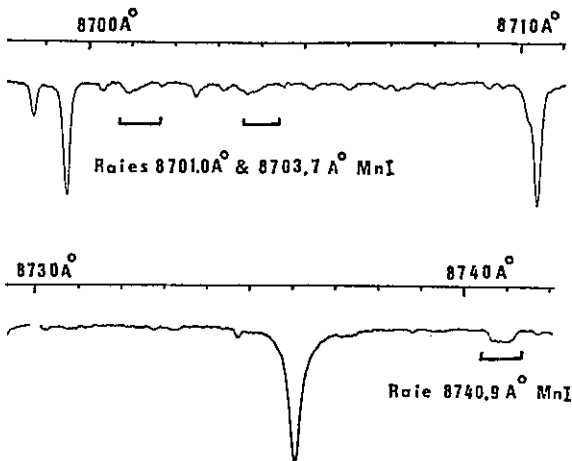


Fig. 2. Extraits du spectre solaire (Delbouille, L. et Roland, G., 1963)

Par contre, la présence de trois raies d'absorption faisant partie de ce multiplet (8740,9 Å (e⁶D_{9/2}-y⁶P_{7/2}) 8703,7 Å (e⁶D_{7/2}-y⁶P_{5/2}) et 8701,0 Å (e⁶D_{5/2}-y⁶P_{5/2})) dans le spectre solaire enregistré par Delbouille et Roland (1963), a permis à Swenson (1966) de déduire les distances entre les composantes hyperfines les plus intenses de chacune de ces trois raies; cependant l'intensité très faible de ces raies d'absorption dans le spectre solaire ainsi que leur largeur rend difficile l'analyse de ces structures complexes (Fig. 2). Cette

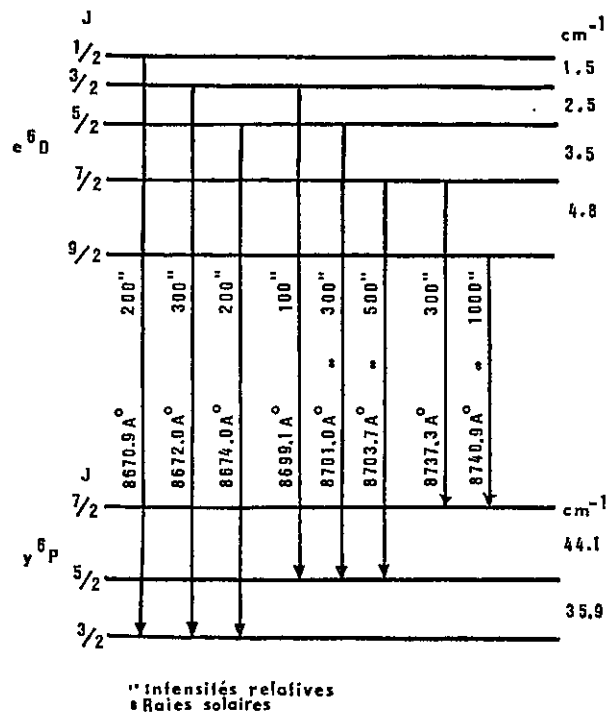


Fig. 3. Transitions du multiplet e⁶D - y⁶P étudiées en laboratoire

situation a conduit Swenson à exprimer le souhait que des mesures concernant ces mêmes structures soient reprises en laboratoire (Swenson, 1966). Nous avons réussi à enregistrer les structures hyperfines correspondant à huit transitions du multiplet considéré (e⁶D - y⁶P) Fig. 3, à l'aide de deux dispositifs expérimentaux différents; un spectromètre Fabry-Perot photo-électrique, un spectromètre de Fourier.

Ces résultats nous ont permis:

- d'améliorer considérablement les mesures astronomiques de Swenson.

- d'obtenir des valeurs précises pour les constantes de structures hyperfines des niveaux des termes e⁶D et y⁶P et accessoirement de comparer les possibilités des deux dispositifs expérimentaux, dans ce cas particulier.

2. Dispositif expérimental

a) Source et récepteur

A priori, deux sources pouvaient convenir; une source excitée par haute fréquence sans électrode et la cathode creuse classique. Le premier type de source, après maints essais, a été abandonné par

suite de la présence à proximité des raies à étudier, de bandes moléculaires, probablement dues au chlore. Nous avons donc été contraints d'utiliser une cathode creuse, en principe moins lumineuse qu'un tube sans électrode. La source que nous avons construite comporte une cathode creuse en manganèse massif, et malgré la nécessité d'y faire circuler un courant de 500 mA environ, il était nécessaire de refroidir à l'azote liquide pour obtenir une émission à la fois stable et intense; le gaz porteur était soit du néon, soit de l'argon. La détection est faite à l'aide d'un photomultiplicateur RCA 7102 refroidi également à l'azote liquide.

b) Dispositif d'analyse

Hypéac

Le premier instrument d'analyse à haute résolution utilisé était le spectromètre Fabry-Perot du type Hypéac (Chabbal et Jacquinet, 1956; Chabbal, 1957; Jacquinet et Dufour, 1948; Jacquinet, 1960; Jacquinet et Chabbal, 1961), constitué principalement par un monochromateur du type Ebert-Fastie, suivi d'un étalon Fabry-Perot. La limite de résolution obtenue avec cet appareil (qui ne comporte qu'un seul F.P.) est imposée d'une part par la largeur totale des structures hyperfines (dans notre cas 1 cm^{-1} environ) et par la finesse réfléchissante des lames, (dans notre cas de l'ordre de 30). Cette faible valeur de la finesse réfléchissante a été choisie afin d'obtenir une bonne transparence, d'où une limite de résolution de 35 mK.

Spectromètre de Fourier

Ce spectromètre construit par P. Connes et J. Pinard était à l'origine conçu pour travailler dans l'infrarouge, vers $2\ \mu$ (P. Connes, 1969; 1970; Pinard, 1968).

En remplaçant la cellule au sulfure de plomb couramment employée comme détecteur dans l'infrarouge, par un photomultiplicateur RCA 7102, il fut possible d'employer cet instrument pour étudier des spectres situés dans la région 8000–9000 Å; comme dans le montage précédent un monochromateur précède l'instrument.

Par rapport au Fabry-Perot (Hypéac), deux avantages étaient attendus; d'une part abaisser la limite de résolution car la fonction d'appareil du spectromètre de Fourier ne dépend que de la différence de marche utilisée; (dans nos expériences cette différence de marche était de l'ordre de 1 m ce qui correspond à une limite de résolution de 10 mK),

et d'autre part la possibilité d'obtenir des informations concernant plusieurs raies à partir d'un seul interférogramme, ce que nous avons réalisé avec les raies 8740,9 Å et 8737,3 Å.

3. Mesures expérimentales

Les transitions étudiées sont de deux types, les unes correspondant à $\Delta J = \pm 1$, les autres à $\Delta J = 0$.

Chaque structure hyperfine comporte un certain nombre de composantes, (15 pour la raie 8740,9 Å, 16 pour la raie 8737,3 Å) dont certaines peu intenses, appelées satellites, sont désignées par des lettres minuscules sur nos figures.

La connaissance de leurs positions par rapport à celles des autres composantes est très importante car elle permet de déterminer les écarts hyperfins des niveaux supérieurs et inférieurs d'une transition. Les transitions du multiplet considéré s'effectuent entre des niveaux dont les décompositions hyperfines sont inversées l'une par rapport à l'autre. Les satellites se trouvent donc à l'intérieur des structures et de ce fait ne sont jamais totalement résolus.

La détermination précise des positions et des intensités des composantes hyperfines de ces structures complexes a demandé la mise au point de programmes écrits pour ordinateur UNIVAC 1108. Ces programmes permettent à partir d'une fonction d'appareil connue, ou à partir du profil d'une composante hyperfine pure obtenue expérimentalement, de rechercher le meilleur accord entre le profil total enregistré et celui obtenu par reconstitution, tenant compte de divers paramètres (intensités et distances entre les composantes obéissant a priori, ou non, à la règle de Casimir).

Les Figs. 4 et 5 reproduisent les enregistrements des deux raies voisines 8740,9 Å ($\Delta J = +1$) et 8737,3 Å ($\Delta J = 0$).

Le tracé n° 1 a été obtenu à l'aide du spectromètre F.P. (Hypéac) et le tracé n° 2, par spectromètre de Fourier. Ces deux tracés ont été obtenus dans des conditions expérimentales comparables: intensité de la source (500 mA) et temps d'enregistrement de l'ordre de 1 heure. Le gain en rapport signal/bruit dans le cas du spectromètre de Fourier est dû essentiellement au fait suivant: pour éviter la superposition des ordres avec l'Hypéac, la bande passante du prémonochromateur a dû être limitée à moins de 3 cm^{-1} (présence des raies voisines), dans le cas du spectromètre de Fourier la bande passante de ce même prémonochromateur était de l'ordre de 20 cm^{-1} ; le flux lumineux entrant dans l'interféro-

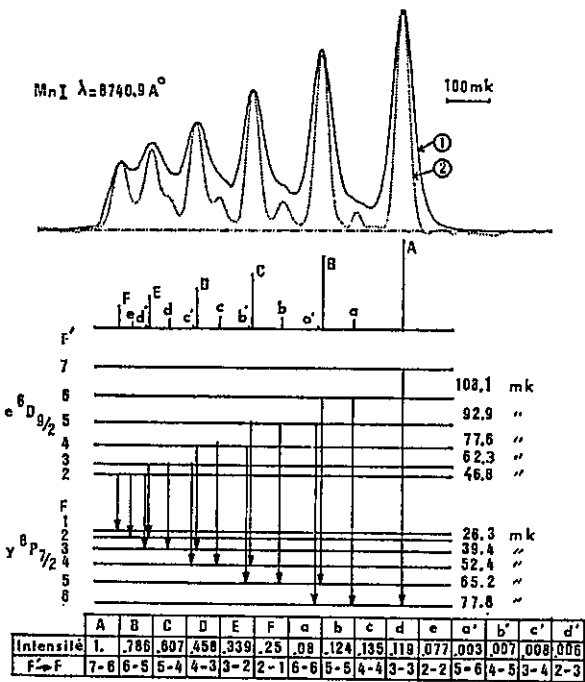


Fig. 4. Enregistrements de la raie $\lambda = 8740,9 \text{ \AA}$. Tracé 1, obtenu au Fabry-Perot. Tracé 2, obtenu par spectrométrie de Fourier

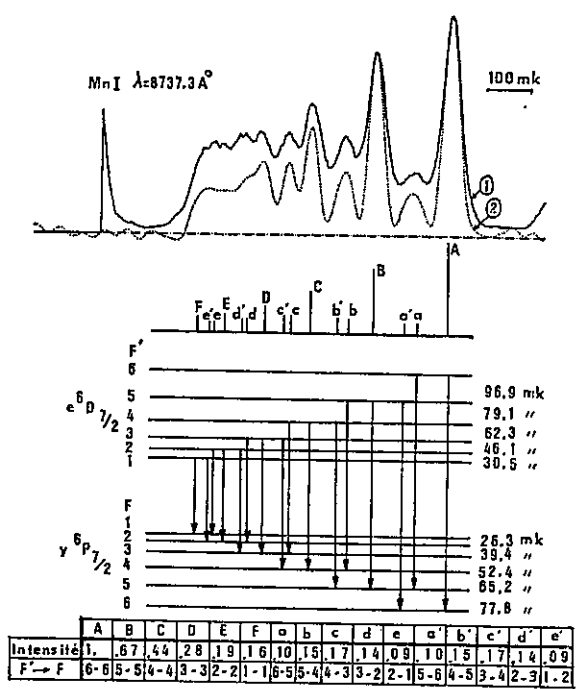


Fig. 5. Enregistrements de la raie $\lambda = 8737,3 \text{ \AA}$. Tracé 1, obtenu au Fabry-Perot. Tracé 2, obtenu par spectrométrie de Fourier

mètre était donc beaucoup plus important que celui disponible pour le Fabry-Perot.

La largeur à mi-hauteur de la fonction d'appareil utilisée en spectrométrie de Fourier (10 mK) est beaucoup plus faible que celle imposée par la structure totale dans le cas du Fabry-Perot (35 mK). La fonction d'appareil en spectrométrie de Fourier présente donc des pieds moins étendus que ceux de la fonction d'Airy, ce qui rend plus aisé la détection des satellites (Fig. 4-raie $\lambda = 8740,9 \text{ \AA}$).

La largeur à mi-hauteur des composantes enregistrées au Fabry-Perot est de 59 mK pour la raie $8740,9 \text{ \AA}$ et de 53 mK pour la raie $8737,3 \text{ \AA}$, la différence entre les deux limites de résolution est due à l'emploi d'intervalles entre ordres différents pour les deux enregistrements. Par spectrométrie de Fourier cette largeur devient 35 mK pour la raie $8740,9 \text{ \AA}$ et 42 mK pour la raie $8737,3 \text{ \AA}$. Le rapport signal sur bruit d'un interférogramme est d'autant plus faible qu'il est enregistré loin de la différence de marche zéro. La seconde raie ($8737,3 \text{ \AA}$) étant d'un ordre de grandeur moins intense que la première ($8740,9 \text{ \AA}$) nous n'avons pas utilisé toute la longueur disponible de l'interférogramme pour le calcul de sa structure,

obtenant ainsi un tracé avec un rapport signal sur bruit acceptable (Fig. 5) sans perdre beaucoup en limite de résolution. La largeur des raies émises par notre source peut donc être estimée à 30 mK environ.

4. Résultats

Pour atteindre les constantes dipolaires magnétiques du multiplet e^6D et interpréter totalement la structure des raies $8740,9 \text{ \AA}$, $8737,3 \text{ \AA}$ et $8701,0 \text{ \AA}$ Swenson disposait de ses mesures astronomiques et des résultats très peu précis de Fischer et Peck, 1939. Nous avons porté dans le Tableau I les positions des composantes de structure hyperfine déterminées à partir du spectre solaire et celles déduites de nos mesures interférométriques. Pour chaque raie la position de la composante la plus intense a été prise comme origine. Les mesures astronomiques concernant les raies $8740,9 \text{ \AA}$, $8703,7 \text{ \AA}$ et les résultats très précis obtenus en laboratoire sur ces mêmes raies sont compatibles compte tenu des limites d'erreur qu'impliquent les mesures faites en absorption, à partir de l'atlas solaire. Une différence plus importante apparaît entre les deux types de mesures pour la raie

Tableau 1

Multiplet hyperfin	Transitions F F	Spectre solaire positions en mK	T.F. et F.P. positions en mK
Raie 8 740,9 Å $e^6D_{9/2} - y^6P_{7/2}$	7 → 6	0,0	0,0
	6 → 5	-170,0	-185,8 ± 1
	5 → 4	-320,0	-343,9 ± 2
	(4 → 4, 4 → 3, 3 → 4, 3 → 3, 3 → 2, 2 → 3, 2 → 2, 2 → 1) ^a	-510,0	-539,1 ± 3
Raie 8 703,7 Å $e^6D_{7/2} - y^6P_{5/2}$	6 → 5	0,0	0,0
	5 → 4	-200,0	-188,1 ± 2
	4 → 3	-340,0	-339,1 ± 2
	(3 → 2, 2 → 3, 2 → 2, 2 → 1, 1 → 2, 1 → 1, 1 → 0) ^a	-550,0	-508,1 ± 3
Raie 8 701,0 Å $e^6D_{5/2} - y^6P_{3/2}$	5 → 5	0,0	0,0
	(4 → 4, 4 → 3, 3 → 4) ^a	-260,0	-214,0 ± 2
	(3 → 3, 2 → 3, 3 → 2, 2 → 2, 2 → 1, 1 → 2, 1 → 1, 1 → 0, 0 → 1) ^a	-520,0	-414,7 ± 3

^a Centre de gravité de l'ensemble des composants.

8701,0 Å. Cette dernière transition correspond à la plus faible des trois raies étudiées par Swenson. Son interprétation à partir du spectre solaire est de ce fait très délicate.

Le Tableau 2 donne les valeurs des constantes dipolaires magnétiques et quadrupolaires électriques des termes e^6D et y^6P déduites de nos mesures.

Les valeurs des constantes dipolaires magnétiques ont servi de données expérimentales au calcul paramétrique des constantes de structure hyperfine des électrons s, p, d . (Luc *et al.*, 1969; Walther, 1969). Les valeurs des constantes quadrupolaires magnétiques du terme y^6P sont assez voisines de celles calculées théoriquement par Walther, 1969.

5. Conclusion

L'étude en laboratoire de la structure hyperfine des raies du multiplet $e^6D - y^6P$ a permis de confirmer les interprétations déduites de l'atlas solaire de Delbouille et Roland (identification des raies et mesure globale par Swenson des distances hyperfines). En laboratoire les décompositions hyperfines des niveaux des termes e^6D et y^6P sont mesurées avec précision grâce à la finesse des raies d'émission et à l'emploi de techniques de haute résolution. L'utilisation de la spectrométrie de Fourier même dans un cas où le bruit est d'origine photonique, apparaît pleine de promesses. La détermination précise des positions des satellites a permis de connaître avec une faible incertitude les constantes dipolaires magnéti-

Tableau 2

Niveaux	A en mK	B en mK	Niveaux	A en mK	B en mK
$e^6D_{1/2}$	61,6 ± 2,0	—	$y^6P_{3/2}$	-32,4 ± 0,7	1,1 ± 1,0
$e^6D_{3/2}$	22,8 ± 1,0	7,5 ± 8,0	$y^6P_{5/2}$	-18,0 ± 0,7	-2,0 ± 0,9
$e^6D_{5/2}$	17,6 ± 0,7	3,0 ± 4,0	$y^6P_{7/2}$	-13,0 ± 0,5	0,9 ± 0,9
$e^6D_{7/2}$	15,8 ± 0,7	4,0 ± 6,0			
$e^6D_{9/2}$	15,5 ± 0,5	-0,9 ± 0,8			

ques. Ces grandeurs ont servi de données expérimentales aux calculs paramétriques des constantes de structure hyperfine des électrons s, p, d . (calculs déjà exposés (Luc *et al.*, 1969; Walther, 1969)).

Les valeurs des constantes quadrupolaires sont données avec une précision faible. On remarque toutefois que les signes de ces constantes déterminés expérimentalement pour le multiplet y^6P sont en accord avec ceux prévus théoriquement par Walther, 1969.

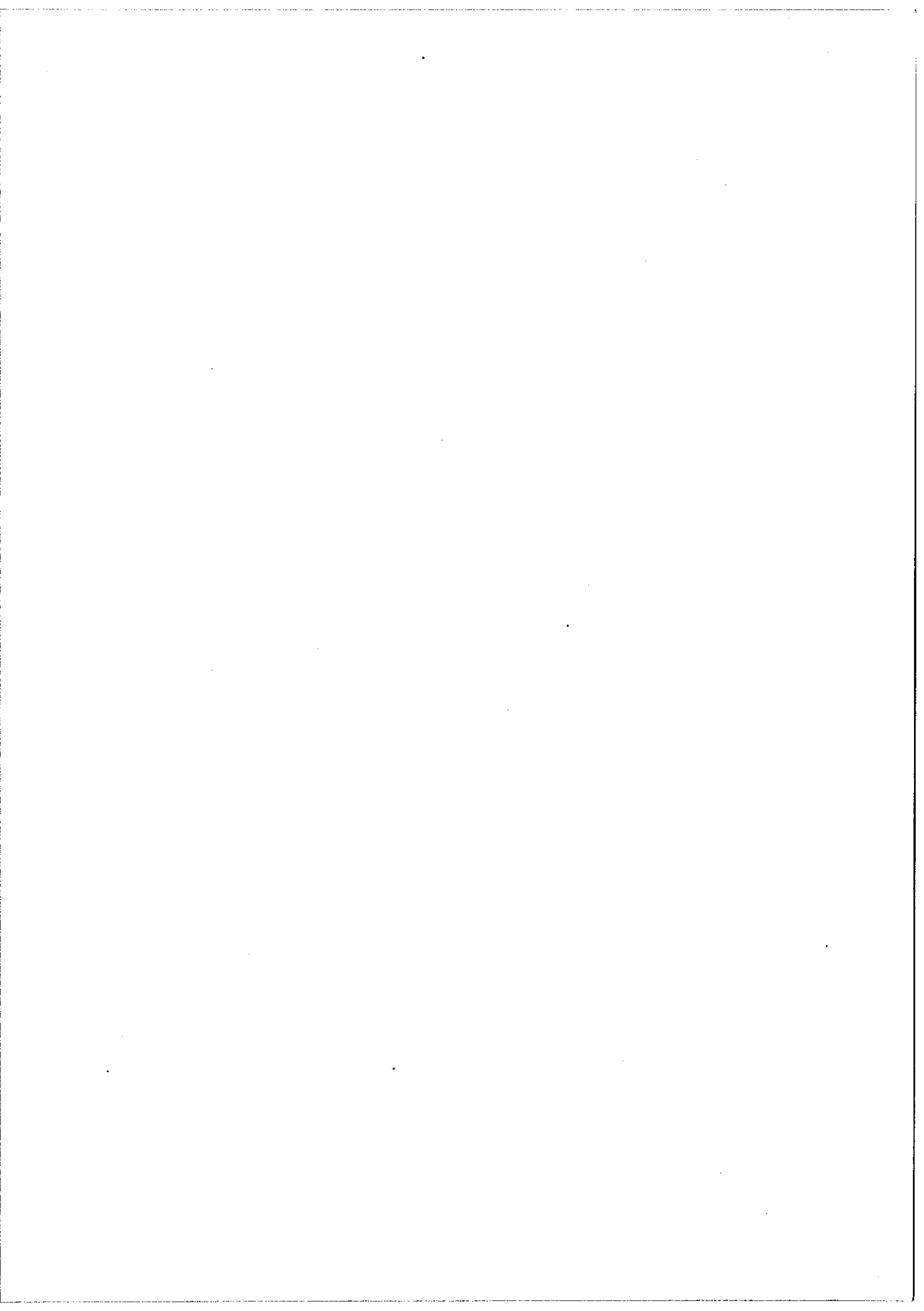
La présence tout à fait exceptionnelle de structures hyperfines mesurables dans le spectre solaire est due au fait que les transitions ont lieu entre niveaux dont les décompositions hyperfines sont inversées l'une par rapport à l'autre. Les structures hyperfines sont d'autant plus grandes que la polarisation des électrons s par les électrons $3d$ est élevée. Sans ce phénomène de polarisation prévu par

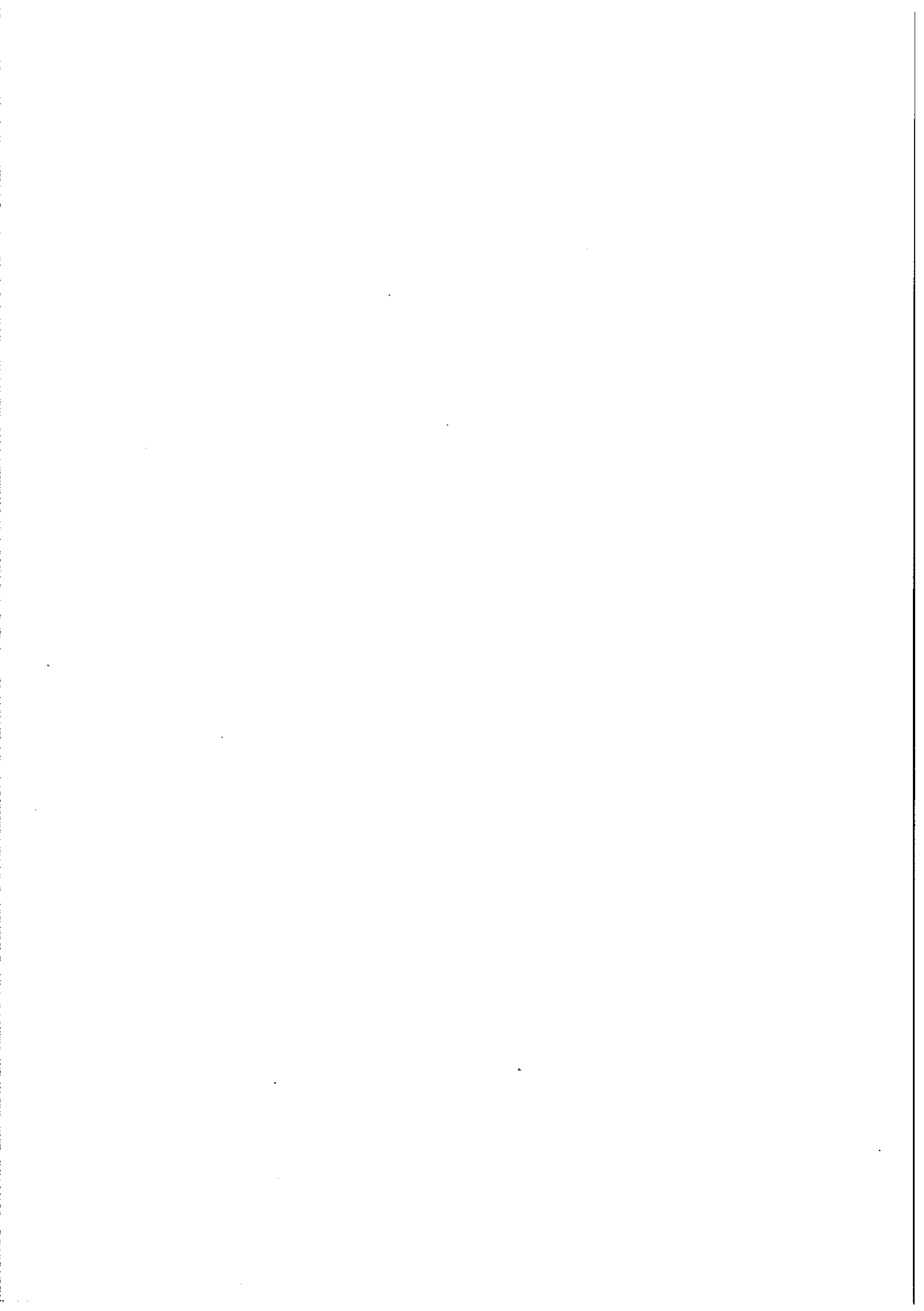
Bagus *et al.* (1966) les structures étudiées auraient une étendue plus faible (30 à 40 % environ) ce qui les aurait rendues inobservables dans le spectre solaire compte tenu de la largeur des raies d'absorption.

References

- Chabbal, R. 1957, Thèse Paris.
 Chabbal, R., Jacquinet, P. 1956, *J. opt. Soc. Am.* **16**, 556.
 Connes, P. 1969, *Optical Instruments and techniques* — Ariel Press — Londres, p. 1.
 Connes, P. 1970, *A. Rev. Astr. Astrophys.* **8**, 209.
 Connes, J., Connes, P. 1966, *J. opt. Soc. Am.* **56**, 896.
 Connes, J., Connes, P., Maillard, J. P. 1967, *J. Phys.* **28** suppl. 3 et 4, 120.
 Delbouille, L., Roland, G. 1963, *Photometric atlas of solar spectrum from $\lambda = 7498 \text{ \AA}$ to $\lambda = 12016 \text{ \AA}$* — imprimerie George Michels — Liège.
 Fisher, R., Peck, E. 1939, *Phys. Rev.* **55**, 270.
 Freeman, A., Bagus, P., Watson, R. 1966, La structure hyperfine magnétique des atomes et des molécules, C.N.R.S. Paris, P. 293.
 Jacquinet, P. 1960, *Rep. Progr. Phys.* **23**, 267.
 Jacquinet, P., Chabbal, R. 1961, *Rev. Opt.* **40**, 157.
 Jacquinet, P., Dufour, C. 1948, *J. Rech. C.N.R.S.* **6**, 91.
 Luc, P. 1970, Deuxième Réunion Annuelle de l'Association Européenne de Spectroscopie Atomique (E.G.A.S.) Hanovre, P. 61.
 Luc, P., Bauche, J., Gerstenkorn, S. 1969, Première Réunion Annuelle de l'Association Européenne de Spectroscopie Atomique (E.G.A.S.) Paris-Orsay, P. 63.
 Pinard, J. 1968, thèse Orsay, 1969 *Ann. phys.* **4**, 147.
 Rottmann, H. 1958, *Z. Phys.* **153**, 158.
 Swenson, J. A. 1966, *Ark. Fys.* **32**, 463.
 Walther, H. 1962, *Z. phys.* **170**, 507.
 Walther, H. 1969, Première Réunion Annuelle de l'Association Européenne de Spectroscopie Atomique (E.G.A.S.) Paris-Orsay P. 33.

P. Luc
 S. Gerstenkorn
 Laboratoire Aimé Cotton — CNRS II —
 Campus d'Orsay — Bâtiment 505 —
 Université de Paris XI
 F-91 Orsay, France





INTERPRÉTATION THÉORIQUE DE LA STRUCTURE
HYPERFINE DIPOLAIRE MAGNÉTIQUE DES TERMES
 z^8P , z^6P , y^6P DE LA CONFIGURATION $3d^54s4p$
DU MANGANÈSE I

P. LUC

Laboratoire Aimé Cotton, Université de Paris XI, 91 – Orsay, France

Reçu le 31 Janvier 1972

Synopsis

We measured the hyperfine structure (hfs) of eight lines of the e^6D – y^6P multiplet in manganese I both with a photometric Fabry–Pérot interferometer and a Fourier spectrometer. From these measurements we deduced the magnetic-dipole interaction constants of all levels of e^6D and y^6P . Using these values we determined the various electronic hfs parameters in the configuration $3d^54s4p$. These parameters are compared with *ab initio* values obtained by the spin-polarized Hartree–Fock method.

1. *Introduction.* Les constantes de structure hyperfine dipolaire magnétique et quadrupolaire électrique des niveaux des termes $3d^54s(a^7S)4p z^8P$ et $3d^54s(a^7S)4p z^6P$ du manganèse I ont été mesurées avec une grande précision par Walther (1969)^{1,2}).

Nous avons pu enregistrer les structures hyperfines des transitions correspondant au multiplet $3d^54s(a^7S)4d e^6D$, $3d^54s(a^5S)4p y^6P$ à l'aide d'un Fabry–Pérot photoélectrique et d'un spectromètre de Fourier³). Nous en avons déduit les valeurs des constantes dipolaires magnétiques et quadrupolaires électriques des niveaux $y^6P_{3/2\ 5/2\ 7/2}$ et $e^6D_{1/2\ 3/2\ 5/2\ 7/2\ 9/2}$. Nous n'entrons pas ici dans la partie expérimentale du travail qui a déjà été décrite³); nous présenterons dans cet article une interprétation théorique de la structure dipolaire magnétique des niveaux de la configuration $3d^54s4p$.

Un calcul paramétrique permet de donner une bonne interprétation des constantes dipolaires magnétiques des niveaux et fournit les valeurs des constantes de structure hyperfine des électrons 3d, 4s, 4p. Ces calculs ont mis en évidence un important phénomène de polarisation des électrons s par les électrons 3d, phénomène que nous avons cherché à interpréter par un calcul de Hartree–Fock avec polarisation de spin.

2. *Choix du couplage.* En 1963 Catalán, Meggers et García-Riquelme donnaient une classification très complète du spectre I du manganèse⁴). Nous reproduisons dans le tableau I les niveaux impairs les plus profonds de cet élément, les valeurs des facteurs de Landé mesurées expérimentalement et calculées en couplage *LS*. Le faible écart d'énergie entre les niveaux d'un même terme, la bonne vérification de la règle de Landé pour la structure fine, le très bon accord entre les valeurs expérimentales et théoriques en couplage *LS* des facteurs de Landé, montrent que le couplage Russell-Saunders constitue une excellente approximation.

TABLEAU I

Positions des niveaux les plus profonds de la configuration $3d^5 4s 4p$ du manganèse I mesurées expérimentalement

Configuration	Terme	J	Énergie E_J (K)	Écart $E_{J+1} - E_J$	g observé	g calculé en <i>LS</i>
$3d^5 4s 4p$	z^8P	5/2	18402,46		2,284	2,286
		7/2	18531,64	129,18	1,938	1,937
		9/2	18705,37	173,73	1,779	1,778
$3d^5 4s 4p$	z^6P	3/2	24779,32		2,364	2,400
		5/2	24788,05	8,73	1,875	1,886
		7/2	24802,25	14,20	1,714	1,714
$3d^5 4s 4p$	z^4P	5/2	31001,15		1,6	1,6
		3/2	31076,42	-75,27	1,732	1,733
		1/2	31124,94	-48,53	2,668	2,667
$3d^5 4s 4p$	y^6P	3/2	35689,98		2,400	2,400
		5/2	35725,85	35,87	1,886	1,886
		7/2	35769,97	44,12	1,712	1,714

3. *Traitement paramétrique sans interaction de configuration.* 3.1. Calcul des fonctions d'onde. Les multiplets P les plus profonds des configurations impaires, trouvés expérimentalement, sont représentés sur le diagramme de la fig. 1. Les quatre termes z^8P , z^6P , z^4P , y^6P sont bien isolés dans la configuration $3d^5 4s 4p$ et assez éloignés des autres termes perturbateurs possibles. Une étude théorique sans interaction de configuration et ne faisant intervenir que ces quatre termes peut donc être envisagée. L'énergie électrostatique de ces quatre termes dépend de quatre paramètres indépendants:

$$A, \quad G_2(d, s), \quad G_1(d, p) + \frac{21}{2}G_3(d, p), \quad G_1(s, p),$$

où A est la constante additive usuelle commune à toutes les énergies.

Un traitement paramétrique classique proposé par Mehlhorn⁵) conduit donc à un accord parfait entre les positions calculées et expérimentales des termes.

Il est intéressant de comparer les valeurs des paramètres électrostatiques ainsi obtenues à celles tirées d'une étude paramétrique du spectre II (plus simple) ou de résultats de Hartree-Fock, obtenus à l'aide du programme de Froese-Fischer⁶.

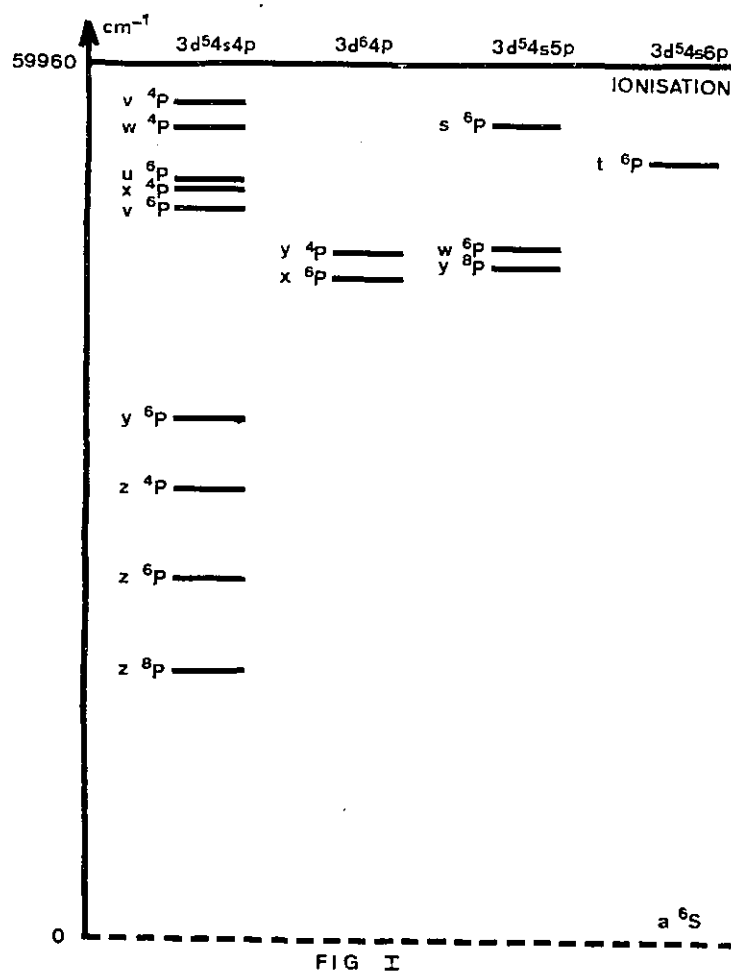


Fig. 1. Multiplets P des configurations impaires du manganèse I.

Le tableau II contient des valeurs de paramètres obtenues pour les spectres I et II et du rapport R défini par

$$R = G_2(d, s) / [G_1(d, p) + \frac{21}{2}G_3(d, p)].$$

Comme dans le cas de l'euporium étudié par Bordarier, Judd et Klapisch⁷) nous constatons une grande différence entre les valeurs R_I et R_{II} des rapports R obtenues par études paramétriques des spectres I et II.

A la solution qui consiste à substituer à R_I la valeur R_{II} (obtenue pour le spectre II), nous préférons celle qui consiste à prendre $R_I = R_{II} R'_I / R'_{II}$, où R'_I et R'_{II} sont les valeurs du rapport R calculées pour les spectres I et II par la méthode Hartree-Fock. La valeur numérique du rapport R_I ainsi obtenue est 5,28.

TABLEAU II

Valeurs des paramètres électrostatiques				
Paramètres	Etudes paramétriques		Etudes Hartree-Fock	
	Spectre I (Mehlhorn) 3d ⁵ 4s4p	Spectre II 3d ⁵ 4s et 3d ⁵ 4p	Spectre I 3d ⁵ 4s4p	Spectre II 3d ⁵ 4s et 3d ⁵ 4p
G_2 (d, s)	1586,8	1578,0	1551,0	1752,0
G_1 (d, p) + $\frac{21}{2}G_3$ (d, p)	246,8	402,8	318,5	484,6
R	6,43	3,92	4,87	3,61

Dans une étude paramétrique où le rapport R_1 est fixé à 5,28, l'écart quadratique moyen obtenu sur les quatre termes, défini ici par

$$\text{e.q.m.} = \left[\sum_i (E_{\text{exp}}^i - E_{\text{calc}}^i)^2 / (4 - 3) \right]^{1/2},$$

vaut 231 cm^{-1} (optimisation faite sur quatre termes avec trois paramètres indépendants).

TABLEAU III

Positions expérimentales et calculées des quatre termes z^8P , z^6P , z^4P , y^6P de la configuration $3d^54s4p$ du manganèse I			
Terme	Energie exp.	Energie calc.	$E_{\text{exp.}} - E_{\text{calc.}}$
z^8P	18571,7	18473,7	98
z^6P	24792,5	24985,5	-193
z^4P	31040,0	30960,0	80
y^6P	35737,5	35722,5	15

$$G_2$$
 (d, s) = 1509,3 (39,5), G_1 (d, p) + $\frac{21}{2}G_3$ (d, p) = 285,9 (7,5),

$$G_1$$
 (s, p) = 5637,2 (147,6).

Le tableau III contient les positions calculées et expérimentales des termes ainsi que les valeurs des paramètres avec leurs écarts types.

Cette étude ne rend pas compte de la structure fine des termes qui d'ailleurs est faible (tableau I), mais elle permet d'obtenir en couplage «*LS* intermédiaire» les fonctions d'onde des deux multiplets z^6P et y^6P qui se perturbent mutuellement.

$$\Psi(z^8P) = |\{[d^5 \ ^6S, s] \ ^7S, p\} \ ^8P\rangle,$$

$$\Psi(z^4P) = |\{[d^5 \ ^6S, s] \ ^5S, p\} \ ^4P\rangle,$$

$$\Psi(z^6P) = 0,8266 |\{[d^5 \ ^6S, s] \ ^7S, p\} \ ^6P\rangle + 0,5628 |\{[d^5 \ ^6S, s] \ ^5S, p\} \ ^6P\rangle.$$

$$\Psi(y^6P) = -0,5628 |\{[d^5 \ ^6S, s] \ ^7S, p\} \ ^6P\rangle + 0,8266 |\{[d^5 \ ^6S, s] \ ^5S, p\} \ ^6P\rangle.$$

3.2. Calcul de la structure hyperfine dipolaire magnétique. Au premier ordre, la constante de structure hyperfine dipolaire magnétique d'un niveau s'exprime classiquement par l'expression :

$$A_J = \langle \Psi_J \| X^{(1)} \| \Psi_J \rangle [J(J+1)(2J+1)]^{-\frac{1}{2}}, \quad (1)$$

avec dans notre cas, en notation adaptée au calcul :

$$X^{(1)} = a_s s_s^{(1)} + a_p [l_p^{(1)} - \sqrt{10} \{s^{(1)} C^{(2)}\}_p^{(1)}] + \sum_i \text{électrons d} a_d [l_{d_i}^{(1)} - \sqrt{10} \{s^{(1)} C^{(2)}\}_{d_i}^{(1)}], \quad (2)$$

a_s , a_p , a_d , sont les constantes de structure hyperfine dipolaire magnétique des électrons s, p, d. Le groupe des électrons 3d étant, en très bonne approximation, couplé en un terme S (6S), les coefficients angulaires de a_d sont pratiquement nuls. La constante de structure hyperfine A_J d'un niveau peut alors se mettre sous la forme très simple :

$$A_J = u_J a_s + v_J a_p,$$

où u_J et v_J sont des coefficients angulaires calculés numériquement à partir des expressions (1) et (2) par les méthodes de calcul tensoriel décrites par Racah et Judd⁸).

TABLEAU IV

Valeurs des constantes de structures hyperfines a_s et a_p (calculs faits isolément pour chaque terme)

Niveaux	$z {}^8P_{5/2 \ 7/2 \ 9/2}$ $z {}^6P_{3/2 \ 5/2 \ 7/2}$ $y {}^6P_{3/2 \ 5/2 \ 7/2}$	$z {}^8P_{5/2 \ 7/2 \ 9/2}$	$z {}^6P_{3/2 \ 5/2 \ 7/2}$	$y {}^6P_{3/2 \ 5/2 \ 7/2}$
a_s (mK)	138,9 (17,9)	119,9 (4,2)	116,2 (1,6)	254,3 (4,5)
a_p (mK)	13,1 (8,1)	8,1 (2,4)	9,7 (0,8)	6,3 (1,2)
e.q.m. (mK)	6,9	1,0	0,38	0,64

Disposant des valeurs expérimentales de neuf constantes A_J correspondant aux niveaux $z {}^8P_{5/2 \ 7/2 \ 9/2}$, $z {}^6P_{3/2 \ 5/2 \ 7/2}$, $y {}^6P_{3/2 \ 5/2 \ 7/2}$, nous avons pu déterminer les valeurs des constantes de structure hyperfine a_s et a_p par méthode des moindres carrés. Le calcul des valeurs (numériques) de ces paramètres a été fait de deux manières différentes. La première consiste à faire une seule optimisation avec les neuf valeurs connues des A_J (9 valeurs de A_J , 2 paramètres); la seconde consiste à effectuer trois optimisations différentes, chacune faisant intervenir les trois niveaux issus d'un même terme (3 optimisations avec chacune 3 valeurs de A_J et 2 paramètres). Le tableau IV renferme les valeurs des constantes de structure hyperfine a_s et a_p ainsi déterminées avec l'écart quadratique moyen sur les cons-

tantes A_J correspondant à chaque calcul. La valeur de chaque paramètre est donnée avec son écart-type entre parenthèses.

Les résultats contenus dans le tableau IV appellent deux commentaires :

L'accord entre les valeurs expérimentales et calculées de A_J est assez mauvais dans le cas d'une optimisation faite sur neuf niveaux à la fois : l'écart quadratique moyen (6,9 mK) représente environ 30% de l'ordre de grandeur de la valeur absolue des constantes A_J .

Dans le cas où les optimisations sont faites séparément pour chacun des trois termes z^8P , z^6P , y^6P , on constate un bon accord entre les valeurs calculées et expérimentales des A_J (e.q.m. faible), mais les valeurs de la constante électronique a_s sont très différentes entre les termes z^8P et z^6P d'une part et y^6P d'autre part.

Ces deux constatations mettent en évidence le phénomène de polarisation des électrons s internes par les électrons extérieurs, principalement les électrons $3d^9$). Pour tenir compte de ce phénomène dans les calculs théoriques, il faut ajouter à l'opérateur $X^{(1)}$ la quantité : $a_d S_d^{(1)7}$.

La constante de structure hyperfine A_J a alors la forme :

$$A_J = u_J a_s + v_J a_p + w_J a_d.$$

Les constantes hyperfines électroniques a_s , a_p et a_d ont été déterminées par méthode des moindres carrés, en tenant compte des neuf valeurs des A_J connues.

TABLEAU V

Valeurs expérimentales et calculées des constantes hyperfines dipolaires magnétiques des niveaux des termes z^8P , z^6P , y^6P (calculs sans interactions de configurations)		
Niveau	A exp (mK)	A calc (mK)
$z^8P_{9/2}$	14,00	15,05
$z^8P_{7/2}$	18,21	17,86
$z^8P_{5/2}$	19,07	19,75
$z^6P_{7/2}$	14,30	13,59
$z^6P_{5/2}$	15,58	14,64
$z^6P_{3/2}$	19,06	19,10
$y^6P_{7/2}$	-13,04	-12,95
$y^6P_{5/2}$	-18,00	-17,08
$y^6P_{3/2}$	-32,40	-32,91

$$a_s = 161,1 (2,4) \text{ mK}, \quad a_p = 7,8 (1,0) \text{ mK}, \quad a_d = -7,64 (0,35) \text{ mK}, \quad \text{e.q.m.} = 0,83 \text{ mK}.$$

Le tableau V contient les valeurs calculées et expérimentales des constantes A_J ainsi que les valeurs de a_s , a_p , a_d avec leurs écarts types. L'introduction du paramètre supplémentaire a_d entraîne une importante diminution de l'écart quadratique

moyen qui passe de 6,9 mK à 0,83 mK. De plus, la valeur de a_s se fixe assez loin des valeurs obtenues pour les trois termes intéressants dans le traitement précédent (tableau IV), où il est clair que ce paramètre contenait une grosse partie « effective » (c'est-à-dire prenant en compte des effets non introduits explicitement).

4. *Traitement avec interaction de configuration.* 4.1. Fonctions d'onde. En 1969 Roth¹⁰) publiait une thèse où figure une étude paramétrique détaillée des configurations $(3d + 4s)^6 4p$ du manganèse I.

En utilisant les valeurs des paramètres d'énergie électrostatique proposées par cet auteur nous avons pu obtenir pour les termes z^8P , z^6P et y^6P des fonctions d'onde en couplage « *LS* intermédiaire ». Nous n'avons tenu compte que de la principale interaction de configuration qui conduit à une perturbation des termes z^6P et y^6P par le terme $3d^6(^5D) 4p x^6P$; les autres interactions, d'ailleurs très faibles, étant négligées dans le cadre de notre étude. Après troncature et normalisation nous avons obtenu les fonctions d'onde ci-dessous :

$$\Psi(z^8P) = |\{[d^5 \ ^6S, s] \ ^7S, p\} \ ^8P\rangle,$$

$$\Psi(z^6P) = 0,83398 |\{[d^5 \ ^6S, s] \ ^7S, p\} \ ^6P\rangle + 0,53682 |\{[d^5 \ ^6S, s] \ ^5S, p\} \ ^6P\rangle \\ - 0,12768 |\{d^6 \ ^5D, p\} \ ^6P\rangle,$$

$$\Psi(y^6P) = -0,46205 |\{[d^5 \ ^6S, s] \ ^7S, p\} \ ^6P\rangle + 0,82530 |\{[d^5 \ ^6S, s] \ ^5S, p\} \ ^6P\rangle \\ + 0,32938 |\{d^6 \ ^5D, p\} \ ^6P\rangle.$$

4.2. Calcul de la structure hyperfine dipolaire magnétique. Pour le calcul de la structure hyperfine nous avons pris pour $X^{(1)}$ la forme complète suivante :

$$X^{(1)} = a_s S_s^{(1)} + b_p I_p^{(1)} - c_p \sqrt{10} \{S^{(1)} C^{(2)}\}_p^{(1)} + a_p S_p^{(1)} + a_d S_{d^5}^{(1)},$$

où les notations sont maintenant celles de Bordarier, Judd et Klapisch⁷).

On sait que la distinction entre b_p et c_p permet de tenir compte des interactions de configurations lointaines (et des effets relativistes). L'influence des éléments de matrice non-diagonaux entre $3d^5 4s 4p$ et $3d^6 4p$ a été négligée : une évaluation par la méthode de Hartree-Fock donne en effet la valeur $\langle r^{-3} \rangle_{3d-4s} = 0,0085$ u.a. (unités atomiques) pour $3d^5 4s 4p \ ^8P$, valeur beaucoup plus faible que : $\langle r^{-3} \rangle_{3d} = 4,13$ obtenue par la même méthode.

Comme précédemment nous avons déterminé les grandeurs a_s , b_p , c_p , a_p et a_d par méthode des moindres carrés. Après optimisation l'écart quadratique est de 0,83 mK.

Le tableau VI contient les valeurs calculées et expérimentales des constantes dipolaires magnétiques des niveaux ainsi que celles des constantes hyperfines électroniques.

TABLEAU VI

Valeurs expérimentales et calculées des constantes hyperfines dipolaires magnétiques des niveaux des termes z^8P , z^6P , y^6P
(calculs avec interaction de configuration)

Niveau	A exp (mK)	A calc (mK)
$z^8P_{9/2}$	14,00	14,91
$z^8P_{7/2}$	18,21	17,45
$z^8P_{5/2}$	19,07	19,07
$z^6P_{7/2}$	14,30	14,04
$z^6P_{5/2}$	15,58	15,05
$z^6P_{3/2}$	19,06	19,53
$y^6P_{7/2}$	-13,04	-13,24
$y^6P_{5/2}$	-18,00	-17,20
$y^6P_{3/2}$	-32,40	-32,80

$a_s = 155,0$ (2,4), $a_d = -6,93$ (0,48), $a_p = -0,28$ (3,3), $b_p = 8,52$ (1,20), $c_p = 7,27$ (4,62), e.q.m. = 0,83.

La constante a_p est très mal définie, son écart-type étant égal à environ douze fois sa valeur absolue. Si dans une nouvelle optimisation on fixe sa valeur à zéro, la modification entraînée sur les valeurs des quatre autres constantes est d'environ 0,2%. On peut donc dire que l'effet de polarisation des électrons s par les électrons 4p ne modifie pratiquement pas les structures hyperfines des niveaux étudiés.

Les constantes b_p et c_p ne diffèrent que de 1,2 mK alors que leurs écarts-types valent respectivement 1,2 mK et 4,62 mK. Finalement l'ensemble des valeurs des paramètres du tableau V se trouve peu modifié.

Les deux simplifications proposées ($a_p = 0$ et $b_p = c_p$) dans le calcul plus simple exposé au paragraphe précédent se trouvent donc justifiées *a posteriori*. Ce calcul rend parfaitement compte du phénomène de polarisation des électrons s par les électrons 3d qui est dans notre cas très important.

5. *Etude a priori du phénomène de polarisation par méthode Hartree-Fock avec polarisation de spin (SPHF)*. Cette méthode de calcul a priori proposée par Abramam, Horowitz et Pryce¹¹) consiste à poser que la fonction d'onde radiale de l'orbitale $nl\uparrow$ n'est pas identique à celle de l'orbitale $nl\downarrow$. (Les notations \uparrow et \downarrow correspondent respectivement à des électrons de spin $+\frac{1}{2}$ et $-\frac{1}{2}$.) En appliquant le principe variationnel à ces fonctions d'onde il est possible d'obtenir les quantités $|\Psi_{ns\uparrow}(0)|^2$ et $|\Psi_{ns\downarrow}(0)|^2$ qui sont reliées au terme de contact par la relation simple:

$$A_c = \frac{2}{3} \mu_B \mu_N \frac{1}{IJ} \sum_n [|\Psi_{ns\uparrow}(0)|^2 - |\Psi_{ns\downarrow}(0)|^2].$$

Ce terme de contact correspond dans l'étude précédente à la contribution apportée par les constantes a_s , a_d et a_p à la structure hyperfine d'un niveau.

Le calcul du terme de contact a été fait pour les états : $((3d\uparrow)^5 4s\uparrow 4p\uparrow)$, $(3d\uparrow)^5 4s\uparrow 4p\downarrow$, $(3d\uparrow)^5 4s\downarrow 4p\uparrow$ et $[(3d\uparrow)^4 3d\downarrow]^6 S 4s\uparrow 4p\uparrow$.

Les densités de probabilités de spin totales des électrons s en $r = 0$ portées dans le tableau VII ont été calculées à l'aide du programme de Hartree-Fock avec polarisation de spin écrit par Froese-Fischer et modifié par Bagus.

TABLEAU VII

Densités de probabilité de spin totales des électrons en $r = 0$				
Etats	$(3d\uparrow)^5 4s\uparrow 4p\uparrow$ (1)	$(3d\uparrow)^5 4s\uparrow 4p\downarrow$ (2)	$(3d\uparrow)^5 4s\downarrow 4p\uparrow$ (3)	$(3d\uparrow)^4 3d\downarrow 4s\uparrow 4p\uparrow$ (4)
$4\pi \sum_n [\Psi_{ns\uparrow}(0) ^2 - \Psi_{ns\downarrow}(0) ^2]$ en unités atomiques (u.a.)	31,04	37,14	-59,80	35,96

En comparant la densité de spin totale de l'état $(3d\uparrow)^5 4s\uparrow 4p\uparrow$ à celle des trois autres états on obtient la modification qu'apporte à cette quantité le passage d'un électron \uparrow à un électron \downarrow .

Ces modifications valent respectivement: 90,84, -6,10 et -4,92 pour les électrons 4s, 4p et 3d.

Le calcul de la densité de spin de l'état (1) à partir des contributions respectives dues aux électrons 4s, 4p, 4d donne 30,07 u.a. Ceci montre la cohérence de nos quatre calculs puisque la même quantité obtenue directement vaut 31,04 u.a.

TABLEAU VIII

Valeurs des constantes de structure hyperfine a_s , a_d , a_p obtenues par calculs Hartree-Fock avec polarisation de spin		
	Etude Hartree-Fock avec polarisation de spin	Etude paramétrique
$a_s = 266,9$		
$a_d = -14,5$	$x_1 = -0,054$	$x_1 = -0,045$
$a_p = -17,9$	$x_2 = -0,077$	$x_2 = -0,0018$

Le tableau VIII contient les valeurs en mK des constantes de structure hyperfine a_s , a_p , a_d calculées à partir des termes de contact A_c des quatre états cités plus haut. Nous y avons également porté les valeurs des deux rapports $x_1 = a_d/a_s$ et $x_2 = a_p/a_s$. Si on compare ces résultats à ceux obtenus par une étude paramétrique.

on constate que le calcul de Hartree-Fock avec polarisation de spin fournit un bon ordre de grandeur des paramètres a_s et a_d . De plus, on notera que les deux valeurs du rapport $\alpha_1 = a_d/a_s$ obtenues par la méthode paramétrique et par la méthode Hartree-Fock sont en bon accord.

Par contre la méthode de Hartree-Fock ne semble pas donner de bonnes valeurs pour a_p et α_2 . Ceci peut s'expliquer par le fait que les calculs de Hartree-Fock ne donnent pas toujours de bonnes fonctions radiales pour les électrons peu liés (ici l'électron 4p).

Il faut également remarquer que dans l'étude paramétrique la constante a_p est très mal définie et que les contributions qu'elle apporte au calcul de la structure hyperfine des niveaux sont de l'ordre de dix fois inférieure à celles de a_d (en valeur absolue).

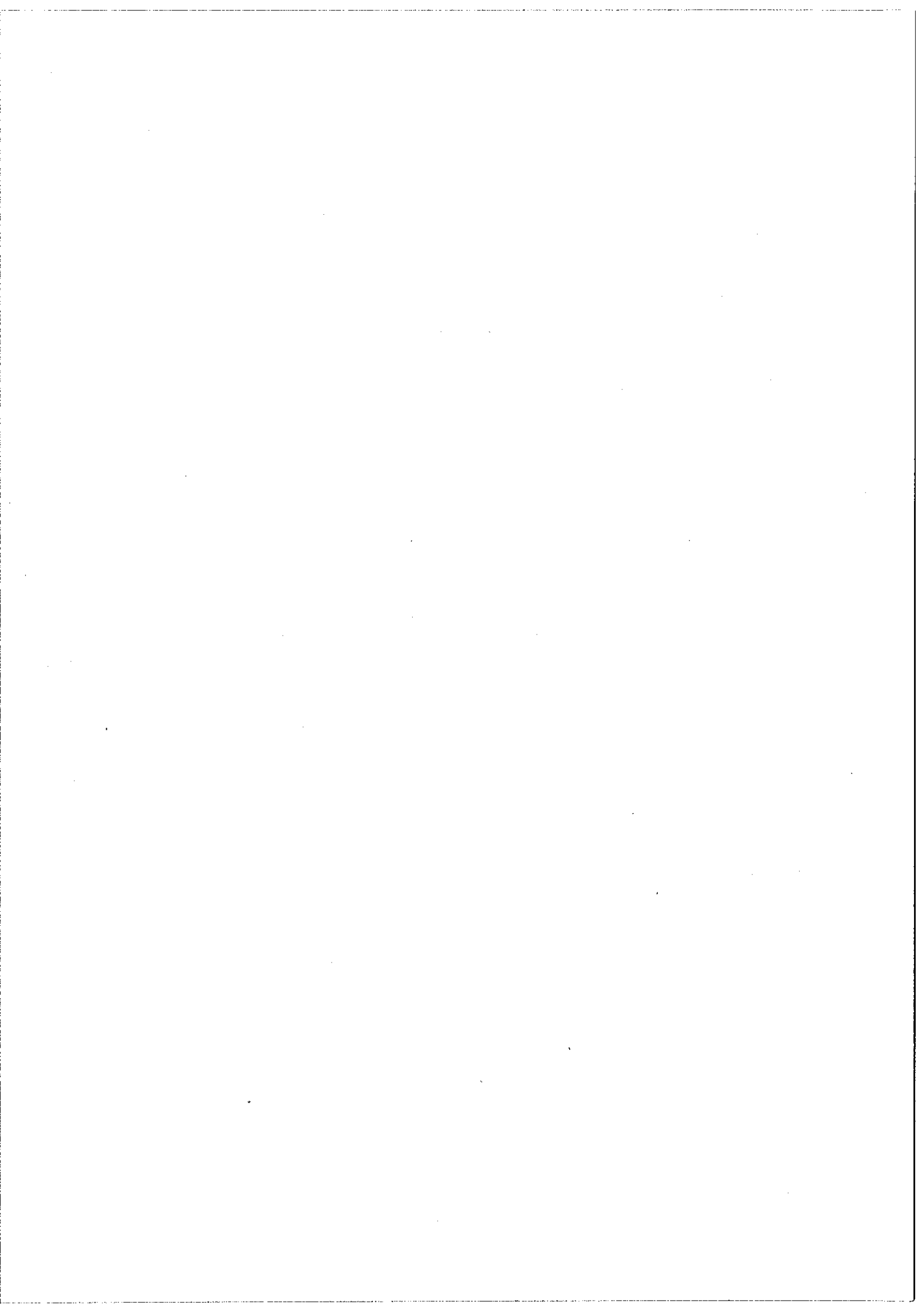
6. *Conclusion.* Cette étude montre l'importance de l'effet de polarisation des électrons s par les électrons 3d. Ce phénomène explique en partie la grande étendue (1000 mK environ) des structures hyperfines des raies du multiplet $e^6D \rightarrow y^6P$ du manganèse I. L'étendue est telle que certaines de ces structures hyperfines sont mesurables en absorption dans le spectre solaire¹²).

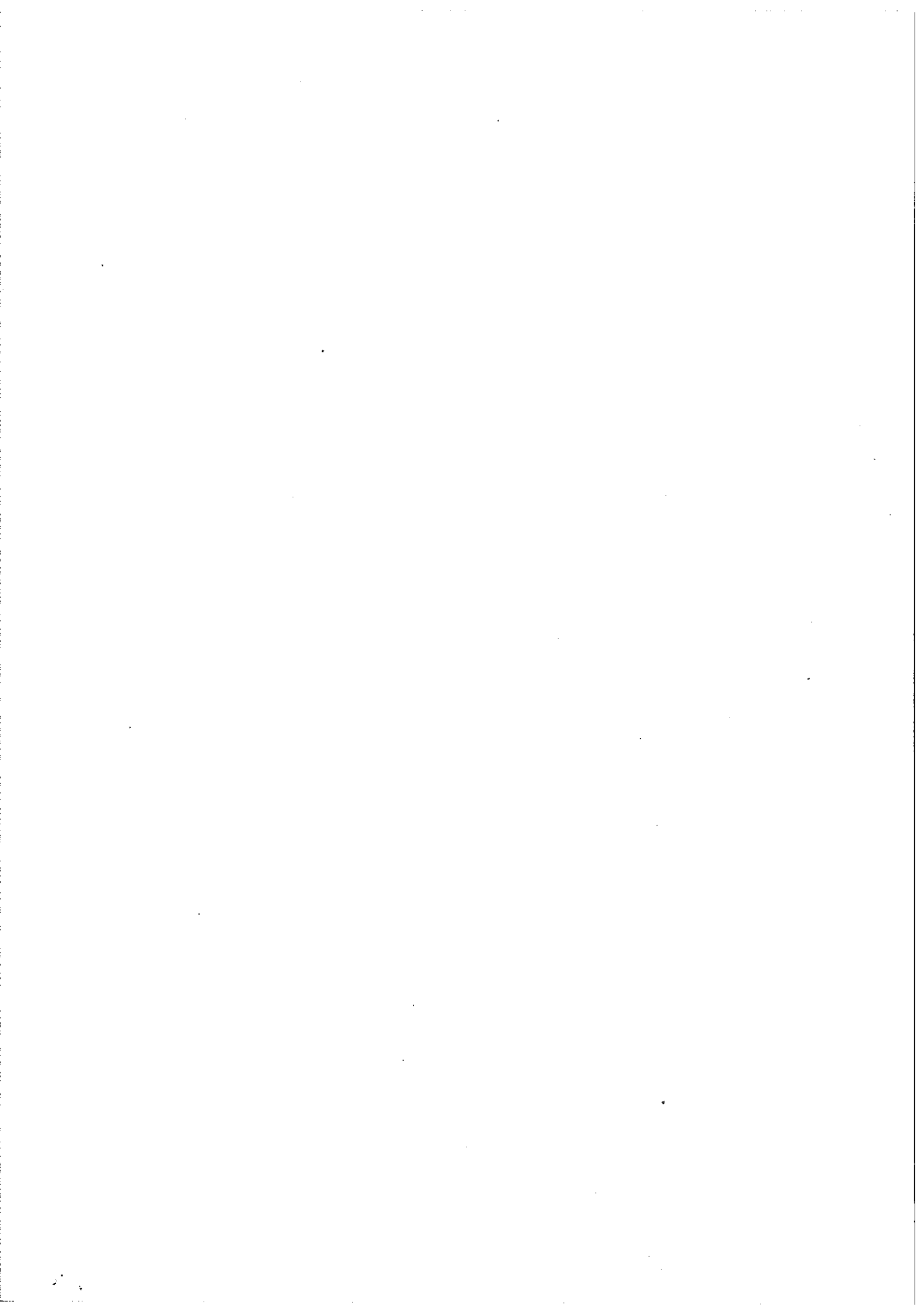
L'interprétation proposée permet d'obtenir un bon ordre de grandeur du terme de contact. Toutefois une étude quantitative plus poussée serait souhaitable compte tenu de la grande précision obtenue sur les mesures expérimentales.

Remerciements. Je remercie le Dr. J. Bauche de l'aide constante qu'il a bien voulu m'apporter pendant ce travail.

REFERENCES

- 1) Walther, H., Z. Phys. **170** (1962) 507.
- 2) Handrich, E., Steudel, A. et Walther, H., Communication à la première Conférence EGAS (European Group for Atomic Spectroscopy), Orsay, 1969, p. 33.
- 3) Luc, P. et Gerstenkorn, S., Astronomy and Astrophysics **18** (1972) 209.
- 4) Catalan, M., Meggers, W. et Garcia-Riquelme, O., J. Res. Nat. Bur. Stand. **68A** (1964) 9.
- 5) Mehlhorn, R., Communication privée.
- 6) Froese-Fischer, Canad. J. Phys. **41** (1963) 1895.
- 7) Bordarier, Y., Judd, B.R. et Klapisch, M., Proc. Roy. Soc. **A289** (1965) 81.
- 8) Judd, B.R., Operator Techniques in Atomic Spectroscopy, McGraw-Hill Book Co. (New York, 1963).
- 9) Freeman, A., Bagus, P. et Walson, R., La structure hyperfine magnétique des atomes et des molécules, C.N.R.S. (Paris, 1966) p. 293.
- 10) Roth, C., Thèse (1969), Hebrew University of Jerusalem.
- 11) Abragam, A., Horowitz, J. et Pryce, M.H.L., Proc. Roy. Soc. **A230** (1955) 169.
- 12) Swenson, J., Ark. Fys. **32** (1966) 463.





Déplacement isotopique dans la raie de résonance D_2
du rubidium. Inversion des valeurs de $\langle r^2 \rangle$ des
isotopes ^{85}Rb et ^{87}Rb .

C. BRECHIGNAC, S. GERSTENKORN, P. LUC.

Laboratoire Aimé Cotton, C.N.R.S. II, Bât. 505, 91405-ORSAY, France.

I - INTRODUCTION.

La mesure du Déplacement Isotopique (D.I.) $^{85}\text{Rb} - ^{87}\text{Rb}$ dans la raie de résonance D_1 ($\lambda = 7947 \text{ \AA}$, $^2S_{1/2} - ^2P_{1/2}$) a fait l'objet de trois publications récentes; le tableau I donne les résultats obtenus, ainsi que les méthodes utilisées par les différents auteurs. Nous avons adjoint également les mesures anciennes de H. KOPFERMANN et H. KRUGER (1936).

Tableau I

D_1 $\lambda = 7947 \text{ \AA}$ (mK)	D_2 $\lambda = 7800 \text{ \AA}$ (mK)	Méthodes	Année Références
$+2,8 \pm 1$	$+2,0 \pm 1$	Tube de Geissler. Fabry-Perot photo- graphique.	1936 (1)
$+3,5 \pm 0,5$		Jet atomique. Balayage par effet Stark.	1968 (2)
$+2,59 \pm 0,1$	$+2,68 \pm 0,1$	Jet atomique en émis- sion. Fabry-Perot photo- électrique.	1971 (3)
$+2,57 \pm 0,1$		Jet atomique Absorption d'un rayon- nement laser. Balayage par effet Zeeman	1972 (4)

La position observée des centres de gravité des structures hyperfines ^{85}Rb et ^{87}Rb est celle qui correspondait à l'inversion $\langle r^2 \rangle_{85} > \langle r^2 \rangle_{87}$; en effet l'isotope 85 est déplacé par rapport à l'isotope 87 vers les grandes longueurs d'onde. Par convention cette situation est représentée par le signe + dans le tableau I. Cependant

avant de conclure, étant donné la petitesse de l'effet de volume - du même ordre de grandeur que les effets de masse - il apparaissait nécessaire de confirmer la mesure effectuée par BEACHAM et ANDREW [3] sur la raie D_2 : ces auteurs signalent la présence dans leurs conditions expérimentales d'importantes "anomalies" dans la distribution des intensités des composantes hyperfines. Or, la transition D_2 est, à priori, plus intéressante que la transition D_1 : le niveau supérieur $^2P_{3/2}$ (électron $p_{3/2}$) possède théoriquement un déplacement isotopique de volume d'un ordre de grandeur [5] inférieur à celui du niveau $^2P_{1/2}$ (électron $p_{1/2}$), de telle sorte que la totalité de l'effet de volume observée dans la transition D_2 ($^2S_{1/2} - ^2P_{3/2}$) peut être attribué au niveau fondamental $^2S_{1/2}$ avec plus de sûreté. L'intérêt de la mesure précise du déplacement isotopique dans le cas du rubidium réside dans le fait que l'un des isotopes (^{87}Rb) possède une couche complète de neutron ($Z = 37, N = 50$), et récemment nous avons montré [6] qu'il existe une relation entre les énergies de liaison par nucléon et le déplacement isotopique relatif (D.I.R.). Cette relation permet de prévoir une "inversion" des rayons nucléaires (plus précisément de $\langle r^2 \rangle$, valeur moyenne du carré de la distribution des charges) au voisinage des couches complètes ($N = 50$, cas du Strontium [7] et $N = 82$, cas du cerium [8]). Nous avons donc repris les mesures sur la raie D_2 à l'aide d'une technique, qui, bien que classique (cathode-creuse et spectromètre Fabry-Perot photoélectrique [9]) permet néanmoins d'obtenir une

excellente précision de l'ordre d'une fraction de mK.

Nous indiquerons ensuite les arguments (discussion sur la valeur de l'effet spécifique de masse) qui nous incitent à conclure que, dans le cas du rubidium comme dans le cas du strontium, nous sommes bien en présence d'une inversion des rayons nucléaires $\langle r^2 \rangle$, ce qui permet de prévoir la position des centres de gravité des structures hyperfines des isotopes radioactifs ^{83}Rb et ^{89}Rb .

II - MONTAGE EXPERIMENTAL

C'est un spectromètre Fabry-Perot photoélectrique classique [10], constitué par un Fabry-Perot analyseur précédé d'un monochromateur Ebert-Fastie. Nous indiquons ci-dessous brièvement les conditions expérimentales spécifiques à notre problème.

a) Source. C'est une cathode-creuse du type Schüler refroidie à l'azote liquide, le gaz porteur étant du néon et l'intensité du courant dans la source était de l'ordre de 10 mA. Le rubidium (soit naturel, soit l'isotope ^{85}Rb enrichi à plus de 99,5%) était sous forme de chlorure; la quantité utilisée est de

1 à 2 mg par essai; la durée de vie d'une de ces cathodes était supérieure à 50 heures dans certains cas.

b) Prémonochromateur. La fonction d'appareil du prémonochromateur est donnée par la fig.1. C'est une fonction trapèze; la position des composantes hyperfines est située dans la zone de 300 mK indiquée sur la fig.1; on évite ainsi le déplacement des centres de gravité des quatre groupes de composantes hyperfines observées à travers le Fabry-Perot (fig.2); l'ordre de grandeur de ces déplacements a été récemment évalué [11].

c) Etalonnage des spectres donnés par le Fabry-Perot analyseur.

Il est obtenu à l'aide d'une interféromètre de Michelson auxiliaire à "bras repliés" (à l'aide d'un prisme de Kösters) [12], le balayage des ordres du Fabry-Perot étant effectué par variation de l'indice de l'air entre les lames de l'étalon Fabry-Perot.

d) Récepteur. C'est un tube photoélectrique RCA 7102 (maximum de rendement quantique de la photocathode situé vers 8000 \AA), refroidi à l'aide d'un mélange de carboglace-acétone. Les données sont recueillies à volonté soit sur un potentiomètre enregistreur du type MECI soit sur bandes perforées à l'aide d'un voltmètre digital.

III - RESULTATS DES MESURES.

III - 1. Mesures d'intensités.

L'utilisation du rubidium naturel dont le rapport d'ordonnance est bien connu [13] ainsi que la mesure des intensités par planimétrie de groupes de composantes hyperfines A_1 , B_1 , B_2 et A_2 (fig.2) donne une idée du taux d'autoabsorption dans la source. Ces mesures sont rendues difficiles par suite de la nécessité de tenir compte de l'influence mutuelle des pieds des composantes complexes A_1 , B_1 , B_2 et A_2 . Aussi, nous avons repris certaines mesures à l'aide d'un échantillon enrichi à plus de 99,5% en ^{85}Rb , où le problème de la détermination du fond est plus facile à résoudre, la structure observée^{se} réduisant cette fois aux deux composantes B_1 et B_2 (fig.3).

Le tableau II donne les intensités mesurées à partir d'enregistrements obtenus dans des conditions où l'effet de l'autoabsorption est réduit à sa plus faible valeur possible (nombre d'atomes présent dans la source aussi petit que possible, faible courant dans la source), tout en étant compatible pour obtenir un tracé avec un rapport signal/bruit acceptable (fig.2). Pour comparer nos mesures avec celles observées dans le jet atomique en émission, nous avons adopté la valeur $\rho = 2,59$ pour le rapport d'abondance $^{85}\text{Rb}/^{87}\text{Rb}$,

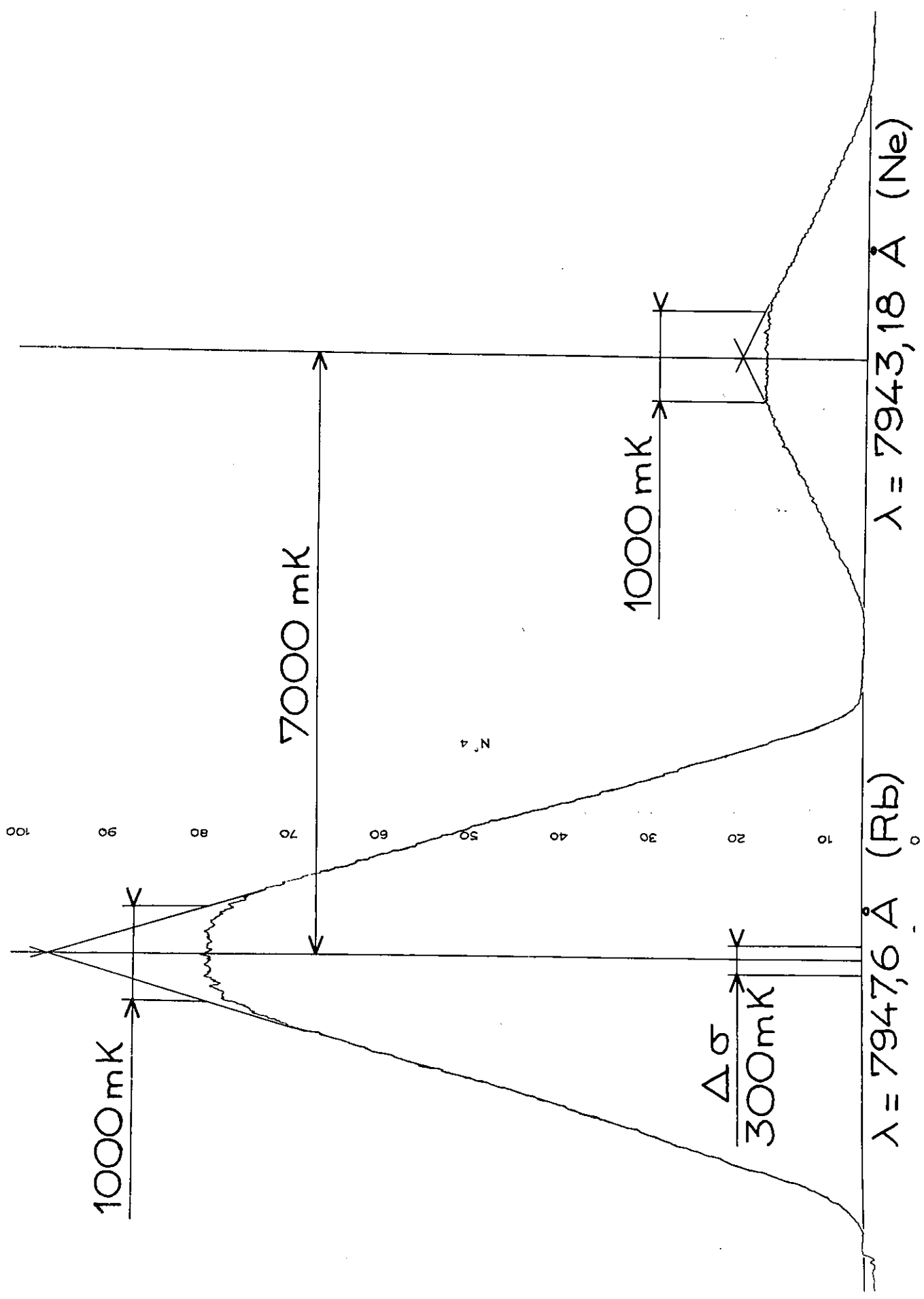


Fig.1

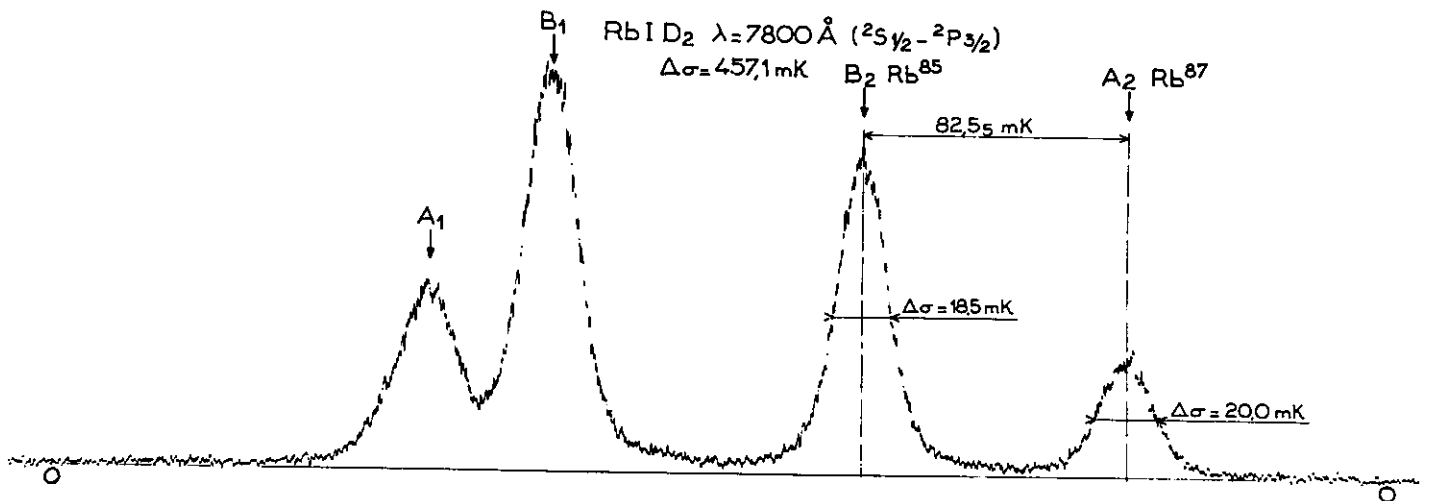
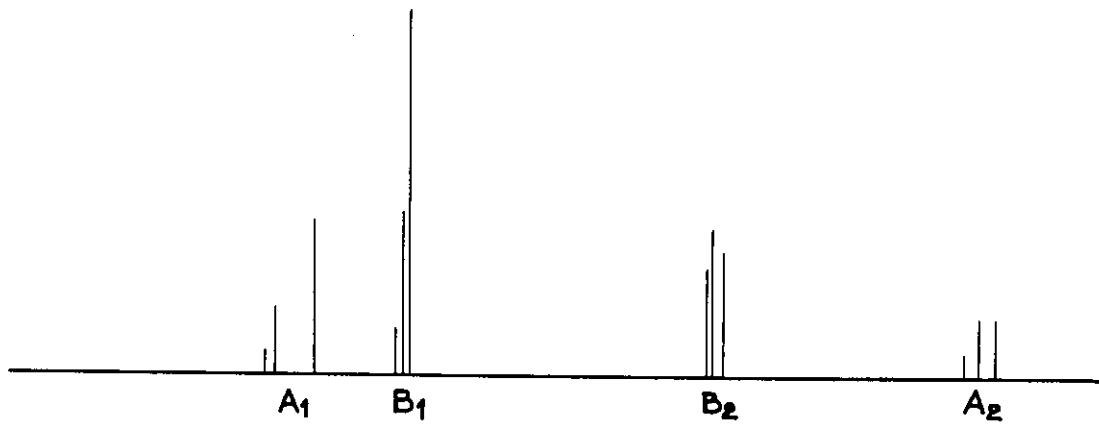
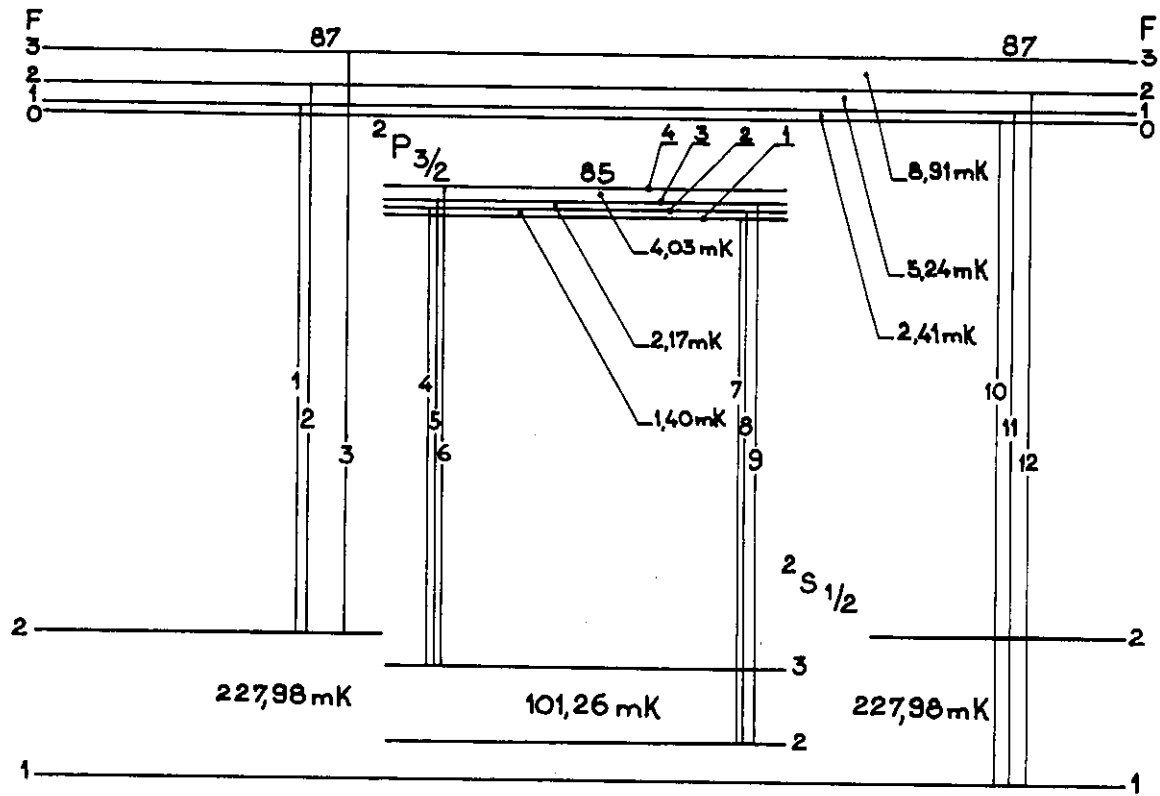


Fig.2

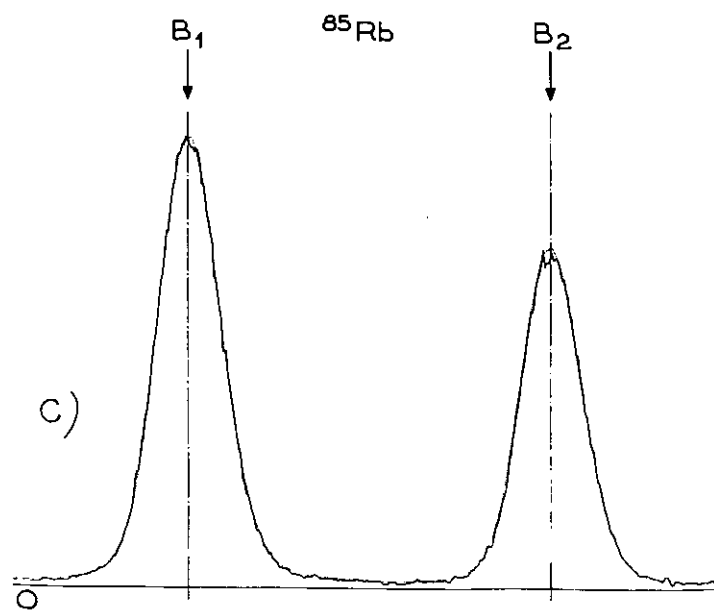
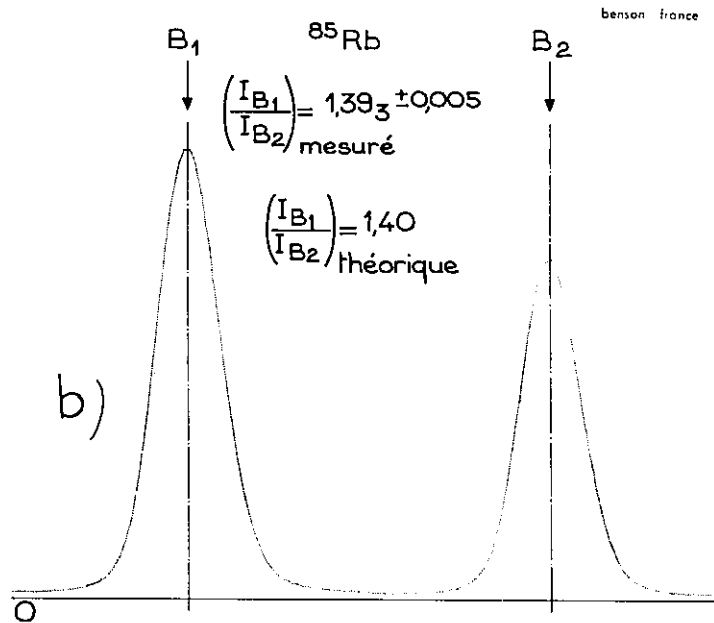
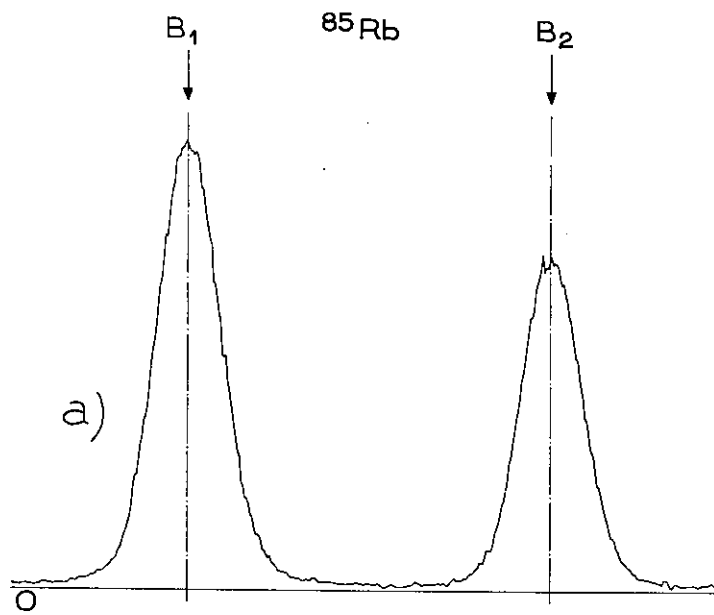


Fig. 3

valeur plus récente [13] que celle retenue par BEACHAM et ANDREW ($\rho = 2,66$).

Les résultats obtenus montrent que, dans nos conditions expérimentales on retrouve aux erreurs de mesure près, le rapport d'abondance ainsi que les rapports théoriques des intensités des groupes de composantes complexes A_1/A_2 , B_1/B_2 et B_2/A_2 (tableau III). Dans le cas où la source est un jet atomique en émission, ces rapports sont toujours inférieurs aux rapports théoriques (tableau III, dernière colonne). Cette différence peut-elle être attribuée à la présence d'autoabsorption, malgré la faible épaisseur optique d'un jet atomique? Dans ce cas il ne serait pas nécessaire d'invoquer une rupture du couplage LS [3]. Néanmoins, à l'intérieur de chacune des composantes complexes A_1 , B_1 , B_2 et A_2 une distribution "anormale" des intensités des composantes hyperfines ne peut être exclue, a priori, à l'aide de notre technique; en effet la largeur Doppler des raies excités par notre source ne permet pas de résoudre chacune des quatre composantes complexes.

Cependant, pour la mesure de la position des centres de gravité de ces composantes complexes, qui seule importe dans la détermination du déplacement isotopique, le fait de retrouver le rapport d'abondance ainsi que les rapports théoriques entre les différents groupes de composantes complexes plaide plutôt en faveur d'une distribution des intensités des composantes individuelles en accord

avec les intensités théoriques. Tel n'est pas le cas de la détermination du déplacement isotopique effectué par BEACHAM et ANDREW.

En effet, pour le calcul du déplacement isotopique ce sont les intensités théoriques qui ont été considérées et non les intensités observées; alors que la mesure des positions résultent d'une distribution d'intensités "anormales". C'est cette difficulté qui nous a incité, en partie, à reprendre la mesure du déplacement isotopique de la raie D_2 , à l'aide d'une source autre que le jet atomique en émission. Enfin, ajoutons que dans le cas de la raie D_1 ($\lambda = 7947 \text{ \AA}$), raie moins intense que la raie D_2 , la distribution des intensités observées soit dans le jet atomique en émission, soit dans notre source (fig.4) est un bon accord avec la distribution des intensités donnée par la théorie: les valeurs du déplacement isotopique pour la raie D_1 donnés par les deux dernières mesures (tableau I) sont d'ailleurs en excellent accord (2,59 et 2,57 mK).

III - 2. Mesures de positions.

A priori, les quatre composantes complexes A_1 , B_1 , B_2 et A_2 devraient présenter un profil assymétrique (voir schéma fig.2); ceci impliquerait une détermination laborieuse des centres de gravité de ces composantes complexes. Cependant, dans le cas de la raie

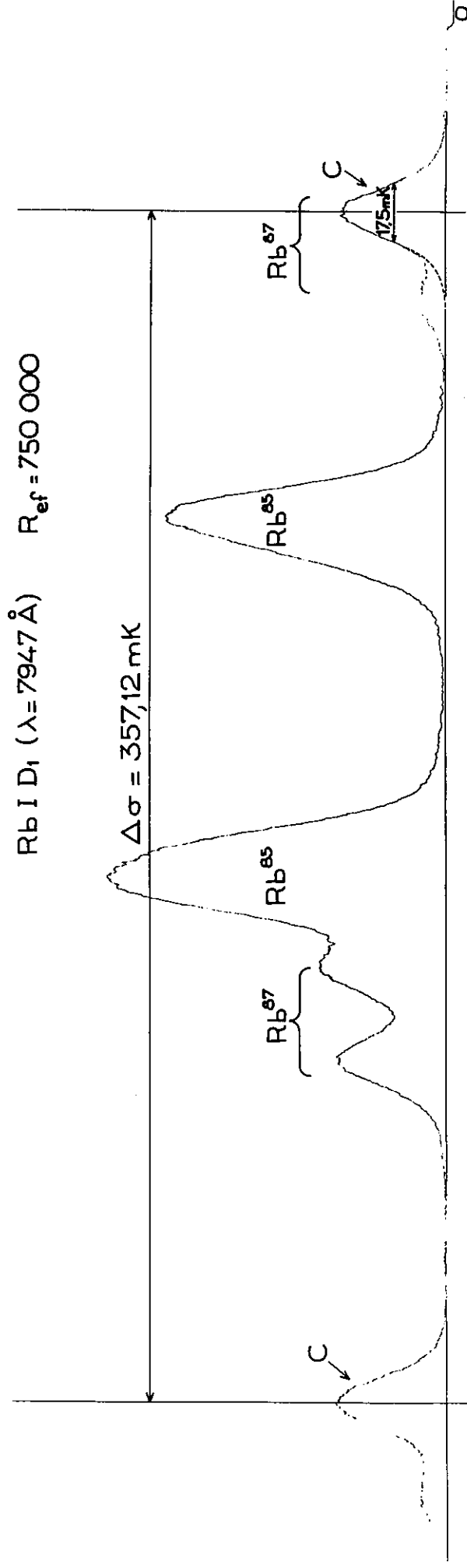


Fig. 4

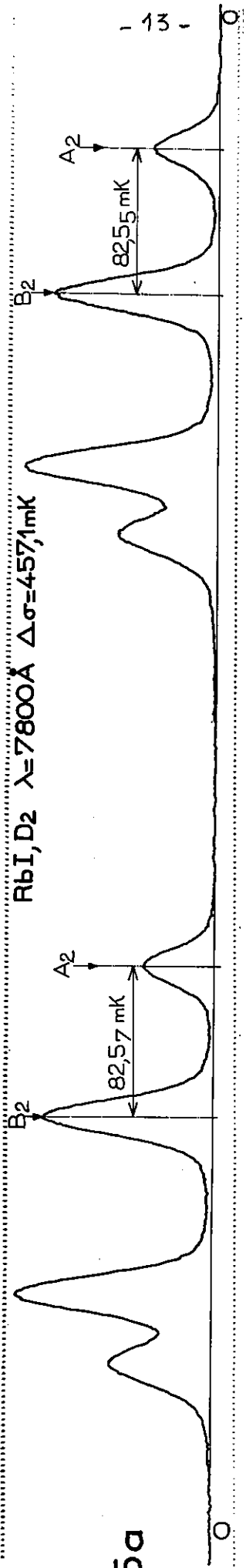


Fig.5a

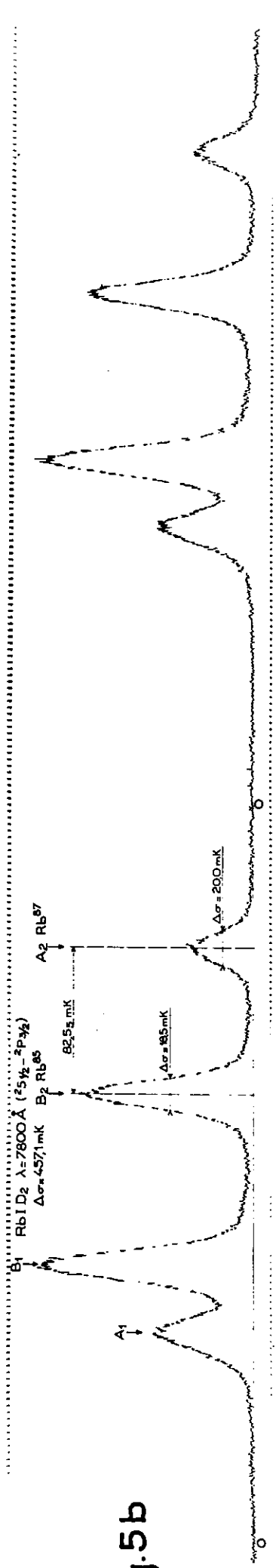


Fig.5b

B_2 (Rb85)

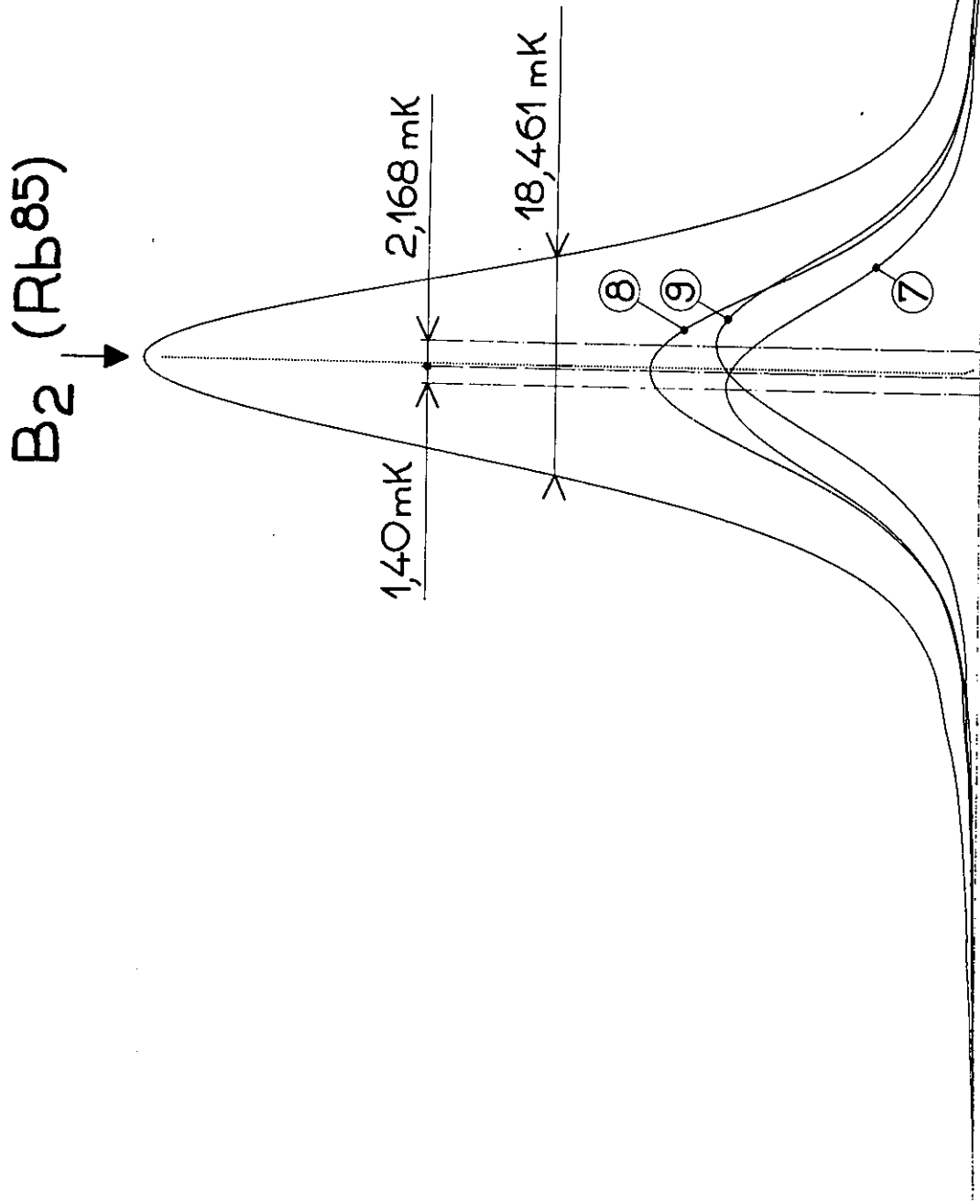


Fig. 6

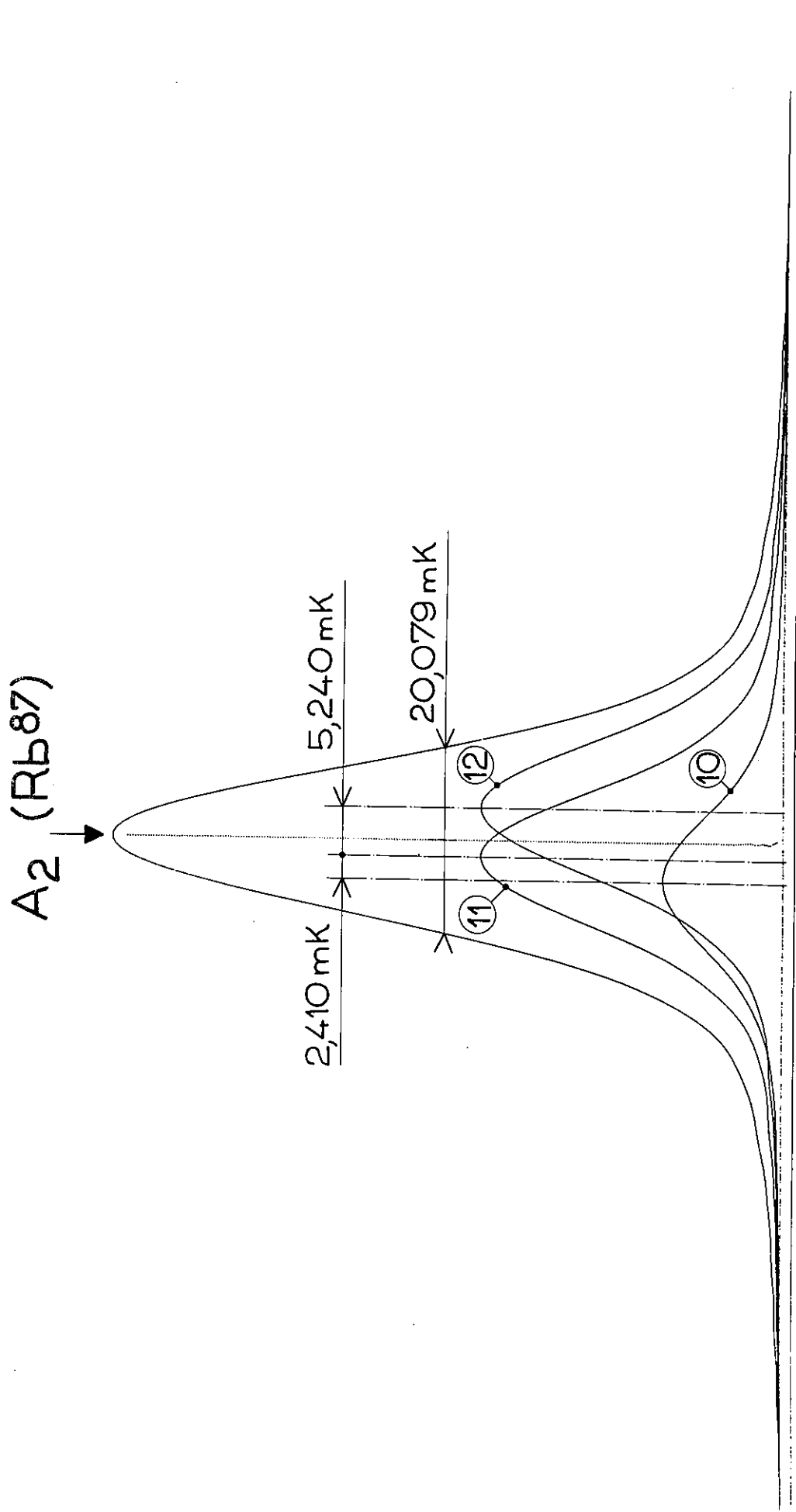


Fig. 7

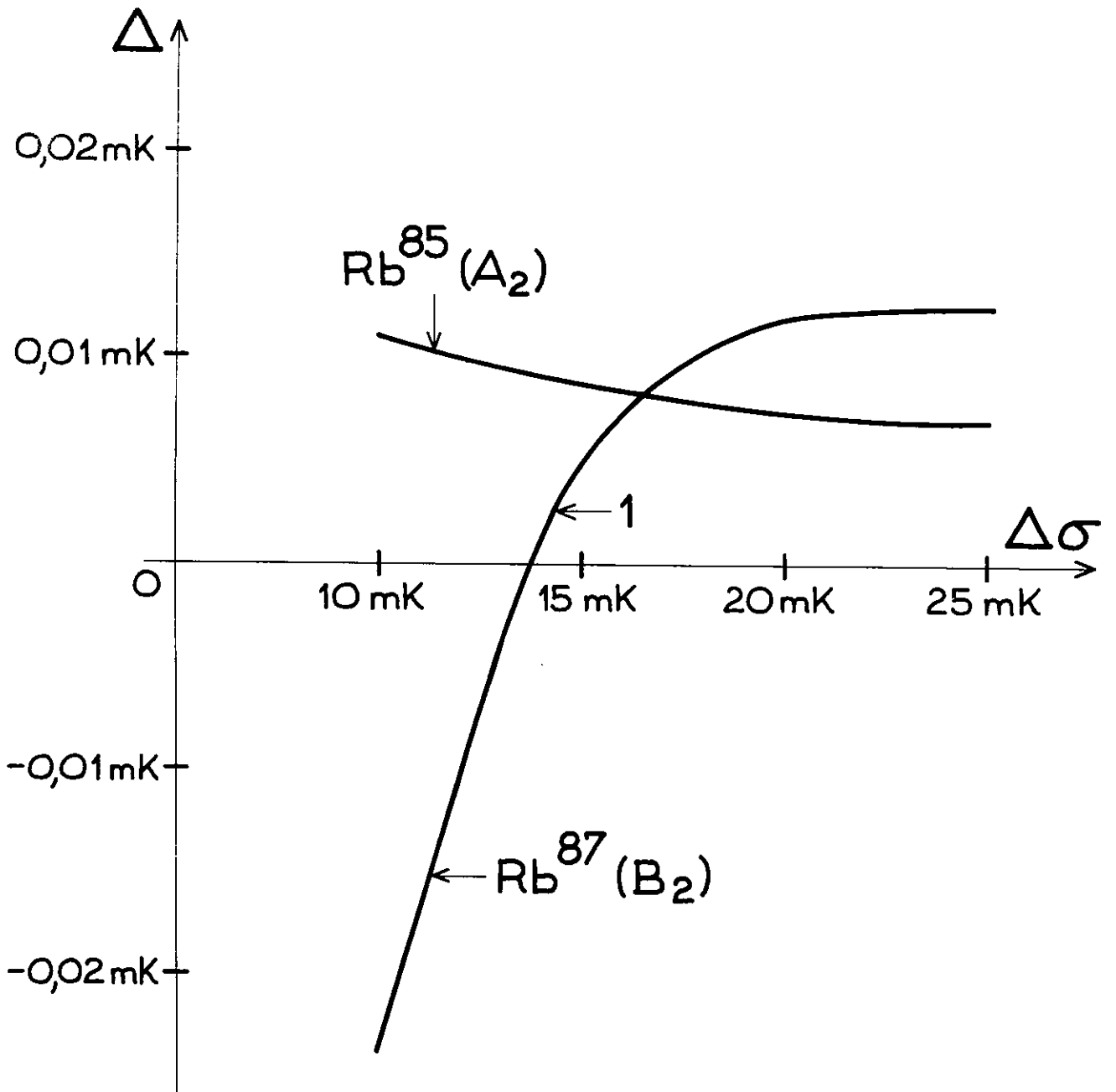


Fig. 8

Fig. 9

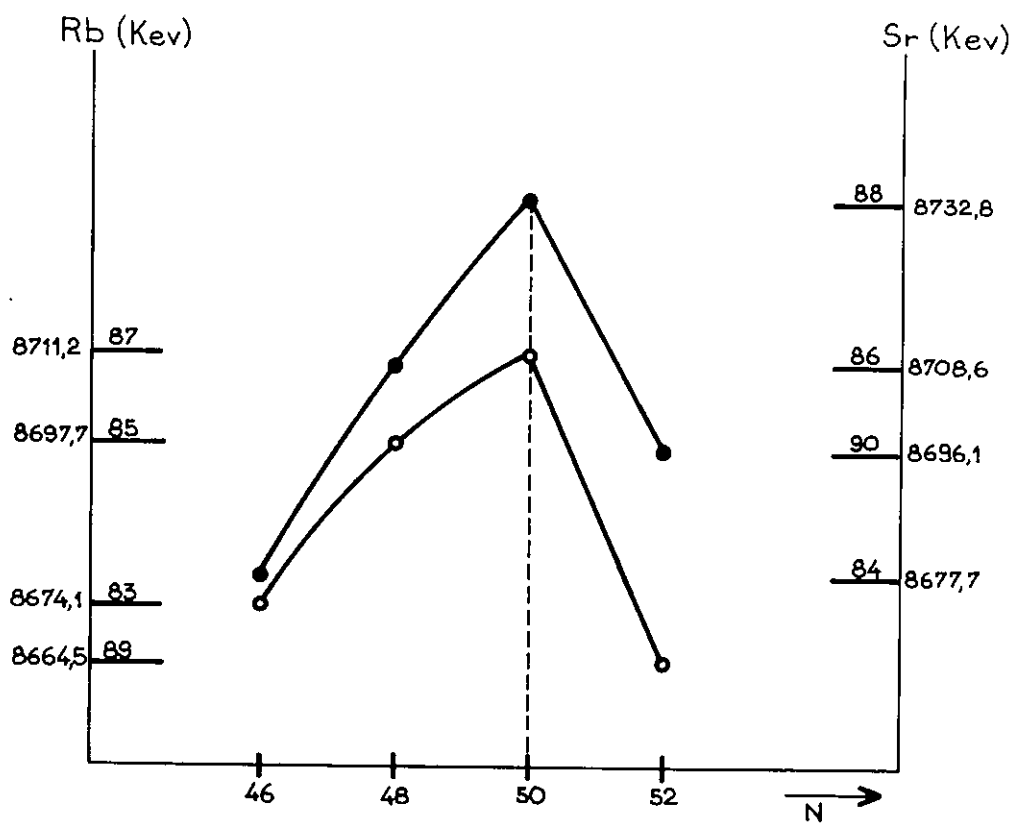


Fig. 10

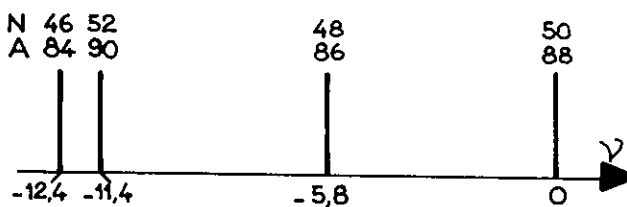
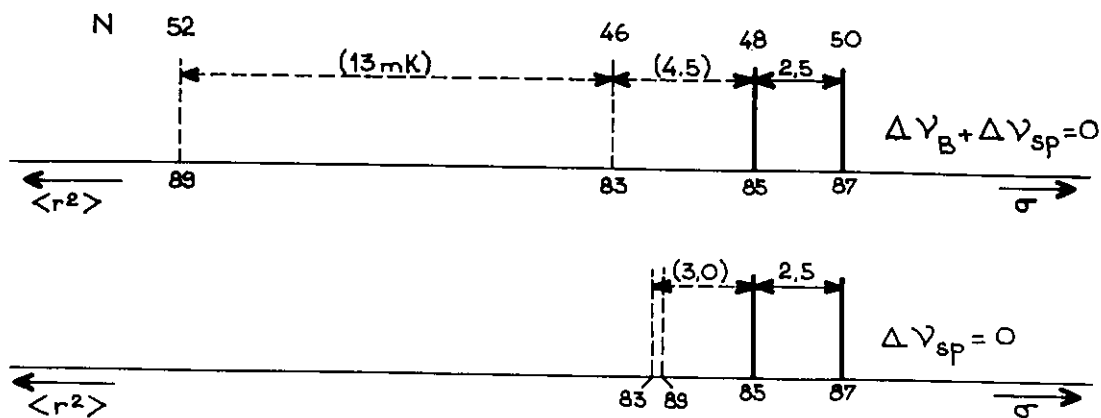


Fig. 11



D_2 , les composantes complexes B_2 (^{85}Rb) et A_2 (^{87}Rb) se présentent sous une forme parfaitement symétrique (fig.2 et fig.4), aux erreurs de pointés près ($\pm 0,05$ mK). Cela est dû au fait que les distances entre les composantes hyperfines 7, 8, 9 (B_2) d'une part et 10, 11, 12 (A_2) d'autre part sont d'un ordre de grandeur inférieur à la largeur des raies émises par la source. Connaissant la fonction d'appareil, grâce au profil pur de la composante C de la raie D_1 (fig.4) ainsi que les structures hyperfines relatives aux deux isotopes 85 et 87 du niveau $^2P_{3/2}$ (mesures très précises par résonance de B. SENITZKY et I.I. RABI [14]), nous avons calculé la différence Δ entre le centre de gravité des composantes complexes B_2 et A_2 et l'axe de symétrie (en pointillé) de ces deux composantes complexes (fig.6 et fig.7). Les courbes de la fig.8 résument le résultat de ce calcul: l'erreur commise $\Delta \sim 0,01$ mK pour les largeurs de raie variant de 14 à 20 mK reste toujours inférieure aux erreurs de pointe ($\pm 0,05$ mK) et reste donc indécélable sur nos enregistrements. Ce calcul a été effectué point par point à l'aide d'un ordinateur UNIVAC 1106. Ceci nous a permis d'essayer un certain nombre de fonctions d'appareil, en particulier l'étude de l'influence des "pieds", ainsi que la présence simulée d'une faible autoabsorption. Dans tous ces cas, la conclusion obtenue est la suivante: l'erreur commise

sur l'évaluation du centre de gravité par rapport à l'axe de symétrie des composantes reste toujours inférieure à 0,01 mK.

En résumé, la mesure de la distance entre les axes de symétrie des composantes B_2 et A_2 fournit directement la distance entre les centres de gravité des composantes complexes B_2 et A_2 : la correction Δ à effectuer étant de $2 \times 0,01 \text{ mK} = 0,02 \text{ mK}$. Cette conclusion reste valable, même en présence d'un taux d'autoabsorption pas trop élevé, ce que nous avons vérifié expérimentalement en enregistrant la raie D_2 à l'aide de courant dans la source s'élevant jusqu'à 50 mA. Cette circonstance favorable permet donc l'enregistrement de la raie D_2 avec un excellent rapport signal/bruit (fig. 5); elle explique également les résultats étonnants obtenus par Kopfermann et Kruger dès 1936, mais avec une précision moindre, il est vrai.

Tableau II

Composantes hyperfines	Intensités théoriques	Composantes complexes	Intensités théoriques (composantes complexes)	Intensités observés	
				Cathode creuse	Jet en émission
1	0,031	1 } 2 } A ₁ 3 }	0,624	0,63±0,05	0,52±0,03
2	0,156				
3	0,437				
4	0,123	4 } 5 } B ₁ 6 }	1,555	1,50±0,05	1,12±0,07
5	0,432				
6	1,000				
7	0,333	7 } 8 } B ₂ 9 }	1,111	1,07±0,05	0,90±0,1
8	0,432				
9	0,346				
10	0,062	10 } 11 } A ₂ 12 }	0,374 ^a	0,374 ^a	0,374 ^a
11	0,156				
12	0,156				

a: standard interne

Tableau III

Rapport des composantes	Théorie	Rapports observés	
		cathode creuse	jet atomique
$(B_1+B_2)/(A_1+A_2)$	2,59	$2,6 \pm 0,2$	$2,28 \pm 0,15$
A_1/A_2	1,66	$1,70 \pm 0,1$	$1,38 \pm 0,08$
B_2/A_2	2,87	$2,85 \pm 0,15$	$2,4 \pm 0,3$
B_1/A_2	4,02	$4,0 \pm 0,2$	$3,0 \pm 0,2$
B_1/B_2	1,40	$1,40 \pm 0,1$	$1,25 \pm 0,11$
B_1/B_2 (enrichi)	1,40	$1,35 \pm 0,05$	-----

III - 3. Détermination du déplacement isotopique $^{85}\text{Rb} - ^{87}\text{Rb}$.

Par définition, le déplacement isotopique mesuré dans une transition comportant des isotopes de masses impairs, est la distance séparant les centres de gravité des structures hyperfines relatives à chacun des isotopes. Dans le cas du rubidium nous disposons des données très précises, obtenues par resonance magnétique, à la fois sur les structures hyperfines de l'état fondamental $^2S_{1/2}$ [15] et des états excités $^2P_{1/2}$ $^2P_{3/2}$ [16] ^{il} est donc facile de calculer la relation entre la distance des centres de gravité des composantes complexes B_2 et A_2 et le déplacement isotopique $\Delta \nu(85-87)$. Tout calcul fait on trouve:

$$\Delta \nu(85-87) = d - (80,05 \pm 0,01 \text{ mK})$$

La distance d étant la distance mesurée expérimentalement. A cette fin, nous avons utilisé trois étalons Fabry- Perot d'épaisseurs différentes correspondant respectivement à 317, 357 et 457 mK d'intervalle spectral libre. La finesse reflectrice de cet étalon est de l'ordre de 90, la surface utilisée sur l'étalon est de 1 cm^2 environ. Le nombre total de mesure est de 70, ce qui nous a donné le résultat suivant:

$$d = 82,54 \text{ mK} \pm 0,1 \text{ mK}$$

L'erreur donnée $\pm 0,1 \text{ mK}$ correspond à l'erreur quadratique moyenne $\sigma = (\sum_i (x_i - \bar{x})^2 / n)^{1/2}$. Tenant compte de la correction Δ de l'ordre de

0,02 mK il vient:

$$\Delta\nu(85-87) = (82,54 + 0,02) \text{ mK} - 80,05 = 2,51 \text{ mK}$$

Finalement on obtient:

$$\Delta\nu_m(85-87) = 2,51 \text{ mK} \pm 0,1 \text{ mK}$$

Compte tenu de l'erreur admise, ce résultat reste, d'une part, encore compatible avec celui de Beacham et Andrew ($2,68 \pm 0,1 \text{ mK}$) et, d'autre part, montre qu'il n'y a pas différence sensible entre les déplacements isotopiques des niveaux ${}^2P_{1/2}$ et ${}^2P_{3/2}$.

IV - INTERPRETATION DU DEPLACEMENT ISOTOPIQUE.

1. - Rappelons que le déplacement isotopique mesuré $\Delta \nu(85-87)$ est la somme de trois termes:

$$\Delta \nu_m(85-87) = \Delta \nu_v + \Delta \nu_B + \Delta \nu_{sp}$$

où $\Delta \nu_v$ représente l'effet de volume due à la variation de $\langle r^2 \rangle$ lorsque l'on passe d'un isotope à l'autre. $\Delta \nu_B$ est l'effet du Bohr normal: ($\Delta \nu_n = 1,89$ mK pour $\lambda = 7800 \text{ \AA}$), enfin $\Delta \nu_{sp}$ est l'effet spécifique de masse.

Tenant compte de la valeur mesurée (+ 2,51 mK) on obtient:

$$\Delta \nu_v = (2,51 - 1,89)\text{mK} - \Delta \nu_{sp} = + 0,62 \text{ mK} \pm 0,1 \text{ mK} - \Delta \nu_{sp}$$

S'il est possible de montrer que l'effet spécifique de masse $\Delta \nu_{sp}$ est négatif, on pourrait en conclure que $\Delta \nu_v$ est surement positif, ce qui équivaudrait à montrer que la valeur moyenne du carré de la distribution des charges $\langle r^2 \rangle$ se trouve inversée lorsque l'on passe de l'isotope le plus léger au plus lourd, c'est à dire que l'on a: $\langle r^2 \rangle_{85} > \langle r^2 \rangle_{87}$.

2. - Signe de $\Delta \nu_{sp}$.

Pour évaluer $\Delta \nu_{sp}$ nous disposons de deux voies. L'une est représentée par l'inégalité empirique donnée par BRUCH et al. [17]:

$|\Delta u_{sp}| \leq 1,4 \Delta u_B$; l'autre est de considérer la valeur théorique calculée par J. BAUCHE [18] et trouvée égale à $-1,6$ mK.

Etant donné la faible valeur de l'effet total observé, l'utilisation soit de l'inégalité de BRUCH et al', soit de la valeur théorique entraîne une incertitude trop grande dans la détermination de Δu_v . C'est pourquoi nous proposons le processus suivant: dans le cas du Strontium, l'effet spécifique de masse Δu_{sp} est connu [17] et trouvé égal $-0,10$ mK pour la transition $^2S_{1/2} - ^2P_{3/2}$, et ceci pour une différence de deux unités de masse. Or la raie D_2 correspond à la même séquence isoélectrique que celle du Sr II ($\lambda=4077$ $^2S_{1/2} - ^2P_{3/2}$). D'après les règles générales, gouvernant les effets spécifiques de masse, on peut en déduire que Δu_{sp} de la raie D_2 du rubidium est également négatif et du même ordre de grandeur.

3) Relations entre les déplacements isotopique relatif et les variations des énergies de liaison par nucléon [6].

Les courbes de la fig.9 représentent respectivement les variations des énergies de liaisons (E en Kev) par nucléon [19] en fonction du nombre de neutrons dans le cas du strontium et du rubidium.

Pour ces deux éléments E est maximum pour N=50 (couche complète). Si l'on suppose, a priori, que le rapport $\delta_{13} < r^2 > / \delta_{12} < r^2 >$ de la variation du carré moyen de la distribution des charges, lorsque l'on passe des isotopes N-4 à N(N=50), est égal au rapport de la variation des énergies de liaisons, il devrait être possible de vérifier cette hypothèse, par le calcul de l'effet spécifique de masse. Les données de la fig. 10 dues au travail de HEILIG [20] sur les raies de resonances du strontium II permet d'effectuer cette vérification.

En effet on peut écrire:

$$\begin{aligned} \Delta v_m(88-84) &= \Delta v_v(88-84) + (4/88.84)k = 12,4 \text{ mK} \\ \Delta v_m(86-88) &= \Delta v_v(86-88) + (2/88.86)k = 5,8 \text{ mK} \end{aligned} \quad (1)$$

D'après notre hypothèse on a:

$$\rho_v = \frac{\Delta v_v(88-84)}{\Delta v_v(88-86)} = \frac{E_{88} - E_{84}}{E_{88} - E_{86}} = \frac{8732,7 - 8677,7}{8732,7 - 8706,7} = 2,28$$

Compte tenu de l'incertitude sur les énergies de liaisons E de l'ordre de $\pm 0,1$ Kev on obtient $\rho_v = 2,28 \pm 0,03$.

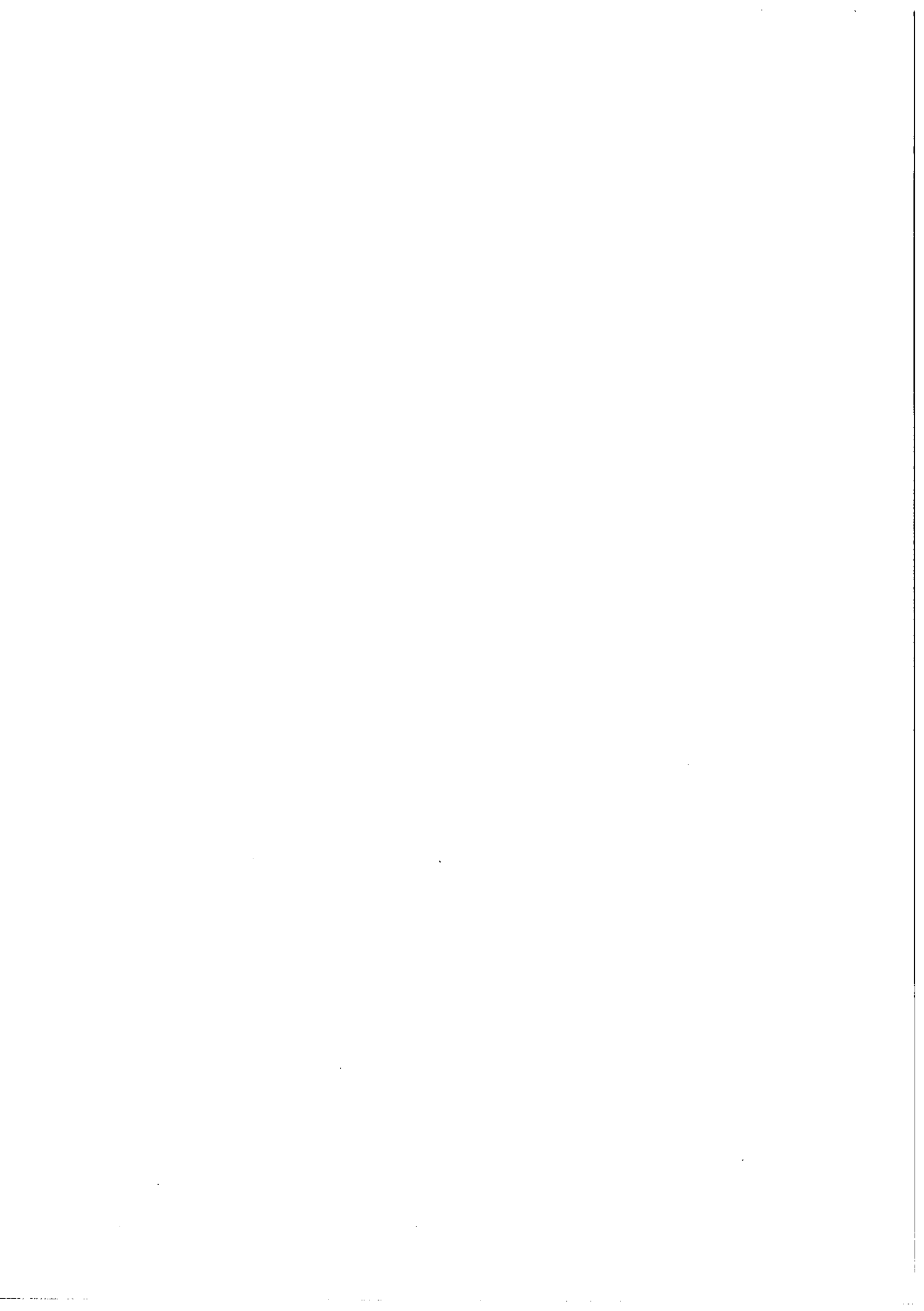
La résolution du système (1) donne $k = 13.500$ mK d'où

$$\Delta v_B(88-84) + \Delta v_{sp}(88-84) = + 7,24 \text{ mK}$$

Or $\Delta v_B(88-84)$ est égal à 7,2 mK pour la raie D_2 , il en résulte $\Delta v_{sp} \sim 0$. Cette conclusion suppose que les valeurs mesurées [20] sont connues avec une incertitude inférieure à 0,1 mK.

Il y a donc bon accord avec notre hypothèse et l'ordre de grandeur de l'effet spécifique de masse déduite des atomes muoniques (-0,1 mK). De plus, il y a bien inversion des rayons $\langle r^2 \rangle$ dans le cas du strontium [7] et les variations de $\langle r^2 \rangle$, sont bien en sens inverse de celles des énergies de liaisons.

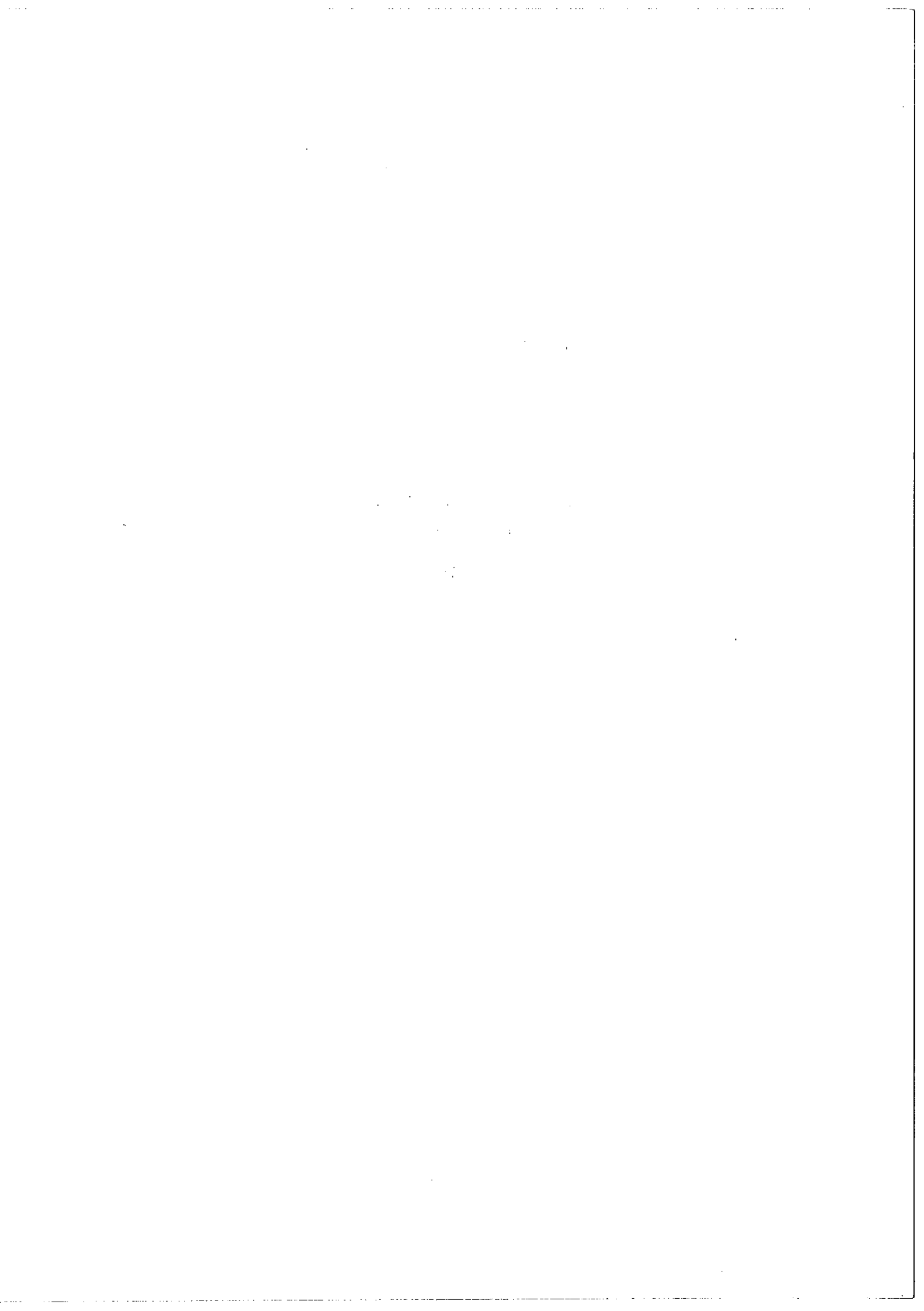
Dans le cas du rubidium, les variations des énergies de liaisons ont la même allure que dans le cas du strontium. Nous pouvons maintenant considérer 2 valeurs extrêmes de l'effet spécifique de masse dans la raie D_2 : l'une la valeur théorique calculée par J. BAUCHE égale à -1,6 mK (les valeurs théoriques sont en général trop grandes en valeur absolue), l'autre enfin $\Delta v_{sp} \approx 0$ par comparaison avec le strontium. La fig. 11 donne les positions relatives des trois isotopes N-4 (A=83 radioactif), N-2 et N(N=50) en fonction de l'effet spécifique de masse dans les deux cas limites $\Delta v_{sp} = 0$ et $\Delta v_{sp} + \Delta v_B = 0$ (dans ce cas $\Delta v_{sp} = -1,89$ mK). La position de l'isotope 89 radioactif (N=52) possédant deux neutrons en dehors de la couche complète est donnée à titre d'indication. Comme dans le cas du strontium, on devrait observer un "retournement" complet de la structure.



REFERENCES.

- [1] H. KOPFERMANN und H. KRÜGER,
Zeit. f. Physik, 103 (1936) 485.
- [2] T.H. DUONG, R. MARRUS and J. YELLIN,
Physics Letters 27B (1968) 565.
- [3] J.R. BEACHAM and K.L. ANDREW,
J.O.S.A. 61 (1971) 231.
- [4] H.M. GIBBS and G.G. CHURCHILL,
Bul.American Physical Society, 27 avril (1972).
- [5] G. BREIT
Review of Modern Physics, 30 (1958) 507.
- [6] S. GERSTENKORN,
C.R. Acad.Sc.Paris 268B (1969) 1636.
- [7] R.D. EHRLICH, D. FRYBERGER, D. JENSEN, C. NISSIM-SABAT, R.J. POWERS
V.L. TELEGDI and C.K. HARGROVE,
Phys. Rev. Letters, 18 (1967) 959.
- [8] R.J. CHAMPEAU et S. GERSTENKORN,
Physics Letters 26A (1968) 334.
- [9] P. JACQUINOT et Ch. DUFOUR,
Journal Recherches C.N.R.S., 6 (1948).
- [10] R. CHABBAL et P. JACQUINOT,
Revue d'optique, 1 (1968).

- [11] P. LUC,
Thèse, Orsay 1972.
- [12] H.T. DUONG, S. GERSTENKORN, J.M. HELBERT,
Revue Physique Appliquée 2 (1967) 249.
- [13] A. NIER,
Phys.Rev. 79 (1950) 450.
- [14] B. SENITZKY and I.I. RABI,
Phys.Rev. 103 (1956) 315.
- [15] S. PENSELIN, T. MORAN, V.W. COHEN and G.WINKLER,
Phys.Rev. 127 (1962) 524.
- [16] H. BUCKA, H. KOPFERMANN, M. RASIWALA und H. SCHÜSSLER,
Zeit. f. Physik 176 (1963) 45.
- [17] R. BRUCH, K. HEILIG, D. KALETTA, A. STEUDEL and D. WENDLANDT,
Journal de Physique C₁, 30 (1969) 51.
- [18] J. BAUCHE,
Thèse, Orsay 1969.
- [19] A.H. WAPSTRA and N.B. GOVE,
Nuclear Data, Atomic Mass Table (1971).
- [20] K. HEILIG,
Zeit.f.Physik 161 (1961) 252.



Service de Reprographie
C.N.R.S.
Gif