

N° d'ordre :

THÈSE

DE DOCTORAT D'ÉTAT ÈS-SCIENCES PHYSIQUES

PRÉSENTÉE À L'UNIVERSITÉ DE PARIS-SUD

CENTRE D'ORSAY

PAR

Claude MORILLON

LABORATOIRE AIMÉ COTTON

C. N. R. S.

POUR OBTENIR

LE GRADE DE DOCTEUR ÈS-SCIENCES

ETUDE EXPERIMENTALE A HAUTE RESOLUTION DANS L'INFRAROUGE
ET INTERPRETATION THEORIQUE DES SPECTRES ATOMIQUES DU
SELENIUM, DU BROME, DU TELLURE ET DE L'IODE.

SOUTENUE LE

DEVANT LA COMMISSION D'EXAMEN

M. P. JACQUINOT..... : Président
MM. J. L. COJAN }
J. BLAISE..... } Examineurs
R. LENNUIER..... }
S. LOWENTHAL..... }

P L A N

I. <u>INTRODUCTION</u>	1
II. <u>CONSIDERATIONS EXPERIMENTALES ET ANALYSE DES SPECTRES</u>	
II-1. <u>Les sources de lumières</u>	5
II-1-A Causes d'élargissement et de déplacement des raies	5
II-1-B Qualités des sources de lumière	9
II-1-C Lampes à décharge sans électrodes	12
II-1-D Autres sources pour études infrarouges à haute résolution	20
II-1-E Utilisation de sources à décharges pulsées	21
II-1-F Extension de l'observation infrarouge au-delà de 4 μm	23
II-2. <u>La spectrométrie par transformation de Fourier (S.T.F.)</u>	
II-2-A Présentation	27
II-2-B Rappels sur le principe de la méthode	28
II-2-C Description de l'interféromètre	32
II-2-D Calcul du spectre par transformation de Fourier de l'interférogramme	34
II-2-E Bruit dans le spectre calculé	36
II-2-F Raies fantômes ("ghosts")	43

II-3.	<u>Méthode expérimentale et traitement de</u>	
	<u>l'information</u>	45
II-3-A	Obtention du spectre	45
II-3-B	Mesure des nombres d'ondes et de l'intensité	
	des raies	46
II-3-C	Précision sur les mesures	48
II-4.	<u>Interprétation des résultats expérimentaux</u>	55
II-4-A	Niveaux d'énergie	56
II-4-B	Etude paramétrique du couplage intermédiaire	
	et du mélange des configurations	57
II-4-C	Etude paramétrique de structure hyperfine	61
III.	<u>RESULTATS</u>	
III-1.	<u>Analyse et synthèse des résultats</u>	65
III-1-A	Classification et analyse des spectres	66
III-1-B	Observation et analyse des raies interdites ..	74
III-1-C	Structure hyperfine des niveaux atomiques	80
	<u>BIBLIOGRAPHIE</u> du Chapitre II et du Paragraphe III-1	87
III-2.	<u>Classification du Spectre d'Arc du Sélénium (Se I)</u>	
	entre 3 900 et 11 844 cm^{-1}	(P1)
	C. MORILLON et J. VERGÈS, Physica Scripta,	
	<u>10</u> , 227 (1974).	
III-3.	<u>Observation et Classification du Spectre d'Arc du</u>	
	<u>Tellure (Te I)</u> entre 3 678 et 11 761 cm^{-1}	(P2)
	C. MORILLON et J. VERGÈS, Physica Scripta, à paraître.	

- III-4. Etude de la transition "interdite" $^2P_{1/2} \rightarrow ^2P_{3/2}$
 de la configuration $ns^2 np^5$ dans le brome et
 l'iode par Spectrométrie de Fourier (P3)
 E. LUC-KOENIG, C. MORILLON et J. VERGÈS
 Physica, 70, 175 (1973).
- III-5. Etude des configurations fondamentales $5s^2 5p^4$
 de Te I et I II par l'observation des raies
 multipolaires infrarouges (P4)
 C. MORILLON et J. VERGÈS, Physica Scripta, à paraître.
- III-6. Etude expérimentale et théorique de l'Iode atomique :
 Observation du spectre d'arc infrarouge,
 classification et structure hyperfine (P5)
 E. LUC-KOENIG, C. MORILLON et J. VERGÈS,
 Physica Scripta, à paraître.

PUBLICATIONS présentées en Annexe :

- A1 : Etude des spectres d'émission du samarium, du néodyme et de
 l'uranium entre 2.3 et 4.1 μm avec un spectromètre à grilles.
 C. MORILLON
 Spectrochim. Acta, 25B, 513 (1970).
- A2 : Etude des spectres d'émission atomique du néon et du xénon
 entre 3.5 et 5.5 μm à l'aide d'un spectromètre à grilles.
 C. MORILLON
 Spectrochim. Acta, 27B, 527 (1972).

I. INTRODUCTION

INTRODUCTION

Les métalloïdes, et plus généralement les éléments de la série p dont les configurations fondamentales sont du type $ns^2 np^N$, sont parmi les premiers atomes dont les spectres ont été observés. Dès 1930 les spectres ultraviolets et visibles de beaucoup d'entre eux avaient été obtenus. Il est étonnant de constater que pour la plupart des éléments lourds de cette série aucune observation plus précise n'ait eu lieu depuis et que la classification de leur spectre soit particulièrement incomplète, sinon à peine ébauchée. Si pour le polonium et l'astate les difficultés expérimentales qui résultent de leur radioactivité sont une explication suffisante, pour les autres il faut invoquer d'autres raisons. La première provient de la distribution des niveaux d'énergie du spectre d'arc qui fait que les raies les plus intenses se trouvent dans l'ultraviolet à vide et dans l'infrarouge photoélectrique. Une autre raison est liée aux problèmes de couplage intermédiaire et de mélange des configurations qui rendent très complexes l'analyse et la classification de ces spectres.

Il nous a semblé que nous disposions au Laboratoire Aimé Cotton des outils qui avaient manqué jusqu'à maintenant pour étudier ces spectres et faire progresser leur classification. La spectrométrie de Fourier

est devenue un puissant moyen d'investigation du domaine spectral infrarouge, révolutionnaire par sa nature, mais surtout par ses résultats. En ce qui concerne l'analyse et l'interprétation théorique des spectres, les méthodes semi-empiriques fondées sur les travaux de RACAH ont été largement développées ; elles sont parvenues à un haut degré de perfection et se sont révélées particulièrement fructueuses.

Le sélénium, le brome, le tellure et l'iode ont retenu notre attention pour les raisons qui viennent d'être exposées, mais également à cause des raies interdites dues à l'émission de rayonnements dipolaire magnétique et quadrupolaire électrique correspondant à des transitions entre les niveaux de la configuration fondamentale. Plusieurs éléments de la série p ont déjà donné lieu à de telles observations dans les régions visibles et ultraviolettes du spectre, la plus connue étant celle de la raie verte aurorale du spectre d'arc de l'oxygène. Nous avons entrepris l'observation systématique de ces raies multipolaires dans l'infrarouge à l'aide de la Spectrométrie de Fourier. Les raies interdites jouent un grand rôle dans l'étude spectrale des objets célestes, nébuleuses et étoiles, et en particulier dans le soleil, et les astrophysiciens ont besoin de disposer des valeurs précises des probabilités de transition. Des estimations théoriques des probabilités de transition dipolaire magnétique et quadrupolaire électrique ont été faites, mais nécessitent des vérifications expérimentales en laboratoire. Très peu de raies interdites observées dans les astres sont observables en laboratoire ; des études précises, même sur des raies qui ne sont pas observées par les astrophysiciens ou qui ne l'ont pas encore été, sont utiles pour tester les résultats théoriques. Enfin l'étude infrarouge

de ces raies multipolaires permet d'effectuer des mesures précises de grandeurs telles que l'énergie, le facteur de Landé et les constantes de structure hyperfine des niveaux des configurations fondamentales. Ces grandeurs ne peuvent être atteintes que dans l'ultraviolet lointain, donc avec une précision beaucoup moins bonne, par l'observation des transitions "permises" entre la configuration fondamentale et les configurations excitées.

En ce qui concerne la structure hyperfine des niveaux atomiques, l'étude des métalloïdes lourds est intéressante car on prévoit que les effets relativistes et les perturbations dues aux mélanges avec les configurations lointaines seront importants. La généralisation récente de la théorie en ce qui concerne les effets des configurations lointaines sur des configurations $n\ell^N n'\ell'$, montre que ce problème est complexe. Pour les éléments de la série p, avec les configurations $ns^2 np^N$ et $ns^2 np^{N-1} n'\ell$, la complexité semble moins grande que pour les éléments des séries de transition (séries d) ou pour les lanthanides et actinides (séries f). Par ailleurs, pour le tellure et l'iode dont le numéro atomique est supérieur à 50, on s'attend à d'importants effets relativistes pour lesquels la méthode nouvelle du potentiel paramétrique donne des éléments de comparaison avec les résultats expérimentaux particulièrement intéressants.

Ce mémoire se divise en deux parties bien distinctes. La première est constituée par un exposé général des méthodes et des techniques expérimentales et théoriques que j'ai utilisées. Beaucoup des sujets abordés sont traités de façon plus détaillée et précise dans des articles spécialisés dont on trouvera les références dans le texte.

Dans la deuxième partie, après une présentation synoptique et une analyse des résultats obtenus, ceux-ci sont exposés sous la forme de cinq publications. Les résultats expérimentaux et leurs interprétations théoriques sont accompagnés de rappels assez importants sur les différents sujets traités. En ce qui concerne l'étude des raies "interdites" multipolaires des calculs non publiés sont donnés en annexe.

II. CONSIDERATIONS EXPERIMENTALES
ET ANALYSE DES SPECTRES.

II-1 LES SOURCES DE LUMIERE .

La spectrométrie à haute résolution, rendue possible dans l'infrarouge grâce à la méthode de spectrométrie par transformation de Fourier (S. T. F.), ne peut être développée que si des sources de lumière donnant des raies très fines sont disponibles. C'est pourquoi nous allons rappeler les causes d'élargissement des raies émises par une source. Nous verrons que, simultanément, certains déplacements peuvent être observés, qui limitent la précision avec laquelle sont mesurés les nombres d'ondes, et par conséquent l'énergie des niveaux.

II-1-A CAUSES D'ELARGISSEMENT ET DE DEPLACEMENT DES RAIES [1].

La largeur naturelle de la raie est due au processus de rayonnement lui-même et est étroitement liée à la durée de vie de l'atome dans les états initial et final de la transition. C'est une grandeur intrinsèque de l'atome isolé. Cette largeur est le plus souvent négligeable devant d'autres causes d'élargissement tels que l'effet Doppler, l'effet de pression et l'effet Stark dont l'importance peut varier suivant le type de source considéré

a) L'élargissement par l'effet Doppler est une conséquence directe du mouvement des atomes, et est donc lié à la température absolue de la

source par la relation :

$$\delta\sigma = 7.16 \times 10^{-7} \times \sigma \times \sqrt{\frac{T}{M}}$$

où σ est le nombre d'ondes de la raie, T la température absolue, et M le nombre de masse de l'émetteur, c'est-à-dire de l'atome considéré. Si les raies émises par l'atome au repos sont considérées comme quasi-monochromatiques, c'est-à-dire si la largeur naturelle et l'élargissement dû à d'autres causes sont négligés, la distribution de l'intensité suit une loi de Gauss, à condition que les vitesses des atomes suivent une distribution de Maxwell. On remarque que $\delta\sigma$ est proportionnel à σ , ce qui montre, de ce point de vue, qu'il est plus favorable de travailler dans l'infrarouge que dans le visible, et à plus forte raison dans l'ultraviolet quand il s'agit d'études à haute résolution, de structure hyperfine par exemple.

L'élargissement Doppler peut être réduit en refroidissant la source; les lampes utilisant une décharge dans une cathode creuse se prêtent bien à cette technique (lampe de Schüller à l'origine).

Sauf dans des cas très particuliers dont nous ne ferons pas état ici, on peut admettre avec une bonne approximation que l'axe de la gaussienne n'est pas déplacé par rapport à la raie quasi monochromatique émise par l'atome au repos.

b) Elargissement par pression et par effet Stark.

L'élargissement par pression est dû aux perturbations exercées sur l'émetteur par les particules environnantes, atomes ou molécules.

L'interaction entre l'émetteur et les perturbateurs dépend de la nature de ceux-ci. Lorsque se trouvent en présence deux atomes identiques, l'un dans l'état fondamental et l'autre dans un état excité, et s'il existe une transition forte entre ces deux états (raie de résonance), ces 2 atomes peuvent échanger de l'énergie, ce qui donne naissance au phénomène d'élargissement par résonance (voir, par exemple, KUHN, OMONT [1]).

Le type d'interaction le plus général entre 2 atomes neutres, et en particulier entre 2 atomes de nature différente (élargissement par des atomes étrangers) est dû à des forces qui dérivent d'une énergie potentielle en $\frac{1}{r^6}$ (forces de Van der Waals, ou de London), en première approximation.

On peut enfin citer l'élargissement dû aux particules chargées présentes dans la décharge. L'effet Stark produit par ces charges électriques, peut être important dans les sources où des densités de courant importantes sont employées.

Dans les sources à basse pression qui sont utilisées pour les études à haute résolution la théorie classique de l'élargissement par collision (approximation d'impact) établie par LORENTZ, puis développée par WEISSKOPF, est généralement admise, et s'applique quel que soit le type de potentiel d'interaction. Cette théorie a été ensuite affinée (voir par exemple FOLEY [1]) et décrit finalement le profil obtenu à partir d'une radiation quasi-monochromatique par une fonction de Lorentz de la forme :

$$I(\Delta\omega) = \frac{(1-A)/\pi\tau_0}{[(1-A)/\tau_0]^2 + [B/\tau_0 - \Delta\omega]^2} .$$

Cette expression de la forme de raie donne une largeur à mi-hauteur $\gamma = 2(1-A)/\tau_0$ et un déplacement

du centre de la raie $\beta = B/\tau_0$; ces 2 quantités sont proportionnelles à la densité n des atomes.

Les constantes A et B sont calculées à partir du potentiel d'interaction en $\frac{c}{r^p}$; τ_0 est le temps moyen entre 2 collisions.

On montre que dans le cas de l'élargissement par résonance il n'y a pas de déplacement du centre de la raie ; dans les autres cas, en particulier pour l'élargissement par un gaz étranger, ce déplacement n'est pas nul, et le rapport $\frac{\beta}{\gamma}$, pour une loi en $\frac{c}{r^p}$ est donné par l'expression :

$$\frac{\beta}{\gamma} = \frac{1}{2} \cotg \left[\frac{p-3}{2(p-1)} \cdot \pi \right] .$$

Il est particulièrement intéressant de remarquer que le rapport du déplacement à l'élargissement est indépendant de la pression, et dépend seulement de la forme de la loi d'interaction.

Pour la loi en $\frac{1}{r^6}$ qui correspond à l'interaction de Van der Waals entre atomes différents, le rapport $\frac{\beta}{\gamma}$ vaut 0.363 . Ce rapport a été mesuré par plusieurs auteurs [1] sur des raies d'émission atomique élargies par différents gaz. Les résultats varient entre 0.16 et 0.77, de telle sorte qu'on ne peut pas dire que la loi en $\frac{1}{r^6}$ soit vérifiée. Toutefois la moyenne des rapports expérimentaux est très voisine de la valeur théorique 0.363 .

Ces rappels sur la théorie de l'élargissement par pression montrent à quel point il nous faut être prudent dans la précision annoncée des nombres d'ondes et de l'énergie des niveaux, car des élargissements par

pression de 0.010 cm^{-1} , qui sont fréquents, laissent supposer des déplacements pouvant atteindre 0.003 ou 0.004 cm^{-1} .

II-1-B LES QUALITES DES SOURCES.

De nombreux travaux sont publiés chaque année, portant sur l'étude des performances des sources de lumière, ou sur leur amélioration. Toutefois les qualités recherchées sont très différentes suivant leur utilisation. En particulier de nombreuses études effectuées pour l'analyse spectrochimique ont permis de mettre au point des sources donnant des raies de résonance, ou raies "ultimes", très intenses. On peut citer à ce sujet l'utilisation du laser de puissance pour effectuer la vaporisation d'une très petite fraction du matériau à analyser ; l'excitation des atomes est généralement complétée par une étincelle entre 2 électrodes.

Pour être utilisées à l'observation photoélectrique de spectres infrarouges, les sources doivent présenter un certain nombre de qualités bien particulières.

a) Excitation efficace de niveaux dans un large domaine d'énergie.

La puissance rayonnée, à force de raie constante, étant proportionnelle au nombre d'ondes élevé à la puissance 4 pour l'émission spontanée de raies dipolaires électriques, il est indispensable de disposer de sources particulièrement intenses au fur et à mesure que l'on s'éloigne du visible vers l'infrarouge moyen. De plus, la détermination des niveaux

d'énergie nécessite évidemment que ces niveaux donnent lieu à des transitions observables, d'où le souci de détecter le plus grand nombre de raies, faisant intervenir aussi bien des niveaux faiblement excités que des niveaux dont l'énergie est proche de la limite d'ionisation. Ces derniers donnent généralement des transitions faibles.

b) Des sources continues, stables et de grande durée de vie.

Dans le cas des spectromètres infrarouges, spectrométrie classique à fentes, ou S. I. S. A. M. (Spectromètre interférentiel à sélection pour l'amplitude de la modulation [2]), ou spectromètre à grilles [3, A1, A2], les spectres sont enregistrés élément spectral par élément spectral ; ceci nécessite des sources continues, assez stables et qui durent suffisamment longtemps pour permettre l'exploration de régions spectrales étendues (quelques dizaines d'heures). La méthode de spectrométrie par transformation de Fourier (S. T. F.), dans l'état actuel des interféromètres et de l'électronique utilisés, non seulement nécessite des sources continues pouvant fonctionner quelques heures, mais exige une très bonne stabilité pour obtenir des spectres à haute résolution avec un bon rapport signal sur bruit.

c) Des raies fines et peu déplacées.

Etant données les causes d'élargissement et de déplacement exposées au paragraphe précédent, le choix de la source dépendra de ses possibilités de refroidissement et de fonctionnement à basse pression avec des densités de courant faibles. Ces différentes exigences sont rarement

compatibles avec la nécessité d'une émission intense, et un compromis doit être accepté suivant la nature des études effectuées : classification, étude de structure hyperfine, déplacement isotopique, etc... .

d) Etendue de faisceau.

L'avantage du spectromètre à grilles ou du S. I. S. A. M. par rapport aux spectromètres à fentes vient de leur plus grande luminosité qui est liée à la plus grande étendue de faisceau qu'ils acceptent. Des sources permettant d'utiliser pleinement cet avantage sont nécessaires, ce qui pose quelques problèmes dans certains cas [A1]. Dans le cas de la S. T. F., le gain ne réside pas uniquement dans l'augmentation de l'étendue de faisceau ; toutefois l'adaptation de l'étendue de faisceau des sources à l'étendue des interféromètres peut présenter des difficultés dans le cas d'une source de lumière très ponctuelle.

e) Excitation sélective d'un spectre.

Lorsqu'il est possible d'exciter soit le spectre d'arc, soit le spectre d'étincelle, le travail de classification est évidemment simplifié. Le processus d'excitation des atomes est complexe dans la plupart des sources. Toutefois plus l'énergie d'excitation est forte, c'est-à-dire par exemple plus la différence de potentiel qui sert à accélérer les ions est grande, et plus l'énergie des niveaux excités sera élevée, donc plus on atteindra de niveaux des spectres ionisés.

Un autre facteur intervient, qui est la densité d'atomes présents dans la source. Pour une assez forte densité, le libre parcours moyen est insuffisant pour que les ions acquièrent une énergie suffisante ; les raies du spectre d'arc sont intenses alors que le spectre d'étincelle est faible ou tout à fait absent. Sans changer les conditions d'excitation, en diminuant la pression on peut quelquefois observer un changement très net de régime et obtenir une augmentation de l'intensité des raies du spectre d'étincelle par rapport à celle des raies du spectre d'arc.

II-1-C LAMPES à DECHARGE SANS ELECTRODES. (E. D. L. : abréviation classique du terme anglo-saxon "électrodeless discharge lamp").

Parmi les sources de lumière employées en spectroscopie, les lampes sans électrodes excitées en haute fréquence, et les lampes à cathode creuse sont le plus fréquemment utilisées. Pour l'observation infrarouge photoélectrique, les E. D. L. ont jusqu'à maintenant été les seules utilisées, à quelques exceptions près. Ces lampes conviennent bien car elles émettent des raies intenses, faisant intervenir des niveaux dans un grand domaine d'énergie ; c'est leur avantage important sur les cathodes creuses, il est déterminant ; elles sont d'un emploi très commode et permettent quelquefois de sélectionner les spectres d'arc ou d'étincelle. Enfin elles ne nécessitent que de très faibles quantités de matière. Les points faibles des E. D. L., par rapport aux lampes à cathode creuse, sont leur moins bonne stabilité et leurs raies plus larges, ceci étant dû à la difficulté de refroidir le plasma par des réfrigérants tels que l'eau, l'azote ou

l'hydrogène liquide, etc... . L'élargissement par effet Doppler ne peut donc pas être facilement diminué avec ces sources, mais le fait que l'on travaille dans l'infrarouge rend cet inconvénient un peu moins grave. R. J. CHAMPEAU et al. [4] ont toutefois utilisé une lampe sans électrodes refroidie à l'azote liquide pour observer le spectre de O I .

Les sources que nous avons utilisées sont uniquement des lampes de type E. D. L., mais dont les caractéristiques peuvent être assez différentes suivant l'élément à exciter.

a) Rappel du principe des E. D. L. .

La préparation décrite par FRED et TOMKINS [5] est celle qui est généralement utilisée au Laboratoire Aimé Cotton où R. BARONNET et J. VERGÈS ont bien maîtrisé cette technique. Les sources sont constituées d'une ampoule en verre de silice très pure de 40 mm de longueur environ et dont le diamètre est compris entre 5 et 10 mm. Le point le plus important consiste à effectuer un dégazage très soigné de cette ampoule. Un système de pompage permettant de descendre à des pressions inférieures à 10^{-6} torr est nécessaire ; l'ampoule est chauffée au voisinage de 1000°C pendant le pompage qui dure au moins 24 heures. Ces précautions sont particulièrement indispensables lorsque la température de fonctionnement est élevée, comme c'est le cas pour les terres rares et les actinides pour lesquels cette température est voisine de 800°C .

De plus il faut éviter toute contamination de l'ampoule par la vapeur de graisse à vide des robinets ou des raccords ; un ou plusieurs pièges à azote liquide doivent être intercalés entre le banc de pompage

et la partie où se fabrique la source. Si la fabrication d'un composé est nécessaire, la réaction chimique en tube scellé a lieu sous vide dans cette partie du banc ; une petite quantité de matière de l'ordre de 1 mg, soit l'élément lui-même à l'état pur, soit un composé de cet élément, est ensuite sublimée sous vide dans l'ampoule ; puis l'ampoule est remplie ou non d'un gaz rare à une pression de l'ordre de quelques torrs ; elle est enfin scellée en fondant la silice.

L'excitation de la lampe est effectuée par un champ électromagnétique de haute fréquence, 2450 MHz, délivré en continu par un magnétron de 200 W (Philips 7090). La source se trouve dans une cavité en argent [6] calculée pour que le magnétron soit fermé sur son impédance caractéristique. Cependant, l'introduction de la source dans la cavité résonnante produit une variation de l'impédance en bout de ligne, ce qui introduit un taux d'onde stationnaire supérieur à un, qui détériore le magnétron. Pour éviter cet inconvénient et diminuer le taux d'onde stationnaire la sortie du magnétron et la cavité sont reliées par un câble coaxial possédant des pertes de manière à masquer les variations d'impédance de la charge. L'atténuation du câble utilisé est de l'ordre de 1dB/m , ce qui donne la moitié ou le quart de la puissance fournie par le générateur, soit 100 ou 50 watts, pour des câbles ayant respectivement 3 m ou 6 m de longueur.

Le générateur micro-ondes comprenant le magnétron et son alimentation a été étudié par la Société d'Etudes et de Fabrications Industrielles (E. F. I.). L'alimentation est stabilisée en tension, ce qui est une très nette amélioration par rapport au générateur Raytheon qui a été

longtemps utilisé pour l'excitation des E. D. L. dans plusieurs laboratoires. Le filtrage de l'alimentation a été amélioré de manière à supprimer le mieux possible la modulation à la fréquence de 100 Hz. Enfin la puissance totale rayonnée par la source peut être stabilisée ; à cet effet un photomultiplicateur reçoit une partie du flux émis et crée une différence de potentiel aux bornes d'une résistance de charge. Par comparaison à une tension constante on obtient un signal d'erreur qui, après amplification, est appliqué à l'alimentation haute tension du magnétron. Cette solution n'est pas complètement satisfaisante car le photomultiplicateur voit une partie du spectre visible alors que c'est le spectre infrarouge qui est étudié, toutefois une bonne stabilité de la source est ainsi obtenue, ce qui améliore considérablement le rapport signal sur bruit du spectre obtenu par S. T. F. . Ces deux améliorations, filtrage de la haute tension et stabilisation de la puissance lumineuse, ont été effectuées par J. VERGES.

b) Forme chimique du matériau.

Pour être excité dans les E. D. L. et donner lieu à un fonctionnement satisfaisant, le matériau doit présenter les propriétés suivantes : avoir une tension de vapeur au moins égale à 1 torr pour une température de fonctionnement comprise entre 100 et 800°C , avoir une vapeur monoatomique ou formée de molécules facilement dissociées dans la décharge, enfin il ne doit pas avoir une action corrosive sur le verre de l'ampoule qui le contient. Un certain nombre de renseignements sur la tension de vapeur des éléments et de leurs principaux composés sont donnés dans la littérature [7]. En ce qui concerne l'énergie de dissociation des

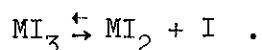
molécules il est plus difficile de trouver, ne serait-ce que des ordres de grandeur. Quant à l'attaque de l'ampoule par le matériau, l'emploi d'un verre de silice très pur réduit les risques au maximum. Toutefois les alcalins, les alcalino-terreux et certains cations provenant de la dissociation des molécules sont très actifs et posent des problèmes non résolus pour fabriquer des E. D. L. .

Si l'atome que l'on veut étudier possède sous sa forme d'élément les qualités énumérées plus haut, on peut l'utiliser à l'état pur. Si cet élément n'est pas gazeux, ou si sa tension de vapeur est inférieure à 1 torr à la température ordinaire, les tubes ont besoin d'être chauffés pour amorcer la décharge.

Pour les éléments très réfractaires tels que les lanthanides et les actinides, le problème consiste à trouver un composé volatil, dont la vapeur soit dissociée et qui n'attaque pas la silice. Les halogènes, et parmi eux les iodures, sont les plus employés. On fabrique donc un iodure de l'élément M en réduisant un oxyde de cet élément à l'aide de l'iodure d'aluminium. L'iodure obtenu est sublimé sous vide dans l'ampoule préalablement dégazée. La mise en service des lampes est effectuée en dissociant l'iodure par chauffage ; puis l'iode atomique est excité par le champ électrique. Il est quelquefois nécessaire de continuer à chauffer pour exciter l'élément M . Au bout d'un temps de fonctionnement qui peut varier entre quelques minutes et quelques heures, il y a suffisamment d'iode dissocié et qui le reste, pour que la lampe puisse être rallumée sans chauffage.

Certains éléments, comme l'uranium [8], le samarium [9], présentent

des valences multiples qui sont la cause d'un mauvais fonctionnement des E. D. L. . Pour le samarium par exemple, les valences 2 et 3 sont possibles. Les chaleurs de formation des 2 iodures correspondants sont comparables et il en résulte que la fabrication et le fonctionnement des sources sont délicats à cause de la réaction d'équilibre :



La décomposition de l'iodure de valence 3 en iodure de valence 2 libère de l'iode en excès qui tend à augmenter la pression. La transformation de SmI_3 en SmI_2 est facilement observable par le changement de couleur de la matière enfermée dans l'ampoule.

c) Difficultés de fonctionnement des E. D. L. .

Les E. D. L. ont quelquefois besoin d'être chauffées pour amorcer la décharge ; ensuite celle-ci se maintient d'elle-même à condition de contrôler la température pour conserver une pression stable. On sait que les régimes de la décharge sont très différents suivant la pression. On passe du spectre d'arc au spectre d'étincelle lorsque la pression baisse. Mais on observe alors, avec l'excitation du spectre d'étincelle une augmentation de la température, donc une augmentation de pression qui rétablit le spectre d'arc. Quoique cette description soit un peu schématique, on peut observer ces régimes oscillants entre 2 types d'excitation. La régulation de la température est effectuée par un courant d'air à la température du laboratoire. Une amélioration pourrait peut-être être apportée au fonctionnement de ce type de source avec un système de contrôle de la température plus élaboré.

Les difficultés qui viennent d'être décrites sont surtout observables lorsque l'élément pur, sans gaz porteur, est excité. C'est le cas du mercure, du sélénium [P1], du tellure [P2]. L'utilisation d'un gaz porteur comme le néon réduit les instabilités dues aux variations de température. Ce procédé a été utilisé dans le cas du tellure pour l'étude de l'effet Zeeman [P2]. Dans un champ magnétique la stabilité des E. D. L. est toujours moins bonne qu'en champ nul, quel que soit l'élément étudié, et des précautions très particulières doivent être prises.

La pression à l'intérieur des ampoules est difficile à apprécier. Pour les iodures de lanthanides et d'actinides dont la température de fonctionnement est élevée, de l'ordre de 800°C, la pression d'iode peut être suffisamment forte pour que l'élargissement qui en résulte soit du même ordre de grandeur ou plus important que l'effet Doppler. La largeur des raies est alors de l'ordre de 0.050 cm^{-1} dans l'infrarouge vers $7\ 000\text{ cm}^{-1}$, dont 0.030 cm^{-1} d'élargissement dû à la pression. De telles largeurs sont acceptables pour des observations à moyenne résolution dont le but est la mesure des nombres d'ondes des raies et ensuite la détermination de l'énergie des niveaux. Il faut toutefois se souvenir que dans ce cas des déplacements moyens de 0.01 cm^{-1} sont à craindre, ce qui est très supérieur à l'incertitude avec laquelle la mesure du nombre d'ondes d'une raie peut être faite par les techniques de pointé sur ordinateur [10] qui sont rappelées plus loin.

d) E. D. L. pour études à haute résolution.

Pour les études à haute résolution de structures hyperfines de

déplacement isotopique et d'effet Zeeman, qui sont maintenant possibles grâce à la spectrométrie de Fourier, il est nécessaire d'utiliser des sources donnant des raies plus fines.

Pour réduire la pression à une valeur aussi faible que possible, compatible avec le type de spectre à étudier, nous avons utilisé des sources constituées d'un tube en silice non scellé ; les ampoules sont reliées par un raccord pyrex-silice à un banc de pompage et à une réserve dont la température peut être maintenue constante, égale ou inférieure à celle du laboratoire (point froid). Pour éviter la contamination de l'ampoule par la graisse à vide du banc, des pièges à azote liquide et des robinets à pointeau en téflon sont utilisés. La pression peut être choisie de manière à obtenir la meilleure intensité compatible avec un élargissement par pression négligeable.

Ce type de source ne peut être utilisé que si l'on dispose d'éléments ou de composés qui ont une tension de vapeur au moins égale à 1 torr à la température ordinaire. Dans les cas du néon et du xénon [A2], de l'iode et du brome [P3, P4, P5], du tribromure de bore, ces sources ont été employées et ont donné de bons résultats. En particulier pour l'étude des raies interdites la pression est le facteur qui influe le plus sur l'intensité, et ces sources ont été d'un emploi très souple.

Pour les éléments réfractaires dont on ne connaît pas de composés très volatils, les sources excitées en haute fréquence, telles qu'elles viennent d'être décrites, ne sont pas utilisables pour les études infrarouges à haute résolution.

II-1-D AUTRES SOURCES POUR ETUDES INFRAROUGES à HAUTE RESOLUTION.

La cathode creuse [11] jusqu'à maintenant peu utilisée pour les observations infrarouges à cause de sa faible intensité, semble cependant une source intéressante pour des études à haute résolution par la S. T. F. . Ses possibilités de refroidissement, d'excitation à faible densité de courant et de fonctionnement à faible pression en font la meilleure source pour des études à haute résolution. Sa très grande stabilité permet, d'autre part, d'enregistrer des interférogrammes de longue durée, ce qui, joint à l'avantage multiplex de la S. T. F., compense sa faible intensité ; des spectres présentant un bon rapport signal sur bruit sont donc possibles à obtenir. Une mesure par spectrométrie de Fourier de la structure hyperfine des raies $\lambda = 11\,522\text{ \AA}^{\circ}$ ($2s_2 \rightarrow 2p_4$) et $\lambda = 15\,234\text{ \AA}^{\circ}$ ($2s_2 \rightarrow 2p_1$) du néon (^{21}Ne) a ainsi été effectuée par R. J. CHAMPEAU et al. [12].

Par ailleurs plusieurs modifications ont été apportées aux lampes à cathode creuse dans le but d'augmenter leur intensité. On peut citer la cathode de SULLIVAN et WALSH [13] dont la particularité consiste à utiliser une décharge pour produire la vapeur atomique par bombardement des parois internes de la cathode creuse, et une seconde pour exciter plus efficacement cette vapeur. Une version modifiée de ce type de lampe a également été décrite par R. M. LOWE [14]. Selon ces auteurs l'intensité des raies de résonance peut être augmentée de 10 à 100 fois sans une augmentation de la largeur de raie.

Un autre type de lampe à cathode creuse, où les fonctions

d'évaporation du métal et d'excitation de la vapeur sont séparées, utilise une excitation par un champ haute fréquence. Une comparaison a été effectuée par H. G. C. HUNAN et al. [15] entre ces 2 types d'excitations de la vapeur atomique, en continu ou en haute fréquence. Il semble que l'excitation en courant continu soit légèrement préférable. Ces auteurs indiquent toutefois que les raies sont légèrement plus larges que dans une cathode creuse classique.

Le gain en intensité, obtenu par une excitation annexe, semble varier suivant l'énergie du niveau supérieur de la transition. Les gains les plus forts sont obtenus sur les raies de résonance, et sur les raies faisant intervenir des niveaux très élevés.

Des lampes à cathode creuse utilisant un champ magnétique annexe ont également été décrites [16].

II-1-E UTILISATION DE SOURCES À DECHARGES PULSEES POUR LA SPECTROMETRIE PAR TRANSFORMATION DE FOURIER.

L'utilisation de sources dont l'excitation n'est pas continue ne peut être envisagée avec la S. T. F. qu'en apportant quelques modifications au fonctionnement actuel des interféromètres. L'échantillonnage de l'interférogramme se prête bien à l'utilisation de sources pulsées à condition que la fréquence des impulsions soit suffisamment grande pour que le temps d'enregistrement ne devienne pas prohibitif, et à condition que la reproductibilité des impulsions de lumière soit bonne. Le

fonctionnement pas à pas de l'interféromètre et celui de la source devront être commandés par la même horloge. Les différents moments d'une période s'enchaîneront par exemple de la façon suivante :

- 1) Stationnement de la différence de marche,
- 2) Déclenchement de l'impulsion électrique,
- 3) Intégration pendant la durée de l'impulsion lumineuse,
- 4) Déplacement du chariot.

On peut aussi envisager d'utiliser plusieurs impulsions par échantillon. Plusieurs types de sources pulsées ont déjà été décrits dans la littérature ; certains semblent donner une fréquence pouvant atteindre 100 Hz et une bonne reproductibilité des impulsions. Il s'agit, par ordre d'intérêt décroissant, des lampes à cathode creuse pulsées, décrites par LITZÉN [17], des arcs à étincelle glissante décrits par exemple par HOVIS [18], des tubes sans électrodes excités par un champ haute fréquence pulsé, de grande puissance, et du laser de puissance en déclenché volatisant une quantité de matière excitée par une étincelle [19].

Ces sources pourront être employées en particulier pour l'étude de matériaux très réfractaires, carbone, silicium, bore, etc... ou pour l'étude de spectres ionisés. Dans ce dernier cas toutefois, l'intérêt de l'observation infrarouge n'est pas évident ; en particulier plus l'ionisation augmente et plus la distance entre configurations est grande, ce qui repousse vers l'ultra-violet les transitions. Toutefois l'intérêt des raies interdites dues à des transitions au sein de la configuration fondamentale peut, par exemple, justifier l'emploi de sources de ce genre pour une observation infrarouge.

II-1-F EXTENSION DE L'OBSERVATION INFRAROUGE AU-DELA DE 4 μm .

Les premières observations infrarouges ont été effectuées au Laboratoire Aimé Cotton par J. VERGÈS, avec un spectromètre de type SISAM [2], dont la limite de résolution était de l'ordre de 250 mK, pour mesurer les nombres d'ondes des raies et déterminer les énergies des niveaux. Ces mesures ont pu être faites entre 12 000 et 4 000 cm^{-1} . Au-dessous de 4 000 cm^{-1} , la très forte absorption de la vapeur d'eau entre 4 000 et 3 400 cm^{-1} oblige à travailler sous vide. D'autre part, la séparatrice et la compensatrice étaient toutes deux en verre de 10 mm d'épaisseur, de telle sorte que le faisceau devait traverser 30 mm d'épaisseur de verre et, de ce fait, le spectromètre était pratiquement opaque au-dessous de 3 500 cm^{-1} ($\lambda = 2.8 \mu$).

J'ai pu étendre cette observation entre 4 000 et 2 500 cm^{-1} ($2.5 < \lambda < 4 \mu\text{m}$) à l'aide d'un spectromètre à grilles de GIRARD [A1], équipé de grilles et de hublots en fluorine et d'un réseau permettant d'aller jusqu'à 1 250 cm^{-1} ($\lambda = 8 \mu$). La limite de résolution moyenne de cet instrument, pour ces observations, était de 0.15 cm^{-1} . Les sources utilisées étaient des lampes sans électrodes vues en bout pour utiliser au mieux l'énergie émise par la colonne lumineuse. L'épaisseur de la silice au bout de l'ampoule était aussi faible que possible et des raies ont ainsi pu être observées jusqu'à 4.1 μm . Le détecteur au sulfure de plomb refroidi à la carboglace employé dans l'infrarouge proche a été remplacé par un détecteur photovoltaïque à l'antimoniure d'indium, qui est le meilleur détecteur entre 3.5 et 5.5 μm , bien que sa détectivité dans cette région soit environ 10 fois inférieure à celle de la PbS vers 2 μm .

Au-delà de 4 μm le problème le plus ardu à résoudre est dû aux sources. La silice n'étant plus transparente, ni aucun verre (matériau à l'état vitreux ou amorphe), les E. D. L. classiques ne sont plus utilisables. La lampe à cathode creuse pourrait être utilisée avec une fenêtre en fluorine par exemple, mais les raies émises ne sont pas suffisamment intenses pour être détectées compte tenu de la baisse de la puissance rayonnée (en moyenne proportionnelle à σ^4) et de la baisse de détectivité des récepteurs.

Les matériaux connus qui sont transparents au-delà de 4 μm n'ayant pas la forme vitreuse qui permet de souffler des ampoules, on peut penser à utiliser des fenêtres soudées sur des tubes en silice. En fait quelques uns, comme Irtran, peuvent être brasés sur un métal, mais ces assemblages sont inutilisables pour une excitation dans une cavité haute fréquence.

Le collage d'une fenêtre sur un tube en silice peut être effectué, mais il doit résister à des températures pouvant aller jusqu'à 800°C, et ne doit pas donner lieu à un dégazage gênant. Des collages par adhérence moléculaire, des assemblages avec un joint en or, ont été essayés. Les tentatives ont échoué à cause de la grande différence qui existe entre le coefficient de dilatation de la silice qui est particulièrement bas (de l'ordre de 0.5×10^{-6}), et celui des autres matériaux qui est de l'ordre de 5×10^{-6} au moins. Les variations de température, même lentes, entre 20 et 500°C sont fatales à ces assemblages. La silice doit donc être abandonnée et remplacée par un verre qui ne soit plus en silice pure. Il en résulte deux inconvénients importants : il a un point de ramollissement plus bas, et une moins bonne inertie chimique.

En liaison avec le L. E. P. (Laboratoire d'Electronique Appliquée, LIMEIL-BREVANNES) nous avons finalement réussi à "souder" des fenêtres en saphir sur des tubes d'un verre Schott spécialement fabriqué pour avoir un coefficient de dilatation voisin de celui du saphir. Le saphir ou corindon synthétique Al_2O_3 est fabriqué industriellement et des fenêtres de bonnes qualités peuvent être obtenues. Sa transmission est excellente jusqu'à $5.5 \mu m$ environ. Il résiste assez bien aux chocs thermiques, comparé aux autres matériaux tels que la fluorine. Le verre Schott utilisé a son point de ramollissement à $700^\circ C$ environ, ce qui permet d'utiliser ces lampes à $600^\circ C$ maximum ; des réactions chimiques sont à craindre. L'utilisation de ces sources pour l'étude des lanthanides et des actinides est évidemment exclue à cause de leur température de fonctionnement élevée.

Un appareillage permettant la soudure de fenêtres en saphir sur le verre Schott a été construit au Laboratoire Aimé Cotton. Il s'agit d'une pièce cylindrique en alumine (bobine) comportant un enroulement qui permet par un chauffage électrique de la porter à $1000^\circ C$. Cette bobine est placée dans un four d'ambiance permettant d'atteindre une température de $600^\circ C$. Les températures de la bobine et du four sont mesurées par des thermocouples. La fenêtre en saphir repose sur la bobine et est portée à la température de fusion du verre. Le tube est positionné contre la fenêtre et la "soudure" a lieu par fusion du verre sur le saphir.

Pour éviter les risques de fracture de la fenêtre les variations de température doivent être aussi lentes que possible.

Les spectres du neon et du xenon ont pu être observés entre $3.5 \mu m$

et $5.5 \mu\text{m}$ grâce à ces sources [A2]. Il semble que les métalloïdes tels que l'iode et le brome, peut-être le tellure et le sélénium, pourraient être excités de cette manière.

Pour la S. T. F. l'interféromètre devra être équipé de lames séparatrice et mélangeuse en fluorine et de détecteurs InSb ce qui ne présente pas de difficultés techniques (en cours de réalisation sur un appareil destiné à l'étude des spectres d'absorption moléculaire par G. GUELACHVILI).

Quoi qu'il en soit l'observation infrarouge de l'émission atomique spontanée au-delà de $4 \mu\text{m}$ est difficile parce que l'intensité des raies est faible, que les récepteurs ont une faible détectivité et que les sources sont délicates à construire. Cette observation est possible entre 4 et $5.5 \mu\text{m}$ mais elle ne doit être faite que dans les cas où des résultats importants ne peuvent pas être obtenus dans d'autres domaines spectraux. En particulier les transitions $5g \rightarrow 4f$, pour des spectres de type $ns^2 np^x n'l$ (brome, iode, sélénium, tellure, Sb, Sn, etc...) sont toutes attendues au voisinage ou légèrement au-dessus de $4 \mu\text{m}$, et doivent donner lieu à des raies intenses. Seule l'observation de ces raies pourra fournir l'énergie des niveaux $5g$. Leur structure fine très serrée pourrait être résolue par la S. T. F. compte tenu de la faiblesse de l'effet Doppler à $4 \mu\text{m}$ (de l'ordre de $3 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$). Ces raies ont été observées par U. LITZÉN [20] sur plusieurs métaux alcalins, Na, K, Rb, Cs, mais la structure fine des doublets, $4f^2 F$ et $5g^2 G$, n'a pas pu être résolue.

II-2 LA SPECTROMETRIE PAR TRANSFORMATION DE FOURIER (S. T. F.).

II-2-A PRESENTATION.

La S. T. F. débuta vers 1950 avec P. FELLGETT [21] qui obtint un spectre par transformation de Fourier numérique d'un interférogramme. Indépendamment P. JACQUINOT [22] montra à cette époque la supériorité des méthodes interférométriques et les possibilités offertes par l'interféromètre de MICHELSON en tant qu'analyseur de spectre.

Depuis cette date les problèmes théoriques et techniques posés par cette méthode ont été bien étudiés et résolus, principalement au Laboratoire Aimé Cotton où, grâce à une importante équipe de chercheurs, ingénieurs et techniciens sous la direction de P. CONNES, des résultats spectaculaires ont été obtenus.

La mise au point de la S. T. F. est maintenant terminée en ce qui concerne le domaine infrarouge couvert par les détecteurs au sulfure de plomb ; son extension vers les longueurs d'onde plus grandes a été effectuée par G. GUELACHVILI avec les détecteurs à antimoniure d'indium ; son utilisation dans le visible et l'ultraviolet est imminente grâce aux travaux de P. LUC. La S. T. F. est donc entièrement au service des utilisateurs qui doivent profiter de ses possibilités nouvelles pour aborder des problèmes nouveaux.

Le travail que je présente ici a été possible grâce aux observations infrarouges effectuées à l'aide d'un interféromètre très évolué qui est le résultat de nombreuses années de recherches. Il a été conçu par P. CONNES, monté et réglé par J. VERGÈS.

Des études précises des possibilités offertes par la S. T. F. ont été effectuées et les résultats de nombreux tests ont été publiés qui décrivent ses performances. Cette méthode qui a demandé plusieurs années de recherche avant de devenir productive est assez complexe. Dans ce chapitre mon but est essentiellement de donner le point de vue de l'utilisateur, compte tenu des résultats obtenus sur plusieurs spectres d'émission et des discussions fructueuses pour moi que j'ai eues avec G. GUELACHVILI et J. VERGÈS.

Après avoir donné brièvement le principe de la méthode, je décrirai l'interféromètre et les méthodes de calcul, puis je rappellerai les limitations imposées par le bruit.

II-2-B RAPPELS SUR LE PRINCIPE DE LA METHODE.

Le flux lumineux à la sortie d'un interféromètre à deux ondes du type Michelson est de la forme :

$$\Phi(x) \propto \int_0^{\infty} B_0(\sigma) \cdot \cos^2 \pi \sigma x \cdot dx = \int_0^{\infty} \frac{1}{2} B_0(\sigma) [1 + \cos 2\pi \sigma x] dx$$

où x est la différence de chemin optique (ou différence de marche) et $B_0(\sigma)$ le spectre émis par la source.

En calculant la transformée de Fourier de l'interférogramme $I(x)$, signal détecté proportionnel à $\Phi(x)$, on obtient une fonction paire de σ :

$$B'_P(\sigma) \propto B_0(\sigma) \quad \text{pour } \sigma > 0$$

$$B'_P(\sigma) \propto B_0(-\sigma) \quad \text{pour } \sigma < 0 .$$

Fonction d'appareil et limite de résolution [23].

L'interférogramme $I(x)$ est enregistré entre la différence de marche zéro et une différence de marche maximale x_M ; ceci revient à multiplier la fonction $I(x)$, qui s'étend de zéro à l'infini par une fonction $\text{rect} \frac{x}{2x_M}$, de sorte que le spectre calculé est : $B_P(\sigma) * \text{sinc}(\sigma \cdot 2x_M)$.

La fonction d'appareil est la fonction $\text{sinc}(\sigma \cdot 2x_M)$ dont la largeur à mi-hauteur, ou limite de résolution instrumentale, est $\delta\sigma_0 = \frac{1}{2x_M}$.

Pour éviter les pieds importants de cette fonction sinc on peut remplacer a posteriori la fonction $\text{rect} \frac{x}{2x_M}$ par une fonction $A(x)$ qui s'annule en $x = x_M$ sans discontinuité, en multipliant $I(x)$ par $A(x)$. Avec cette "apodisation" la fonction d'appareil est alors la transformée de Fourier de $A(x)$. La largeur de cette fonction d'appareil est comprise entre $\frac{1}{2x_M}$ et $\frac{1}{x_M}$, suivant la fonction $A(x)$ choisie.

Etendue de faisceau [23].

La fonction d'appareil est définie ci-dessus dans l'hypothèse où le trou d'entrée est très petit. Le maximum du produit $\mathcal{L} \times \mathcal{R}$ (Luminosité \times Résolution) a lieu pour une valeur de l'angle solide Ω sous lequel le diaphragme d'entrée est vu depuis le centre du collimateur, telle que

$\Omega = 2\pi / \mathcal{B}_0$ (\mathcal{B}_0 : résolution théorique avec un trou infiniment fin) .
Ceci réalise les meilleures conditions d'emploi de l'interféromètre de
Michelson [29].

Dans ces conditions la fonction d'appareil réelle est le produit de
convolution de la fonction sinc théorique par une fonction rectangle
de largeur $\delta\sigma_0 = \sigma_0 \cdot \frac{i_M^2}{2} = \sigma_0 \cdot \frac{\Omega}{2\pi}$. Par ailleurs pour une raie mono-
chromatique émise par la source, $B_0 \cdot \delta(\sigma - \sigma_0)$, le nombre d'ondes de
l'axe de la fonction d'appareil est plus petit que σ_0 d'une quantité
 $d\sigma = \sigma_0 \cdot \frac{i_M^2}{4} = \sigma_0 \cdot \frac{\Omega}{4\pi}$.

Modulation interne [24, 25].

La détection du flux lumineux $\Phi(x)$ se fait par modulation "interne"
c'est-à-dire en utilisant une modulation périodique en forme de créneaux de
la différence de marche x , autour d'une position x_0 . L'amplitude de
modulation du flux est donc :

$$\Phi(x_0 + \frac{\Delta x}{2}) - \Phi(x_0 - \frac{\Delta x}{2})$$

où Δx est l'amplitude de modulation de la différence de marche. Le
signal obtenu après détection synchrone et intégration pendant un temps
 t_i , à la différence de marche x est de la forme :

$$I(x) = K \int_0^{\infty} [B_0(\sigma) \sin \pi \sigma \Delta x] \sin 2\pi \sigma x \, d\sigma .$$

C'est donc une transformée de Fourier en sinus qu'on effectue en réalité,
et on obtient une fonction impaire de σ , $B_1(\sigma) = B_0(\sigma) \sin \pi \sigma \Delta x$

$$= B_0(\sigma) \sin \frac{\pi \sigma}{2\sigma_0}$$

en posant $\sigma_0 = \frac{1}{2\Delta x}$.

L'amplitude de la modulation Δx est choisie pour que σ_0 soit situé au milieu du domaine exploré ; sur les bords du domaine le spectre $B(\sigma)$ est multiplié par un coefficient inférieur à un, qui peut atteindre 0.7 pour $\sigma = \frac{\sigma_0}{2}$ et $\sigma = \frac{3\sigma_0}{2}$.

Exemple : Si $3\ 000 < \sigma < 12\ 000\ \text{cm}^{-1}$, $\sigma_0 = 7\ 500\ \text{cm}^{-1}$, $\Delta x = 0.6\ \mu\text{m}$.

Echantillonnage [23].

Le spectre étudié étant nul en dehors d'un domaine $[\sigma_1, \sigma_2]$, l'interférogramme $I(x)$ est entièrement déterminé par ses valeurs aux points $x = nh$ où n est entier et h le pas d'échantillonnage.

Soit la distribution :

$$\mathbb{W}\left(\frac{x}{h}\right) = \sum_{-\infty}^{+\infty} \delta\left(\frac{x}{h} - n\right) = h \sum \delta(x - nh) \quad ;$$

alors l'interférogramme échantillonné s'écrit :

$$I_n(x) = \frac{1}{h} \mathbb{W}\left(\frac{x}{h}\right) \cdot I(x)$$

d'où $B_n(x) = \text{TF}[I_n(x)] = \mathbb{W}(\sigma h) * B_0(\sigma)$.

Le spectre calculé $B_n(x)$ se reproduit identique à lui-même avec une période $\Delta\sigma = \frac{1}{h}$.

Pour qu'il n'y ait pas recouvrement il faut et il suffit que le domaine spectral soit contenu dans une demi-période, soit :

$$\frac{K}{2h} < \sigma < \frac{K+1}{2h} \quad \text{où } K \text{ est entier} \ .$$

II-2-C DESCRIPTION DE L'INTERFEROMETRE.

L'interféromètre utilisé pour l'étude des spectres d'émission atomique entre 3 000 et 12 000 cm^{-1} (J. VERGÈS) est identique à quelques détails près à celui destiné à l'étude des spectres d'absorption moléculaire (G. GUELACHVILI) et à celui destiné à la spectroscopie astronomique (J.-P. MAILLARD). Ce type d'interféromètre a été décrit et ses performances exposées par J. CONNES, P. CONNES et leurs collaborateurs [26]. Ces appareils bénéficient de toute l'expérience acquise en S. T. F. et ont été conçus pour traiter les problèmes à haute résolution dans tout le domaine spectral couvert par les détecteurs au sulfure de plomb.

Je rappellerai brièvement les caractéristiques essentielles de ces interféromètres. Les miroirs sont remplacés par des systèmes à oeil-de-chat [27] pour éliminer les dérèglages au cours du déplacement. Dans l'enregistrement pas à pas de l'interférogramme le chariot portant l'oeil-de-chat mobile stationne sur chacune des valeurs de la différence de marche pour lesquelles un échantillon est désiré. Le flux sortant de l'interférogramme est mesuré par intégration et le chariot est déplacé aussi rapidement que possible d'un point à l'autre.

Le processus qui détermine la variation de la différence de marche est périodique. Il se décompose en 2 temps : un temps de stationnement, un temps de déplacement. Chaque pas est un multiple entier de la centième partie de la longueur d'onde 3.50μ de la raie superradiante du xénon, $p \times \frac{\lambda_{xe}}{100}$, où p peut être choisi entre 1 et 10 000. Cette souplesse dans le choix du pas d'échantillonnage permet de traiter des domaines

spectraux dont les largeurs sont comprises entre 14 et 140 000 cm^{-1} environ.

Exemple : Pour un spectre s'étendant de 3 000 à 12 000 cm^{-1} , le domaine spectral le plus petit est $[0-12957 \text{ cm}^{-1}]$, soit un pas égal à $11 \times \frac{\lambda_{xe}}{100}$.

Le système d'asservissement de la différence de marche est obtenu d'une part avec un moteur linéaire qui déplace le chariot et répond à des fréquences basses ($<50 \text{ Hz}$), et d'autre part grâce à des céramiques piézoélectriques qui portent les petits miroirs des oeils-de-chat et qui répondent aux fréquences supérieures à 20 Hz environ.

La modulation interne de la différence de marche est obtenue à l'aide de ces céramiques.

La différence de marche maximale qu'on peut atteindre est de 2 m, ce qui donne une limite de résolution comprise entre 2.5 et $5. \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$, suivant l'apodisation effectuée.

Le diamètre du faisceau, limité par les lames séparatrice et mélangeuse, est de 80 mm. La distance focale des collimateurs d'entrée et de sortie est de 2 m. L'étendue du faisceau est adaptée en fonction de la résolution en choisissant le diamètre du trou d'entrée.

Le gain du système de mesure est déterminé par celui des préamplificateurs qui est égal au maximum à 2^6 (128), et par celui d'un amplificateur à détection synchrone dont le gain peut varier suivant une progression géométrique de raison 4, entre 1 et 4^5 (1024).

L'interférogramme échantillonné est enregistré sur bande magnétique

point par point. La cadence avec laquelle les échantillons sont pris est limitée par l'enregistreur magnétique à 15 points par seconde environ.

Un calculateur en temps réel de la transformée de Fourier de l'interférogramme a été construit au Laboratoire Aimé Cotton [28]. Il est utilisé pendant l'enregistrement de l'interférogramme et calcule à chaque nouvel échantillon 4 000 éléments spectraux sur une petite fraction du spectre étudié avec la résolution maximale atteinte à cet instant. Cette nouvelle possibilité est particulièrement intéressante car elle permet de vérifier qu'aucune fausse manoeuvre n'a été commise et qu'aucun incident n'a lieu pendant la durée de l'enregistrement. Les seules pannes non détectées sont des erreurs d'écriture sur la bande magnétique.

II-2-D CALCUL DU SPECTRE PAR T. F. DE L'INTERFEROGRAMME [26, 30, 31].

Le calcul de la transformée de Fourier de l'interférogramme échantillonné s'exécute sur un ordinateur 360/168 IBM. La durée du calcul a été réduite considérablement en utilisant l'algorithme de Cooley-Tuckey. Ces programmes écrits par J. CONNES et H. DELOUIS permettent de calculer 2×10^6 points spectraux à partir de 2×10^6 échantillons de l'interférogramme en une dizaine de minutes.

Avant d'effectuer le calcul complet, 2 tests peuvent être effectués pour s'assurer qu'il n'y a pas eu d'erreur dans l'enregistrement de l'interférogramme et que la bande magnétique a été correctement interprétée par l'ordinateur. Un premier calcul à basse résolution n'utilise que les

premiers points de l'interférogramme ; un autre permet d'obtenir une tranche spectrale étroite à la résolution maximale. Cette tranche est obtenue en calculant la T. F. d'un interférogramme secondaire obtenu par "filtrage mathématique" de l'interférogramme primaire [32].

L'échantillonnage de l'interférogramme est voisin de l'échantillonnage critique, c'est-à-dire que l'on prend juste le nombre de points N pour ne pas avoir de perte d'informations ni recouvrement du spectre par lui-même. La transformation de Fourier numérique fournit également N points, appelés "points primaires", c'est-à-dire un point par élément spectral de largeur $\delta\sigma_0 = \frac{1}{2x_M}$. Toutes les informations sont contenues dans ces N points primaires ; toutefois, il est commode pour l'expérimentateur d'avoir l'allure du spectre sous la forme d'une courbe continue. Le spectre $B(\sigma)$ peut être reconstitué en tout point grâce au théorème d'interpolation :

$$B(\sigma) = \sum_{-\infty}^{+\infty} B\left(\frac{n}{2h}\right) \frac{\sin(2\pi \sigma h - n \pi)}{2\pi \sigma h - n \pi} .$$

Habituellement on calcule 4 points "secondaires" entre 2 points primaires à l'aide de cette interpolation, et pour tracer le spectre on effectue une interpolation linéaire entre les $5N$ points.

II-2-E LE BRUIT DANS LE SPECTRE CALCULÉ [23, 33].

L'interférogramme enregistré est la somme de l'interférogramme $I(x)$ dont nous avons parlé jusqu'à maintenant, et d'un bruit qui est généralement assimilé à une fonction aléatoire (f. a.) stationnaire du second ordre, à valeur moyenne nulle $f(x)$.

La transformation de Fourier étant une opération linéaire, on obtient la somme du spectre $B(\sigma)$, fonction certaine, et d'un bruit, qui est encore une fonction aléatoire dont le rayon de corrélation est de l'ordre de la largeur de la fonction d'appareil $\delta\sigma_0 = \frac{1}{2x_M}$ [23].

Dans l'interférogramme, la fonction d'autocorrélation du bruit $\Gamma(\Delta)$ est définie par : $\Gamma(\Delta) = E[f(x) \cdot f(x-\Delta)]$ où E est l'espérance mathématique ou moyenne d'ensemble. Le théorème ergodique permet de remplacer cette moyenne d'ensemble par une moyenne "temporelle"

$$\overline{f(x) \cdot f(x-\Delta)} = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \int_0^L f(x) f(x-\Delta) dx \quad .$$

Calculer la transformée de Fourier de l'interférogramme théorique (sans bruit) c'est en faire l'analyse harmonique, c'est-à-dire décomposer cette fonction en une somme de fonctions sinusoïdales (ou d'exponentielles complexes). La transposition aux f. a. présente des difficultés. L'étude générale de l'analyse harmonique des fonctions aléatoires [34] montre qu'on peut écrire $f(x)$ sous la forme d'une somme d'exponentielles complexes

$$f(x) = \int dF(\sigma) \exp i 2\pi \sigma x$$

où $dF(\sigma)$ est l'accroissement d'une fonction $F(\sigma)$ définie comme la

sortie du filtre passe bande parfait $\mathcal{F}_{-\infty, \sigma}$ coupant toutes les fréquences supérieures à σ et ne changeant pas les autres

$$dF(\sigma) = F(\sigma + d\sigma) - F(\sigma) \quad .$$

La transformée de Fourier de la fonction de corrélation $\Gamma(\Delta)$ est la densité spectrale de $f(x)$, $\gamma_f(\sigma)$, c'est-à-dire la densité de répartition de la puissance de bruit sur l'axe des fréquences.

$$\Gamma(0) = \overline{f(x)^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} \gamma_f(\sigma) \cdot d\sigma \quad , \text{ est la puissance totale de bruit.}$$

$dF(\sigma)$ est lié à la densité spectrale par l'expression

$$E[dF(\sigma), dF(\sigma')] = \delta(\sigma - \sigma') \gamma_f(\sigma) d\sigma d\sigma'$$

soit
$$E[|dF(\sigma)|^2] = \gamma_f(\sigma) = \text{TF}[\Gamma(\Delta)] \quad .$$

L'étude du bruit dans le spectre calculé a été faite par J. CONNES [23] puis par J. PINARD [33]. Je rappellerai l'effet de l'intégration et de l'échantillonnage sur la densité spectrale de bruit.

L'intégration du signal a pour effet de filtrer le bruit par un filtre de gain $G(\nu) = \frac{\sin \pi \nu t_0}{\pi \nu t_0}$ où t_0 est le temps d'intégration ; donc la densité spectrale de bruit devient :

$$\gamma_f'(\sigma) = |G(\nu)|^2 \cdot \gamma_f(\sigma) \quad .$$

J. CONNES a montré que si l'on néglige le temps de déplacement d'un échantillon à l'autre, le rapport signal sur bruit dans le spectre calculé est le même que lorsque l'interférogramme $I(x)$ est enregistré de façon continue pendant le temps $T = N t_0$, et que la T. F. est faite en utilisant toutes les valeurs de $I(x)$.

En ce qui concerne l'effet de l'échantillonnage, J. PINARD a montré que deux cas doivent être distingués suivant que le pas h est supérieur ou inférieur à la largeur de la fonction de corrélation $\Gamma(\Delta)$, ou rayon de corrélation Δ_0 .

a) $\Delta_0 < h$: l'échantillonnage est tel que les différents points ne sont pas corrélés. La densité spectrale de bruit est constante (amplitude de bruit constante dans tout le spectre) ; tout se passe comme si le bruit dans l'interférogramme était un bruit blanc. $E[|dF(\sigma)|^2] = \text{cte}$ quel que soit σ .

b) $\Delta_0 > h$: les échantillons sont corrélés ; on retrouve dans le spectre la forme de la densité spectrale de bruit de l'interférogramme non échantillonné. $E[|dF(\sigma)|^2] = \gamma_{\Gamma}(\sigma)$.

Les sources de bruit dans l'interférogramme en tant que fluctuations aléatoires, sont dues essentiellement à la source, au récepteur, à l'interféromètre et au système de mesure.

Dans l'infrarouge le bruit du détecteur est supérieur au bruit de photons (ce dernier est négligé). Son rayon de corrélation est inférieur au pas d'échantillonnage de l'interférogramme et il donne un bruit constant dans tout le spectre (cas a).

La source présente des fluctuations d'intensité qui comportent des fréquences basses. Elles sont responsables dans le spectre calculé d'un bruit qui se situe au voisinage des raies et dont l'amplitude est proportionnelle à l'intensité de la raie [33].

En effet si $I_0(x)$ est l'interférogramme idéal sans bruit de source, l'interférogramme réel $I(x)$ peut s'écrire :

$$I(x) = I_0(x) [1+f(x)]$$

où $f(x)$ est la fonction aléatoire qui représente les variations du flux émis par la source.

Avec utilisation de la modulation interne en crénaux, $I_0(x)$ est assimilé à une fonction impaire de x sur $[-\infty, +\infty]$; c'est la transformée de Fourier en sinus du spectre $B_0(\sigma)$.

Le calcul du spectre s'effectue par transformation de Fourier en sinus de $I(x)$, ce qui donne la fonction impaire de σ , $B_{\text{imp}}(\sigma)$, associée à $B_0(\sigma)$:

$$B_{\text{imp}}(\sigma) \propto \int_0^{\infty} I_0(x) \sin(2\pi \sigma x) dx = \frac{+i}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} I_0(x) \exp(-2\pi i \sigma x) dx .$$

Avec le bruit de source on obtient :

$$B_{\text{imp}}'(\sigma) \propto \int_0^{\infty} I_0(x) [1+f(x)] \sin(2\pi \sigma x) dx$$

$$B_{\text{imp}}' \propto \frac{+i}{2} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} I_0(x) \exp(-2\pi i \sigma x) dx + \int_{-\infty}^{+\infty} I_0(x) \cdot f(x) \exp(-2\pi i \sigma x) dx \right] .$$

Cette égalité n'est vraie que si $I(x)$ est impaire.

Donc $I_0(x) \cdot f(x)$ est impair, ce qui entraîne que seule la composante paire de $f(x)$ doit être considérée :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} I_0(x) \cdot f(x) \exp(-2\pi i \sigma x) dx = \text{TF} [I_0(x)] * \text{TF} [f_{\text{paire}}(x)]$$

$$\text{avec } F_{\text{paire}}(\sigma) = \text{TF} [f_{\text{paire}}(x)] = \text{TF}_{\cos} [f(x)]$$

$$\text{d'où } B_{\text{imp}}'(\sigma) = B_{\text{imp}}(\sigma) + B_{\text{imp}}(\sigma) * F_{\text{paire}}(\sigma) .$$

Donc le bruit dû à la source est représenté par le produit de convolution du spectre lui-même, par une fonction de bruit paire, qui est la T. F. en cosinus de la fonction bruit de l'interférogramme. Il convient de remarquer que les fréquences temporelles peuvent être transformées en fréquences spatiales en utilisant une vitesse moyenne v de variation de la différence de marche.

Exemple : Une source présentant des fluctuations dont les fréquences temporelles sont réparties entre 0 et 0,1 Hz, donnera du bruit s'étendant sur 36 cm^{-1} de chaque côté des raies pour un interférogramme pris à la vitesse moyenne de $28 \mu\text{m/s}$ (différence de marche maximale 1 m et durée de l'enregistrement 10 heures).

Ce type de bruit est particulièrement important avec les tubes sans électrodes qui présentent des fluctuations lentes assez importantes malgré le dispositif d'asservissement en intensité de ces sources. On peut aussi compenser les variations de flux par de légères variations du gain d'amplification de la chaîne de mesure.

Lorsque l'interféromètre est baigné par l'air atmosphérique, les fluctuations d'indice dus aux courants de convection sont responsables de fluctuations de la différence de marche qui créent un bruit supplémentaire [33].

Une petite erreur $\Delta(x)$ sur la différence de marche x entraîne une erreur $\Delta I(x)$ sur la valeur de $I(x)$ telle que :

$$\Delta I(x) = \left(\frac{d I_0}{dx} \right) \cdot \Delta(x)$$

$\Delta(x)$ représente l'erreur commise sur la mesure de x . C'est une fonction aléatoire lorsqu'il s'agit de traiter l'effet des fluctuations d'indice.

Si $I_0(x)$ est l'interférogramme idéal, fonction impaire de x sur le domaine $[-\infty, +\infty]$, $\left(\frac{d I_0}{dx}\right)$ est une fonction paire. Le calcul du spectre par transformation de Fourier en sinus de $I(x) = I_0(x) + \Delta I(x)$ fait apparaître un bruit $F(\sigma)$ tel que :

$$F(\sigma) \propto \int_0^{\infty} \Delta I(x) \sin(2\pi \sigma x) dx = \frac{i}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\left(\frac{d I_0}{dx}\right) \cdot \Delta(x) \right] \exp(-2\pi i \sigma x) \cdot dx$$

Le produit $\left(\frac{d I_0}{dx}\right) \cdot \Delta(x)$ étant une fonction impaire ceci implique, compte tenu de la parité de $\left(\frac{d I_0}{dx}\right)$, que seule la composante impaire de $\Delta(x)$ intervient.

D'autre part, si $B_{\text{imp}}(\sigma) = \text{TF}_{\text{sin}}[I_0(x)]$, alors

$$\text{TF}_{\text{sin}} \left[\frac{d I_0}{dx} (x) \right] = 2\pi i \sigma B_{\text{imp}}(\sigma),$$

d'où $F(\sigma) \propto [2\pi i \sigma B_{\text{imp}}(\sigma) * \text{TF}[\Delta_{\text{imp}}(x)]]$

où $\text{TF}[\Delta_{\text{imp}}(x)] = \text{TF}_{\text{sin}}[\Delta(x)]$ est une fonction impaire de σ .

Dans le spectre calculé ce bruit apparaît encore au voisinage des raies ; il est antisymétrique par rapport à la raie.

La manière classique de caractériser la qualité d'un spectre est de déterminer le rapport entre l'écart quadratique moyen du bruit et l'intensité d'une raie donnée, c'est-à-dire le rapport signal sur bruit.

Dans le cas des raies intenses le bruit de source prédomine et le rapport

signal sur bruit, constant, ne dépend que de l'amplitude des fluctuations à basses fréquences de la source.

En ce qui concerne la détection de raies faibles hors du voisinage de raies intenses, le bruit dominant est uniformément réparti et son écart type est proportionnel à $\sqrt{T_0}$, où T_0 est le temps total d'exposition $T_0 = N t_0$, (N nombre d'échantillons, t_0 temps d'intégration). Lorsque la largeur de raie est très inférieure à la limite de résolution instrumentale, l'intensité d'une raie est proportionnelle à T_0 ; le rapport signal sur bruit est donc proportionnel à $\sqrt{T_0} = \sqrt{N t_0}$.

Lorsque la limite de résolution diminue et devient inférieure à la largeur de la raie émise par la source, il est clair que l'intensité tend vers une valeur I_0 , qui est pratiquement atteinte pour une différence de marche x_0 pour laquelle la largeur de la fonction d'appareil est égale à la largeur de la raie émise par la source. Le rapport signal sur bruit décroît donc en $\frac{1}{\sqrt{N t_0}}$ après être passé par un maximum pour une limite de résolution instrumentale qui dépend du profil des raies émises par la source et qui est en général voisine de la largeur de ce profil. Ceci signifie qu'une meilleure connaissance du profil s'accompagne d'une détérioration du rapport signal sur bruit.

II-2-F RAIES FANTÔMES (GHOSTS).

Certaines imperfections instrumentales donnent lieu à l'observation de raies fantômes ("ghosts") qui sont des raies présentes dans le spectre calculé mais qui n'existent pas réellement dans le spectre de la lumière analysée.

Une erreur périodique sur la mesure de la différence de marche, de période égale à la longueur d'onde de référence du xénon ($\lambda_{Xe} = 3.50 \mu\text{m}$) est pratiquement impossible à supprimer totalement avec le type de contrôle utilisé car la polarisation circulaire du faisceau de référence, droite pour un bras de l'interféromètre, gauche pour l'autre, est rendue légèrement elliptique par les réflexions et transmissions obliques [26].

Le calcul effectué au paragraphe précédent pour tenir compte d'une erreur aléatoire sur la différence de marche peut être utilisé ici à condition de remplacer la fonction aléatoire $\Delta(x)$ par une fonction certaine périodique. Si l'on considère la composante sinusoïdale fondamentale :

$$\Delta(x) = m \cdot \sin 2\pi \sigma_{Xe} \cdot x$$

m , l'amplitude de l'erreur, dépend de l'ellipticité.

Par transformation de Fourier en sinus on obtient comme précédemment:

$$F(\sigma)_{\mathcal{L}} [2\pi i \sigma B_{\text{imp}}(\sigma)] * \text{TF} [\Delta(x)]$$

avec
$$\text{TF} [m \sin 2\pi \sigma_{Xe} x] = \frac{i}{2} m [\delta(\sigma - \sigma_{Xe}) - \delta(\sigma + \sigma_{Xe})] .$$

On observe donc pour les raies les plus intenses des raies fantômes antisymétriques par rapport à la raie principale et distantes de celle-ci

de $\sigma_{\text{Xe}} = \frac{1}{\lambda_{\text{Xe}}} = 2\,850 \text{ cm}^{-1}$. Leur intensité est environ 500 fois plus faible que celle de la raie principale dans les spectres que nous avons étudiés.

La présence de "ghosts" peut aussi être due au fait que la caractéristique du système de détection et de mesure n'est linéaire que dans un certain domaine. Pour de grandes variations de flux on peut sortir des limites de ce domaine et une raie intense de nombre d'ondes σ_0 , sera accompagnée des harmoniques de rang 2 ($2\sigma_0$), 3 ($3\sigma_0$) [33]. Les défauts de non linéarité du système d'amplification sont pratiquement éliminés par un changement de gain. Par contre en ce qui concerne les détecteurs le problème n'a pas encore trouvé de solution satisfaisante. Toutefois l'observation de ces harmoniques est rare pour les spectres d'émission atomique.

II-3 METHODE EXPERIMENTALE ET TRAITEMENT DE L'INFORMATION.

II-3-A OBTENTION DU SPECTRE.

Les spectres ont été obtenus avec une limite de résolution de l'ordre de la moitié de la largeur des raies émises par la source. Cette manière de procéder a plusieurs avantages. Tout d'abord on évite une apodisation qui est toujours une perte d'informations. En effet, le profil de la raie étant plus large que la fonction d'appareil les pieds de celle-ci ne sont plus aussi accentués. D'autre part la largeur enregistrée est peu supérieure à la largeur de la raie émise par la source, ce qui est indispensable à la fois pour des études de structures hyperfines et pour des pointés précis des nombres d'ondes.

Le diamètre du trou d'entrée est assez souvent inférieur à sa valeur optimale pour la résolution cherchée, pour que les variations de flux lumineux ne soient pas trop importantes à faible différence de marche.

La cadence d'enregistrement de l'interférogramme, limitée à 15 points par seconde, nous oblige à explorer le domaine spectral entre 3 000 et 12 000 cm^{-1} en plusieurs fois quand il s'agit d'obtenir une résolution instrumentale élevée. En effet avec une limite de résolution de l'ordre de 6 mK (cas de l'iode), le nombre d'échantillons nécessaires est de $2. \times 10^6$, ce qui demanderait 43 heures ininterrompues d'enregistrement,

sans aucun incident ni de la source, ni de l'interféromètre, ni du système de mesure et d'enregistrement. La probabilité pour qu'aucune interruption n'ait lieu pendant ce temps est faible. Des enregistrements de 10 heures maximum sont généralement effectués. Lorsqu'on ne descend pas au-dessous d'une limite de résolution de 30 mK, cette durée est suffisante pour obtenir tout le spectre entre 3 000 et 12 000 cm^{-1} en une seule fois.

La limitation de la cadence d'enregistrement n'est évidemment pas fondamentale. Des cadences 5 fois plus rapides sont faciles à obtenir avec un autre système d'enregistrement magnétique.

II-3-B MESURE DES NOMBRES D'ONDES ET DE L'INTENSITE DES RAIES.

Le spectre $B(\sigma)$ est tracé sur papier à partir des 5N points secondaires. Les opérations habituellement effectuées sur un enregistrement photoélectrique séquentiel sont donc possibles. Deux programmes de recherche et de pointé automatiques des raies permettent de traiter les données directement sur ordinateur [30, 35]. Pour chaque raie détectée le nombre d'ondes de l'axe de symétrie et la hauteur du maximum (l'intensité) sont calculés. Le travail de l'expérimentateur est ainsi considérablement simplifié ; toutefois le tracé du spectre sur papier reste indispensable pour choisir parmi les pointés effectués ceux qui correspondent effectivement à des raies. Il faut également éliminer les raies fantômes dues à la non linéarité du système de détection et à l'erreur périodique sur la différence de marche.

Par ailleurs deux corrections doivent être appliquées aux nombres d'ondes calculés. Le déplacement du centre des raies, dû au diamètre fini du trou d'entrée, doit être corrigé ; ceci peut se faire automatiquement dans le calcul sur ordinateur.

Depuis une date récente l'interféromètre est dans une enceinte où règne un vide de l'ordre de 1 torr [36]. Mais les résultats qui sont présentés ici sont antérieurs. Lorsque l'interféromètre baigne dans l'air ambiant, on obtiendrait le nombre d'ondes dans l'air des différentes raies, à condition d'exprimer la différence de marche en fonction de la longueur d'onde dans l'air de la raie de référence du xénon. En fait, dans les programmes de calcul on donne la longueur d'onde dans le vide de cette raie $\lambda_{Xe} = 3,50\mu\text{m}$, mesurée par J. PINARD [33], on obtient donc des nombres d'ondes dans le vide σ'_v des raies, qui sont légèrement erronés puisqu'on n'a pas tenu compte de la variation d'indice entre la longueur d'onde de la raie de référence et celle des différentes raies étudiées. Le véritable nombre d'ondes dans le vide est $\sigma_v = \sigma'_v \times \frac{n_{Xe}}{n_\sigma}$,

d'où la correction $\delta\sigma = \sigma \times \frac{(n_\sigma - n_{Xe})}{n_\sigma} \neq \sigma \times (n_\sigma - n_{Xe})$.

Pour effectuer cette correction on admet que les conditions normales de température et de pression sont respectées et on utilise la formule d'Edlén [37] pour le calcul de l'indice.

II-3-C PRECISION SUR LES MESURES.

Plusieurs facteurs interviennent dans l'estimation de l'incertitude sur la mesure du nombre d'ondes de l'axe d'une raie. Nous supposons le phénomène bien défini, c'est-à-dire que la source émet une raie symétrique et bien isolée. Nous considérerons que les différentes causes d'incertitude peuvent rentrer dans deux classes distinctes, d'une part l'incertitude sur le pointé, d'autre part l'incertitude sur le spectre calculé et qui provient des défauts de la méthode d'observation.

a) Incertitudes de pointé

Si la S. T. F. donne du spectre émis par la source une image non déformée et sans bruit, une méthode de pointé doit permettre d'extraire le nombre d'ondes avec une précision qui ne dépend que de cette méthode. Dans le cas présent, des tests effectués avec un interférogramme artificiel donnent une incertitude relative inférieure à 10^{-10} [31]. Pratiquement il s'agit de traiter l'information contenue dans un spectre que l'on suppose non déformé par une autre cause que le bruit. En ce qui concerne la détermination de l'axe d'une raie, celui-ci n'est plus défini puisque le bruit rend le profil non symétrique. On convient de définir "la position" de la raie soit en faisant la moyenne des milieux de plusieurs cordes à différentes hauteurs, soit en prenant le milieu d'une corde à une fraction donnée de la hauteur.

On peut admettre que l'incertitude $\Delta\sigma$ sur cette position est proportionnelle à la limite de résolution instrumentale ($\delta\sigma_0$), et inversement proportionnelle au rapport signal sur bruit ; on définit empiriquement cette

incertitude de la manière suivante : $\Delta\sigma = \frac{\delta\sigma_0}{(S/B)}$. Ceci nous ramène à l'étude faite sur le bruit dans le spectre calculé, où nous avons vu qu'il y a un compromis à trouver entre résolution et rapport signal sur bruit, dans le cas du bruit uniformément réparti.

Si $\delta\sigma_0 \gg \delta\sigma_s$ ($\delta\sigma_s$: largeur de raie émise par la source à temps d'intégration t_0 donné), $\Delta\sigma \propto \frac{1}{N^{3/2}}$.

Si $\delta\sigma_0 \ll \delta\sigma_s$, alors $\Delta\sigma \propto \frac{1}{\sqrt{N}}$, toujours à t_0 donné.

En ce qui concerne la précision du pointé nous constatons qu'il est toujours avantageux d'augmenter la résolution quitte à perdre en rapport signal sur bruit. Il est clair que ceci se fait au détriment des raies faibles qui ne seront plus détectées si leur rapport signal sur bruit devient inférieur ou égal à 1.

Les considérations précédentes ne sont plus valables pour les raies où le bruit de source à basse fréquence prédomine. Le rapport signal sur bruit reste constant tant que ce type de bruit prédomine et l'incertitude $\Delta\sigma$ est inversement proportionnel à T .

Exemple : Avec une limite de résolution instrumentale de 5 mK et un rapport signal sur bruit de 100, on peut admettre que l'incertitude sur le pointé est de 0.05 mK.

b) Incertitude due à la méthode et aux instruments. (Incertitude instrumentale).

Certaines imperfections instrumentales risquent d'entraîner une déformation du spectre, et en particulier une erreur sur le nombre d'ondes

des raies. G. GUELACHVILI [38] a étudié en détail les différentes causes d'erreur et leurs effets.

En ce qui concerne l'interféromètre lui-même, on peut citer l'incertitude sur l'angle solide sous lequel est vu le diaphragme d'entrée, le décentrage de ce diaphragme par rapport aux anneaux à l'infini et différentes causes de déformation de la surface d'onde : qualité optique de l'interféromètre imparfaite, inégalité d'éclairement du diaphragme d'entrée et aberrations du miroir collimateur.

D'autres erreurs peuvent être faites qui concernent la mesure de la différence de marche. En effet celle-ci est mesurée par référence à la raie superradiante du xénon. La longueur d'onde de cette raie n'est pas définie par une cavité et constitue donc un étalon naturel. Toutefois une cause principale d'instabilité semble être due aux variations de la pression de Xe dans le tube à décharge. Le centrage de ce faisceau de référence est par ailleurs très difficile à effectuer compte tenu de l'impossibilité de faire des observations à l'oeil.

Une erreur sur la différence de marche zéro, qui correspond au premier échantillon, donne une déformation de la fonction d'appareil entraînant une erreur sur la position de l'axe de la raie.

Compte tenu de toutes ces causes possibles d'erreurs instrumentales, l'incertitude relative sur le nombre d'ondes, $\frac{d\sigma}{\sigma}$, est estimée à 10^{-7} environ. Ceci caractérise la reproductibilité de spectres obtenus dans des conditions identiques à quelques jours d'intervalle.

La mesure absolue des nombres d'ondes est obtenue par comparaison au nombre d'ondes de la raie du Xe, mesurée par J. PINARD [33],

$$\sigma_{\text{Xe}} = 2\,850.6396 \text{ cm}^{-1} \pm 2 \cdot 10^{-4} .$$

L'incertitude relative sur les nombres d'ondes dépend de l'incertitude relative sur la valeur absolue de σ_{Xe} :

$$\left(\frac{d\sigma}{\sigma}\right)_{\text{Xe}} \approx 10^{-7} .$$

Plusieurs mesures du nombre d'ondes de la raie de krypton $^2\text{p}_{10}^{-2}\text{d}_5$, dont la longueur d'onde sert à la détermination du mètre, ont été effectuées par G. GUELACHVILI [38, 39] avec le nombre d'ondes précédent de la raie de référence du xénon. Ces études permettent d'une part d'évaluer à 2×10^{-7} les variations relatives dans le temps de cette grandeur et d'autre part de vérifier sa valeur absolue ; la comparaison des résultats au nombre d'ondes de la raie étalon du krypton donné par le B. I. P. M. indique une erreur relative de $7 \cdot 10^{-7}$.

Toutefois les mesures effectuées par G. GUELACHVILI avaient pour but essentiel de comparer directement la longueur d'onde étalon aux raies du CO, de sorte que dans ses expériences la raie du xénon n'intervenait pas en tant qu'intermédiaire dans la mesure absolue des nombres d'ondes. Par conséquent un réglage particulièrement soigné de la pression de xénon et du centrage du faisceau de référence n'a pas été effectué. L'erreur relative qu'il obtient sur le nombre d'ondes absolu est donc certainement une limite supérieure.

On peut admettre en définitive que la précision relative sur les nombres d'ondes est de l'ordre de 2×10^{-7} , et que la précision sur la valeur absolue est de l'ordre de 5×10^{-7} .

c) Précision effective.

La précision effectivement obtenue sur les nombres d'ondes doit tenir compte à la fois de l'incertitude due à la méthode et de l'incertitude de pointé.

Pour la mesure absolue des nombres d'ondes dans le vide, l'incertitude de pointé est généralement négligeable. En effet, à $10\,000\text{ cm}^{-1}$, avec $\delta\sigma_0 = 5\text{ mK}$ et un rapport signal sur bruit de 10, on peut l'estimer à 0.5 mK alors que l'incertitude due à l'instrument est de 5 mK environ.

Si cela s'avérait nécessaire, on pourrait envisager d'observer des spectres avec des raies dont les longueurs d'onde sont des étalons secondaires (Ne, Kr, Xe par exemple [40]), ce qui rendrait l'incertitude inférieure à 10^{-7} .

Pour des mesures de déplacement isotopique et d'écart entre composantes de structures fine, hyperfine et d'effet Zeeman, à condition que les raies soient bien séparées, la méthode de pointé sur ordinateur peut être utilisée. Sur des écarts de $1\,000\text{ cm}^{-1}$, l'erreur instrumentale est certainement inférieure à 0.1 mK , à l'intérieur d'un même spectre. Par conséquent seule l'erreur de pointé intervient.

d) Cas des structures hyperfines non résolues.

Dans la plupart des cas les structures hyperfines des raies ne sont pas entièrement résolues, ce qui rend très complexe leur interprétation et particulièrement difficiles et imprécises les mesures d'écarts entre les composantes. Ce travail est toujours long et pénible. C'est pourquoi les études des structures hyperfines ont été faites sur ordinateur

à l'aide d'un programme de calcul que j'ai spécialement écrit pour traiter les données issues du calcul de la transformée de Fourier. Le principe de ce calcul est donné dans les articles ; il est tiré des études effectuées par O. ROBAUX [41] et la technique utilisée est assez semblable à celle qui est déjà utilisée au Laboratoire Aimé Cotton pour la décomposition des structures obtenues avec un spectromètre de Fabry-Perot.

Les possibilités de cette technique en ce qui concerne l'interprétation des structures et la précision obtenue dans la mesure des écarts sont tout à fait remarquables. Son principal défaut était de ne pas permettre jusqu'à maintenant une évaluation précise d'une incertitude reliée au rapport signal sur bruit, à la résolution instrumentale, et aussi à la résolution effective de la structure. Des études effectuées par O. ROBAUX sont en cours pour remédier à cet état de chose.

Au moment où s'est effectué ce travail, ces études n'ayant pas encore abouti, j'ai tenté malgré tout de donner des incertitudes sur les mesures des grandeurs, effectuées par cette méthode. Elles ne reposent sur aucun calcul rigoureux mais sont une évaluation subjective obtenue après examen des résultats et comparaison avec des valeurs obtenues par des méthodes très précises (résonance paramagnétique sur jet atomique).

II-4 INTERPRETATION DES RESULTATS EXPERIMENTAUX.

Toutes les techniques connues pour effectuer la classification des spectres sont utilisées au Laboratoire Aimé Cotton depuis plusieurs années. Elles ont été appliquées avec le succès que l'on connaît dans les cas particulièrement délicats des spectres des terres rares et des actinides par une équipe de chercheurs sous la direction de J. BLAISE : Z. BEN AHMED, P. CAMUS, J.-F. WYART, qui ont bien voulu me faire profiter de leur expérience.

II-4-A NIVEAUX D'ENERGIE.

Les listes de nombres d'ondes et d'intensité des raies étant obtenues le travail du classificateur consiste d'une part à chercher si ces raies correspondent à des transitions entre niveaux d'énergie déjà connus, d'autre part à déterminer de nouveaux niveaux d'énergie. Ces derniers doivent être, en plus, caractérisés par leur parité et leur nombre quantique J ; si possible on les attribue à une configuration et on leur donne un nom dans un couplage approprié.

Le travail d'identification des raies à des transitions entre niveaux connus est facilité par l'utilisation d'un programme de calcul (TRI, PREDIC) qui établit toutes les transitions possibles entre niveaux connus et

observables compte tenu des règles de parité et de sélection sur les nombres quantiques.

La recherche de niveaux d'énergie nouveaux peut être faite en s'aidant d'un programme (TRI, COMBAC, SEARCH) qui recherche des coïncidences parmi toutes les différences possibles entre les raies non classées et les niveaux d'une parité donnée. On trouve ainsi des "chaînes", c'est-à-dire des groupes de différences qui présentent entre elles des écarts inférieurs à une certaine quantité fixée par l'utilisateur et qui dépend de la précision de mesures des nombres d'ondes. Il est clair que la grande précision que nous obtenons grâce à la S. T. F. réduit cet écart et diminue le nombre de coïncidences fortuites, c'est-à-dire de chaînes qui ne correspondent pas à l'existence réelle d'un niveau.

Dans les spectres pour lesquels un grand nombre de raies sont connues, ce type de recherche automatique permet très rapidement de trouver des "chaînes" très longues qui déterminent à coup sûr l'énergie d'un niveau, sa parité et son nombre quantique J .

Les chaînes sont beaucoup plus courtes dans les spectres de raies peu denses et lorsque les observations n'ont été faites que dans un domaine spectral relativement étroit, comme c'était le cas pour le tellure où seuls les résultats de la région infrarouge étaient utilisables. Dans ces conditions il est beaucoup plus difficile de distinguer entre les chaînes fortuites et celles qui correspondent véritablement à un niveau. De plus on peut rarement déterminer avec précision le nombre quantique J .

Dans ces conditions l'étude de l'effet Zeeman qui permet une

détermination exacte des J et une mesure précise des facteurs de Landé est indispensable. L'étude de la structure hyperfine peut également aider à la classification, mais ceci n'a pas été le cas dans notre travail. Le tellure a un isotope de nombre de masse 125 dont le spin nucléaire est $I = 1/2$ et ses structures hyperfines sont peu importantes, de sorte que nous avons préféré utiliser l'effet Zeeman, plus puissant.

II-4-B ETUDE PARAMETRIQUE DU COUPLAGE INTERMEDIAIRE ET DU MELANGE DES CONFIGURATIONS.

Cette méthode repose sur l'hypothèse du champ central [43] ; dans ce schéma configurationnel les valeurs de l'énergie des niveaux sont obtenues par diagonalisation de la matrice de l'hamiltonien, habituellement limité aux interactions électrostatique Q , et de spin-orbite Λ . La matrice de $Q + \Lambda$ est construite sur les états d'ordre zéro appartenant à une ou plusieurs configurations. On choisit comme états de base ceux qui correspondent à un couplage extrême.

Les éléments de matrice sont de la forme $A_{ij} = \sum_K \alpha_{ij}^k P_k$, où les α_{ij}^k sont des coefficients purement angulaires que l'on peut calculer à l'aide des méthodes de RACAH [44], et où les P_k sont des grandeurs purement radiales ; les intégrales radiales de l'interaction électrostatique, ou intégrales de SLATER, sont de la forme :

$$R^K(n\ell, n'\ell', n''\ell'' n'''\ell''') = e^2 \int_0^\infty \int_0^\infty \mathcal{R}_{n\ell}^*(r_1) \mathcal{R}_{n'\ell'}^*(r_2) \mathcal{R}_{n''\ell''}(r_1) \mathcal{R}_{n'''\ell'''}(r_2) \\ \times \frac{r_<^K}{r_>^{K+1}} dr_1 dr_2$$

A l'intérieur d'une configuration ces intégrales se réduisent à

$$R^K(n\ell n'\ell', n\ell n'\ell') \equiv F^K(n\ell, n'\ell') \quad \text{intégrale directe}$$

$$\text{et } R^K(n\ell n'\ell', n'\ell n\ell) \equiv G^K(n\ell, n'\ell') \quad \text{intégrale d'échange}$$

avec $|\ell - \ell'| \leq K \leq \ell + \ell'$ et $K + \ell + \ell' = 2m$ (m entier).

Les intégrales radiales associées à l'interaction spin-orbite sont

$$\zeta(n\ell, n'\ell') = \int_0^\infty \mathcal{H}_{n\ell}^*(r) \zeta(r) \mathcal{H}_{n'\ell'}(r) \cdot dr$$

avec $n\ell \equiv n'\ell'$ à l'intérieur d'une même configuration.

Dans la méthode paramétrique les intégrales radiales sont considérées comme des paramètres qui sont déterminés par la méthode des moindres carrés de façon à ce que les valeurs calculées de l'énergie des niveaux, E^{cal} , soient aussi proches que possible des valeurs expérimentales E^{exp} . La qualité du traitement réalisé est appréciée par la valeur de l'écart quadratique moyen au sens de RACAH [45], défini par :

$$\overline{\Delta E} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (E_i^{\text{exp}} - E_i^{\text{cal}})^2}{N - P}}$$

où N est le nombre de niveaux étudiés

et P le nombre de paramètres libres.

Un tel traitement n'est évidemment possible que si le nombre de paramètres est inférieur au nombre de niveaux.

Dans la méthode paramétrique, les paramètres tiennent compte de tous les phénomènes ayant une dépendance angulaire donnée ; ils permettent de

tenir compte non seulement de la contribution au 1er ordre des opérateurs Q et A , mais aussi partiellement des effets des configurations lointaines et des effets relativistes (en particulier dans le cas de la constante de couplage spin-orbite). Il a été montré que les paramètres associés aux intégrales d'échange G^K des configurations $p^N \ell$ contiennent une part effective non négligeable [46].

Il est possible d'introduire dans l'étude de l'énergie la correction effective de TREES [47] $\alpha L(L+1)$ (où L est le moment orbital total) et dans le cas des configurations $p^N \ell$ des métalloïdes $\alpha L_1(L_1+1)$ (où L_1 est le moment orbital du terme parent p^N).

La méthode empirique, qui tient compte de façon effective d'un certain nombre de corrections conduit à une meilleure interprétation de l'énergie que celle obtenue dans une étude a priori.

Une chaîne de programmes a été écrite au Laboratoire Aimé Cotton pour effectuer ces études paramétriques sur l'UNIVAC 1110 du centre d'ORSAY [48]. Le programme SUPRAC mis au point par Y. BORDARIER utilise la théorie des graphes et permet d'obtenir l'expression littérale des coefficients angulaires α_{ij}^K dans le cas d'une base L.S. . Le calcul numérique des coefficients angulaires est effectué par le programme AGENAC [48] à partir des formules littérales écrites dans l'algèbre de RACA. Le programme ASSAC regroupe les coefficients angulaires de façon à construire la matrice de $(Q + A)$ qui est ensuite diagonalisée par le programme DIAGAC. Le programme GRAMAC exécute le calcul des moindres carrés sur les valeurs des énergies.

En partant d'un jeu initial de paramètres P_k^0 , on obtient des valeurs propres $E_{(0)}^{\text{cal}}$ que l'on peut associer aux valeurs expérimentales E^{exp} en s'aidant des valeurs expérimentales et calculées des facteurs de Landé. La méthode des moindres carrés permet de déterminer un nouveau jeu de paramètres P_k^1 qui rend minimale la valeur de l'écart quadratique moyen. On utilise ce nouveau jeu pour une nouvelle itération et on poursuit ce cycle itératif jusqu'à la convergence, c'est-à-dire jusqu'à ce que les jeux P_k^n et P_k^{n+1} soient identiques.

La méthode du potentiel central paramétrique [49] permet de déterminer un jeu initial P_k^0 assez proche du jeu optimal pour rendre possible la convergence. Cette méthode introduit un potentiel central $U(r)$ sous une forme analytique dépendant d'un petit nombre de paramètres ; une fois ce potentiel choisi il est possible d'obtenir les fonctions radiales d'une orbitale quelconque et de calculer a priori les intégrales radiales G^K , F^K et ζ permettant d'obtenir les valeurs des énergies des niveaux du spectre étudié. Pour déterminer le potentiel optimal on utilise soit le critère variationnel qui consiste à minimiser l'énergie totale du niveau fondamental, soit le critère spectroscopique qui minimise l'écart quadratique moyen entre les énergies calculées et observées.

II-4-C ETUDE PARAMETRIQUE DE STRUCTURE HYPERFINE.

La théorie générale de la structure hyperfine des atomes a été traitée par B. R. JUDD [50] et exposée dans un article de revue par C. BAUCHE-ARNOULT et J. BAUCHE [51]. Après avoir rappelé les notions fondamentales, je montrerai comment une étude paramétrique peut être effectuée.

L'hamiltonien décrivant l'interaction entre le moment dipolaire magnétique du noyau et le champ magnétique créé par un électron peut s'écrire :

$$h_{\mu} = \frac{2\beta \beta_N \mu_N}{I} \left\{ \frac{1}{r^3} \vec{N} + \frac{8\pi}{3} \delta(\vec{r}) \cdot \vec{s} \right\} \cdot \vec{I}$$

$$\equiv (\mathbf{x}^{(1)} \cdot \mathbf{I}^{(1)})$$

$$\text{où } \vec{N} = \vec{\ell} - \vec{s} + 3\vec{r} \cdot \frac{(\vec{r} \cdot \vec{s})}{r^2} \equiv \ell^{(1)} - \sqrt{10} \{s^{(1)} c^{(2)}\}^{(1)}$$

β et β_N représentent respectivement le magnéton de Bohr et le magnéton nucléaire,

μ_N est le moment dipolaire magnétique du noyau exprimé en magnétons nucléaires,

$\mathbf{I}^{(1)} \equiv \vec{I}$ est le vecteur spin nucléaire.

L'interaction entre le moment quadrupolaire électrique du noyau et le champ électrique produit par un électron peut être décrite par l'hamiltonien :

$$h_Q = \frac{e^2 Q}{I(2I-1)} \frac{1}{r^3} (c^{(2)} \cdot K^{(2)}) \equiv (Y^{(2)} \cdot K^{(2)}) ,$$

Q est le moment quadropolaire électrique du noyau et

$K^{(2)} = \frac{3}{2} \{I^{(1)} \cdot I^{(1)}\}^{(2)}$ est le tenseur du rang 2 associé au spin nucléaire $I^{(1)}$.

Les interactions entre les moments nucléaires d'ordres supérieurs et les champs produits par les électrons sont négligés dans ce travail.

Pour N électrons, les hamiltoniens s'écrivent :

partie magnétique : $H_{\mu} = \sum_i h_{\mu, i} = (X^{(1)} \cdot I^{(1)})$,

partie électrique : $H_Q = \sum_i h_{Q, i} = (Y^{(2)} \cdot K^{(2)})$.

La formule de CASIMIR donne l'énergie de perturbation au premier ordre pour un sous-niveau hyperfin dont la valeur du moment cinétique total est caractérisé par le nombre quantique F . ($\vec{F} = \vec{J} + \vec{I}$) .

$$\Delta W_{\gamma J} = \frac{1}{2} A_{\gamma J} \cdot C + B_{\gamma J} \frac{3C(C+1) - 4I(I+1) J(J+1)}{8I(2I-1) J(2J-1)}$$

où $C = F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)$.

$A_{\gamma J}$ est la constante de structure hyperfine dipolaire magnétique du "niveau γJ ". On montre qu'elle s'écrit :

$$A_{\gamma J} = \frac{\langle \gamma J || X^{(1)} || \gamma J \rangle}{\sqrt{J(J+1)(2J+1)}} .$$

Pour la partie quadropolaire électrique la constante correspondante pour le "niveau γJ " s'écrit :

$$B_{\gamma J} = 2I(2I-1) \sqrt{\frac{J(2J-1)}{(J+1)(2J+1)(2J+3)}} \langle \gamma J || Y^{(2)} || \gamma J \rangle .$$

Les constantes $A_{\gamma J}$ et $B_{\gamma J}$ d'un niveau γJ peuvent être déterminées expérimentalement par la mesure des écarts entre les sous-niveaux hyperfins de ce niveau. Par ailleurs le calcul des éléments de matrice réduits $\langle \gamma J || X^{(1)} || \gamma J \rangle$ et $\langle \gamma J || Y^{(2)} || \gamma J \rangle$ se décomposent en une somme de produits d'une intégrale radiale et d'une intégrale sur les variables angulaires (θ , φ et spin). On peut donc écrire par exemple pour la partie magnétique :

$$A_{\gamma J} = \sum_{n\ell} \alpha_{n\ell}^{\gamma J} a_{n\ell}$$

n et ℓ sont respectivement les nombres quantiques principal et orbital d'un électron. En tenant compte du couplage réel et éventuellement du mélange de configurations on calcule les coefficients angulaires $\alpha_{n\ell}^{\gamma J}$.

Les coefficients $a_{n\ell}$ contiennent habituellement les facteurs numériques et s'écrivent :

$$a_{n\ell} = \frac{2\beta \beta_N \mu_N}{I} \langle r^{-3} \rangle_{n\ell} \quad \text{pour } \ell \neq 0 \quad ,$$

$$a_{ns} = \frac{16\pi}{3} \frac{\beta \beta_N \mu_N}{I} |\psi_{ns}(\sigma)|^2 \quad \text{pour } \ell = 0 \quad .$$

Si l'on a étudié un nombre suffisant de niveaux γJ on peut donc trouver les constantes monoélectroniques $a_{n\ell}$. En général on dispose d'un nombre de mesures de $A_{\gamma J}$ supérieur au nombre de constantes monoélectroniques $a_{n\ell}$, de sorte qu'on est en présence d'un système de N équations à P inconnues ($N > P$). La résolution de ce système par application de la méthode des moindres carrés permet de trouver les valeurs des paramètres $a_{n\ell}^0$ qui rendent minimal l'écart quadratique moyen entre les valeurs

calculées et expérimentales des $A_{\gamma J}$, c'est-à-dire qui permettent d'interpréter au mieux les mesures expérimentales des $A_{\gamma J}$. Les constantes a_{nl} sont obtenues avec un écart-type qui permet d'apprécier la cohérence des résultats.

Le traitement est identique pour la partie électrique dont les constantes de structure hyperfine s'écrivent :

$$B_{\gamma J} = \sum_{nl} \beta_{nl}^{\gamma J} b_{nl}$$

$\beta_{nl}^{\gamma J}$: coefficients angulaires calculables à l'aide des fonctions d'onde du couplage réel,

$$b_{nl} = e^2 Q \langle r^{-3} \rangle_{nl} \quad (l \neq 0) .$$

Les effets relativistes sur la structure hyperfine ont été étudiés en particulier par P. G. H. SANDARS et J. BECK [52] et l'effet des configurations lointaines par B. R. JUDD [53], puis C. BAUCHE-ARNOULT [54]. Les notions fondamentales concernant ces théories sont rappelées dans les publications présentées aux paragraphes III-5 et III-6 consacrées à l'étude de la structure hyperfine dans le tellure et l'iode. Si la forme de l'hamiltonien est modifiée on montre cependant que les constantes $A_{\gamma J}$ et $B_{\gamma J}$ restent encore des combinaisons linéaires de la forme :

$$A_{\gamma J} = \sum_{nl} \alpha_{nl}^{\gamma J} \cdot a'_{nl}$$

$$B_{\gamma J} = \sum_{nl} \beta_{nl}^{\gamma J} b'_{nl}$$

où les $\alpha_{nl}^{\gamma J}$ et $\beta_{nl}^{\gamma J}$ sont des coefficients angulaires et de spin. Les coefficients a'_{nl} et b'_{nl} peuvent encore être traités comme des paramètres mais ils ne sont plus reliés simplement aux intégrales radiales $\langle r^{-3} \rangle_{nl}$.

III. RESULTATS.

III-1 ANALYSE ET SYNTHÈSE DES RESULTATS.

Les résultats expérimentaux et les interprétations théoriques qui sont présentés dans les 5 publications suivantes peuvent être regroupés en 3 thèmes qui sont : (A) la classification et l'analyse des spectres, (B) l'observation et l'analyse des raies "interdites", enfin (C) l'étude de la structure hyperfine des niveaux atomiques. Dans chaque publication un ou deux thèmes peuvent être abordés ; toutefois, le plus souvent, un thème domine, de sorte que les publications ne sont pas présentées dans un ordre chronologique, mais suivant un plan qui reflète à peu près l'ordre dans lequel je vais présenter les thèmes.

- A 1) Classification du Spectre d'Arc du Sélénium (Se I) entre 3 900 et 11 844 cm^{-1} (C. MORILLON et J. VERGÈS).
- A 2) Observation et Classification du Spectre d'Arc du Tellure (Te I) entre 3 678 et 11 761 cm^{-1} (C. MORILLON et J. VERGÈS).
- B, C 3) Etude de la Transition "Interdite" $^2P_{1/2} \rightarrow ^2P_{3/2}$ de la configuration $ns^2 np^5$ dans le brome et l'iode par spectrométrie de Fourier (E. LUC-KOENIG, C. MORILLON et J. VERGES).
- B, C 4) Etude des Configurations Fondamentales $5s^2 5p^4$ de Te I et I II par l'observation des Raies Multipolaires Infrarouges (C. MORILLON et J. VERGÈS).
- A, C 5) Etude expérimentale et théorique de l'iode Atomique : Observation du spectre d'arc infrarouge, classification et structure hyperfine (E. LUC-KOENIG, C. MORILLON et J. VERGÈS).

III-1-A CLASSIFICATION ET ANALYSE DES SPECTRES.

La classification et l'interprétation théorique des spectres très complexes des lanthanides et des actinides constituent une activité qui se poursuit avec succès depuis des années au Laboratoire Aimé Cotton. Des résultats particulièrement importants ont été obtenus par toute une équipe de chercheurs sous la direction de J. BLAISE grâce à l'exploitation intensive des spectres infrarouges obtenus principalement avec un S.I.S.A.M. (Spectromètre à sélection par l'amplitude de la modulation) puis avec la spectrométrie de Fourier, et à l'aide des spectres visibles et ultraviolets obtenus sur le grand spectrographe à réseau d'Argonne National Laboratory. L'analyse semi-empirique effectuée par la méthode paramétrique à l'aide des programmes de calcul mis au point au Laboratoire Aimé Cotton contribue également très largement aux succès remportés. Dans l'étude de ces spectres qui sont longtemps restés inconnus à cause de leur extrême complexité la grande difficulté est due, entre autres causes, au grand nombre de raies et de niveaux d'énergie. L'introduction des programmes de recherche systématique des niveaux et la confrontation permanente de cette recherche de niveaux avec leur analyse par la méthode paramétrique sont particulièrement fructueux. A l'aide de ces méthodes de classification et d'analyse des spectres, l'étude des métalloïdes lourds a été beaucoup facilitée. Toutefois nous avons rencontré des difficultés assez particulières qui semblent caractéristiques des éléments dont la configuration fondamentale est de la forme $ns^2 np^x$ où x entier est compris entre 1 et 6 (éléments du groupe p).

Le tableau I donne une vue d'ensemble et un état de la classification au début de notre travail [56] pour ces éléments qui appartiennent aux 3ème, 4ème, 5ème, 6ème, 7ème et 8ème colonnes du tableau de Mendeleev. Dans chaque case se trouve un élément représenté par son symbole chimique. On trouve également l'énergie du premier niveau excité, l'énergie du niveau fondamental de l'ion et le domaine d'énergie sur lequel s'étend la configuration fondamentale de l'ion $ns^2 np^{x-1}$.

Pour la plupart de ces éléments, les raies fortes du spectre d'arc se trouvent d'une part dans l'ultraviolet lointain et correspondent à des transitions entre les configurations excitées et la configuration fondamentale, d'autre part dans l'infrarouge et correspondent à des transitions entre configurations excitées. Les observations ultraviolettes permettent de déterminer assez facilement tous les niveaux d'une parité ; les observations infrarouges ultérieures fournissent les transitions qui permettent de déterminer les niveaux qui ont la même parité que la configuration fondamentale. La plupart des éléments de ce groupe ont été classés de cette manière.

Les observations infrarouges des spectres du sélénium, du tellure et de l'iode que nous avons faites par spectrométrie de Fourier nous ont permis de dresser des listes précises du nombre d'ondes et de l'intensité des raies entre 3 000 et 12 000 cm^{-1} environ.

Dans le cas de l'iode la classification était très avancée grâce aux observations de KIESS et CORLISS et au travail de classification de MINNHAGEN [P5]. La plupart des raies observées ont été facilement interprétées. Deux nouveaux niveaux ont cependant été déterminés.

Tableau I

Les numéros des colonnes et des lignes sont ceux du tableau de MENDELEEV.

Dans chaque case on trouve :

(1) le symbole chimique de l'élément,

(2) une lettre entre parenthèses qui correspond à une estimation de l'état de la classification du spectre d'arc, donnée par C. MOORE [56] (A, très bien connu, B, assez bien connu ..., E, à peu près inconnu),

(3) trois nombres exprimés en cm^{-1} (A. E. L. [57]),

le premier indique l'énergie du niveau le plus bas appartenant à la configuration excitée

$$ns^2 np^{x-1} (n+1)s,$$

le second donne l'énergie du niveau fondamental de l'ion $ns^2 np^{x-1}$,

le troisième indique le domaine d'énergie sur lequel s'étend la configuration fondamentale de

$$\text{l'ion } ns^2 np^{x-1}.$$

n	colonne					
	3 ns ² np	4 ns ² np ²	5 ns ² np ³	6 ns ² np ⁴	7 ns ² np ⁵	8 ns ² np ⁶
2	B (B) 40 040. 66 930. 0.	C (A) 60 334. 90 878. 64.	N (A) 83 285. 117 345. 32 687.	O (A) 73 768. 109 837. 40 468.	F (A) 102 406. 140 554. 44 919.	Ne (A) 148 260. 173 932. 782.
3	Al (A) 25 347. 48 279. 0.	Si (A) 39 683. 65 743. 287.	P (A) 55 939. 88 560. 21 576.	S (A) 52 623. 83 559. 24 573.	Cl (A) 71 954. 104 991. [27 900.]	A (A) 93 143. 127 110. 1 432.
4	Ga (A) 24 788. 48 380. 0.	Ge (A) 37 451. 63 600. 1 767.	As (A) 50 694. 79 165. 22 593.	Se (B) 48 182. 78 658. 23 895.	Br (A) 63 430. 95 550. ?	Kr (A) 79 972. 112 915. 5 371.
5	In (A) 24 373. 46 667. 0.	Sn (A) 34 641. 59 232. 4 251.	Sb (A) 43 249. 69 700. 23 905.	Te (C?) 44 253. 72 667. 24 033.	I (A) 54 633. 84 340. 33 629.	Xe (A) 67 068. 97 834. 10 537.
6	Tl (A) 26 477. 49 264. 0.	Pb (A) 34 959. 59 821. 14 081.	Bi (B) 32 588. 58 790. 44 173.	Po (C) 39 081. 67 980. ?	At (E) ? ? ?	Rn (A) 54 620. 86 692. 30 895.

Pour le sélénium la classification, quoique incomplète, était suffisamment avancée pour que l'interprétation d'une grande partie des raies infrarouges soit possible. Nos observations précises à haute résolution nous ont permis de déterminer la structure fine des termes 5D et 3D , des configurations $5s^2 5p^3 nd$, et celles des termes 5F et 3F des configurations $5s^2 5p^3 nf$. En particulier les énergies des niveaux 5F et 3F de $5s^2 5p^3 4f$ ont pu être mesurés avec précision et le nombre quantique n de l'électron f a été corrigé ; il semble que dans plusieurs spectres les valeurs de ce nombre quantique trouvées dans la littérature soient encore erronées.

Dans le cas du tellure la plus grande partie des niveaux proposés dans "A. E. L." (Atomic Energy Levels) [56] se sont révélés faux, aucune des raies observées ne pouvant être identifiée. De sorte que la lettre C du Tableau I devrait être remplacée par D ou E ! Les observations ultraviolettes et visibles, effectuées par MacLENNAN puis par RUEDY [P2] et qui avaient servi à la détermination des niveaux sont d'ailleurs tellement discordantes qu'aucune confiance ne pouvait leur être accordée. C'est donc seulement avec nos mesures infrarouges que nous avons dû analyser ce spectre. Il faut reconnaître que sans l'aide d'observations ultraviolettes précises, notre recherche s'est très vite trouvée dans l'impasse. C'est grâce à l'étude de l'effet Zeeman de 90 raies donnant les facteurs de Landé de 46 niveaux et par la confrontation permanente avec l'analyse paramétrique que les énigmes posées par ce spectre ont été résolues.

Les études paramétriques ont été effectuées pour le spectre d'arc

du tellure et celui de l'iode. Pour le tellure, il s'agissait de déterminer les niveaux d'énergie ; pour l'iode, c'est la connaissance des fonctions d'onde qui était nécessaire pour interpréter la structure hyperfine. Dans le cas du sélénium, la classification était suffisamment avancée pour que l'étude paramétrique ne nous paraisse pas indispensable.

D'importantes difficultés ont été rencontrées dans l'étude paramétrique des configurations $ns^2 np^{x-1} n'l$ de ces éléments. Le premier problème est dû au couplage qui ne peut pas être correctement représenté par l'un des schémas classiques (L-S, j-j, $J_c l$, etc...). Dans le cas de l'iode le couplage $J_c l$ qui fait apparaître des paires a été adopté par MINNHAGEN. C'est certainement un assez bon modèle pour les niveaux bas des configurations $5s^2 5p^4 ({}^3P) 6s$ et $7s$; pour les configurations $5s^2 5p^4 np$ et $5s^2 5p^4 nd$ le couplage réel s'en éloigne de façon évidente.

Dans le spectre d'arc du tellure, les niveaux basés sur le terme parent 4S se groupent assez bien en triplets et quintuplets qui indiquent un couplage proche du couplage L-S. Par contre les niveaux basés sur 2D semblent plutôt se grouper par paires, ce qui indiquerait un couplage $J_c l$. Dans l'impossibilité de trouver un schéma de couplage satisfaisant, les fonctions d'onde ont été décrites par rapport à la base des fonctions L-S : $((5s^2 5p^{x-1} (S_1 L_1), nl) S, L, J)$.

La deuxième difficulté met en évidence les limites de la méthode paramétrique et paraît être générale pour les éléments du groupe $ns^2 np^x$. Pour ces éléments les configurations excitées que l'on rencontre le plus

souvent sont du type $ns^2 np^{x-1} n'l$. Chacune d'elles se divise généralement en groupes de niveaux bien distincts qui sont basés sur les termes parents, c'est-à-dire sur les termes de l'ion $ns^2 np^{x-1}$. Le domaine d'énergie couvert par la configuration fondamentale de l'ion permet d'estimer l'étendue d'une configuration du spectre d'arc $ns^2 np^{x-1} n'l$ (voir Tableau I).

Les éléments de la 3ème colonne, ($x=1$), B, Al, Ga, Ge, In et Tl sont les plus simples de ce point de vue, puisqu'ils ne contiennent qu'un seul terme parent et un seul niveau (1S_0).

Les éléments des colonnes 4 et 8, ($x=2$), ne contiennent qu'un terme parent 2P , qui se divise en 2 niveaux $J = 1/2$ et $J = 3/2$; au fur et à mesure que n augmente, l'interaction spin-orbite croît de sorte que pour le xenon l'écart $^2P_{3/2} - ^2P_{1/2}$ atteint $10\ 000\ \text{cm}^{-1}$.

Les éléments des colonnes 5 et 7, ($x=3$), contiennent trois termes parents 3P , 1D et 1S . Déjà pour les éléments légers, azote et fluor, l'interaction électrostatique des électrons p du coeur est forte, et chaque configuration s'étale sur un domaine d'énergie très étendu, $33\ 000\ \text{cm}^{-1}$ pour N_I et $45\ 000\ \text{cm}^{-1}$ pour F_I .

Tant que l'interaction spin-orbite ζ_{np} des électrons p du coeur reste faible, les niveaux sont bien groupés en 3 paquets distincts. Pour les éléments lourds de ces colonnes, le couplage dans la configuration fondamentale de l'ion est très éloigné du couplage L-S. Les niveaux des configurations $ns^2 np^{x-1} n'l$ se trouvent répartis en 5 groupes basés sur les niveaux d'énergie parents $[^3P_2]$, 3P_1 , $[^3P_0]$, $[^1D_2]$,

$[^1S_0]$. Les niveaux écrits entre crochets ne sont pas des niveaux L-S purs ; de ce fait aucun modèle de couplage classique n'est approprié. Pour le bismuth, dont le spectre est encore mal connu et qui mériterait d'être étudié prochainement, une configuration s'étend sur environ $44\ 000\text{ cm}^{-1}$. Pour l'iode, une configuration s'étend sur $33\ 000\text{ cm}^{-1}$.

Dans la colonne 6, ($x=4$), on observe le même état de chose ; les termes parents sont 4S , 2D et 2P , qui donnent 5 niveaux parents pour les éléments lourds. La classification est peut être légèrement plus simple en ce qui concerne les niveaux bas, car le niveau parent $^4S_{3/2}$ est assez bien isolé et les niveaux qui sont basés sur lui peuvent être plus facilement distingués.

Pour les éléments des colonnes 5, 6 et 7 on observe donc un très important mélange des configurations puisque la distance entre configurations est toujours inférieure au domaine d'énergie sur lequel chacune d'elles s'étend. Ce mélange devient d'autant plus complexe que le couplage s'éloigne du couplage L-S dans la configuration fondamentale de l'ion parent. Il est, en fait, souvent impossible de connaître tous les niveaux d'une configuration, car ceux qui sont basés sur le terme parent de plus grande énergie se trouvent au voisinage du potentiel d'ionisation ou dans le continuum. L'examen du Tableau I permet de constater que ceci est vrai même pour la configuration excitée la plus basse dans le cas de l'iode, du bismuth, etc... .

Une étude paramétrique monoconfigurationnelle est peu significative même pour les niveaux les plus bas et il faut traiter simultanément plusieurs configurations de la même parité pour obtenir des résultats

satisfaisants. Le traitement paramétrique du mélange de configurations fait intervenir des intégrales radiales supplémentaires, de sorte que le nombre de paramètres devient très rapidement supérieur au nombre de niveaux connus. On est donc à la limite d'utilisation de cette méthode.

En fait on est même à la limite de validité du modèle du champ central. L'interaction électrostatique des électrons p du coeur et leur interaction spin-orbite pour les éléments lourds sont trop importantes pour être traitées comme des perturbations.

Il apparaît ainsi que pour ces spectres les modèles classiques ne sont pas bien adaptés ; il s'ensuit que leur classification est délicate, et en toute rigueur de nouvelles approches théoriques devraient être mises au point.

III-1-B OBSERVATION ET ANALYSE DES RAIES INTERDITES.

Plusieurs nébuleuses gazeuses, certaines étoiles, et en particulier la couronne solaire, ont des spectres montrant des raies d'émission qui, pendant longtemps, n'ont pu être identifiées. En 1942, EDLÉN [57] fit la découverte importante que certaines des raies de la couronne solaire étaient dues à des transitions "interdites" dans le spectre des éléments les plus abondants. Actuellement plus de la moitié des raies solaires restent encore non identifiées, soit qu'elles appartiennent à des spectres d'éléments très ionisés, soit qu'elles soient interdites.

L'observation de raies interdites dans les objets célestes indique la présence de conditions physiques inhabituelles, en particulier de faibles densités. Leur grande importance en astrophysique vient de l'information qu'elles peuvent fournir sur les conditions de leur émission. Les raies interdites sont, pour un astrophysicien, un outil puissant pour l'étude de la matière solaire, stellaire, etc... . Le travail du spectroscopiste consiste, entre autre, à développer cet outil au plus haut degré de perfection en étudiant tous les aspects du problème en laboratoire du point de vue expérimental et du point de vue théorique. L'observation et l'analyse des raies interdites retient l'attention des expérimentateurs depuis la naissance de la spectroscopie puisque ce sont des raies qui violent les règles de sélection que les premiers spectroscopistes cherchaient justement à établir.

Il est nécessaire de préciser ce que l'on entend par raies interdites car ce terme recouvre plusieurs phénomènes très distincts. Les règles de sélection pour l'émission du rayonnement dipolaire électrique sont rappelées dans le Tableau II. Il est clair que seules les règles 1, 2 et 3 sont strictes, et nous réserverons le qualificatif "interdit" aux transitions qui ne les respectent pas.

Il faut tout d'abord rappeler l'existence des raies forcées par un champ électrique (externe ou interne) dont l'intensité croît dans une décharge comme le carré du champ [58]. Ces transitions violent la règle de parité (3, Tableau II) mais correspondent cependant à l'émission d'un rayonnement dipolaire électrique ; ce phénomène est expliqué par la propriété de l'effet Stark de mélanger deux niveaux voisins de parités différentes.

	Rayonnement dipolaire électrique (D. E.)	Rayonnement dipolaire magnétique (D. M.)	Rayonnement quadrupolaire électrique (Q. E.)
1	$\Delta J = 0, \pm 1$ ($0 \leftrightarrow 0$)	$\Delta J = 0, \pm 1$ ($0 \leftrightarrow 0$)	$\Delta J = 0, \pm 1, \pm 2$ ($0 \leftrightarrow 0$, $\frac{1}{2} \leftrightarrow \frac{1}{2}, 0 \leftrightarrow 0$)
2	$\Delta M = 0, \pm 1$	$\Delta M = 0, \pm 1$	$\Delta M = 0, \pm 1, \pm 2$
3	Changement de parité	Même parité	Même parité
4	$\Delta l = \pm 1$	$\Delta l = 0$	$\Delta l = 0, \pm 2$
5	$\Delta S = 0$	$\Delta S = 0$	$\Delta S = 0$
6	$\Delta L = 0, \pm 1$ ($0 \leftrightarrow 0$)	$\Delta L = 0$	$\Delta L = 0, \pm 1, \pm 2$ ($0 \leftrightarrow 0$, $0 \leftrightarrow 1$)

Tableau II

Règles de sélection pour les rayonnements dipolaire électrique,
dipolaire magnétique et quadrupolaire électrique.

La règle de sélection $\Delta J=0, \pm 1$ ($0 \not\leftrightarrow 0$) peut aussi être violée dans certaines transitions et donner lieu cependant à l'émission d'un rayonnement dipolaire électrique. C'est le cas des transitions $6s^2 1S_0 - 6s 6p 3P_2$ et $6s^2 1S_0 - 6s 6p 3P_0$ du mercure. L'explication repose sur le couplage entre le moment cinétique total des électrons et le moment cinétique du noyau. Le nombre quantique J des électrons n'est plus un bon nombre quantique ; 2 niveaux $3P_0$ et $3P_1$ d'une part, $3P_1$ et $3P_2$ d'autre part, se mélangent dans un sous-état de nombre quantique total F donné. Il est évident que ces raies ne sont observées que pour les isotopes du mercure qui ont un spin nucléaire non nul.

Les raies "interdites" que nous considérons dans ce travail sont celles qui correspondent à des transitions qui violent la règle du changement de parité et qui sont dues à l'émission soit d'un rayonnement dipolaire magnétique (D. M.), soit d'un rayonnement quadrupolaire électrique (Q. E.), soit de ces deux types de rayonnement simultanément (rayonnement mixte). Les règles de sélection correspondantes sont rappelées dans le Tableau II. Les règles 1, 2 et 3 sont strictes ; 4, 5 et 6 ne sont valables qu'en l'absence de mélange de configurations et pour un couplage L-S pur. Nous conviendrons de distinguer ce type de raies "interdites" en les appelant raies "multipolaires" (de l'expression anglo-saxonne : "multipole lines", généralement admise).

L'observation des raies "multipolaires" (D.M. + Q.E.) dans les configurations fondamentales $ns^2 np^x$ a été effectuée dans le visible et l'ultraviolet depuis longtemps, puis dans l'infrarouge photographique. Dans l'infrarouge photoélectrique, à l'exception de la raie de l'iode

${}^2P_{1/2} \rightarrow {}^2P_{3/2}$ de la configuration $5s^2 5p^5$ qui avait été observée et identifiée par J. VERGES [59] mais non analysée, il semble qu'aucune raie de ce type n'avait encore été identifiée. Or, un grand nombre de transitions entre niveaux des configurations fondamentales donnent des raies de longueur d'onde supérieure à 1μ , ce qui nous a amené à entreprendre leur observation de manière systématique.

En plus de l'intérêt astrophysique déjà évoqué, ces transitions permettent de déterminer directement l'énergie des niveaux de la configuration. Toujours sur le plan de la connaissance de l'atome, les études de l'effet Zeeman et de la structure hyperfine des raies multipolaires fournissent des renseignements sur les niveaux de cette configuration, qui ne peuvent pas être obtenus dans l'ultraviolet et qui ne peuvent l'être que pour quelques-uns par résonance magnétique.

Les études présentées dans les publications P3 et P4 concernent les raies ${}^2P_{1/2} \rightarrow {}^2P_{3/2}$ de ${}^{127}\text{I I}$, ${}^{79}\text{Br I}$ et ${}^{81}\text{Br I}$ dans les configurations $ns^2 np^5$, et plusieurs raies des configurations $5s^2 5p^4$ de Te I et I II .

L'étude de l'effet Zeeman des raies multipolaires a permis d'observer pour la première fois de manière directe "l'effet d'interférence" entre les rayonnements dipolaire magnétique et quadrupolaire électrique. Bien que l'existence de ce phénomène ait déjà été démontrée théoriquement et expérimentalement, le fait d'observer sans artifice une distribution des intensités des composantes π ($\Delta M = \pm 1$) qui s'explique très exactement en tenant compte du terme d'interférence, est important en lui-même. Mais tout l'intérêt d'une telle observation réside dans le fait

qu'elle ouvre la voie à une mesure précise du rapport entre les probabilités de transition dipolaire magnétique et quadrupolaire électrique. Si l'estimation théorique de la probabilité de transition dipolaire magnétique ne repose que sur les grandeurs angulaires, celle du rayonnement quadrupolaire électrique nécessite la connaissance d'une intégrale radiale

$$s_q = \frac{2}{5} \int_0^{\infty} r^2 P^2(r) dr .$$

Les calculs effectués sur la structure observée fournissent une valeur expérimentale du rapport des probabilités de transition qui diffère d'un facteur 3 environ avec la valeur estimée théoriquement par GARSTANG [60]. Nos mesures d'intensité sur la structure observée ne permettent pas actuellement de conclure de manière sûre et définitive et d'autres observations de cette structure sont nécessaires mais n'ont pu être effectuées jusqu'à maintenant, en particulier pour des raisons techniques concernant la spectrométrie de Fourier.

D'ores et déjà il semble que d'autres structures d'effets Zeeman de raies multipolaires présentant l'effet d'interférence devraient pouvoir être observées dans l'infrarouge grâce à la spectrométrie de Fourier. Si la méthode se révèle aussi puissante que je l'espère, il n'est pas impensable d'étudier l'effet Zeeman de structure hyperfine de raies multipolaires comme la raie $^2P_{1/2} \rightarrow ^2P_{3/2}$ de I I . Un dépouillement sur ordinateur de la structure serait alors nécessaire pour obtenir les informations intéressantes.

III-1-C STRUCTURE HYPERFINE DES NIVEAUX ATOMIQUES.

L'étude de la structure hyperfine par des voies optiques était jusqu'à maintenant limitée au visible et au proche ultraviolet par l'utilisation de l'interféromètre de Fabry-Perot. L'avènement de la spectrométrie de Fourier permet d'étendre les observations hyperfines au domaine infrarouge.

L'étude de structure hyperfine peut être effectuée pour plusieurs raisons : comme aide à la classification des spectres ou comme test aux fonctions d'onde établies par ailleurs, comme moyen d'accès aux grandeurs nucléaires telles que le spin et les moments dipolaire magnétique et quadrupolaire électrique, enfin le but cherché peut être d'améliorer la connaissance du phénomène lui-même. Dans ce domaine des études théoriques récentes ont été faites, qui concernent d'une part les effets de la relativité et d'autre part les effets dûs aux configurations lointaines dont la polarisation de spin est un aspect.

D'importants rappels concernant la structure hyperfine dipolaire magnétique et quadrupolaire électrique sont faits dans les articles P4 et P5 qui donnent eux-mêmes les références des travaux théoriques traitant des effets cités ci-dessus. Très brièvement on peut rappeler que les effets dûs aux configurations lointaines ont été étudiés par B. R. JUDD [53] pour les configurations p^N et par C. BAUCHE-ARNOULT [54] dans le cas le plus général des configurations l^N et $l^N l'$.

En ce qui concerne la relativité, ce sont P. G. H. SANDARS et J. BECK [52] qui, les premiers, ont étudié ses effets sur un système de plusieurs

électrons hors des sous-couches complètes. Dans le cas des configurations $n\ell^N$ les conclusions sont que, pour la partie magnétique, les effets relativistes se mélangent aux effets des interactions de configurations lointaines ; en revanche, pour la partie électrique, les effets relativistes peuvent être en partie obtenus isolément.

Deux méthodes de calcul des effets relativistes sont actuellement utilisées couramment. La plus ancienne repose sur la méthode de Hartree-Fock [62]. Une méthode récente utilise la méthode du potentiel paramétrique établie par M. KLAPISCH [49] et étendue au cas relativiste par E. LUC-KOENIG [62].

Du point de vue expérimental le travail de LIBERMAN [63] sur la structure hyperfine des isotopes impairs de Xe I a été le premier au laboratoire à porter sur les configurations $ns^2 np^{x-1} n'\ell$. Il mettait en évidence l'importance des effets relativistes sans toutefois pouvoir préciser l'influence des configurations lointaines.

Notre travail expérimental en structure hyperfine porte sur les configurations $ns^2 np^5$ de $^{127}\text{I I}$, $^{79}\text{Br I}$ et $^{81}\text{Br I}$, sur les configurations $5s^2 5p^4$ de $^{125}\text{Te I}$ et $^{127}\text{I II}$ et sur les configurations $5s^2 5p^4 n\ell$ de $^{127}\text{I I}$. Grâce aux sources utilisées et à la spectrométrie de Fourier, ces éléments assez lourds ont des structures hyperfines infrarouges assez bien résolues, bien qu'elles ne le soient parfaitement que dans des cas exceptionnels. L'utilisation du programme de décomposition des structures nous a donné des valeurs précises des constantes magnétiques $A_{\gamma J}$ et électriques $B_{\gamma J}$. L'incertitude sur $A_{\gamma J}$ varie entre 0.05 et 1 mK, alors que celle sur les $B_{\gamma J}$ varie entre 0.5 et 5 mK (1 mK = 10^{-3} cm $^{-1}$).

La structure des raies multipolaires a été interprétée en faisant l'hypothèse que le rayonnement dipolaire magnétique était prépondérant. La structure hyperfine d'une raie quadrupolaire électrique pure de $^{125}\text{Te I}$ $^1D_2 \rightarrow ^3P_0$ a pu être observée et analysée.

La structure hyperfine des niveaux appartenant aux configurations excitées de I I a été étudiée de façon systématique. 130 structures ont été analysées, donnant les constantes de 37 niveaux pairs et 42 niveaux impairs. Je pense qu'un si grand nombre de mesures aussi précises sur un même spectre n'avait encore jamais été obtenu. Bien que la précision des mesures ne soit pas comparable à celle obtenue par résonance magnétique sur un jet atomique, il nous semblait en effectuant ce travail que ce grand nombre de résultats pourrait servir à tester les résultats théoriques obtenus par C. BAUCHE-ARNOULT pour les configurations $l^N l'$. Les difficultés rencontrées dans l'étude du couplage intermédiaire et du mélange de configurations, et qui ont été évoqués plus haut, ont rendu difficile l'utilisation de ces résultats pour tenir compte en toute rigueur des effets dûs aux configurations lointaines. C'est pourquoi l'interprétation théorique de structure hyperfine s'est limitée à la détermination par la méthode paramétrique des constantes de structure hyperfine monoélectroniques, $a(nl)$ pour la partie magnétique et $b(nl)$ pour la partie électrique en faisant l'approximation que ces grandeurs gardent la même valeur pour une parité donnée quels que soient la configuration et le terme considérés. L'ensemble des résultats obtenus est assez cohérent et permet, en particulier pour les électrons p du coeur, d'intéressantes remarques.

En effet, grâce aux calculs relativistes effectués par E. LUC-KOENIG et aux calculs de polarisation de spin effectués par J. BAUCHE par la méthode S.U.H.F. (Hartree-Fock sans restriction sur le spin), on peut apprécier les importances respectives de ces effets.

L'étude des configurations $ns^2 np^5$ de Br I et I I permet la détermination du rapport $A(^2P_{3/2}) / A(^2P_{1/2})$ qui, comparé à la valeur théorique, autorise à penser que les effets relativistes prédominent. Les deux niveaux de cette configuration sont insuffisants pour évaluer les constantes monoélectroniques $a_s(5p)$, $a_l(5p)$ et $a_{sC}(5p)$ par une méthode paramétrique. On peut cependant obtenir des valeurs cohérentes en fixant soit la valeur de $a_s(5p)$, soit le rapport $a_l(5p) / a_{sC}(5p)$ à l'aide de calculs relativistes a priori.

Dans les configurations $5s^2 5p^4$ de Te I et I II la situation est plus favorable. C'est dans l'étude de la structure hyperfine magnétique de ces configurations que les résultats sont les plus spectaculaires. Les valeurs expérimentales des constantes $a_s(5p)$, $a_l(5p)$ et $a_{sC}(5p)$ sont remarquablement interprétées par les calculs des effets relativistes et de polarisation de spin. Les valeurs de $a_l(5p)$ et $a_{sC}(5p)$ sont très cohérentes avec les valeurs relativistes. Par contre la valeur expérimentale de $a_s(5p)$ est due, de manière à peu près égale, aux effets relativistes et à la polarisation de spin.

En ce qui concerne les configurations excitées de l'iode, les résultats obtenus pour les configurations impaires sont meilleurs que ceux des configurations paires pour lesquelles le couplage intermédiaire et le mélange de configurations sont particulièrement complexes. Toutefois les

mêmes conclusions peuvent être faites en ce qui concerne l'importance des effets relativistes. Les valeurs des paramètres $a(5p)$ sont voisines de celles obtenues dans $5s^2 5p^4$ de I II et $5s^2 5p^5$ de I I (à l'exception de $a_{sc}(5p)$ dans les configurations paires, vraisemblablement à cause de la mauvaise qualité des fonctions d'onde).

Toutefois la polarisation de spin paraît moins importante que dans Te I ; un calcul S.U.H.F. est nécessaire pour confirmer ce point.

En conclusion, cette étude de la structure hyperfine pour des éléments lourds ($Z > 50$) a permis, grâce à la précision des calculs relativistes a priori utilisant la méthode du potentiel central et avec l'appui des calculs de polarisation de spin, de confirmer l'importance primordiale des effets relativistes dans cette région du spectre. Mais on a pu mettre en évidence la part non négligeable de la polarisation de spin. Si, dans les configurations fondamentales, on peut affirmer que l'influence des configurations lointaines ne se manifeste pas de façon sensible par d'autres effets, dans les configurations excitées l'incertitude sur la valeur des constantes monoélectroniques, due non à l'incertitude sur les mesures expérimentales mais à l'imprécision des fonctions d'onde, ne permet pas de conclure de façon définitive.

PUBLICATIONS PRESENTEES dans la Thèse :

- P1 : Classification du spectre d'arc du sélénium (Se I) entre 3 900 et 11 844 cm^{-1} . C. MORILLON et J. VERGÈS
PHYSICA SCRIPTA, 10, 227 (1974).
- P2 : Observation et Classification du spectre d'arc du tellure (Te I) entre 3 678 et 11 761 cm^{-1} . C. MORILLON et J. VERGÈS
PHYSICA SCRIPTA, à paraître.
- P3 : Etude de la transition "interdite" $^2P_{1/2} \rightarrow ^2P_{3/2}$ de la configuration np^5 dans le brome et l'iode par spectrométrie de Fourier.
E. LUC-KOENIG, C. MORILLON et VERGÈS
PHYSICA, 70, 175 (1973).
- P4 : Etude des configurations fondamentales $5s^2 5p^4$ de Te I et I II par l'observation des raies multipolaires infrarouges.
C. MORILLON et J. VERGÈS
PHYSICA SCRIPTA, à paraître.
- P5 : Etude expérimentale et théorique de l'iode atomique :
Observation du spectre d'arc infrarouge, classification et structure hyperfine.
E. LUC-KOENIG, C. MORILLON et J. VERGÈS
PHYSICA SCRIPTA, à paraître.

PUBLICATIONS présentées en Annexe :

A1 : Etude des spectres d'émission du samarium, du néodyme et de l'uranium entre 2,3 et 4,1 μm avec un spectromètre à grilles.

C. MORILLON

Spectrochim. Acta, 25 B, 513 (1970).

A2 : Etude des spectres d'émission atomique du néon et du xénon entre 3.5 et 5.5 μm à l'aide d'un spectromètre à grilles.

C. MORILLON

Spectrochim. Acta, 27 B, 527 (1972).

BIBLIOGRAPHIE.

- [1] Voir par exemple :
- WEISSKOPF, V., *Physikalische Zeitschrift* 34, 1 (1933).
- FOLEY, H. M., *Physical Review* 69, 616 (1946).
- BARANGER, M., *Physical Review* 112, 855 (1958).
- FANO, U., *Physical Review* 131, 259 (1963).
- BRUNE, R. G., *Handb. d. Physik*, Springer, 27, 1 (1964).
- OMONT, A., *Journal de Physique* 26, 26 (1965).
- KUHN, H. G. and VAUGHAN, J. M., *Proc. Roy. Soc.* A277, 297 (1964).
- KUHN, H. G., *Proceeding of the Int. Conf. on Optical Pumping and Atomic Line Shape (O P A L S)*, WARSAW, Poland (1968).
- SMITH, E. W., COOPER, J., CHAPPELL, W. R. and DILLON, T.
- J. Quant. Spectros. Radiat. Transfer* 11, 1547 (1971).
- 11, 1567 (1971).
- [2] CONNES, P., *Rev. Opt.* 38, 157 (1959) ; *ibid.* 38, 416 (1959) ;
ibid. 39, 402 (1960).
- VERGÈS, J., *Spectrochim. Acta* 24B, 177 (1969).
- [3] GIRARD, A., *Optica Acta* 1, 81 (1960).
- Appl. Opt.* 2, 79 (1963).
- J. Phys.* 24, 139 (1963).
- [4] CHAMPEAU, R. J., JOCCOTTON, J. et LUC-KOENIG, E.
- J. Phys. B*, à paraître.
- [5] TOMKINS, F. S. et FRED, M., *J. Opt. Soc. Am.* 47, 1087 (1957).
- [6] VERGÈS, J., *Thèse*, ORSAY (1969).

- [7] NESMEYANOV, A. N. (U.S.S.R.), "Vapor pressure of the Chemical Elements" edited by R. GARY (N.B.S., U.S.A.)
ELSEVIER PUBLISHING COMPANY (1963), Handbook of Chemistry and Physics, Published by the Chemical Rubber Co .
- [8] GUELACHVILI, G., Thèse de 3ème cycle, ORSAY (1965).
- [9] BLAISE, J., MORILLON, C., SCHWEIGHOFER, M. G. et VERGES, J.,
Spectrochim. Acta, 24B, 405 (1969).
- [10] DELOUIS, H., Thèse d'Etat, ORSAY (1973).
- [11] TOLANSKY, S., High Resolution Spectroscopy
Edited by Methuen and Co, LTD, LONDON (1947).
International Conference on Hollow Cathode discharges and their Applications (ORSAY, Sept. 1971).
- [12] CHAMPEAU, R. J., KELLER, J. C., ROBAUX, O. et VERGES, J.,
J. Phys. B, 7, L163 (1974).
- [13] SULLIVAN, J. V. et WALSH, A., Spectrochim. Acta, 21, 721 (1965).
- [14] LOWE, R. M., Spectrochim. Acta, 26B, 201 (1971).
- [15] HYMAN, H. G. C., ZEEGERS, P. J. Th. et VAN ELST, J. A.,
Spectrochim. Acta, 29B, 111 (1974).
- [16] GERSTENKORN, S., Méthodes Physiques d'Analyse
(G. A. M. S.) 5, 315 (1969).
- [17] LITZÉN, U., Arkiv. för Fysik, 28, 239 (1964).
- [18] HOVIS, W. A., J. Opt. Soc. Am., 52, 649 (1962).
- [19] DEBRAS-GUEDON, J. et LIODEC, N., Compt. Rend. Acad. Sciences,
p. 3336, Séance du 23 Septembre 1963.
RASBERRY, S. P., SCRIBNER, B. F. et MARGOSHES, M.,
Appl. Opt. 6, 81 (1967), Appl. Opt. 6, 87 (1967).

- [19] Suite
BURGESS, D. D., FAWCETT, B. C. et PEACOCK, N. J.
Proc. Phys. Soc. 92, 805 (1967).
- [20] LITZÉN, U., Physica Scripta, 1, 253 (1970).
- [21] FELLGETT, P., Thèse, Université de CAMBRIDGE (1951).
- [22] JACQUINOT, P., 17ème Congrès du G. A. M. S., 1954,
J. Phys. 19, 39 (1958).
- [23] CONNES, J., Thèse, PARIS (1960).
- [24] CONNES, J., CONNES, P. et MAILLARD, J. P.,
J. Phys., 28 (C2), 120 (1967).
- [25] MAILLARD, J. P., Thèse (Ingénieur-Docteur), ORSAY (1967).
- [26] CONNES, J., DELOUIS, H., CONNES, P., GUELACHVILI, G., MAILLARD, J.P.
et MICHEL, G., Nouv. Rev. Opt. Appliquée, 1, 3 (1970).
- [27] CUSENIER, M. et PINARD, J., J. Phys., 28 (C2), 97 (1967).
- [28] CONNES, P. et MICHEL, G., C. R. Acad. Sc. Paris, 270, 1548 (1970).
ASPEN, International Conference on Fourier Spectroscopy, 313 (1970).
- [29] CONNES, J., J. Phys. et le Rad., 19, 197 (1958).
- [30] DELOUIS, H., Thèse, ORSAY (1968).
- [31] CONNES, J., ASPEN, 83 (1970).
DELOUIS, H., ASPEN, 145 (1970).
- [32] CONNES, J. et NOZAL, V., J. Phys. 22, 359 (1961).
- [33] PINARD, J., Thèse, ORSAY (1968), Ann. Phys. 4, 147 (1969).
- [34] BLANC-LAPIERRE, A. et FORTET, R., Théorie des Fonctions
Aléatoires, éd. Masson, PARIS (1953).
- [35] CHAUVILLE, J., communication personnelle.
- [36] GUELACHVILI, G., Nouv. Rev. Opt. Appliquée, 3, 317 (1972).

- [37] EDLÉN, B., J. Opt. Soc. Am., 43, 339 (1953).
- [38] GUELACHVILI, G., Thèse, ORSAY (1973).
- [39] GUELACHVILI, G., Opt. Commun., 8, 171 (1973).
- [40] NARAHARI, R., HUMPHREYS, C. J. et RANK, D. H., Wavelength Standard
in the Infrared, Academic Press, NEW YORK, LONDON (1966).
- [41] ROBAUX, O., Thèse, ORSAY (1971).
- [42] GERSTENKORN, S., LUC, P., BAUCHE-ARNOULT, Cl. et MERLE, D.,
J. Phys., 34, 805 (1973).
- [43] SLATER, J. C., Phys. Rev., 34, 1293 (1929).
- [44] JUDD, B. R., Operator Techniques in Atomic Spectroscopy,
McGraw-Hill, NEW YORK (1963).
- [45] RACAH, G., Physica, 16, 651 (1950).
- [46] AYMAR, M., Thèse, ORSAY (1973).
- [47] TREES, R. E., Phys. Rev. 84, 1089 (1951).
- [48] BORDARIER, Y. et BACHELIER-CARLIER, A.,
Programmes non publiés (A. Cotton).
- [49] KLAPISCH, M., Thèse, ORSAY (1971), J. Phys., 30, 53 (1969),
Comput. Phys. Commun., 2, 239 (1971).
- [50] JUDD, B. R., Théorie de la Structure Hyperfine (PARIS 1964)
Cours à la Faculté des Sciences de PARIS.
- [51] BAUCHE-ARNOULT, Cl. et BAUCHE, J., Ann. Phys., 3, 341 (1968).
- [52] SANDARS, P. G. H. et BECK, J., Proc. Roy. Soc., A289, 97 (1965).
- [53] JUDD, B. R., La Structure hyperfine des Atomes et des Molécules,
Colloque International du C. N. R. S., PARIS (1966)
(Editions du C. N. R. S., 1967)

- [54] BAUCHE-ARNOULT, Cl., Proc. Roy. Soc. Lond., A322, 361 (1971),
J. Phys.,
- [55] MOORE-SITTERLY, C., Optica Pura y Aplicada, 2, 103 (1969).
- [56] MOORE, C., Atomic Energy Levels, Vol. III (1958)
National Bureau of Standards
- [57] EDIÉN, B., Atomic Spectra, Hand. der. Phys.,
Encycl. of Phys., 27, 149 (1964),
Mon. Ot. Roy. Astron. Soc., 105, 323 (1945).
- [58] JACQUINOT, P., C. R. Acad. Sc., 208, 1896 (1939),
BROCHARD, J. et JACQUINOT, P., Ann. de Phys., 20, 509 (1945),
BROCHARD, J., Thèse, PARIS (1949).
- [59] VERGES, J., Spectrochim. Acta, 24B, 177 (1969).
- [60] GARSTANG, R. H., J. Research N. B. S., 68A, 61 (1964).
- [61] DESCLAUX, J. P., D. E. A., PARIS (1968),
BESSIS, N., PICART, J. et DESCLAUX, J. P., Phys. Rev., 187, 88 (1969).
- [62] LUC-KOENIG, E., Physica, 62, 393 (1972).
- [63] LIBERMAN, S., Thèse, ORSAY (1971),
J. Phys., 30, 53 (1969).

Les publications font partie du travail effectué au Laboratoire Aimé Cotton par une équipe composée de Jean VERGES, Eliane LUC-KOENIG, Jacqueline CHEVILLARD et moi-même, sous la direction scientifique de Serge FENEUILLE.

La partie expérimentale a été faite en collaboration avec Jean VERGES ; les calculs théoriques a priori d'effets relativistes sur la structure hyperfine ont été effectués par E. LUC-KOENIG. L'étude du couplage intermédiaire et du mélange des configurations dans le spectre d'arc de l'iode a été exécutée en collaboration avec E. LUC-KOENIG.

III - 2

ARTICLE n°1

Classification du Spectre d'Arc du Sélénium (SeI) entre 3 900 et 11 844 cm^{-1}

C. Morillon et J. Vergès

Laboratoire Aimé Cotton, C.N.R.S. II, 914 05 - Orsay, France

Received April 10, 1974

Résumé

Classification du spectre d'arc du Sélénium (Se I) entre 3 900 et 11 844 cm^{-1} . C. Morillon et J. Vergès (Laboratoire Aimé Cotton, C.N.R.S. II, Bât. 505, 91405-Orsay, France). Physica Scripta 10, 227-235, 1974.

Le spectre émis par un tube sans électrodes contenant du sélénium isotopiquement pur, de masse 80, a été analysé par spectrométrie de Fourier. Les nombres d'ondes de 360 raies ont été mesurés avec une précision de 0,003 cm^{-1} ce qui a permis d'améliorer la précision des énergies des niveaux déjà connus. La structure fine des termes $4p^3(^4S)nd^5D$ et 3D a été précisée, plusieurs niveaux $J=0$ ayant pu être trouvés grâce à une limite de résolution instrumentale de l'ordre de $2 \times 10^{-3} \text{cm}^{-1}$. Pour les termes 5F et 3F des sous-configurations $4p^3(^4S)nf$, la structure fine qui n'était pas connue, a été entièrement résolue. Il est montré qu'une erreur de une unité sur le nombre quantique principal de ces termes existe dans les publications antérieures. Enfin le potentiel d'ionisation a été déterminé avec une bonne précision grâce à la régularité de la série $4p^3(^4S)nf^5F_5$:

$$IP = 78\,658,12 \pm 0,1 \text{ cm}^{-1} (9,747 \pm 0,001 \text{ eV}).$$

Abstract

Classification of the arc spectrum of selenium (Se I) between 3 900 and 11 844 cm^{-1} . C. Morillon and J. Vergès (Laboratoire Aimé Cotton, C.N.R.S. II, Bât. 505, 91405-Orsay, France). Physica Scripta 10, 227-235, 1974.

The spectrum emitted by an electrodeless discharge tube filled with pure ^{80}Se has been newly investigated by Fourier transform spectroscopy. The observations have led to a list of wavenumbers and estimated intensities for 360 lines in the range 3 900 to 11 844 cm^{-1} . The values of the known energy levels involved in the observed transitions have been improved by exploiting the high wavenumber accuracy, $3 \times 10^{-3} \text{cm}^{-1}$. The fine structures of the $4p^3(^4S)nd^5D$ and 3D terms have been improved and 3 levels with $J=0$ are new. The fine structures of the $4p^3(^4S)nf^5F$ and 3F terms, which were not resolved in previous studies, are given from $n=4$ to $n=6$. It is shown that the principal quantum numbers n are in error by one unit in the compilation Atomic Energy Levels Vol. II (1952). Finally, the very regular $4p^3(^4S)nf^5F_5$ series yields for the principal ionization energy of Se I the value:

$$IP = 78\,658,12 \pm 0,1 \text{ cm}^{-1} (9,747 \pm 0,001 \text{ eV}).$$

1. Introduction

Le spectre d'arc du sélénium a été étudié vers 1930 simultanément par Ruedy et al. [1], et par Meissner et al. [2]. C. E. Moore dans « Atomic Energy Levels » [3] (désigné dans la suite par « A. E. L. ») signale la discordance suprenante qui existe entre les longueurs d'onde des raies communes aux 2 listes, et aussi le fait qu'un grand nombre de raies apparaissent dans une liste et pas dans l'autre, et réciproquement.

On peut s'attendre, d'après la position connue ou estimée des configurations, à trouver beaucoup de transitions dans l'infrarouge. Peu après avoir commencé ce travail nous avons eu connais-

sance de l'article de S. George et al. [4] qui ont observé le spectre infrarouge entre 2 976 et 9 910 cm^{-1} . La précision obtenue par ces auteurs étant nettement inférieure à celle permise par la méthode de spectroscopie par transformation de Fourier nous avons décidé de poursuivre cette étude.

2. Techniques expérimentales

2.1. La Source

Nous avons utilisé des tubes sans électrodes dans lesquels avait été distillé du sélénium isotopiquement pur, de masse 80, sans gaz porteur. Il est nécessaire de les chauffer vers 400°C de manière à obtenir une pression suffisante pour amorcer la décharge. Ces ampoules sont excitées par un champ électromagnétique à 2 450 MHz dans une cavité. Une fois amorcée, la décharge s'entretient d'elle-même. Le meilleur fonctionnement s'obtient en refroidissant légèrement la cavité. L'enveloppe en silice est alors à une température comprise entre 300°C et 400°C, ce qui correspond à une pression de vapeur à l'intérieur du tube de l'ordre de 10 Torr. Ces sources ont l'avantage d'émettre des raies intenses, et permettent l'observation de transitions infrarouges issues de niveaux relativement élevés. La largeur des raies émises par ces sources est estimée à $2 \times 10^{-2} \text{cm}^{-1}$ à 6 000 cm^{-1} . La largeur due à l'effet Doppler étant inférieure à 0,015 cm^{-1} , l'élargissement dû à la pression n'est pas négligeable. Il peut s'ensuivre un déplacement des raies de l'ordre de $1 \times 10^{-3} \text{cm}^{-1}$.

2.2. Spectrométrie de Fourier

Cette méthode, ainsi que les appareils utilisés, ont été décrits dans plusieurs articles [5]. Les interféromètres utilisés permettent d'atteindre une différence de marche de 2 m, soit une limite de résolution instrumentale comprise entre 2,5 et $5 \times 10^{-3} \text{cm}^{-1}$, suivant l'apodisation effectuée sur la fonction d'appareil.

La résolution obtenue est donc plusieurs fois supérieure à celle des meilleurs spectromètres à réseau. D'autre part, la précision de mesure des nombres d'ondes est également très améliorée; en effet, il n'y a ni balayage du spectre, ni interpolation entre étalons secondaires; les nombres d'ondes sont obtenus par des opérations purement digitales à partir d'une raie étalon unique. Dans notre cas il s'agit d'une raie de Xe I, dont la longueur d'onde a été comparée interférométriquement à l'étalon primaire de longueur, c'est-à-dire à la longueur d'onde $\lambda = 6\,057 \text{ \AA}$ de la raie du Krypton, sur un appareil identique à celui que nous avons utilisé [10]. La longueur d'onde dans le vide de la raie du Xe I, qui a été utilisée est $\lambda = 35\,079,8464 \text{ \AA}$. D'autre part, l'interféromètre utilisé pour obtenir le spectre du sélénium étant dans l'air, une correction d'indice donnée par la formule de B. Edlén [6] a été

effectuée sur le nombre d'ondes de chaque raie pour obtenir le nombre d'ondes dans le vide.

Le spectre infrarouge du sélénium a été obtenu entre 3 500 et 12 000 cm^{-1} , avec une limite de résolution instrumentale de $5 \times 10^{-2} \text{ cm}^{-1}$. Un autre spectre a été obtenu entre 7 000 et 12 000 cm^{-1} avec une limite de résolution instrumentale de $2 \times 10^{-2} \text{ cm}^{-1}$. L'absorption par la vapeur d'eau rend les observations imprécises et incomplètes pour les nombres d'ondes inférieurs à 4 000 cm^{-1} .

La plus grande partie des nombres d'ondes a été mesurée avec une grande précision par un programme de pointé sur ordinateur [7]. La précision de ce pointé est de l'ordre de $1 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$; elle est limitée d'une part par la largeur des raies enregistrées et d'autre part, par la dissymétrie du profil introduite par le bruit. Pour les raies trop faibles (rapport signal sur bruit inférieur ou égal à 2) cette technique de pointé n'est plus utilisable et nous avons mesuré la position de l'axe de la raie sur le tracé du spectre. La précision du pointé est alors de $1 \times 10^{-2} \text{ cm}^{-1}$ environ. Pour un interféromètre donné, et avec le programme de pointé cité ci-dessus, la reproductibilité du nombre d'ondes dans le vide se fait mieux qu'à $1 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$ près. Mais certains effets instrumentaux, tels qu'une erreur de centrage du diaphragme d'entrée ou la possibilité d'un déplacement de la raie de référence du xénon pour des conditions de pression ou d'excitation légèrement différentes, peuvent augmenter l'erreur sur la valeur du nombre d'ondes. On estime à $3 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$ l'incertitude sur nos mesures.

3. Résultats

3.1.

361 raies ont été observées et leurs nombres d'ondes mesurés. Dans le tableau I, pour chaque raie observée, on trouve successivement le nombre d'ondes dans le vide exprimé en cm^{-1} , la longueur d'onde dans l'air exprimée en Ångströms, et l'intensité. Cette intensité est donnée dans une échelle linéaire, telle que la plus faible raie détectée ($I=1$) ait un rapport signal sur bruit compris entre 1 et 2. Cette intensité donne une estimation du rapport signal sur bruit de la raie. Pour les raies les plus intenses ce rapport reste inférieur à la valeur attendue car les petites instabilités de la source augmentent le bruit dans leur voisinage, d'autant plus que leur intensité est plus grande. La raie la plus intense a une intensité de 8 000 dans notre échelle ce qui donne une idée de la forte dynamique de la méthode.

3.2. Détermination précise des énergies des niveaux déjà connus

Les niveaux d'énergie donnés dans « A. E. L. » [3], et qui sont basés sur les mesures déjà anciennes de Ruedy et Meissner ont une précision médiocre de l'ordre de 0,2 cm^{-1} . Eriksson [8] en 1972 a mesuré les niveaux d'énergie de la configuration fondamentale $4p^4$ avec une bonne précision, en observant les transitions « interdites » à l'intérieur de cette configuration.

La bonne précision avec laquelle nous déterminons le nombre d'ondes dans le vide des raies infrarouges nous a amenés à réviser l'énergie des niveaux de Se I pour les configurations excitées. Malheureusement aucune transition infrarouge ne permet d'atteindre les niveaux mesurés par Eriksson. Nous avons donc admis provisoirement l'énergie du niveau $4p^3(4S)5s^2 5S_2^0$ donnée dans « A. E. L. », soit 48 182,190 cm^{-1} , et à partir de ce niveau nous avons déterminé de proche en proche les valeurs des énergies des niveaux impliqués dans les transitions infrarouges observées. Le tableau II donne la liste des énergies des niveaux, avec une incertitude de l'ordre de $5 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$.

3.3. Sous-configuration $4p^3(4S)nd$

Les termes 6D et 3D des sous-configurations $4p^3(4S)nd$ n'étaient que partiellement connus de $n=4$ à 11 car leur structure fine est petite et dépend d'une manière compliquée du couplage et du mélange avec des termes d'autres configurations. Des raies fines et une bonne résolution étaient nécessaires pour les résoudre. Nous avons pu déterminer l'énergie des niveaux $J=0$ dans les termes 6D pour $n=5, 6, 7$ ainsi que celle du niveau 6D_4 de $6d$ qui est très proche de 6D_3 . Les transitions $4p^3(4S)nd \rightarrow 4p^3(4S)np$ ont été utilisées pour ces mesures. Les intensités relatives des composantes des multiplets $^6D \rightarrow ^6P$ et $^3D \rightarrow ^3P$ sont assez proches des intensités théoriques en couplage Russell Saunders pur. Le tableau III rend compte de ce fait pour le multiplet $4d^5D \rightarrow 5p^5P$.

3.4. Sous-configuration $4p^3(4S)nf$

On trouve dans « A. E. L. » une seule valeur de l'énergie pour chaque terme 6F et 3F de $4p^3(4S)nf$, ceci de $n=6$ à 11. Les termes 6F et 3F pour $n=4$ et $n=5$ étaient encore manquants. Notre étude a permis de trouver un groupe de niveaux vers 72 000 cm^{-1} que nous avons attribué en première analyse à $4p^3(4S)5f$ suivant les prédictions de Ruedy et al. [1]. Les transitions entre ces niveaux et les niveaux des termes 6D et 3D de $4d$ sont fortes. Mais aucune transition n'a pu être observée avec les niveaux $4f$ prévus par Ruedy vers 66 500 cm^{-1} . Il nous est donc apparu qu'une erreur d'une unité sur la valeur du nombre quantique principal était probable. L'étude des spectres d'arc des éléments voisins tend à prouver l'exactitude de cette hypothèse. La théorie du défaut quantique [9] appliquée aux éléments non hydrogénoïdes conduit à 2 types de formules:

$$(1) T_n = \frac{R\zeta^2}{(n-\delta)^2} = \frac{R\zeta^2}{(n^*)^2} \quad \text{et} \quad (2) T_n = R \cdot \frac{(Z-S)^2}{n^2}$$

La formule (1), où $\zeta = Z - (N - 1)$, est surtout utilisée dans l'étude des séries de Rydberg : Z est le numéro atomique de l'élément et N le nombre d'électrons. δ est le défaut quantique et $n^* = n - \delta$ le nombre quantique effectif.

La formule (2), où S est le paramètre d'écran, est utilisée dans l'étude des séquences isoélectroniques. Nous avons calculé les quantités $(Z-S)$ et T_n pour les termes p^nf des éléments de nombre atomique voisin de celui du Sélénium ($Z=34$), et en prenant comme terme parent le terme fondamental de la configuration p^n . Les résultats ont été portés dans le tableau IV. On peut remarquer que pour le brome, le krypton et le rubidium, les valeurs de T_n sont très voisines, et que $(Z-S)$ est toujours très peu différent de 1. Si l'on fait le même calcul pour Se I on obtient des résultats différents quand on prend pour n les valeurs admises jusqu'à maintenant. Par contre, l'accord est excellent si l'on prend les valeurs de n que nous proposons. Pour ces atomes on trouve $Z-S$ très peu différent de 1 ce qui conduit à considérer que l'électron nf est très extérieur au coeur.

Des calculs théoriques a priori des nombres quantiques effectifs ont été effectués par D. C. Griffin et al. [11] pour les éléments qui précèdent les séries de transition, d, f et g . Les résultats prévoient que le nombre quantique effectif n^* pour les électrons nf de ces éléments doit être constant jusqu'au numéro atomique $Z=56$, et doit être très peu différent de n . Ceci est parfaitement vérifié par notre étude.

Les énergies des niveaux appartenant aux termes $4p^3(4S)nf^6F$ et 3F ont été déterminées pour $n=4, 5$ et 6 . Les tableaux V et VI donnent les transitions $^6F \rightarrow ^6D$ et $^3F \rightarrow ^3D$ pour $4p^3(4S)4f \rightarrow 4p^3(4S)4d$. Les tableaux VII et VIII donnent les transitions correspondantes $^6F \rightarrow ^6D$ et $^3F \rightarrow ^3D$ pour $4p^3(4S)5f \rightarrow 4p^3(4S)4d$. Les niveaux des

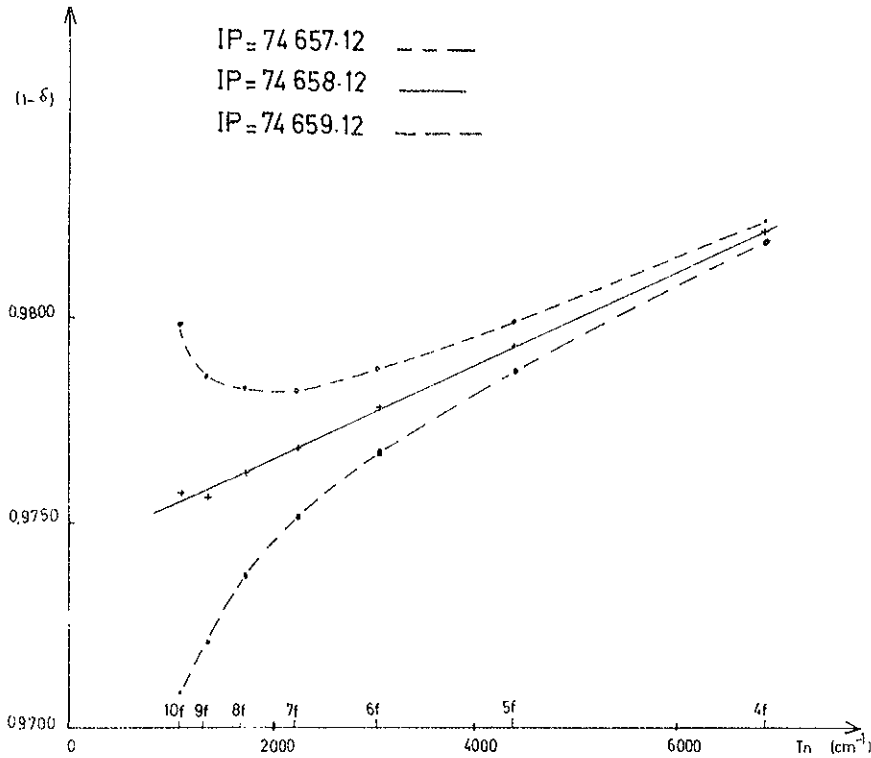


Fig. 1. Variation de la quantité $(1-\delta)$ en fonction de l'énergie T_n pour la série $4p^3(^4S)nf^3F_5$. La droite est obtenue pour une valeur du potentiel d'ionisation principal $IP = 78\,658,12\text{ cm}^{-1}$. Les courbes situées de part et d'autre correspondent à des valeurs de ce potentiel respectivement supérieure et inférieure de 1 cm^{-1} .

termes 3F et 3F pour $n=6$ ont été également déterminés à l'aide des transitions $4p^3(^4S)6f \rightarrow 4p^3(^4S)4d$, mais ces raies sont faibles et seules celles dont l'intensité relative est grande ont été observées. Quelques raies d'intercombinaison $4f^5F \rightarrow 4d^3D$ et $4f^5F \rightarrow 4d^5D$, ont été observées.

3.5.

Si une série de Rydberg suit la formule de Ritz, alors $n^* \rightarrow n - \alpha - \beta \cdot T_n$, où α et β sont des constantes caractéristiques de la série; soit $\delta \cdot n - n^* = \alpha - \beta \cdot T_n$, δ est calculé à l'aide de la formule (1), dans laquelle T_n n'est connu qu'autant que la limite E_l est connue: $T_n = E_l - E_n$ où E_n est l'énergie du niveau mesurée à partir du niveau fondamental. E_l apparaît donc comme un paramètre définissant une famille de courbes $\delta(T)$, qui sont en général différentes d'une droite. La valeur exacte de la limite de la série E_l^0 , est obtenue par une méthode de moindre carré, et correspond à la courbe qui se rapproche le plus d'une droite.

La figure 1 donne une représentation graphique de la série $4p^3(^4S)nf^3F_5$. La quantité $(1-\delta)$ est représentée en fonction de T_n . Cette série est très peu perturbée car aucun terme des configurations $4p^3np$ n'a de niveaux $J=5$. Le seul mélange possible est avec les niveaux 3G_5 et 3H_5 de $4p^3(^2D)nf$ et 3G_5 de $4p^3(^2P)nf$, mais le membre le plus bas de ces séries, $4p^3(^2D)4f^3H_5$ doit se situer vers $85\,000\text{ cm}^{-1}$, soit dans le continuum à $7\,500\text{ cm}^{-1}$ au-dessus de la limite d'ionisation principale, limite de $4p^3(^4S)$.

La meilleure droite est obtenue pour une valeur de E_l^0 égale à $78\,658,12\text{ cm}^{-1}$. Les courbes situées de part et d'autre correspondent à des valeurs de cette limite, supérieure et inférieure de 1 cm^{-1} à la valeur optimale. On voit que l'on obtient une allure très différente pour d'aussi faibles variations de E_l . Ceci nous conduit à estimer à $0,05\text{ cm}^{-1}$ l'incertitude sur la valeur exacte de la limite de $4p^3(^4S)$. La régularité de cette série permet de penser que cette limite fournit une très bonne valeur du potentiel d'ionisation principal. Toutefois un déplacement par effet Stark des niveaux élevés est possible ce qui nous fait admettre une incertitude de $0,1\text{ cm}^{-1}$ sur la détermination de l'énergie d'ionisation princi-

pale: $IP = 78\,658,12 \pm 0,1\text{ cm}^{-1}$, soit une valeur très proche de la valeur précédemment admise. Avec le facteur de conversion $12\,395 \times 10^{-8}\text{ eV/cm}^{-1}$ adoptée par « A. E. L. » nous obtenons $9,747 \pm 0,001\text{ eV}$.

3.6.

Les intensités relatives des composantes des multiplets $^3D \rightarrow ^3P$, $^3D \rightarrow ^3P$ d'une part, $^3F \rightarrow ^3D$, $^3F \rightarrow ^3D$ d'autre part sont assez voisines des intensités théoriques en couplage Russell-Saunders. Les tableaux IV, V, VI, VII et VIII en donnent une illustration: dans chaque case d'un tableau on trouve le nombre d'ondes de la transition, l'intensité relative LS en bas à droite, l'intensité relative mesurée en bas et à gauche. Cet assez bon accord sur les intensités peut signifier que les écarts à la règle de Landé sur les intervalles sont dûs principalement à des interactions magnétiques autres que l'interaction spin-orbite classique. En effet, aucune hypothèse particulière sur la nature des interactions magnétiques, autre que celle du couplage LS , n'est nécessaire pour obtenir les règles d'intensités, contrairement à la règle des intervalles de Landé.

Champeau et al. [12] ont montré, dans le cas de O I, que pour un terme γSL donné les intervalles de structure fine sont très bien interprétés par la formule:

$$W_J = \frac{1}{2} A_{\gamma SL} \cdot C + B_{\gamma SL} \frac{[C(C+1) - S(S+1)L(L+1)]}{2S(2S-1)L(2L-1)}$$

$$\text{avec } C = J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)$$

Dans cette expression, le premier terme du 2ème membre représente les interactions spin-orbite, et spin-autre-orbite qui ne peuvent être différenciées. Le deuxième terme représente les interactions magnétiques de type sin-spin.

Nous avons tenté d'appliquer cette formule aux multiplets 3D et 3F du sélénium, mais elle ne permet pas d'interpréter leur structure. Il semble donc, bien que les intensités soient dans leur ensemble voisines des intensités théoriques LS , que des conditions

de couplage intermédiaire et de mélange complexe entre configurations soient surtout responsables des écarts à la règle de Landé observés sur les multiplets.

4. Conclusion

Les lampes sans électrodes excitées par un champ haute fréquence d'une part, et la méthode de spectrométrie par transformation de Fourier d'autre part, nous ont permis de fournir une liste de nombres d'ondes très précis des raies infrarouges du sélénium entre 3 500 et 12 000 cm^{-1} . Les niveaux d'énergie que nous avons pu déterminer à l'aide de cette liste confirment bien dans leur ensemble les niveaux donnés dans « A. E. L. » et basés sur l'étude de Ruedy et al. La grande précision avec laquelle nous donnons ces niveaux d'énergie ne trouvera toute son importance que lorsque nous aurons relié ces niveaux à la configuration fondamentale. Nous nous proposons de déterminer précisément la hauteur des niveaux $4p^3(^4S)5s\ ^5S_2$ et 3S_1 par rapport aux niveaux $4p^4\ ^1D_2$ et 1S_0 qui ont été déterminés de façon précise par Eriksson [8], par des observations ultraviolettes.

La détermination précise de la structure fine des termes 6D et 3D de $4p^3(^4S)nd$, ainsi que celle des termes 5F et 3F de $4p^3(^4S)nf$ a été possible grâce à la résolution permise par la spectrométrie par transformation de Fourier.

Enfin l'étude du spectre d'arc du sélénium pourra être reprise au delà de 2,5 μm et jusque vers 4,0 μm à l'aide d'un interféromètre sous vide, avec comme objectif l'observation des transitions $4p^3(^4S)5g \rightarrow 4p^3(^4S)4f$ vers 2 500 cm^{-1} ($\lambda = 4,0\ \mu\text{m}$) et celles $4p^3(^4S)6g \rightarrow 4p^3(^4S)4f$ vers 3 500 cm^{-1} ($\lambda = 2,8\ \mu\text{m}$). Ces dernières se trouvent peut être déjà dans la liste des raies non classées que nous avons observées, mais l'importance de l'absorption par la vapeur d'eau dans cette région rend impossible toute identification.

Remerciements

Nous remercions Madame J. Chevillard pour sa précieuse collaboration en ce qui concerne le traitement des données sur ordinateur.

Références

1. Ruedy, J. E. et Gibbs, R. C., Phys. Rev. **46**, 880 (1934).
2. Meissner, K. W., Bartelt, O. et Eckstein, L., Z. Physik **91**, 427 (1934).
3. Moore, C. E., Atomic Energy Levels II, Natl. Bur. Std. Circ. No. 467. U.S. Government Printing Office, Washington, D.C., 1952.
4. George, S., Fredrickson, J. E. et Tucker, A. W., J. Opt. Soc. Am. **63**, 596 (1973).
5. Connes, J., Delouis, H., Connes, P., Guelachvili, G., Maillard, J. P. et Michel, G., Nouv. Rev. Opt. App. **1**, 1 (1970).
6. Edlén, B., J. Opt. Soc. Am. **43**, 339 (1953).
7. Chauville, J., Communication personnelle.
8. Eriksson, K. B. S., Phys. Lett. **41 A**, 97 (1972).
9. Edlén, B., Handbuch der Physik (ed. S. Flügge), Vol. XXVII. Springer-Verlag, 1964.
10. Guelachvili, G., Optics Comm. **8**, 171 (1973).
11. Griffin, D. C., Andrew, K. L. et Cowan, R. D., Phys. Rev. **177**, 62 (1969).
12. Champeau, R.-J. et al., à paraître.
13. Tech, J. L., J. Research N B S **67 A**, 505 (1963).

Laboratoire Aimé Cotton
C.N.R.S. II
F-91405 Orsay, France

Appendix

(Tables I–XIII)

 Tableau I. Liste des raies de Se I observées entre 3 500 et 11 844 cm^{-1}

Nombres d'ondes mesurés (cm^{-1})							Nombres d'ondes calculés (cm^{-1})							
Longueurs d'onde air (Å)	Intensité	Niveaux impairs	Niveaux pairs	J Imp.	J Pairs		Longueurs d'onde air (Å)	Intensité	Niveaux impairs	Niveaux pairs	J Imp.	J Pairs		
3 519,15	28 408,20	1					4 718,649	21 186,72	6	4 718,649	74 318	69 599	1	1
3 782,42	26 430,89	1					4 794,20	20 852,85	1					
3 860,077	25 899,15	4					4 804,307	20 808,98	2					
3 866,768	25 854,34	1					4 810,281	20 783,13	7					
3 915,161	25 534,77	1					4 810,428	20 782,50	2					
3 978,629	25 127,43	2 600	3 978,629	63 369	59 391	4	4 847,151	20 625,05	6	4 847,152	74 161	69 314	2	3
3 981,838	25 107,18	50	3 981,838	63 373	59 391	2	4 865,365	20 547,83	2					
3 996,110	25 017,51	650	3 996,110	63 387	59 391	3	4 883,943	20 469,67	5	4 883,941	74 161	69 277	2	2
4 085,326	24 471,17	500	4 085,326	63 373	59 287	2	4 895,470	20 421,47	15	4 895,470	74 209	69 314	2	3
4 094,948	24 413,67	260	4 094,948	63 382	59 287	1	4 898,30	20 409,67	1	4 898,321	74 161	69 263	2	1
4 099,597	24 385,99	1 400	4 099,598	63 387	59 287	3	4 932,259	20 269,15	10	4 932,259	74 209	69 277	2	2
4 116,677	24 284,81	5					4 946,639	20 210,23	7	4 946,639	74 209	69 263	2	1
4 130,347	24 204,44	340	4 130,346	63 373	59 242	2	5 047,833	19 805,07	6					
4 138,076	24 159,23	295	4 138,076	63 380	59 242	0	5 102,919	19 591,28	2					
4 139,969	24 148,18	700	4 139,968	63 382	59 242	1	5 166,978	19 348,39	5					
4 191,438	23 851,65	40	4 191,439	63 479	59 287	2	5 182,045	19 292,13	2					
4 205,763	23 770,41	1	4 205,764	73 819	69 614	2	5 195,638	19 241,66	6	5 195,639	70 391	75 587	3	4
4 220,414	23 687,89	5	4 220,414	73 819	69 599	2	5 196,343	19 239,05	6	5 196,344	70 390	75 587	4	5
4 226,91	23 651,49	1	4 226,925	73 541	69 314	2	5 196,346	19 239,05	6	5 196,346	70 390	75 587	4	4
4 231,082	23 628,17	115					5 198,286	19 231,86	3	5 198,285	70 388	75 587	2	3
4 231,842	23 623,93	1					5 198,927	19 229,49	3	5 198,927	70 388	75 587	1	2
4 233,161	23 616,56	45	4 233,154	73 547	69 314	3	5 198,927	19 229,49	3	5 198,927	70 388	75 587	1	1
4 233,161	23 616,56	45	4 233,165	73 547	69 314	4	5 232,723	19 105,29	2	5 232,723	66 623	71 856	1	1
4 234,231	23 610,60	2	4 234,230	73 863	69 629	1	5 270,318	18 969,01	2					
4 236,459	23 598,18	22	4 236,459	63 479	59 242	2	5 285,385	18 914,93	7					
4 246,405	23 542,91	10	4 246,404	73 860	69 614	3	5 285,58	18 914,24	2					
4 263,714	23 447,33	11	4 263,714	73 541	69 277	2	5 312,149	18 819,63	21	5 312,148	65 989	60 677	2	2
4 265,970	23 434,93	2	4 265,970	73 543	69 277	1	5 340,474	18 719,82	2					
4 269,944	23 413,12	20	4 269,943	73 547	69 277	3	5 367,235	18 626,48	5	5 367,234	65 989	60 622	2	1
4 274,376	23 388,85	220	4 274,377	65 339	69 614	3	5 419,599	18 446,51	2					
4 278,094	23 368,52	8	4 278,094	73 541	69 263	2	5 456,660	18 321,23	2					
4 280,350	23 356,20	10	4 280,350	73 543	69 263	1	5 586,997	17 893,82	2					
4 280,492	23 355,43	3	4 280,490	73 543	69 263	0	5 642,080	17 719,12	6					
4 299,910	23 249,96	37	4 299,910	65 299	69 599	1	5 657,148	17 671,93	2					
4 314,564	23 170,99	2	4 314,561	65 299	69 614	1	5 697,790	17 545,87	6	5 697,790	75 311	69 614	3	2
4 321,526	23 133,66	110	4 321,525	65 277	69 599	2	5 713,242	17 498,42	2	5 713,242	75 312	69 599	2	1
4 329,975	23 088,52	51	4 329,976	65 299	69 629	1	5 760,489	17 354,90	6					
4 335,177	23 060,82	7					5 760,64	17 354,44	2					
4 335,328	23 060,01	1					5 783,979	17 284,42	5	5 783,979	63 479	69 263	2	1
4 336,175	23 055,51	43	4 336,176	65 277	69 614	2	5 798,360	17 241,55	11	5 798,359	63 479	69 277	2	2
4 389,35	22 776,20	1					5 803,950	17 224,94	3	5 803,952	66 623	72 427	1	2
4 390,260	22 771,48	2					5 805,65	17 219,90	2					
4 392,988	22 757,34	12					5 815,574	17 190,51	3					
4 393,706	22 753,62	45					5 876,35	17 012,72	1	5 876,345	75 154	69 277	1	2
4 394,387	22 750,09	2					5 879,489	17 003,64	2					
4 419,711	22 619,74	8					5 879,592	17 003,34	2					
4 434,071	22 546,49	7	4 434,076	71 154	75 588	3	5 880,470	17 000,80	6	5 880,471	63 382	69 263	1	1
4 449,474	22 468,43	2					5 881,267	16 998,50	2	5 881,265	75 195	69 314	3	3
4 454,323	22 443,98	5					5 881,397	16 998,12	14	5 881,396	75 195	69 314	4	3
4 469,388	22 368,32	2					5 882,361	16 995,33	32	4 882,362	63 380	69 263	0	1
4 482,836	22 301,22	2	4 482,836	71 106	75 588	1	5 890,092	16 973,03	32	5 890,093	63 373	69 263	2	1
4 492,692	22 252,30	6	4 492,693	71 096	75 588	2	5 890,201	16 972,71	133	5 890,200	63 387	69 277	3	2
4 559,70	21 925,28	1	4 559,698	70 388	74 948	1	5 890,725	16 971,20	2	5 890,725	75 154	69 263	1	1
4 560,30	21 922,40	1	4 560,297	70 391	74 951	3	5 894,850	16 959,33	23	5 894,851	63 382	69 277	1	2
4 562,90	21 909,91	1	4 562,914	70 388	74 951	2	5 904,472	16 931,69	79	5 904,473	63 373	69 277	2	2
4 569,373	21 878,87	2	4 569,373	70 390	74 960	4	5 918,052	16 892,84	7	5 918,054	75 195	69 277	3	2
4 572,747	21 862,73	2					5 919,325	16 889,20	5	5 919,327	75 197	69 277	2	2
4 572,878	21 862,10	1					5 926,989	16 867,37	69	5 926,989	62 387	69 314	3	3
4 583,944	21 809,32	5					5 927,278	16 866,54	421	5 927,277	66 623	60 696	1	0
4 600,551	21 730,60	570	4 600,551	65 277	60 677	2	5 933,708	16 848,27	2	5 933,707	75 197	69 263	2	1
4 603,566	21 716,36	730	4 603,565	65 299	60 696	1	5 941,263	16 826,84	10	5 941,262	63 373	69 314	2	3
4 622,166	21 628,98	39	4 622,166	65 299	60 677	1	5 944,470	16 817,76	275	5 944,471	63 370	69 314	4	3
4 626,824	21 607,20	6					5 945,878	16 813,78	2 557	5 945,878	66 623	60 677	1	2
4 646,675	21 514,89	11					5 990,119	16 689,60	8	5 990,121	65 277	59 287	2	2
4 655,637	21 473,48	1 721	4 655,637	65 277	60 622	2	5 998,039	16 667,56	7					
4 662,350	21 442,56	4 603	4 662,350	65 339	60 677	3	6 000,964	16 659,44	1 295	6 000,964	66 623	60 622	1	1
4 677,252	21 374,24	556	4 677,252	65 299	60 622	1	6 035,139	16 565,10	19	6 035,141	65 277	59 242	2	1
4 691,872	21 307,64	5					6 051,918	16 519,17	85	6 051,920	65 339	59 287	3	2
4 703,999	21 252,71	9	4 703,999	74 318	69 614	1	6 053,125	16 515,88	2					
4 717,430	21 192,20	2					6 056,753	16 505,99	5	6 056,756	65 299	59 242	1	1

Tableau I (cont.)

Nombres d'ondes mesurés (cm ⁻¹)	Longueurs d'onde (Å)		Nombres d'ondes calculés (cm ⁻¹)	Niveaux impairs	Niveaux pairs	J Imp.	J Pairs	Nombres d'ondes mesurés (cm ⁻¹)	Longueurs d'onde (Å)		Nombres d'ondes calculés (cm ⁻¹)	Niveaux impairs	Niveaux pairs	J Imp.	J Pairs
	Intensité								Intensité						
6 062,098	16 491,43							7 770,972	12 864,88		7 770,971	61 828	69 599	2	1
6 117,183	16 342,93							7 779,898	12 850,12						
6 132,242	16 302,80							7 780,022	12 849,92						
6 134,853	16 295,86		6 134,857	63 479	69 614	2	2	7 785,621	12 840,68		7 785,621	61 828	69 614	2	2
6 191,00	16 148,07							7 805,173	12 808,51		7 805,173	65 277	73 083	2	1
6 220,525	16 071,42							7 883,381	12 681,44						
6 226,70	16 055,48		6 226,698	63 387	69 614	3	2	7 898,448	12 657,25						
6 235,591	16 032,59							7 914,242	12 631,99		7 914,246	65 339	73 254	3	4
6 235,75	16 032,18							7 918,202	12 625,68		7 918,201	61 681	69 599	1	1
6 259,632	15 971,02		6 259,633	75 574	69 314	2	3	7 948,25	12 577,94		7 948,267	61 681	69 629	1	0
6 280,75	15 917,32							7 962,506	12 555,43						
6 290,674	15 892,21							7 986,004	12 518,48		7 986,006	65 277	73 263	2	3
6 296,423	15 877,70		6 296,422	75 574	69 277	2	2	8 017,444	12 469,39						
6 299,649	15 869,56							8 017,590	12 469,16						
6 369,798	15 694,80							8 096,706	12 347,32						
6 397,562	15 626,68		6 397,564	65 339	71 737	3	4	8 120,934	12 310,49						
6 400,143	15 620,38	135	6 400,144	65 339	71 739	3	3	8 126,90	12 301,45						
6 400,957	15 618,40	1 550	6 400,955	65 339	71 740	3	2	8 135,997	12 287,69						
6 400,957	15 618,40	1 550	6 400,958	65 339	71 740	3	4	8 151,787	12 263,89						
6 437,911	15 528,75	11	6 437,911	65 299	71 737	1	2	8 200,061	12 191,70						
6 441,137	15 520,97	703	6 441,139	65 299	71 740	1	2	8 200,186	12 191,51						
6 461,942	15 471,00	1 031	6 461,942	65 277	71 739	2	3	8 245,866	12 123,97		8 245,867	50 996	59 242	1	1
6 462,753	15 469,06	129	6 462,754	65 277	71 740	2	2	8 257,950	12 106,23		8 257,949	63 479	71 737	2	3
6 473,162	15 444,18							8 258,211	12 105,85		8 258,208	63 479	71 737	2	2
6 473,27	15 443,92							8 260,624	12 102,31		8 260,624	63 479	71 739	2	3
6 537,202	15 292,89							8 261,433	12 101,13		8 261,436	63 479	71 740	2	2
6 556,434	15 248,03	13	6 556,435	65 299	71 856	1	1	8 290,887	12 058,14		8 290,887	50 996	59 287	1	2
6 592,285	15 165,10							8 349,791	11 973,07		8 349,790	63 387	71 737	3	3
6 598,230	15 151,44	2 480	6 598,230	65 989	59 391	2	3	8 349,886	11 972,93		8 349,886	63 387	71 737	3	4
6 701,717	14 917,47	1 687	6 701,719	65 989	59 287	2	2	8 353,280	11 968,07		8 353,276	63 387	71 740	3	2
6 710,697	14 897,51							8 353,280	11 968,07		8 353,279	63 387	71 740	3	4
6 740,190	14 832,32							8 354,698	11 966,04		8 354,699	63 382	71 737	1	2
6 746,738	14 817,93	1 001	6 746,738	65 989	59 242	2	1	8 354,756	11 965,96		8 354,757	63 382	71 737	1	1
6 765,785	14 776,21							8 356,648	11 963,25		8 356,648	63 380	71 737	0	1
6 933,172	14 419,47							8 357,926	11 961,42		8 357,927	63 382	71 740	1	2
6 948,244	14 388,19							8 364,062	11 952,64		8 364,062	63 373	71 737	2	3
7 003,329	14 275,02							8 364,321	11 952,27		8 364,321	63 373	71 737	2	4
7 013,302	14 256,76							8 367,367	11 947,92		8 367,367	63 369	71 737	4	2
7 041,25	14 198,14		7 041,288	65 989	73 030	2	3	8 368,105	11 946,87		8 368,105	63 369	71 738	4	5
7 053,40	14 173,69		7 053,386	65 989	73 042	2	1	8 376,732	11 934,56		8 376,731	63 479	71 856	2	1
7 062,868	14 154,68		7 062,872	65 989	73 052	2	2	8 437,608	11 848,46						
7 067,387	14 145,63							8 473,221	11 798,66		8 473,223	63 382	71 856	1	1
7 081,200	14 118,04							8 475,10	11 796,04		8 475,114	63 380	71 856	0	1
7 082,456	14 115,54							8 482,844	11 785,27		8 482,845	63 373	71 856	2	1
7 086,00	14 108,48							8 492,692	11 771,61						
7 087,484	14 105,52		7 087,480	65 339	72 427	3	2	8 596,032	11 630,09						
7 093,575	14 093,41		7 093,575	65 989	73 083	2	1	8 611,099	11 609,74						
7 104,842	14 071,06		7 104,843	65 989	73 094	2	2	8 666,181	11 535,95						
7 111,554	14 057,76		7 111,571	65 989	73 101	2	3	8 675,131	11 524,05						
7 149,279	13 983,60		7 149,279	65 277	72 427	2	2	8 833,586	11 317,33						
7 170,730	13 941,77							8 894,949	11 239,26		8 894,949	65 339	74 234	3	4
7 185,795	13 912,54							8 912,706	11 216,87						
7 240,882	13 806,70							8 934,950	11 188,94		8 934,950	65 299	74 234	1	2
7 249,851	13 789,62							8 956,685	11 161,79		8 956,686	65 277	74 234	2	3
7 304,938	13 685,63							8 967,793	11 147,96						
7 318,620	13 660,04		7 318,627	65 299	72 618	1	2	9 054,074	11 041,73		9 054,074	63 373	72 427	2	2
7 320,006	13 657,46							9 071,134	11 020,96						
7 335,446	13 628,71		7 335,448	66 623	59 287	1	2	9 150,259	10 925,66						
7 366,512	13 571,23		7 366,513	62 247	69 614	3	2	9 205,346	10 860,28						
7 376,780	13 552,34		7 376,785	65 339	72 716	3	3	9 237,263	10 822,75		9 237,266	63 479	72 716	2	3
7 380,466	13 545,58		7 380,468	66 623	59 242	1	1	9 343,375	10 699,84		9 343,379	63 373	72 716	2	3
7 410,697	13 490,32		7 410,697	66 623	74 033	1	0	9 386,831	10 650,30		9 386,831	63 479	72 866	2	1
7 423,909	13 466,31							9 387,808	10 649,20						
7 438,580	13 439,75		7 438,584	65 277	72 716	2	3	9 442,758	10 587,23						
7 460,239	13 400,73		7 460,239	66 623	74 083	1	1	9 442,897	10 587,07						
7 468,753	13 385,46		7 468,760	66 623	74 092	1	2	9 457,964	10 570,20						
7 487,403	13 352,11							9 489,701	10 534,85		9 489,700	62 247	71 737	3	4
7 542,489	13 254,60							9 492,944	10 531,25		9 492,944	63 373	72 866	2	1
7 557,565	13 228,16							9 493,094	10 531,09		9 493,091	62 247	71 740	3	2
7 566,533	13 212,48		7 566,534	65 299	72 866	1	1	9 493,094	10 531,09		9 493,094	62 247	71 740	3	4
7 588,149	13 174,84		7 588,149	65 277	72 866	2	1	9 551,568	10 466,62		9 551,567	63 479	73 030	2	3
7 645,837	13 075,44							9 563,663	10 453,38		9 563,665	63 479	73 042	2	1
7 660,896	13 049,73							9 625,371	10 386,36		9 625,371	50 996	60 622	1	1
7 691,086	12 998,51		7 691,087	65 339	73 030	3	3	9 657,679	10 351,62		9 657,681	63 373	73 030	2	3
7 712,670	12 962,13		7 712,671	65 339	73 052	3	2	9 680,457	10 327,26		9 680,457	50 996	60 677	1	2
7 742,394	12 912,37		7 742,395	65 299	73 041	1	0	9 699,058	10 307,45		9 699,058	50 996	60 696	1	0
7 754,641	12 891,98		7 754,642	65 339	73 094	3	2	9 731,178	10 273,43		9 731,173	63 369	73 101	4	3
7 764,983	12 874,81		7 764,983	65 277	73 042	2	1	9 735,524	10 268,85						

Tableau I (cont.)

Nombres d'ondes mesurés (cm ⁻¹)	Longueurs d'onde air (Å)	Inten- sité	Nombres d'ondes calculés (cm ⁻¹)	Niveaux impairs	Niveaux pairs	<i>J</i>		Nombres d'ondes mesurés (cm ⁻¹)	Longueurs d'onde air (Å)	Inten- sité	Nombres d'ondes calculés (cm ⁻¹)	Niveaux impairs	Niveaux pairs	<i>J</i>	
						Imp.	Pairs							Imp.	Pairs
9 784,688	10 217,25	400	9 784,687	63 479	73 263	2	3	10 745,961	9 303,27	15	10 745,955	61 681	72 427	1	2
9 862,911	10 136,22	5						10 783,226	9 271,12	107	10 783,223	62 247	73 030	3	3
9 866,567	10 132,46	9	9 866,567	63 387	73 253	3	4	10 789,688	9 265,57	9	10 789,687	61 828	72 618	2	2
9 890,801	10 107,63	39	9 890,801	63 373	73 263	2	3	10 804,810	9 252,60	11	10 804,807	62 247	73 052	3	2
9 911,395	10 086,63	6	9 911,388	61 828	71 739	2	3	10 813,106	9 245,50	4					
9 917,996	10 079,92	8						10 844,985	9 218,32	15	10 844,984	63 387	74 232	3	4
9 936,602	10 061,04	2						10 846,780	9 216,80	5	10 846,777	62 247	73 094	3	2
10 021,339	9 975,97	2						10 849,684	9 214,33	4	10 849,685	63 382	74 232	1	2
10 027,500	9 969,84	64	10 027,495	61 828	71 856	2	1	10 849,78	9 214,25	2	10 849,762	63 382	74 232	1	1
10 059,434	9 938,19	6	10 059,430	61 681	71 740	1	2	10 851,653	9 212,66	2	10 851,653	63 380	74 232	0	1
10 100,460	9 897,83	4						10 853,505	9 211,09	6	10 853,506	62 247	73 101	3	3
10 126,05	9 872,81	2						10 859,273	9 206,19	8	10 859,272	63 373	74 232	2	3
10 155,387	9 844,29	3						10 862,302	9 203,63	18	10 862,303	63 369	74 232	4	5
10 155,545	9 844,14	9						10 862,465	9 203,49	3	10 862,466	63 369	74 232	4	4
10 174,731	9 825,58	127	10 174,726	61 681	71 856	1	1	10 888,032	9 181,88	173	10 888,029	61 828	72 716	2	3
10 179,619	9 820,86	15	10 179,616	62 247	72 427	3	2	10 936,919	9 140,83	123	10 936,918	61 681	72 618	1	2
10 249,128	9 754,25	2	10 249,129	65 339	75 588	3	4	10 997,632	9 090,37	2	10 997,630	70 388	59 391	2	3
10 310,807	9 695,90	2	10 310,808	65 277	75 588	2	3	10 999,540	9 088,79	80	10 999,540	70,390	59 391	4	3
10 338,012	9 670,39	4						11 000,247	9 088,21	21	11 000,247	70 391	59 391	3	3
10 393,095	9 619,13	8						11 006,382	9 083,14	292	11 006,382	62 247	73 254	3	4
10 410,065	9 603,45	7	10 410,065	71 106	60 696	1	0	11 016,346	9 074,93	4	11 016,343	62 247	73 263	3	3
10 418,666	9 595,53	11	10 418,665	71 096	60 677	2	2	11 060,608	9 038,61	850	11 060,608	48 182	59 242	2	1
10 428,70	9 586,29	2	10 428,666	71 106	60 677	1	2	11 100,564	9 006,08	6	11 100,564	70 388	59 287	1	2
10 468,920	9 549,46	81	10 468,921	62 247	72 716	3	3	11 101,118	9 005,63	25	11 101,118	70 388	59 287	2	2
10 473,751	9 545,06	24	10 473,751	71 096	60 622	2	1	11 103,735	9 003,51	35	11 103,735	70 391	59 287	3	2
10 477,402	9 541,73	45	10 477,402	71 154	60 677	3	2	11 105,628	9 001,97	1 340	11 105,628	48 182	59 287	2	2
10 483,752	9 535,95	7	10 483,752	71 106	60 622	1	1	11 145,593	8 969,69	25	11 145,584	70 388	59 242	1	1
10 496,438	9 524,43	3						11 145,593	8 969,69	25	11 145,603	70 388	59 242	0	1
10 503,544	9 517,99	6	10 503,545	71 199	60 696	1	0	11 146,137	8 969,26	14	11 146,138	70 388	59 242	2	1
10 575,566	9 453,17	5						11 184,831	8 938,23	25	11 184,825	61 681	72 866	1	1
10 598,731	9 432,50	236	10 598,725	61 828	72 427	2	2	11 202,337	8 924,26	16	11 202,331	61 828	73 030	2	3
10 604,249	9 427,60	2	10 604,248	63 479	74 083	2	1	11 209,116	8 918,86	1 718	11 209,116	48 182	59 391	2	3
10 612,77	9 420,03	2	10 612,769	63 479	74 092	2	2	11 212,825	8 915,91	9	11 212,825	71 890	60 677	1	2
10 630,647	9 404,19	8						11 435,458	8 742,33	19	11 435,451	61 828	73 263	2	3
10 649,256	9 387,75	2						11 830,541	8 450,38	4	11 830,541	63 479	75 309	2	2
10 733,989	9 313,65	2						11 844,426	8 440,47	9	11 844,424	62 247	74 092	3	2

Tableau II. Niveaux d'énergie du spectre d'arc du Sélénium

Config.	LS	<i>J</i>	Niveau (cm ⁻¹)	Config.	LS	<i>J</i>	Niveau (cm ⁻¹)	Config.	LS	<i>J</i>	Niveau (cm ⁻¹)	Config.	LS	<i>J</i>	Niveau (cm ⁻¹)	
4p ⁴	³ P	2	0,00	4p ³ (⁴ S)6p	⁵ P	1	69 263,236	4p ³ (² P)5s''	¹ P ^o	1		4p ³ (⁴ S)5f	³ F	2	74 234,504	
		1	1 989,497	[8]		2	69 277,616	4p ³ (² D)5p'	³ F	2	72 618,181		3	74 234,624		
		0	2 534,36	[8]		3	69 314,405		3	72 716,522		4	74 234,687			
4p ⁴	¹ D	2	9 576,149	[8]	4p ³ (⁴ S)6p	³ P	0	69 629,529		4	73 253,983	4p ³ (⁴ S)8s	⁶ S ^o	2	74 209,875	
						1	69 599,464	4p ³ (² D)5p'	¹ P	1	72 866,088	4p ³ (⁴ S)8s	³ S ^o	1	74 318,113	
4p ⁴	¹ S	0	22 446,202	[8]		2	69 614,114	4p ³ (⁴ S)7p	³ P	0	73 041,948	4p ³ (⁴ S)8p	⁵ P	1	74 948,08	
4p ³ (⁴ S)5s	⁵ S ^o	2	48 182,190		4p ³ (⁴ S)5d	⁵ D ^o	0	70 388,40		1	73 042,922		2	74 951,85		
4p ³ (⁴ S)5s	³ S ^o	1	50 996,931			1	70 388,382		2	73 052,408		3	74 960,219			
4p ³ (⁴ S)5p	⁵ P	1	59 242,798			2	70 388,936	4p ³ (⁴ S)7p	⁵ P	1	73 083,111	4p ³ (⁴ S)7d	⁵ D ^o	0		
		2	59 287,818			3	70 391,553		2	73 094,379		1	75 153,961			
		3	59 391,306		4p ³ (⁴ S)5d	³ D ^o	1	71 106,054		3	73 101,107		2	75 196,943		
4p ³ (⁴ S)5p	³ P	0	60 695,989			2	71 096,053	4p ³ (² D)5p'	¹ F	3	73 263,944		3	75 195,670		
		1	60 622,302			3	71 154,790	4p ³ (⁶ S)6d	⁵ D ^o	0	73 543,727		4	75 195,802		
		2	60 677,388		4p ³ (² P)5s''	³ P ^o	0	71 199,533		1	73 543,586	4p ³ (⁴ S)7d	³ D ^o	1		
4p ³ (² D)5s'	³ D ^o	1	61 681,263			1	71 199,533		2	73 541,330		2	75 312,706			
		2	61 828,493			2			3	73 547,560		3	75 311,904			
		3	62 247,602		4p ³ (⁴ S)7s	⁵ S ^o	2		4	73 547,564						
4p ³ (⁴ S)4d	⁵ D ^o	0	63 380,874		4p ³ (⁴ S)7s	³ S ^o	1	71 890,213	4p ³ (⁴ S)6d	³ D ^o	1	73 863,760	4p ³ (² D)5p'	¹ D	2	75 309,798
		1	63 382,766		4p ³ (⁴ S)7s	⁵ S ^o	1	71 737,522		2	73 819,878	4p ³ (⁴ S)9s	⁵ S ^o	2	75 574,038	
		2	63 373,144		4p ³ (⁴ S)4f	⁵ F	2	71 737,465		3	73 860,519	4p ³ (⁴ S)9s	³ S ^o	1		
		3	63 387,416			3	71 737,206	4p ³ (² D)5p'	³ P	0	74 033,963	4p ³ (⁴ S)6f	⁵ F	1		
		4	63 369,935			4	71 737,302		1	74 083,505		2	75 587,309			
4p ³ (² D)5s'	¹ D ^o	2	63 479,257		4p ³ (⁴ S)4f	³ F	2	71 740,692		2	74 092,025		3	75 587,221		
4p ³ (⁴ S)4d	³ D ^o	1	65 299,554			3	71 739,881	4p ³ nl	⁵ A	2	74 161,558	4p ³ (⁴ S)6f	³ F	2	75 588,890	
		2	65 277,939			4	71 740,695	4p ³ (⁴ S)5f	⁵ F	1	74 232,527		3	75 588,746		
		3	65 339,738		4p ³ (² D)5p'	³ D	1	71 855,988		2	74 232,450		4	75 587,189		
4p ³ (⁴ S)6s	⁵ S ^o	2	65 989,536			2	72 427,218		3	74 232,416	4p ³ (⁴ S)6f	³ F	2	75 588,890		
4p ³ (⁴ S)6s	³ S ^o	1	66 623,266			3	73 030,824		4	74 232,400		3	75 588,746			
									5	74 232,237		4	75 588,866			

Tableau III. Transitions observées entre $4p^3(^4S)6p\ ^6P$ et $4p^3(^4S)4d\ ^6D$

$4p^3(^4S)4d$ (cm^{-1})	$4p^3(^4S)6p$					
	6P_1 59 242 cm^{-1}		6P_2 59 287 cm^{-1}		6P_3 59 391 cm^{-1}	
6D_0 63 380	4 138 11,3					11,1
6D_1 63 382	4 139 27		4 094 10			8,3
6D_2 63 373	4 130 13,1	19,4	4 085 19,2	32,4	3 981 1,92	3,7
6D_3 63 387			4 099 53,8	51,9	3 996 25	25,9
6D_4 63 369					3 978 100	100

Tableau IV. Variation de la quantité $Z-S$ pour les éléments de nombre atomique voisin de celui du Sélénium

Z: numéro atomique, S: paramètre d'écran

	$4f$			$5f$			$6f$			$7f$		
	E_4	T_4	$Z-S$	E_5	T_5	$Z-S$	E_6	T_6	$Z-S$	E_7	T_7	$Z-S$
Br I [13] $4s^24p^4(^3P)nf$ IP = 95 295	88 370	6 915	1,0041	90 863	4 422	1,0037	92 213	3 072	1,0039	93 029	2 256	1,0037
Kr I [3] $4s^24p^4(^3P)nf$ IP = 112 915	106 013	6 902	1,0032	108 498	4 417	1,0031	109 850	3 065	1,0027	110 663	2 252	1,0028
Rb I [3] $4s^24p^4(^1S)n;$ IP = 33 691	26 791	6 900	1,0030	29 277	4 414	1,0028	30 628	3 063	1,0024	31 441	2 250	1,0023
Se I [3] $4s^24p^3(^4S)nf$ IP = 78 658				71 738	6 920	1,2556	74 233	4 425	1,2049	75 588	3 070	1,1708
Se I $4s^24p^3(^4S)nf$ IP = 78 658	71 738	6 920	1,0045	74 233	4 425	1,0040	75 588	3 070	1,0036	76 404	2 254	1,0032

Tableau V. Transitions observées entre $4p^3(^4S)4d\ ^6D$ et $4p^3(^4S)4f\ ^6F$

$4p^3(^4S)4d$ (cm^{-1})	$4p^3(^4S)4f$									
	6F_6 71 738,040 cm^{-1}		6F_4 71 737,302 cm^{-1}		6F_3 71 737,206 cm^{-1}		6F_2 71 737,465 cm^{-1}		6F_1 71 737,522 cm^{-1}	
6D_4 63 369,935	8 368,105 100	100	8 367,367 13,4	13,6			0,9			
6D_3 63 387,416			8 349,886 56,6	68,2	8 349,791 17,3	19,1			1,8	
6D_2 63 373,144					8 364,062 38,8	43,6	14,9	8 364,321 18,2		1,8
6D_1 63 382,766							13,4	8 354,698 25,5	6,6	8 354,756 12,7
6D_0 63 380,874									12,8	8 356,648 12,7

Tableau VI. Transitions observées entre $4p^3(^4S)4d^3D$ et $4p^3(^4S)4f^3F$

$4p^3(^4S)4d$ (cm^{-1})	$4p^3(^4S)4f$		
	3F_4 71 740,695 cm^{-1}	3F_3 71 739,881 cm^{-1}	3F_2 71 740,692 cm^{-1}
3D_3 65 339,738	6 400,957 100	6 400,143 100	8,7 8,8
3D_2 65 277,939		6 461,942 66,5	69,1 8,3
3D_1 65 299,554			6 441,137 45,4

 Tableau VII. Transitions observées entre $4p^3(^4S)4d^5D$ et $4p^3(^4S)5f^6F$

$4p^3(^4S)4d$ (cm^{-1})	$4p^3(^4S)5f$				
	6F_6 74 232,237 cm^{-1}	6F_4 74 232,400 cm^{-1}	6F_3 74 232,416 cm^{-1}	6F_2 74 232,450 cm^{-1}	6F_1 74 232,527 cm^{-1}
6D_4 63 369,935	10 862,302 100	10 862,465 100	16,7	13,6	0,9
6D_3 63 387,416		10 844,985 83,3	68,2		19,1
6D_2 63 373,144			10 859,273 44,4	43,6	18,2
6D_1 63 382,766				10 849,684 22,2	25,5
6D_0 63 380,874					10 849,78 11,1
					10 851,653 11,1
					12,7

 Tableau VIII. Transitions observées entre $4p^3(^4S)4d^3D$ et $4p^3(^4S)5f^3F$

$4p^3(^4S)4d$ (cm^{-1})	$4p^3(^4S)5f$		
	3F_4 74 234,687 cm^{-1}	3F_3 74 234,624 cm^{-1}	3F_2 74 234,504 cm^{-1}
3D_3 65 339,738	8 894,949 100		8,8
3D_2 65 277,939		8 956,685 75,4	69,1
3D_1 65 299,554			8 934,950 49,1

III - 3

ARTICLE n°2

Observation et Classification du Spectre d'Arc du Tellure (Te I)

entre 3 678 et 11 761 cm^{-1} *

C. MORILLON et J. VERGÈS

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

Résumé

Observation et classification du spectre d'arc du tellure (Te I) entre 3 678 et 11 761 cm^{-1} . C. MORILLON et J. VERGÈS (Laboratoire Aimé Cotton, C.N.R.S.II, Bât. 505, 91405-ORSAY, FRANCE).

Physica Scripta.

Le spectre émis par un tube sans électrodes contenant du tellure isotopiquement pur de masse 130, a été enregistré par spectrométrie de Fourier. Les nombres d'ondes de 400 raies ont été mesurés avec une précision de 0.005 cm^{-1} . L'étude de l'effet Zeeman de 90 raies a été faite. 70 niveaux, dont 65 sont nouveaux, ont été déterminés, classant 170 raies. L'énergie de ces niveaux est donnée avec une précision de 0.005 cm^{-1} environ. Les facteurs de Landé de 46 niveaux ont été mesurés avec une précision pouvant atteindre 0.003 U.L. (unité Lorentz). L'étude paramétrique des configurations $5s^2 5p^3 (6s+7s+5d+6d)$ d'une part, $5s^2 5p^3 (6p+7p)$ d'autre part a permis d'interpréter la plupart des niveaux ; l'écart quadratique moyen entre les énergies expérimentales et calculées est de l'ordre de 30 cm^{-1} .

* Cet article recouvre en partie la thèse de Doctorat ès Sciences Physiques soutenue le 11 - III - 1975 à ORSAY par Claude MORILLON et enregistrée au C.N.R.S. sous le n°

Abstract

Observation and classification of the arc spectrum of tellurium (Te I) between $3\,678\text{ cm}^{-1}$ and $11\,671\text{ cm}^{-1}$. C. MORILLON and J. VERGES (Laboratoire Aimé Cotton, C.N.R.S. II, Bât. 505, 91405-ORSAY, FRANCE). Physica Scripta.

The spectrum emitted by an electrodeless discharge tube filled with pure ^{130}Te has been investigated by Fourier transform spectroscopy. The observations have led to a list of wavenumbers and estimated intensities for 400 lines in the range $3\,678$ to $11\,761\text{ cm}^{-1}$. Zeeman structures for 90 lines were studied. 70 levels, 65 of them being new, have been found and 170 lines have been classified. For these levels the energy is given with an accuracy equal to 0.005 cm^{-1} . Landé factors for 46 levels have been measured with an accuracy up to 0.003 L.U. .

Parametric studies performed on $5s^2 5p^3(6s+7s+5d+6d)$ configurations on the one hand and on $5s^2 5p^3(6p+7p)$ on the other hand, give a good interpretation for most of the levels ; the r. m. s. deviation of the level energy between theory and experiment is equal to roughly 30 cm^{-1} .

1 - Introduction

La classification du spectre d'arc du tellure telle qu'on la trouve dans "Atomic Energy Levels" (A. E. L.) [4] est surtout basée sur les travaux de J. E. RUBEY [2] qui datent de 1932. L'analyse faite par cet auteur utilise les observations ultraviolettes de McLEHMAN [1] entre 30 000 et 60 000 cm^{-1} , et ses propres observations dans le visible et l'infrarouge photographique entre 11 000 et 20 000 cm^{-1} .

G. BARTELT [3] en 1934 proposa une classification en désaccord sur plusieurs points avec celle de RUBEY. Des observations plus précises s'avèreraient donc nécessaires pour éclaircir la situation, et, dans le cadre de l'étude des métalloïdes lourds, nous avons entrepris l'analyse du spectre infrarouge du tellure en utilisant la spectrométrie de Fourier. On pouvait s'attendre à ce que l'observation infrarouge de ce spectre soit particulièrement féconde. En effet, la première configuration excitée $5s^2 5p^3 (4S) 6s$ se situe 45 000 cm^{-1} au-dessus du fondamental. Le potentiel d'ionisation étant de 72 667 cm^{-1} , la plupart des transitions entre configurations excitées doivent avoir des nombres d'ondes inférieurs à 12 000 cm^{-1} . Seul l'infrarouge pouvait d'ailleurs permettre de localiser les configurations $5s^2 5p^3 np$ et $5s^2 5p^3 nf$ de même parité que le fondamental.

Comme pour les autres éléments de cette colonne du tableau de Mendeleev, la difficulté de la classification provient d'un très grand mélange des configurations. La configuration $5s^2 5p^3$ de Te II contient en effet 3 termes 4S , 2D et 2P séparés de 11 000 cm^{-1} environ. Une configuration excitée $5s^2 5p^3 n\ell$ que l'on peut décomposer en 3 sous-configuration : $5s^2 5p^3 (4S) n\ell$, $5s^2 5p^3 (2D) n\ell$, $5s^2 5p^3 (2P) n\ell$ s'établira

donc sur $22\ 000\ \text{cm}^{-1}$, ce qui est très supérieur à la différence entre les énergies de 2 configurations voisines.

De plus, si pour le sélénium [6] le couplage n'est plus L-S, on sait que pour le tellure il l'est encore moins, et l'absence d'un schéma de couplage qui décrive de façon satisfaisante le spectre du tellure, joint aux difficultés précédentes rend particulièrement complexe la classification de ce spectre "simple".

2 - Les Sources

L'obtention d'un spectre par la méthode de transformation de Fourier d'un interférogramme nécessite des sources de durée de vie assez longue pour atteindre une haute résolution et traiter un domaine spectral suffisamment étendu avec un bon rapport signal sur bruit. En pratique les sources doivent rester stables pendant quelques heures ; en particulier un changement de régime de la décharge est inacceptable.

Les lampes que nous avons utilisées étaient des tubes sans électrodes, en silice fondue, de 30 mm de longueur. L'expérience nous a conduit à utiliser des tubes d'assez grand diamètre intérieur, 10 mm, qui semblent donner des lampes plus stables. Dans ces ampoules sont distillés sous vide quelques milligrammes de tellure isotopiquement pur, de masse atomique 130. Elles sont placées dans des cavités en argent et excitées par un champ électrique haute fréquence à 2 450 MHz avec une puissance de 100 Watts environ.

La tension de vapeur du tellure, à une température de 400°C environ, est suffisante pour que la décharge s'amorce ; ensuite elle s'entretient

d'elle-même sans gaz porteur, à condition de contrôler la température de fonctionnement. On sait que ces types de lampes ont des régimes de fonctionnement très différents selon la pression. Ainsi le spectre d'arc est excité préférentiellement pour une pression de quelques torrs, alors que le spectre d'étincelle apparaît pour des pressions inférieures. Les lampes à tellure sont d'un emploi assez difficile car une faible variation de la température crée de fortes variations de pression qui tendent à faire osciller la décharge entre 2 régimes.

De plus, si l'excitation baisse en dessous d'un certain seuil, la décharge change d'aspect, devient brillante et moins concentrée ; le tube s'éteint rapidement pour ne plus se rallumer. On observe alors un voile brunâtre sur l'enveloppe en silice du tube, ce qui semble être le résultat d'une attaque par le tellure.

Cet élément se caractérise encore par la difficulté d'observer des raies provenant de niveaux élevés. On observe généralement des raies très intenses entre les plus bas niveaux excités $(^4S) 6s$, 5S_2 et 3S_1 pour les niveaux impairs, $(^4S) 6p$, 5P et 3P pour les niveaux pairs. Toutes les autres transitions donnent des raies dont les plus intenses sont environ cent fois plus faibles.

Pour l'étude de l'effet Zeeman, des sources un peu différentes ont été utilisées. La stabilité dans le champ magnétique et la durée de vie des lampes sans électrodes au tellure, ont été considérablement augmentées en utilisant du néon comme gaz porteur sous une pression de 5 mm de Hg environ. La cavité et le tube sont placés dans l'entrefer de l'électro-aimant et la décharge est amorcée en l'absence de champ magnétique. Après une courte période où le néon est seul excité, le tellure se vaporise et

ensuite son spectre prédomine. Le champ magnétique est alors augmenté jusqu'à la valeur choisie. Il est nécessaire de refroidir la source pour maintenir le régime stable où le spectre d'arc du tellure est prépondérant. Si l'excitation baisse trop, et si le tellure n'est plus excité, le néon maintient la décharge et évite l'extinction et la mise hors d'usage de la lampe comme il a été indiqué plus haut.

Ces sources peuvent ainsi fonctionner pendant 2 à 3 heures dans un champ magnétique de 10 000 Oersted avec une stabilité très satisfaisante.

3 - Spectre infrarouge du tellure entre 3 600 et 11 800 cm^{-1} .

La méthode de spectrométrie par transformation de Fourier, ainsi que les appareils utilisés ont été décrits antérieurement [5]. Les performances, la résolution et la précision obtenue sur la mesure des nombres d'ondes en particulier, ont été rappelées dans un article récent consacré au sélénium [6].

Le tableau I contient la liste des nombres d'ondes dans le vide des raies observées, la longueur d'onde dans l'air, et l'intensité. Comme précédemment [6], cette intensité est donnée dans une échelle linéaire, et telle que la plus faible raie détectée ($I=1$) ait un rapport signal sur bruit compris entre 1 et 2.

On trouve ensuite dans le tableau I, éventuellement, la classification de la raie et les valeurs des facteurs de Landé de chacun des niveaux.

Plusieurs interférogrammes ont été enregistrés et les spectres correspondants calculés, mais nous n'avons retenu que les nombres d'ondes du

spectre qui couvre entièrement le domaine $3\ 500 - 11\ 800\ \text{cm}^{-1}$, afin d'avoir la meilleure cohérence entre les valeurs mesurées. L'enregistrement de l'interférogramme qui a fourni ce spectre a duré environ 10 heures. La différence de marche maximale était de 35.7 cm, et 850 000 échantillons ont été pris. La largeur de la fonction d'appareil non apodisée est alors de $0.014\ \text{cm}^{-1}$ et le domaine spectral libre s'étend de 0 à $11\ 877\ \text{cm}^{-1}$. Vers les grands nombres d'ondes un filtre coupe le visible au-delà de $12\ 000\ \text{cm}^{-1}$. Vers les faibles nombres d'ondes, la limite physique du spectre enregistré se situe vers $3\ 500\ \text{cm}^{-1}$ à cause de la baisse de transmission de la silice dont sont faits la séparatrice de l'interféromètre et le tube sans électrodes d'une part, et à cause de la décroissance de la détectivité des cellules au sulfure de plomb refroidies à l'azote liquide d'autre part.

Les raies observées ont une largeur à mi-hauteur de $0.025\ \text{cm}^{-1}$, vers $6\ 000\ \text{cm}^{-1}$. Si l'on estime à 400°C la température de la décharge, la largeur Doppler est de l'ordre de $0.010\ \text{cm}^{-1}$, ce qui, compte tenu de la largeur de la fonction d'appareil, $0.014\ \text{cm}^{-1}$, est vraisemblable, et tend à montrer que l'élargissement par pression, s'il existe, est de l'ordre de quelques $10^{-3}\ \text{cm}^{-1}$. Un déplacement par pression de l'axe des raies supérieur à $10^{-3}\ \text{cm}^{-1}$ semble donc peu probable.

Les mesures des nombres d'ondes sont effectuées sur ordinateur par un programme de pointé utilisant le spectre échantillonné obtenu par transformation de Fourier de l'interférogramme ; la précision est de l'ordre de $1 \times 10^{-4}\ \text{cm}^{-1}$. Si l'on compare les mesures du nombre d'ondes d'une raie, effectuées sur des spectres obtenus à partir d'interférogrammes pris dans des conditions différentes à plusieurs jours d'intervalle, les écarts restent inférieurs à $0.005\ \text{cm}^{-1}$ environ. L'incertitude sur les mesures absolues des nombres d'ondes est donc de cet ordre.

En effet une erreur systématique due à un léger défaut de réglage de l'interféromètre est certainement responsable de la majeure partie de cet écart qui reste de même signe pour 2 interférogrammes de la même région spectrale. Cette hypothèse est confirmée par l'excellent accord obtenu entre les valeurs calculées et les valeurs mesurées des nombres d'ondes (tableau I), l'écart maximal étant de 0.003 cm^{-1} . Dans l'état actuel de l'interféromètre, il semble difficile d'abaisser l'incertitude sur les mesures absolues des nombres d'ondes en dessous de 0.005 cm^{-1} , toutes les précautions concernant le réglage ayant été prises.

Pour quelques raies très faibles, les mesures ont été effectuées à la main sur le tracé du spectre avec une précision de $1 \times 10^{-2} \text{ cm}^{-1}$ environ.

L'interféromètre étant utilisé dans l'air, une correction, due à la dispersion, donnée par la formule de B. EDLÉN [7] a été effectuée sur le nombre d'ondes de chaque raie pour obtenir le nombre d'ondes dans le vide.

4 - Effet Zeeman.

En utilisant un programme de recherche automatique de différences égales, soit entre les nombres d'ondes expérimentaux, soit entre ceux-ci et une série de niveaux déjà connus, le principe de combinaison et les intensités observées permettent de trouver de nouveaux niveaux d'énergie. Toutefois, le spectre du tellure contenant peu de raies, le nombre de différences égales est rarement supérieur à 3 ce qui est très voisin du nombre de coïncidences fortuites. En particulier les niveaux $J=0, 1, 4$ et 5 sont très difficiles à trouver par cette méthode. De plus, même les niveaux trouvés sont incomplètement connus car le nombre quantique J peut

rarement être déterminé avec certitude. Enfin, l'absence d'observations sûres dans l'ultraviolet et le visible rendait impossible tout progrès dans la classification de ce spectre. C'est pourquoi l'étude de l'effet Zeeman a été effectuée sur le tellure dans l'infrarouge entre 4 000 et 11 800 cm^{-1} , en utilisant la méthode de spectrométrie par transformation de Fourier.

L'électroaimant qui a été utilisé a un entrefer de 150 mm environ ; le diamètre des pôles est de 60 mm ce qui, compte tenu de la faible portion de source observée, donne un champ assez homogène au centre pour ne pas élargir les composantes Zeeman. La stabilité du champ magnétique est largement suffisante.

Une lampe à tellure avec du néon comme gaz porteur, placée au centre de l'entrefer, était observée perpendiculairement à la direction du champ magnétique (observation transversale), sans polariseur, ce qui a permis d'obtenir à la fois les composantes π et σ . La plupart des structures de raies fortes ont pu être interprétées sans ambiguïté. Cette méthode présente l'avantage de ne pas affaiblir le rapport signal sur bruit par l'absorption du polariseur. D'autre part des mesures précises de position peuvent être faites sur toutes les composantes.

Le spectre entre 4 000 et 11 800 cm^{-1} a été observé en 5 fois, chaque tranche spectrale étant isolée par un filtre interférentiel :

- entre 4 000 et 5 900 cm^{-1} , 130 000 points avec une limite de résolution de 0.0152 cm^{-1} ,

- entre 5 500 et 7 000 cm^{-1} , 120 000 points avec 0.014 cm^{-1} ,

- entre 6 800 et 8 100 cm^{-1} , 120 000 points avec 0.0127 cm^{-1} ,

- entre 8 000 et 9 800 cm^{-1} , 130 000 points avec 0.0165 cm^{-1} ,

- entre 8 500 et 11 800 cm^{-1} , 220 000 points avec 0.0305 cm^{-1} .

La largeur d'une composante varie entre 0.030 et 0.050 cm^{-1} suivant la région spectrale. Avec un champ magnétique de 10 000 Oersted les structures observées sont assez bien résolues pour une différence entre les facteurs de Landé des 2 niveaux supérieure à 0,1 ou 0,2 U.L. (Unité Lorentz). Les intensités des composantes sont généralement très bien respectées comme le montrent les figures I, II, III, IV, V, représentant des structures Zeeman de raies de Te I . Les pointés des composantes sont faits sur ordinateur, dans tous les cas où la structure est bien résolue, avec une précision variant de $0,1 \times 10^{-3}$ à 5×10^{-3} cm^{-1} . La détermination des facteurs de Landé des 2 niveaux utilisant les pointés de toutes les composantes π et σ , l'incertitude sur les g se trouve alors égale à 0.005 U.L. environ. Lorsque la structure n'est pas assez résolue ou lorsque le rapport signal sur bruit est trop faible, la décomposition est effectuée à la main sur le tracé du spectre et l'incertitude sur g peut devenir assez grande. Même dans ce cas l'ordre de grandeur du facteur de Landé est une aide importante pour la classification ; en particulier cette grandeur devient très significative lorsque sa valeur s'écarte beaucoup de 1.

Quand il s'agit d'une raie intense présentant une structure bien résolue, la précision sur la mesure de g n'est plus seulement limitée par l'incertitude sur le pointé des composantes, mais aussi par l'incertitude sur la valeur du champ magnétique. Celui-ci a été mesuré à l'aide des structures Zeeman du néon faisant intervenir le niveau d'énergie ,

158 797.954 cm^{-1} , $2p^5 ({}^2P_{3/2}) 4s [3/2] 1$ en notation de Racah, ou $2s_4$

en notation de Paschen. C'est à notre connaissance un des niveaux du néon pour lesquels les facteurs de Landé ont été mesurés avec la plus grande précision. V. D. GALKIN et al. [8] donnent $g = 1.276 \pm 0.004$ U.L. D'autres mesures très précises ont été effectuées par E. H. PINNINGTON [9] mais sur des niveaux profonds qui n'interviennent dans aucune transition infrarouge.

Les raies qui font intervenir le niveau $2s_4$ de Ne I, et qui ont servi à la détermination du champ magnétique sont les suivantes :

$\sigma = 4\ 216.646\ \text{cm}^{-1}$, avec le niveau $163\ 014.6$ de $J=1$ (fig. VI)
et $\sigma = 4\ 605.33\ \text{cm}^{-1}$, avec le niveau $163\ 403.281$ de $J=0$ (fig. VII).

Ces raies ont été choisies pour la simplicité de leurs structures Zeeman parfaitement résolues. Les valeurs du champ magnétique ainsi déterminées sont les suivantes :

$8\ 020 \pm 25$ Oersted pour la tranche $8\ 000 - 9\ 800\ \text{cm}^{-1}$

$9\ 895 \pm 30$ Oersted pour les autres tranches.

Soit une erreur relative $\frac{\delta H}{H} = 3 \times 10^{-3}$. Ceci entraîne donc sur les mesures de g du tellure une erreur systématique relative $\frac{\delta g}{g} \leq 3 \times 10^{-3}$.

Dans le tableau I, lorsque la structure Zeeman d'une raie a pu être étudiée, les valeurs des facteurs de Landé des 2 niveaux sont indiqués.

Dans les tableaux II et III, le facteur de Landé de chaque niveau a été obtenu par une moyenne pondérée des valeurs obtenues pour les différentes raies faisant intervenir ce niveau. L'incertitude indiquée entre parenthèses ne tient compte que des erreurs de pointé sur les composantes. L'incertitude due à la mesure du champ magnétique doit être ajoutée pour obtenir l'incertitude totale. Une déviation moyenne de 0.006 U.L. est

observée entre les valeurs expérimentales et théoriques. Ceci peut provenir de l'erreur systématique sur le champ due à l'incertitude sur le facteur de Landé du niveau $2s_4$ du néon. Une mesure directe du champ, plus précise, ne nous a pas paru nécessaire pour ce travail de classification.

5 - Niveaux d'énergie de Te I.

Sur les 400 raies observées entre $3\ 500$ et $11\ 800\ \text{cm}^{-1}$, la liste de niveaux proposée dans A. E. L. [4] ne classait que quelques raies intenses correspondant aux transitions $6p\ ^5P \rightarrow 6s\ ^5S_2$. Dans ces conditions nous avons été amenés à ne pas tenir compte de ces niveaux, sauf $6s\ ^5S_2$ et $6p\ ^5P$. Nous n'avons pas non plus utilisé les observations antérieures de McLENNAN [1] dans l'ultraviolet et de RUEDY [2] dans le visible.

Les observations infrarouges ne permettant pas de relier les configurations excitées à la configuration expérimentale, l'énergie du niveau $6s\ ^5S_2$ donnée dans 'A. E. L.', soit $44\ 253.000\ \text{cm}^{-1}$ a été prise comme base. A l'aide du principe de combinaison et des résultats apportés par l'effet Zeeman d'une part, et de l'étude paramétrique d'autre part, 38 niveaux appartenant aux configurations paires ont été trouvés (Tableau II), et 32 niveaux appartenant aux configurations impaires (Tableau III).

Dans ces tableaux on trouve l'énergie des niveaux classés par ordre croissant, le nombre quantique J et le facteur de Landé avec son incertitude entre parenthèses.

L'incertitude sur l'énergie des niveaux est de l'ordre de $0,005\ \text{cm}^{-1}$. Ces 70 niveaux classent 170 raies, et l'écart le plus grand entre les

nombres d'ondes calculés et mesurés est de 0.003 cm^{-1} . Toutes les raies fortes, d'intensité comprise entre 50 et 10 000 sont classées. Parmi les raies non classées moins de 10 ont une intensité comprise entre 10 et 50.

6 - Classification des raies U. V. de McLENNAN et visible de RUEDY.

La presque totalité des raies observées par McLENNAN entre 30 000 et 60 000 cm^{-1} ont pu être classées à l'aide des niveaux d'énergie que nous avons déterminés (Tableau IV). L'écart entre les valeurs calculées et mesurées varie de façon continue en fonction du nombre d'ondes, et atteint 7 cm^{-1} vers 55 000 cm^{-1} .

Par contre, seules quelques raies de la liste établie par RUEDY ont pu être classées.

7 - Généralités sur le spectre du tellure.

La configuration fondamentale de Te I, $5s^2 5p^4$ contient 3 termes : 3P , 1D et 1S . Les configurations excitées $5s5p^5$ et $5p^6$ donnent respectivement deux termes : 3P et 1P , et un terme 1S . Tous les autres niveaux appartiennent aux configurations excitées de type $5s^2 5p^3 n\ell$. Les termes de ces configurations peuvent être décrits à l'aide des termes de la configuration $5s^2 5p^3$ de l'ion Te II, c'est-à-dire les termes parents : 4S , 2D , 2P . Les termes que l'on s'attend à trouver pour ces configurations sont indiqués dans le tableau (V), en couplage L.S. .

Pour ce spectre l'approximation du champ central qui considère l'interaction électrostatique comme une petite perturbation sur chaque

configuration n'est pas satisfaisante. L'interaction électrostatique du coeur, $Q(5p,5p)$, dont l'intégrale radiale est $F^2(5p,5p)$, est plus grande que la séparation entre les configurations dans le problème du champ central. De forts mélanges de configurations sont donc attendus, non seulement entre les basses configurations que nous étudions, mais aussi entre celles-ci et des configurations situées au voisinage ou au-dessus du potentiel d'ionisation, entre termes parents différents.

L'interaction spin-orbite des électrons 5p du coeur, Λ_{5p} , d'intégrale radiale ζ_{5p} , produit une séparation des niveaux de chaque terme parent. Le couplage du coeur p^3 , intermédiaire entre le couplage L.S. pur et le couplage jj pur, peut être caractérisé par la grandeur

$$\chi = \frac{5 \cdot \zeta_{5p}}{F^2(5p,5p)} \quad [10] \quad .$$

Pour Te II, les valeurs de F^2 et ζ tirées de nos études paramétriques conduisent à une valeur $\chi = 0.73$, alors que pour Sb I, $\chi = 0.64$.

L'interaction électrostatique de l'électron de valence avec l'ion, $Q(5p,n\ell)$, produit une séparation petite devant l'écart entre termes parents. Les intégrales radiales qui interviennent dans cette interaction sont : $F^2(5p,n\ell)$ directe et $G^K(5p,n\ell)$ indirecte.

L'interaction spin-orbite de l'électron externe, $\Lambda_{n\ell}$, apparaît enfin comme une perturbation toujours faible et l'intégrale radiale $\zeta_{n\ell}$ est petite.

D'où la relation d'ordre entre les différentes interactions :

$$Q(5p,5p) > \Lambda_{5p} > Q(5p,n\ell) > \Lambda_{n\ell} \quad .$$

8 - Etude paramétrique de Te I .

8.1 Cette étude a été faite grâce à la chaîne de programmes réalisés au Laboratoire Aimé Cotton [11, 12].

Les matrices de coefficients pour les configurations $s^2 p^3 n\ell$ avaient déjà été constituées pour l'étude de O I et S I [13] ; elles ont été utilisées pour ce travail. Les matrices de coefficients pour le calcul des facteurs de Landé ont été ajoutées.

Les calculs ont été effectués sur UNIVAC 1110 au Centre de Calcul d'Orsay, Université de Paris-Sud.

Pour chaque étude paramétrique les résultats sont donnés sous forme de 2 tableaux. L'un (tableau VI ou VIII) contient les valeurs des paramètres, l'écart-type sur chaque paramètre (sauf lorsqu'il est fixé), et l'écart quadratique moyen sur les énergies :

$$\overline{\Delta E} = \left[\frac{\sum_{i=1}^N (E_{\text{exp}} - E_{\text{calc}})^2}{N - P} \right]^{\frac{1}{2}}$$

où N est le nombre de niveaux connus expérimentalement et P le nombre de paramètres libres.

L'écart type ΔP_j d'un paramètre dont la valeur est P_j , est tel que si l'on fixe le paramètre à l'une quelconque des valeurs du domaine $P_j \pm \Delta P_j$, l'écart quadratique moyen $\overline{\Delta E}$ ne change pas.

L'autre tableau (VII ou IX) donne, par valeur de J et pour chaque niveau, l'énergie expérimentale et l'énergie calculée ainsi que leur différence $\Delta E = E_{\text{exp}} - E_{\text{calc}}$, les facteurs de Landé expérimental et calculé ainsi que leur différence $\Delta g = g_{\text{exp}} - g_{\text{calc}}$, enfin la composition de la fonction d'onde. Les fonctions d'onde sont développées sur les fonctions de base de plusieurs configurations. Les états purs des configurations

$5p^3 n\ell$ sont définis par le couplage L.S. de l'ion p^3 et de l'électron $n\ell$:

$|5p^3 (S_1 L_1) n\ell, SLJ\rangle$. Pour simplifier l'écriture nous désignons par la

suite ce couplage sous le nom de couplage L.S. et nous utilisons les con-

ventions suivantes : $n\ell$ représente $5s^2 5p^3 ({}^4S) n\ell$

$n\ell'$ représente $5s^2 5p^3 ({}^2D) n\ell$

$n\ell''$ représente $5s^2 5p^3 ({}^2P) n\ell$

Les fonctions d'onde réelles sont le plus souvent un mélange complexe de fonctions de base L.S. . Seuls la parité et le nombre quantique J sont de "bons nombres quantiques", de sorte que les règles de sélection strictes, $\Delta S = 0$ et $\Delta L = 0 \pm 1$, $\Delta S_1 = 0$, $\Delta L_1 = 0$ sont couramment violées comme en témoignent les transitions observées (Tableau I).

Enfin, le mélange entre configurations rend plus complexe encore le problème du couplage de sorte que si un nom L.S. et une configuration sont attribués à chaque niveau ceci n'est fait que dans un souci de simple étiquetage.

Tous les niveaux dont l'énergie calculée est inférieure à $68\,000\text{ cm}^{-1}$ environ ont été reportés dans les tableaux. Au-dessus de cette valeur, les énergies calculées fournissent des estimations certainement peu précises en raison de la présence des configurations qui n'ont pas été introduites dans les calculs (les renseignements pourront être fournis par les auteurs aux personnes intéressées).

8.2 Difficultés

La principale difficulté que l'on rencontre dans l'étude paramétrique du spectre d'arc du tellure, consiste dans le faible nombre de niveaux connus, quelle que soit la configuration considérée. En général on connaît les niveaux basés sur $({}^4S)$, quelquefois ceux basés sur $({}^2D)$, $(5s^2 5p^3 ({}^2D) 6s$ et $5s^2 5p^3 ({}^2D) 6p)$, mais aucun niveau basé sur $({}^2P)$ n'a pu être identifié avec certitude.

La deuxième difficulté provient du fort mélange entre configurations, qui oblige à traiter simultanément plusieurs configurations. Aux intégrales radiales propres à chaque configuration s'ajoutent alors celles qui rendent compte du mélange de 2 configurations, de type $R^K(5p\ n\ell, 5p\ n\ell')$ pour l'interaction électrostatique, et de type $\zeta_{n\ell-n\ell'}$ pour l'interaction spin-orbite. Dans ces conditions le nombre d'intégrales radiales devient égal ou supérieur au nombre de niveaux connus, et la méthode paramétrique qui consiste à considérer ces intégrales comme des paramètres ajustables, ne peut être utilisée qu'en fixant un certain nombre de ces intégrales à des valeurs calculées a priori. Le calcul a priori des intégrales radiales a été effectué par la méthode du potentiel paramétrique [14] à l'aide du programme de calcul MAPPAC [15].

9 - Configurations impaires.

9.1 Etude paramétrique de $5s^2 5p^3 (6s+7s+5d+6d)$.

Les configurations $5s^2 5p^3 6s$, $5s^2 5p^3 7s$, $5s^2 5p^3 5d$, $5s^2 5p^3 6d$ ont, dans une première étape, été étudiées séparément, puis ces 4 configurations ont été étudiées simultanément en tenant compte de toutes les interactions: $6s-7s$, $6s-5d$, $6s-6d$, $7s-5d$, $7s-6d$, $5d-6d$.

On a imposé dans cette étude paramétrique que les intégrales $F^2(5p,5p)$ et ζ_{5p} qui caractérisent le coeur p^3 aient la même valeur dans les 4 configurations, ce qui est vraisemblablement une assez bonne approximation. 29 intégrales, dont 13 intégrales d'interaction entre configurations, sont nécessaires pour traiter ce problème. 18 intégrales ayant été fixées à leurs valeurs estimées a priori, finalement l'optimisation a été faite avec

11 paramètres libres pour 24 niveaux expérimentaux. Les résultats sont rassemblés dans les tableaux VI et VII.

L'écart quadratique moyen sur l'énergie est de $34,5 \text{ cm}^{-1}$ pour un domaine de $20\,000 \text{ cm}^{-1}$. Les facteurs de Landé calculés sont généralement très voisins des valeurs expérimentales, ce qui constitue une certaine garantie de la valeur de l'optimisation. L'écart quadratique moyen sur les g est $0,013 \text{ U.L.}$. Le problème le plus ardu à résoudre dans cette parité était dû au mélange des termes 3D et 1D de $6s'$, et 3D de $5d$, qui ont des énergies voisines de $55\,000 \text{ cm}^{-1}$. La confusion qui existe dans les classifications antérieures provient en partie de cette difficulté. L'accord obtenu pour l'ensemble des niveaux connus de cette parité lève totalement cette ambiguïté. On peut remarquer en particulier les niveaux $57\,114 \text{ cm}^{-1}$ et $58\,592 \text{ cm}^{-1}$ qui sont un mélange de $5d \ ^3D_2$ et $6s' \ ^1D_2$, et qui donnent avec les niveaux $6p'$ et $7p$ des transitions d'intensités comparables.

Entre $60\,000$ et $64\,000 \text{ cm}^{-1}$, les niveaux trouvés expérimentalement pouvaient être attribués à $7s$, $6s''$, $5d'$ et $6d$. Les niveaux 5S_2 et 3S_1 de $7s$ ont été facilement identifiés d'une part à cause de la forte intensité des raies $7s-6p$, et d'autre part grâce à la valeur très caractéristique de leur facteur de Landé.

Les niveaux $6d$ bien groupés en 5D et 3D sont aussi tout à fait sûrs. Par contre les niveaux $6s''$ n'ont pu être déterminés, pas plus que les niveaux $5d'$. Aucun indice ne nous permet actuellement de penser qu'ils interviennent dans les raies non classées.

9.2 Autres configurations impaires.

En dehors de l'étude paramétrique on a pu identifier avec assez de sûreté quelques niveaux appartenant à des configurations impaires. Dans le tableau XI on indique 3P_2 et 3P_1 de la configuration $5s5p^5$. Ces 2 niveaux donnent des transitions avec le fondamental $5p^4$ qui classent deux raies de la liste U.V. de McLENNAN [1] (tableau IV).

Enfin 5S_2 et 3S_1 de $8s$ et $9s$ donnent lieu à quelques transitions infrarouges.

10 - Configurations paires.

10.1 La configuration fondamentale $5s^25p^4$ a fait l'objet d'une étude paramétrique effectuée par GRUZDEV et al. [16], par extrapolation à partir de I II et Xe III. ERIKSSON [17], à l'aide d'observations visibles de raies dipolaires magnétiques et quadrupolaires électriques, a déterminé avec une bonne précision les énergies des niveaux de cette configuration.

Parmi les configurations excitées, les niveaux déterminés expérimentalement peuvent être attribués à $6p$, $7p$, $4f$, $5f$. La configuration $5p^6$ qui ne contient que le terme 1S_0 est estimée à $166\ 000\text{ cm}^{-1}$ par la méthode du potentiel paramétrique (MAPPAC [15]) et en utilisant le critère spectroscopique. Son influence peut malgré tout ne pas être négligeable sur les niveaux $J=0$.

10.2 Etude paramétrique de $5s^25p^3$ ($6p+7p$).

Une étude paramétrique de l'ensemble de ces 2 configurations a été effectuée. Pour chacune de ces configurations 7 paramètres sont nécessaires.

Les paramètres décrivant le mélange des 2 configurations sont au nombre de 4. Au total 18 intégrales radiales sont donc nécessaires pour décrire complètement l'ensemble de ces 2 configurations.

Comme pour l'étude des configurations impaires on a imposé que les intégrales $F^2(5p,5p)$ et ζ_{5p} aient la même valeur dans les 2 configurations np . D'autre part, 5 paramètres ont été fixés à leurs valeurs déterminées a priori par MAPPAC.

L'optimisation a donc été faite avec 11 paramètres pour 20 niveaux expérimentaux. Les résultats sont donnés dans les tableaux VIII et IX. L'écart quadratique moyen sur les énergies est de $33,9 \text{ cm}^{-1}$ pour un domaine de $13\,000 \text{ cm}^{-1}$. L'accord entre les facteurs de Landé expérimentaux et calculés est généralement bon, bien que l'écart quadratique moyen sur les g (0.032 U.L.) soit plus grand que pour les configurations impaires. Ceci est dû en particulier aux niveaux $63\,556$ et $63\,669 \text{ cm}^{-1}$ de $J=1$ d'une part, $64\,564$ et $64\,900 \text{ cm}^{-1}$ de $J=2$ d'autre part. Les facteurs de Landé de ces niveaux sont très sensibles à une légère erreur sur leur composition, à cause des valeurs très différentes des g des niveaux L.S. de base qui entrent dans cette composition.

Le mélange de ces configurations est très important pour les niveaux de $6p$ basés sur 2D et ceux de $7p$ basés sur 4S . En particulier pour $J=1$, les niveaux $63\,556$, $63\,669$ et $64\,088$ sont un mélange complexe de $7p \ ^5P_1$, $7p \ ^3P_1$ et $6p' \ ^3D_1$, $6p' \ ^1P_1$. Le comportement remarquablement identique des 2 niveaux $63\,556$ et $63\,669$, tant par leurs facteurs de Landé ($g=1.7$) que par les transitions de même intensité auxquelles ils donnent lieu avec les mêmes niveaux impairs, se trouve bien expliqué par leur composition très semblable ($45\% \ 7p \ ^5P_1$). Les niveaux $6p' \ ^3P$,

indiqués entre parenthèses dans le tableau (IX) n'ont pas été introduits dans l'étude paramétrique en raison de la date récente de leur découverte.

10.3 $5s^2 5p^3 (4S) nf$ (Tableau X) .

Les niveaux appartenant aux termes 5F et 3F de la sous-configuration $5s^2 5p^3 (4S) 4f$ ont été déterminés. Les transitions $5d-4f$ sont particulièrement fortes entre $^5D - ^5F$ et $^3D - ^3F$ mais plusieurs raies d'intercombinaison ont aussi été observées.

Pour la sous-configuration $5s^2 5p^3 (4S) 5f$ les niveaux de 5F et 3F ont été trouvés.

Les facteurs de Landé des niveaux $4f$ sont donnés avec une mauvaise précision, car les structures Zeeman observées dans le champ magnétique sont très perturbées, la structure fine très serrée des multiplets 5F et 3F donnant lieu à un début d'effet Paschen-Back.

Remarque :

A la fin de notre étude, une liste de niveaux pairs, déterminés par absorption à partir de la configuration fondamentale, nous a été communiquée (Travail effectué par K. S. BATHIA, Imperial Collège, Londres). Les énergies de ces niveaux semblent peu précises, mais ces observations ultraviolettes confirment bien nos résultats.

Remerciements :

Nous remercions Madame J. CHEVILLARD pour sa précieuse collaboration en ce qui concerne le traitement des données sur ordinateur.

Références

1. McLENNAN, J. C. et CRAWFORD, M. F., Nature 124, 874 (1929).
2. RUEDY, J. E., Phys. Rev. 41, 588 (1932).
3. BARTELT, O., Z. Physik 88, 522 (1934).
4. MOORE, C. E., Atomic Energy Levels III, Natl. Bur. Std. Circ. N° 467.
Government Printing Office, Washington, D. C., 1958.
5. CONNES, J., DELOUIS, H., CONNES, P., GUELACHVILI, G., MAILLARD, J.-P.
et MICHEL, G., Nouv. Rev. Opt. App. I, 1 (1970).
6. MORILLON, C. et VERGÈS, J., Physica Scripta 10, 227 (1974).
7. EDLÉN, B., J. Opt. Soc. Am. 43, 339 (1953).
8. GALKIN, V. D. et SEMENOV, R. I., Optics and Spectrosc. 29, 544 (1970).
9. PINNINGTON, E. H., J. Opt. Soc. Am. 57, 271 (1967).
10. CONDON, E. U. et SHORTLEY, G. H., The Theory of Atomic Spectra,
p. 276, Cambridge University Press, New York, 1959.
11. BORDARIER, Y., Thèse, Orsay (1970).
12. BORDARIER, Y. et CARLIER, A. : Programme AGENAC, calcul des formules
suivant l'algèbre de Racah (Laboratoire Aimé Cotton, 1966).
- BORDARIER, Y. : Programme ASSAC, Regroupement des résultats
d'AGENAC (Laboratoire Aimé Cotton, 1966).
- BORDARIER, Y. et DAGOURY, P. : Programme DIAGAC, diagonalisation
et calcul des énergies et des facteurs de Landé (1968).
- BORDARIER, Y. : Programme GRAMAC, Optimisation des paramètres par
moindres carrés (Laboratoire Aimé Cotton, 1966).
13. AYMAR, M., Physica 66, 364 (1973).
14. KLAPISCH, M., Thèse, Orsay (1969) ; Compt. Rend. Acad. Sci. (Paris)
265, 914 (1967).

15. KLAPISCH, M., Computer Phys. Commun. 2, 239 (1971).
16. GRUZDEV, P. F., Optics and Spectroscopy 27, 479 (1969).
17. ERIKSSON, K. B. S., Phys. Lett. 44A, 73 (1973).

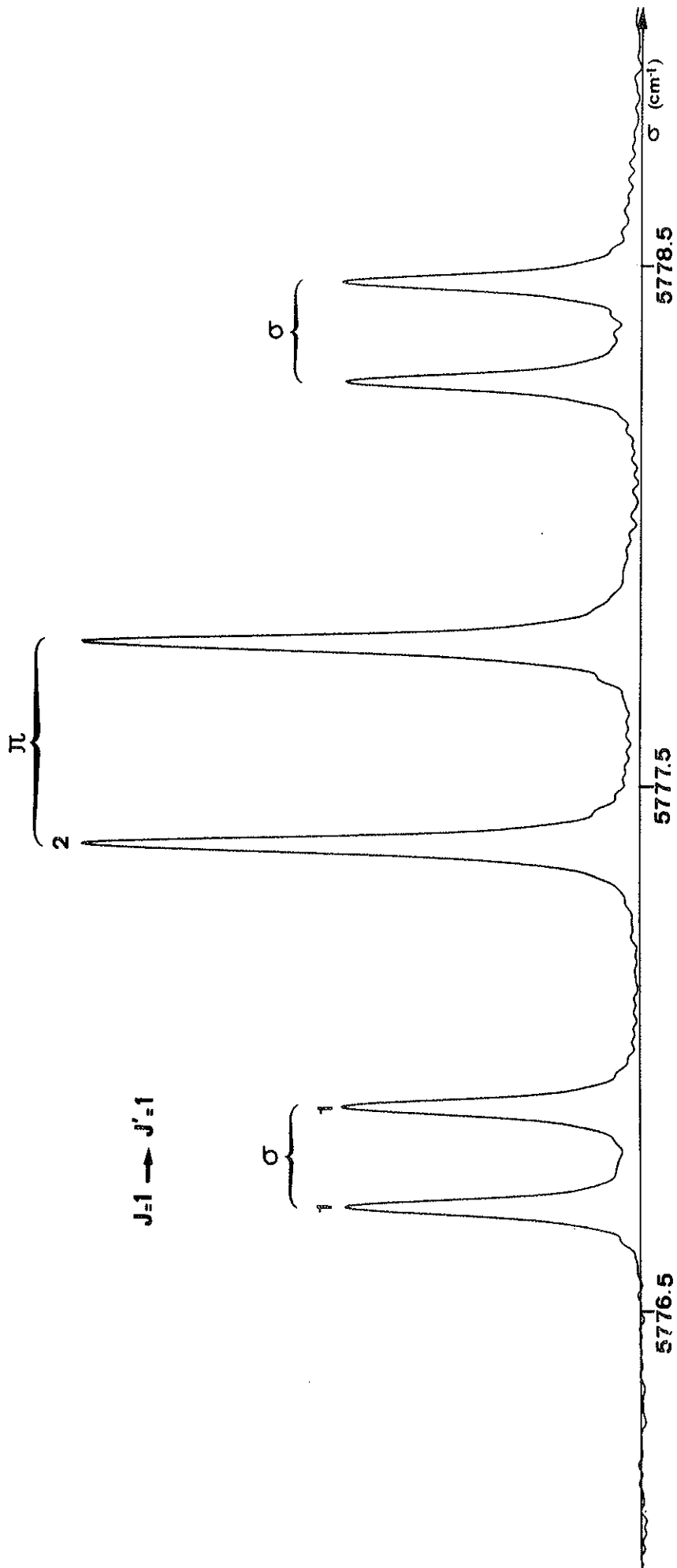


Figure 1 : Fe I . Structure Zeeman de la raie $\sigma = 5\,777.586\text{ cm}^{-1}$ dont la classification est :

$61\,133\ (7s\ ^3S_1) - 55\,355\ (6p\ ^5P_1)$; $\Delta J=0$;

$H = 9\,895 \pm 30$ Oerstedes

$g(^3S_1) = 1.921\ (0.002)$; $g(^5P_1) = 1.504\ (0.002)$.

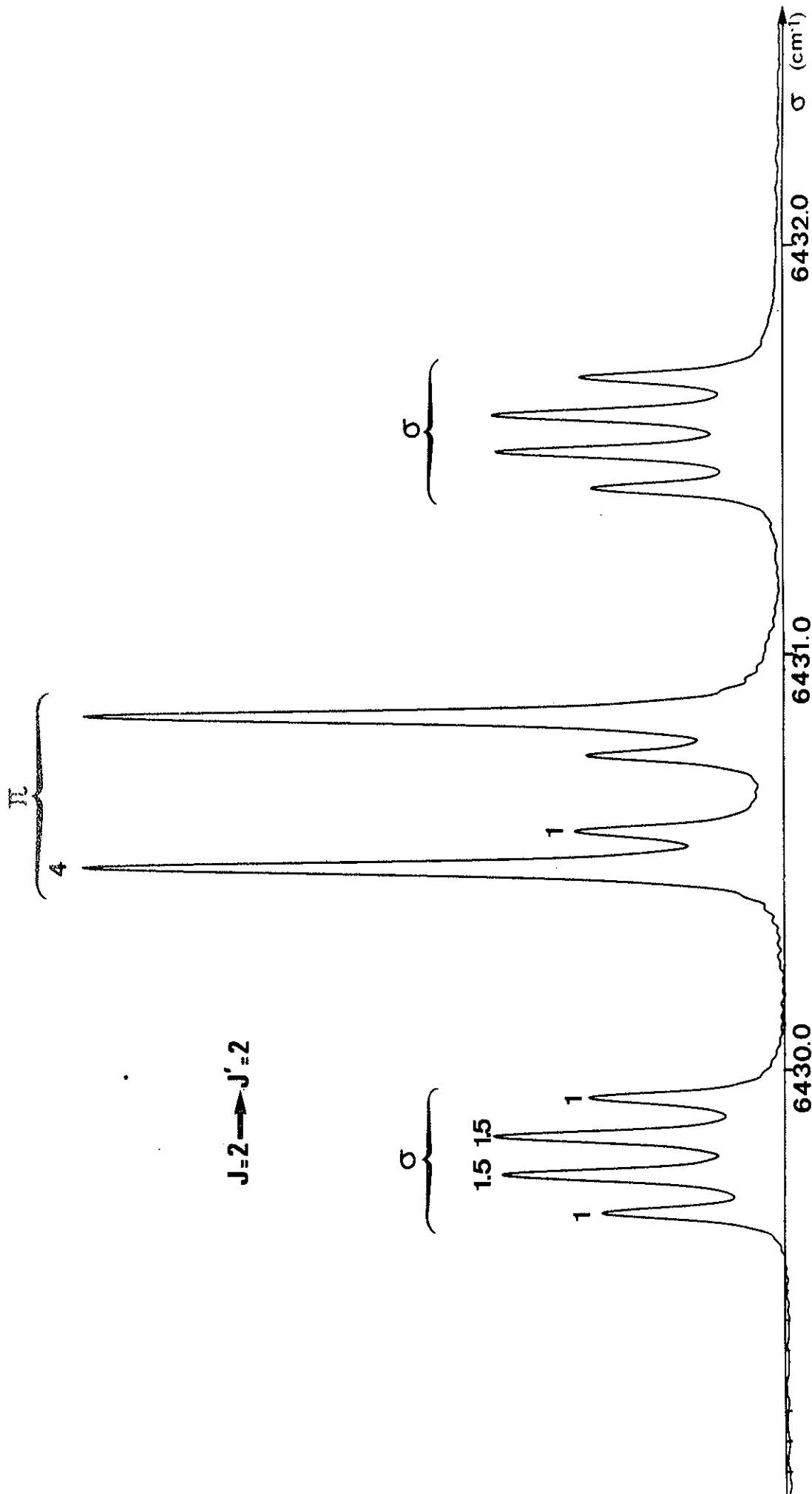


Figure 2 : Te I . Structure Zeeman de la raie $\sigma = 6430.669 \text{ cm}^{-1}$ dont la classification est :

$60\ 629 (7s\ ^5S_2) - 54\ 199 (6p\ ^5P_2)$; $\Delta J=0$;

$H = 9\ 895 \pm 30$ Oersts

$g(^5S_2) = 1.956 (0.005)$; $g(^5P_2) = 1.761 (0.005)$.

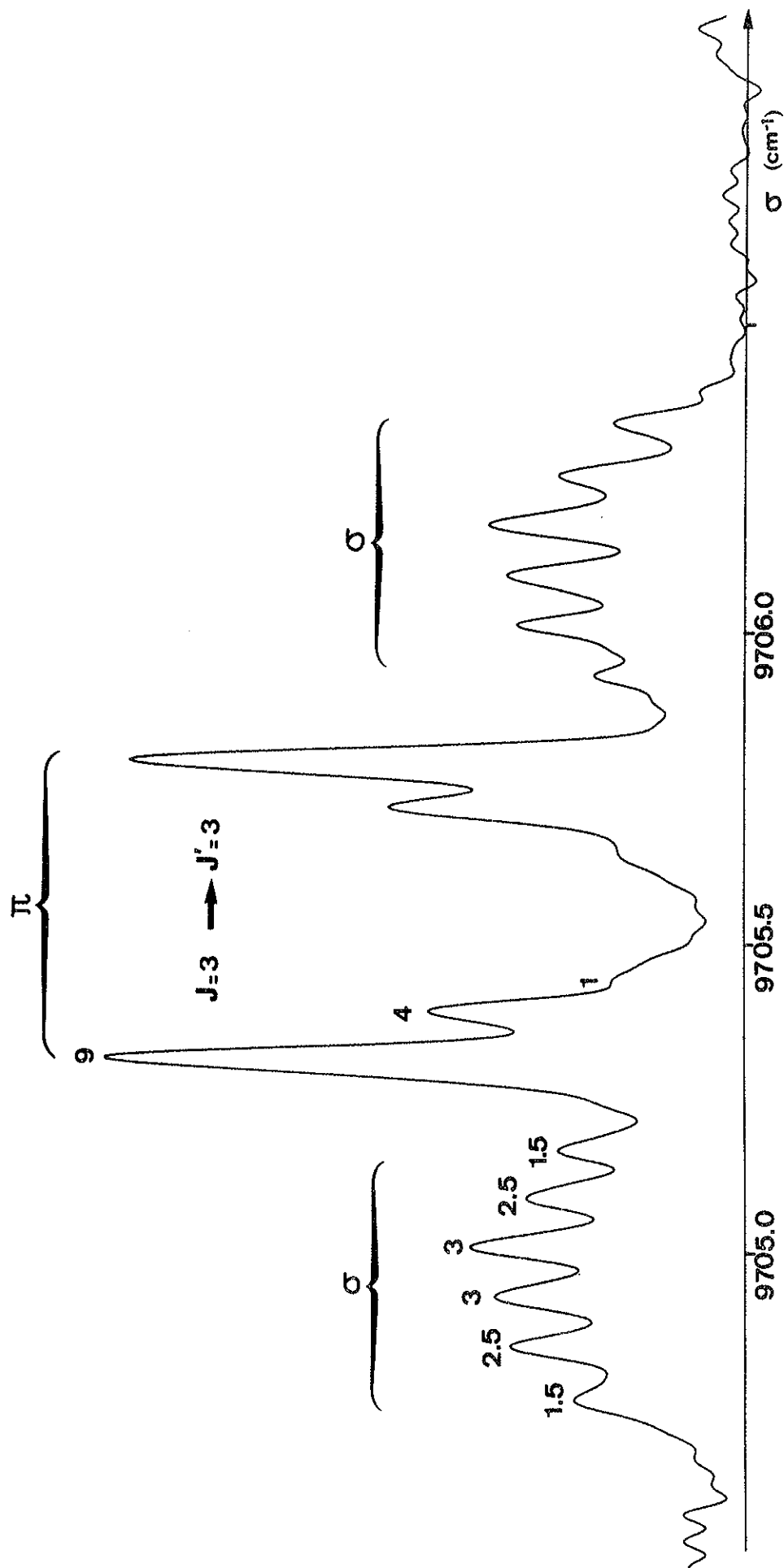


Figure 3 : Te I . Structure Zeeman de la raie $\sigma = 9\,705.549\text{ cm}^{-1}$ dont la classification est :

$56\,842(6s' \ ^3D_3) - 66\,548(6p' \ ^3D_3)$; $\Delta J=0$;

$H = 8\,020 \pm 25$ Oersteds

$g(6s' \ ^3D_3) = 1.352(0.010)$; $g(6p' \ ^3D_3) = 1.178(0.010)$.

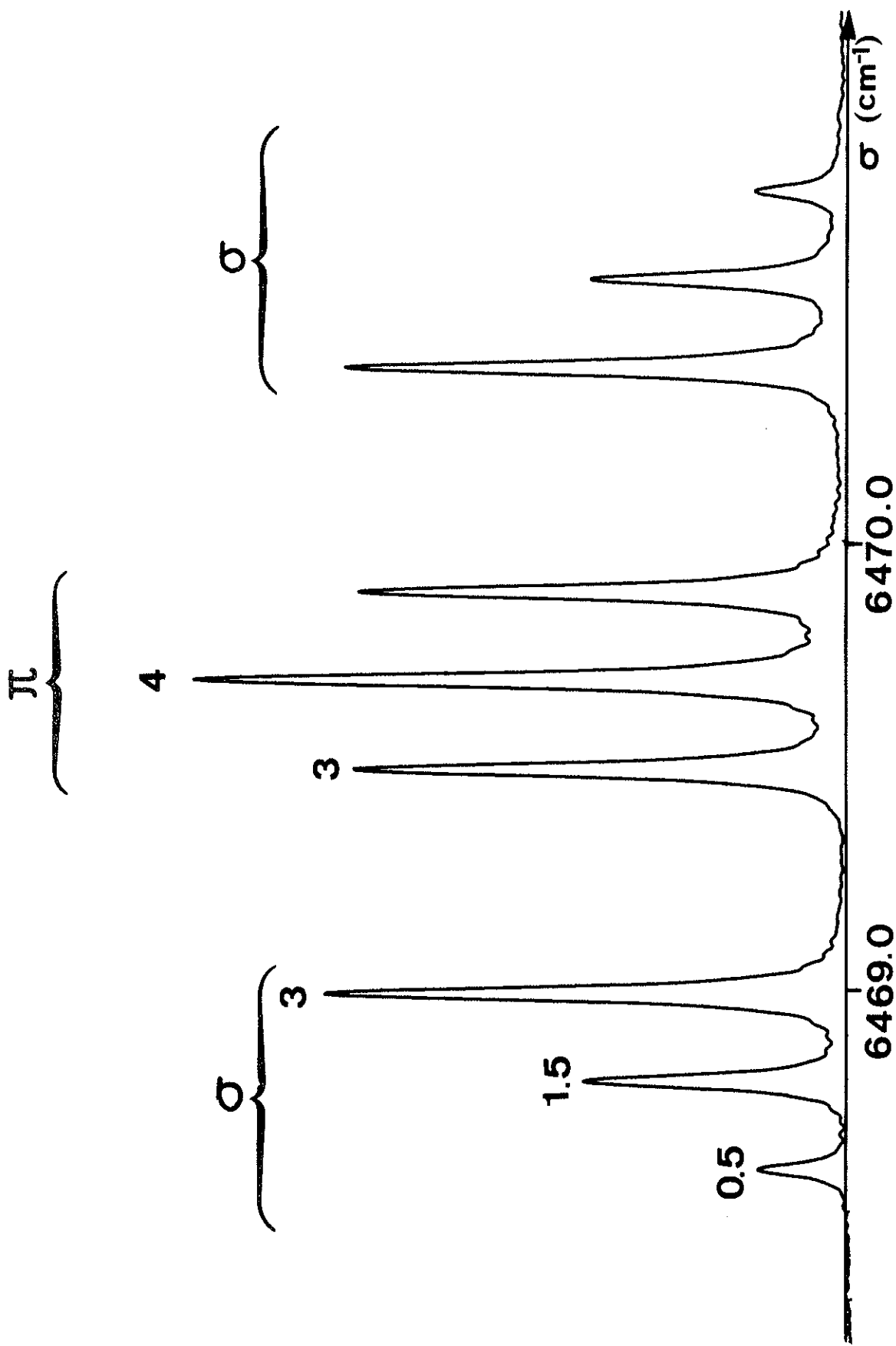


Figure 4 : Te I . Structure Zeeman de la raie $\sigma = 6\,469.696 \text{ cm}^{-1}$ dont la classification est :

$60\,629 (7s\ ^5S_2) - 54\,160 (6p\ ^5P_1)$; $\Delta J=1$;

$H = 9\,895 \pm 30$ Oersteds

$g(^5S_2) = 1.956 (0.005)$; $g(^5P_1) = 2.387 (0.005)$.

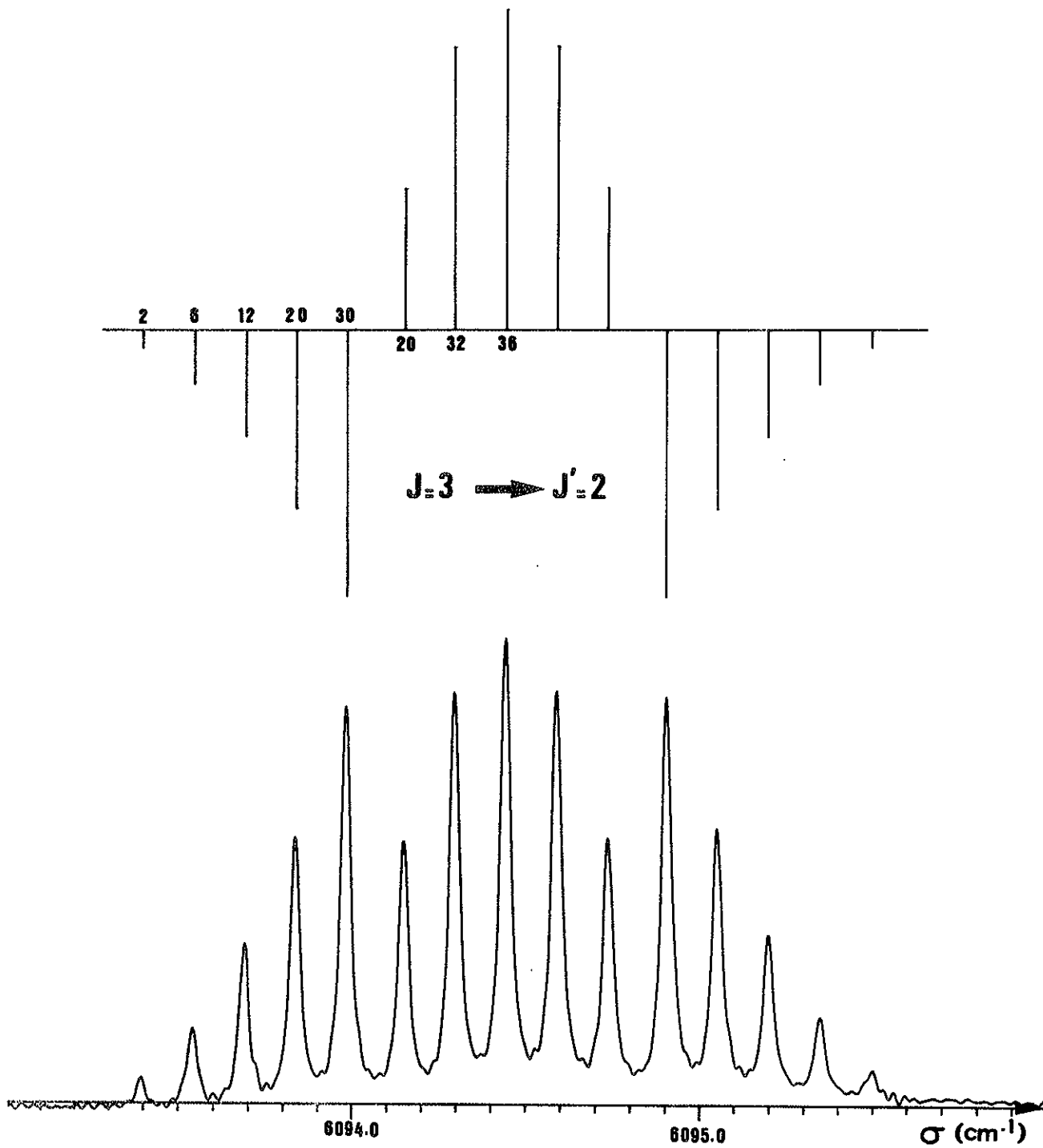


Figure 5 : Te I . Structure Zeeman de la raie $\sigma = 6\,094.445\text{ cm}^{-1}$

dont la classification est :

$$60\,629 (7s\ ^5S_2) - 54\,535 (6p\ ^5P_3) ; \Delta J=1 ;$$

$$H = 9\,895 \pm 30 \text{ Oersteds}$$

$$g (^5S_2) = 1.956 (0.005) ; g (^5P_3) = 1.637 (0.005) .$$

$J=1 \rightarrow J'=1$

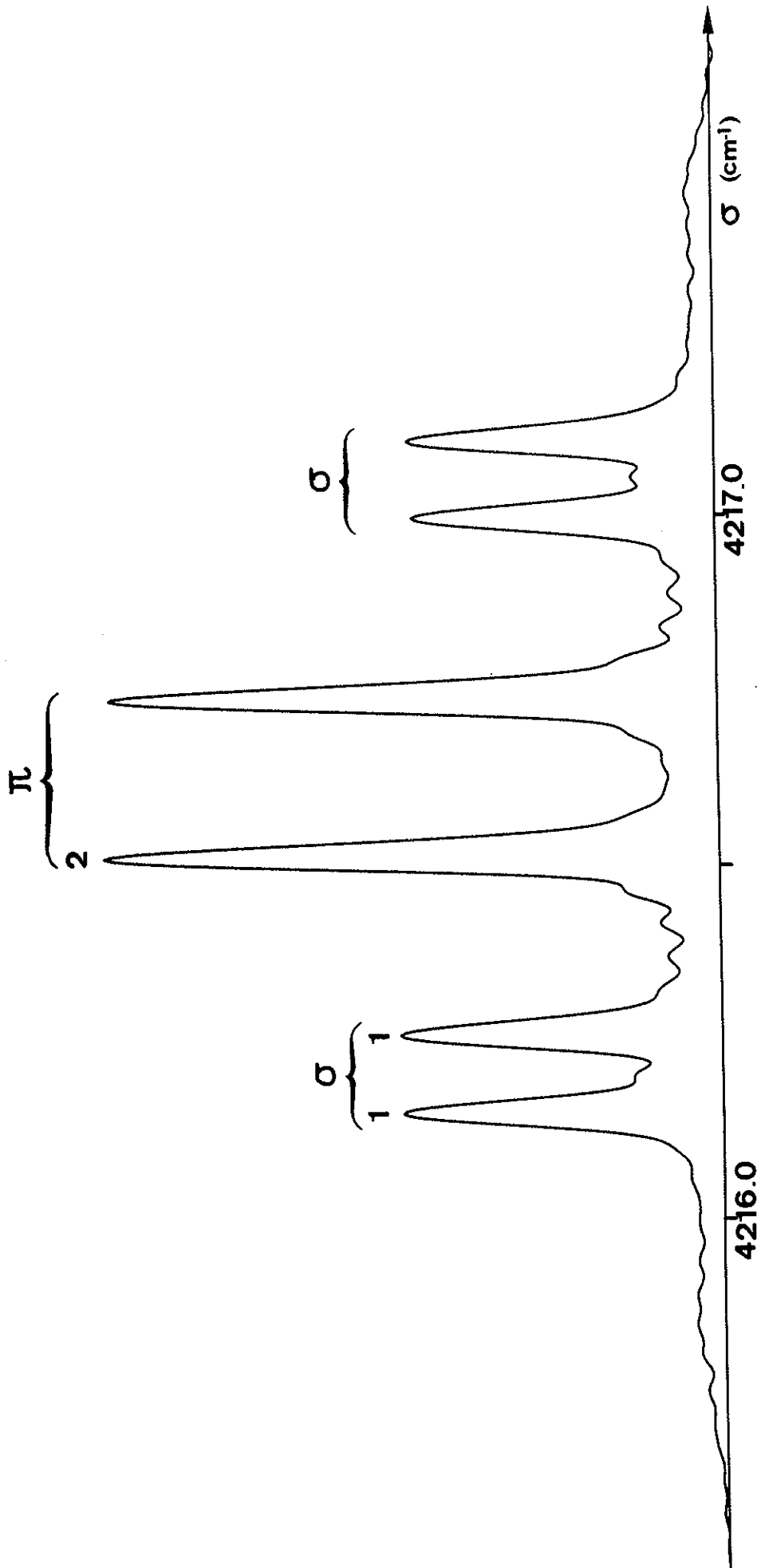


Figure 6 : Ne I . Structure Zeeman de la raie $\sigma = 4\ 216.646 \text{ cm}^{-1}$ dont la classification est :

$(2p^5\ ({}^2P_{3/2})\ 4p\ [3/2]\ 1) - (2p^5\ ({}^2P_{3/2})\ 4s\ [3/2]\ 1) ; \Delta J=0 ;$

$g(4s) = 1.276 \pm 0.004\ [8]$ permet la détermination du champ magnétique : $H = 9\ 895 \text{ Oersted}$.

$J=0 \rightarrow J'=1$

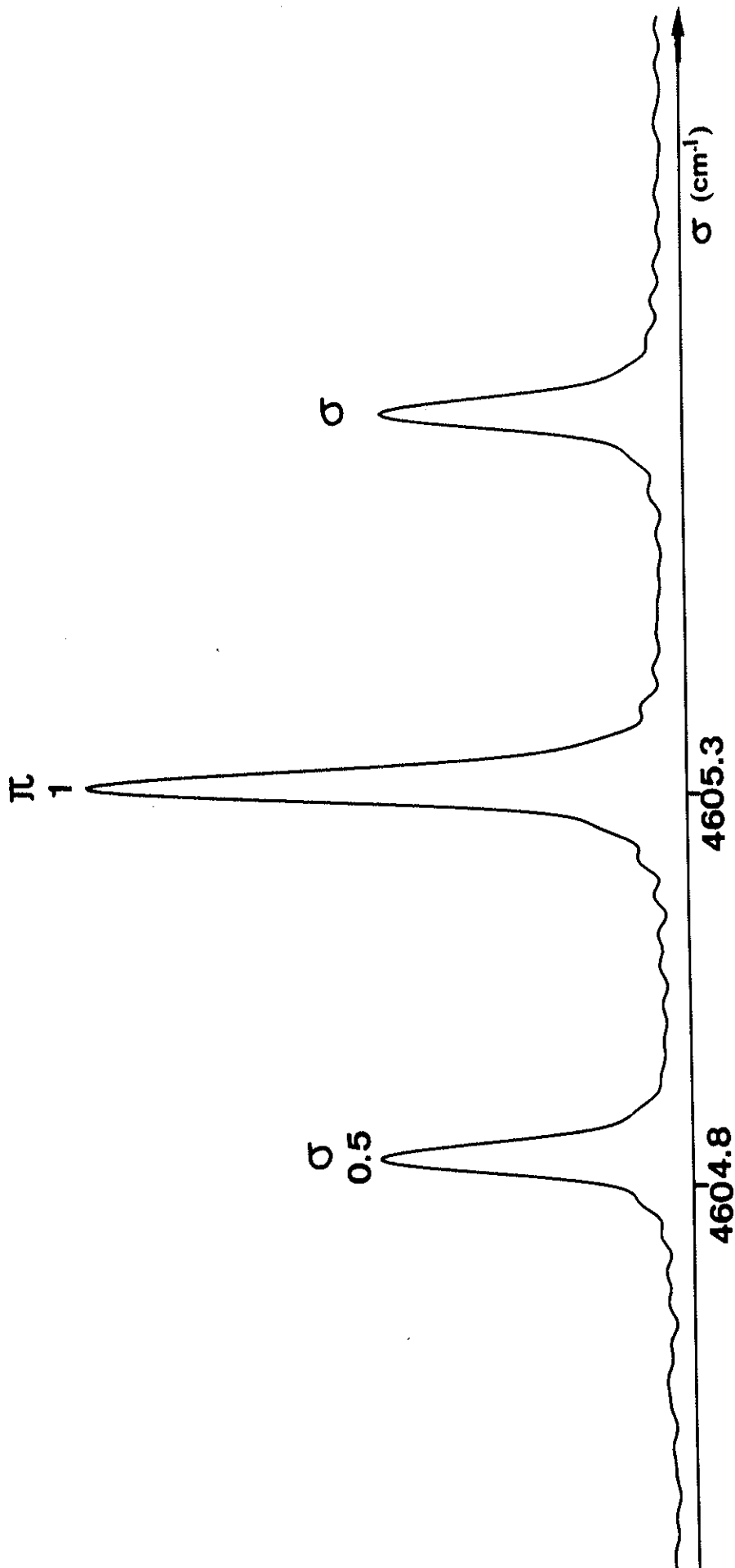


Figure 7 : Ne I . Structure Zeeman de la raie $\sigma = 4\ 605.33\ \text{cm}^{-1}$ dont la classification est :
 $(2p^5\ ({}^2P_{3/2})\ 4p\ [1/2]\ 0) - (2p^5\ ({}^2P_{3/2})\ 4s\ [3/2]\ 1)$; $\Delta J=1$;

$g(4s) = 1.276 \pm 0.004$ [8] permet la détermination du champ magnétique : $H = 9\ 892$ Oersted.

Tableau I (suite 1)

NOMBRES J ONDES MESURES (cm ⁻¹)	LONGUEURS D ONDE AIR (Å)	INTENSITE	NOMBRES D ONDES CALCULFS (cm ⁻¹)		NIVEAUX IMPAIRS		NIVEAUX PAIRS		J	IMP	J	PAIRS	IMP	G	G	PAIRS	
			IMPAIRS	PAIRS	IMPAIRS	PAIRS	IMP	PAIRS									IMP
4208.588	23755.59	5															
4223.911	23668.28	4	4223.910	63993	63993	68217			1		2						
4227.045	23650.73	2															
4270.459	23410.30	2	4270.458	60829	60829	64900			2		2						
4291.424	23295.93	2	4291.422	60829	60829	64921			2		3						
4291.606	23294.94	27	4291.606	58826	58826	54555			3		3						1.631(0.010)
4318.670	23148.96	2	4318.678	68407	68407	64088			1		1						
4362.479	22916.49	5															
4393.312	22755.66	48	4393.312	58592	58592	54199			2		2						1.113(0.005)
4403.284	22704.13	3	4403.284	63296	63296	67700			2		2						
4425.210	22591.63	2	4425.212	68407	68407	63982			1		0						
4432.340	22555.29	74	4432.340	58592	58592	54160			2		1						1.112(0.005)
4437.079	22531.20	3															
4446.940	22486.29	5															
4486.191	22284.54	4	4486.190	68407	68407	63921			1		2						
4522.906	22103.35	4	4522.966	68611	68611	64088					1						
4525.499	22090.98	6															
4544.612	21998.07	5															
4546.952	21986.75	7	4546.952	58746	58746	54199			1		2						
4570.537	21873.20	2	4570.458	61133	61133	65703			1		1						
4583.641	21810.76	3															
4585.980	21799.64	37	4585.980	58746	58746	54160			1		1						0.534(0.005)
4593.500	21763.72	2															
4605.395	21707.74	10	4605.395	61133	61133	65738			1		1						
4621.495	21632.12	10	4621.492	68362	68362	63741			2		3						

Tableau I (suite 2)

NOMBRES D'ONDES MESURES (cm ⁻¹)	LONGUEURS D'ONDE AIR (Å)	INTENSITE	NOMBRES D'ONDES CALCULÉS (cm ⁻¹)	NIVEAUX		J		G	
				IMPAIRS	PAIRS	IMP	PAIRS	IMP	PAIRS
4627.430	21602.50	464	4627.829	58826	54199	3	2	1.319(0.005)	1.762(0.005)
4680.944	21357.38	3							
4683.426	21345.75	4							
4692.601	21304.06	3	4692.660	68362	63669	2	1		
4719.973	21180.78	5							
4750.712	21043.73	1023	4750.712	47505	5	1	2	1.460(0.010)	1.514(0.010)
4751.785	21038.98	8	4751.785	68362	63610	2	2		
4760.529	21000.34	4							
4763.049	20989.23	6							
4782.159	20905.35	4							
4783.867	20897.89	42	4783.868	58826	63610	3	2		
4786.857	20841.29	2	4786.856	68407	63610	1	2		
4805.899	20802.08	3	4805.896	68362	63556	2	1		
4806.377	20800.01	4							
4810.632	20781.62	57	4810.633	58746	63556	1	1	0.534	1.701(0.005)
4818.646	20747.05	5							
4821.195	20736.09	4							
4831.239	20692.98	5	4831.239	68920	64088	2	1		
4837.582	20665.84	4							
4839.700	20656.80	11							
4850.970	20608.81	3	4850.968	68407	63556	1	1		
4864.745	20550.45	3	4864.745	58746	63610	1	2		
4870.597	20525.76	8	4870.598	61133	66003	1	0		
4918.500	20325.85	4							
4923.670	20303.69	46	4923.670	58746	63669	1	1	0.534	1.764(0.005)

Tableau I (suite 3)

NOMBRES D ONDES MESURES (cm ⁻¹)	LONGUEURS D ONDE AIR (Å)	INTENSITE	NOMBRES D ONDES CALCULÉS (cm ⁻¹)	NIVEAUX		J	J	G	G
				IMPAIRS	PAIRS				
4957.526	20165.84	5							
4962.050	20147.54	239	4962.031	60629	55667	2	2	1.961	1.502(0.005)
4963.749	20140.56	9							
4964.273	20138.44	66	4964.273	58592	63556	2	1	1.130(0.015)	1.714(0.015)
4998.704	19999.53	3	4998.752	68920	63921		2		
5000.606	19992.12	6							
5018.385	19921.29	15	5018.385	58592	63610	2	2		
5019.715	19916.01	5							
5055.258	19775.99	5	5055.256	68611	63556		1		
5056.201	19772.30	6							
5058.742	19762.37	4							
5077.510	19689.32	37	5077.510	58592	63669	2	1		
5094.504	19623.52	269	5094.534	58826	63921	3	2		
5146.942	19423.71	5							
5156.053	19389.39	5							
5158.594	19379.84	5							
5175.411	19316.86	11	5175.411	58746	63921	1	2		
5195.078	19243.74	6							
5236.389	19091.92	91	5236.389	58746	63921	1	0	0.529(0.005)	
5274.116	18955.35	69	5274.117	60629	55355	2	1	1.956(0.005)	1.506(0.005)
5293.752	18865.04	5							
5307.059	18837.76	3	5307.038	63294	68603		2		
5308.111	18833.95	4							
5309.418	18829.31	4	5309.418	68920	63610		2		
5312.691	18817.71	4							

Tableau I (suite 4)

NOMBRES D ONDES MESURES (cm ⁻¹)	LONGUEURS D ONDE ΔIR (Å)	INTENSITE	NOMBRES D ONDES CALCULFS (cm ⁻¹)	NIVEAUX		J		G	
				IMPAIRS	PAIRS	IMP	PAIRS	IMP	PAIRS
5324.126	18777.30	394	5324.126	61133	55809	1	0	1.920(0.003)	
5325.890	18771.08	3							
5329.051	18759.94	48	5329.051	58592	63921	2	2	1.080	1.470(0.030)
5334.355	18741.36	3							
5363.531	18639.34	4	5363.529	68920	63556		1		
5396.152	18526.67	5							
5401.222	18509.27	7							
5415.078	18461.91	16							
5432.629	18402.27	5							
5465.500	18291.59	2782	5465.500	61133	55667	1	2	1.920(0.005)	1.496(0.005)
5494.614	18194.01	6							
5496.584	18188.22	43	5496.563	58592	64088	2	1	1.124(0.040)	1.254(0.040)
5500.282	18175.92	4							
5519.516	18112.58	10							
5531.303	18073.99	7							
5531.517	18073.29	11							
5533.064	18068.23	6							
5533.843	18065.69	4							
5537.686	18053.15	6							
5631.158	17753.49	4							
5633.704	17745.47	4							
5670.185	17631.29	5							
5669.294	17572.07	6							
5713.262	17498.36	7							
5732.372	17440.02	5							

Tableau I (suite 7)

NOMBRES D ONDES MESURES(cm^{-1})	LONGUEURS D ONDE AIR (\AA)	INTENSITE	NOMBRES D ONDES CALCULFS(cm^{-1})		NIVEAUX IMPAIRS		NIVEAUX PAIRS		J	IMP	J	PAIRS	IMP	J	PAIRS
6457.944	14577.65	4													
6868.763	14554.68	129	6868.762	58826	65695	58826	65695	3	4						
6869.533	14552.95	26	6869.533	58826	65696	58826	65696	3	3						
6877.056	14537.13	8													
6887.521	14515.04	76	6887.521	58826	65714	58826	65714	3	3						
6888.247	14513.51	1052	6888.247	58826	65715	58826	65715	3	4	1.310(0.020)	1.234(0.020)				
6892.791	14503.95	4	6892.791	58826	65719	58826	65719	3	2						
6898.573	14491.79	9	6898.574	56842	63741	56842	63741	3	3						
6920.131	14446.64	6													
6934.138	14417.46	220	6934.136	61133	54199	61133	54199	1	2	1.926(0.010)	1.767(0.010)				
6956.614	14370.88	5													
6957.743	14368.55	5	6957.740	58746	65703	58746	65703	1	1						
6964.215	14355.20	76	6964.214	58746	65710	58746	65710	1	2	0.537(0.010)	0.945(0.010)				
6973.185	14336.77	73	6973.164	61133	54160	61133	54160	1	1						
6973.667	14335.74	434	6973.667	58746	65719	58746	65719	1	2	0.545(0.010)	0.751(0.010)				
6974.793	14333.42	93	6974.791	57114	64088	57114	64088	2	1	1.112	1.250(0.040)				
6992.580	14296.96	12	6992.578	58746	65738	58746	65738	1	1						
7040.074	14200.51	4													
7059.011	14162.42	5													
7070.320	14139.77	2	7070.318	60629	67700	60629	67700	2	2						
7078.946	14122.54	3	7078.947	56842	63921	56842	63921	3	2						
7104.101	14072.53	144	7104.101	58592	65696	58592	65696	2	3	1.103(0.015)	1.166(0.015)				
7111.383	14058.12	8	7111.381	58592	65703	58592	65703	2	1						
7114.610	14051.74	16													
7122.039	14037.09	217	7122.039	58592	65714	58592	65714	2	3	1.027(0.100)	1.081(0.100)				

Tableau I (suite 10)

NOMBRES D ONDES MESURES (cm ⁻¹)	LONGUEURS D ONDE ΔIR (Å)	INTENSITE	NOMBRES D ONDES CALCULES (cm ⁻¹)	NIVEAUX		J		G	
				IMPAIRS	PAIRS	IMP	PAIRS	IMP	PAIRS
8145.634	12273.16	65	8145.634	58826	66972	3	4		
8146.921	12271.22	7							
8173.025	12232.02	45	8173.023	58826	66999	3	2		
8212.290	12173.54	2	8212.261	58746	66958	1	1		
8227.832	12150.54	4							
8237.464	12136.34	4	8237.464	55851	64088	1	1		
8243.762	12127.07	6	8243.763	55677	63921	3	2		
8244.228	12126.38	3							
8271.667	12086.12	23	8271.686	55817	64088	2	1		
8283.256	12069.24	5							
8302.366	12041.46	6							
8325.788	12007.59	14	8325.788	63993	55667	1	2		
8345.667	11978.96	280	8345.687	58592	66938	2	3	1.112	1.186(0.010)
8365.901	11950.01	82	8365.901	58592	66958	2	1		
8379.856	11930.11	13	8379.855	64047	55667	3	2		
8381.932	11927.16	10							
8390.851	11914.44	3							
8391.033	11914.22	3	8391.032	64058	55667	2	2		
8407.542	11890.83	8	8407.541	58592	66999	2	2		
8465.384	11809.58	5							
8481.781	11786.75	3							
8499.008	11762.86	6	8499.007	64308	55809	1	0		
8520.805	11732.77	6							
8539.916	11706.51	7							
8582.330	11648.66	55	8582.328	57114	65696	2	3	1.056(0.100)	1.131(0.100)

Tableau I (suite 11)

NOMBRES D'ONDES MESURES(cm^{-1})	LONGUEURS D'ONDE AIR (A)	INTENSITE	NOMBRES D'ONDRES CALCULFS(cm^{-1})		NIVEAUX		J	J	G	G
			IMPAIRS	PAIRS	IMPAIRS	PAIRS				
8584.096	11646.26	5			57114	65703	2	1		
8589.610	11638.79	5	8589.608		57114	65714	2	3	1.047(0.050)	1.114(0.050)
8600.267	11624.36	138	8600.267		57114	65719	2	2	1.080	0.720(0.020)
8605.536	11617.25	28	8605.535		63965	55355	0	1		
8609.441	11611.98	8	8609.440		57114	65738	2	1		
8624.449	11591.77	28	8624.446		63993	55355	1	1		
8637.874	11573.75	23	8637.874		54880	63556	2	1		
8676.637	11522.05	45	8676.637		46652	55355	1	1	1.907(0.003)	1.503(0.003)
8702.936	11487.23	6623	8702.934		55817	64564	2	2		
8747.109	11429.14	9	8747.168		63296	54535	2	3		
8761.480	11410.47	35	8761.478		64437	55667	2	2	1.120(0.005)	1.493(0.005)
8769.893	11399.53	125	8769.892		54880	63669	2	1	1.220	1.753
8789.874	11373.61	75	8789.874		56842	65695	3	4		
8853.175	11292.29	35	8853.175		56842	65714	3	3		
8871.933	11268.42	12	8871.935		56842	65715	3	4		
8872.652	11267.49	10	8872.660		54683	63556	1	1	0.667(0.005)	1.707(0.005)
8872.821	11267.29	117	8872.821		55677	64564	3	2		
8880.758	11249.62	5	8886.757							
8896.160	11237.70	8			64308	55355	1	1		
8952.458	11167.05	10	8952.467		64622	55667	3	2	1.300(0.010)	1.497
8955.119	11163.74	508	8955.119		54683	63669	1	1	0.663(0.020)	1.733(0.020)
8985.059	11125.30	153	8986.058		46652	55667	1	2	1.908(0.003)	1.495(0.003)
9015.022	11089.56	10181	9015.020		64826	55809	1	0		
9017.350	11086.68	106	9017.359		54880	63921	2	2		
9041.415	11057.19	155	9041.415							

Tableau I (suite 12)

NOMBRES D'ONDES MESURES(CM ⁻¹)	LONGUEURS D'ONDE AIR (Å)	INTENSITE	NOMBRES D'ONDRES CALCULFS(CM ⁻¹)		NIVEAUX		J	J	G	G
			IMPAIRS	PAIRS	IMPAIRS	PAIRS				
9048.714	11048.27	19	9048.714	55851	64900	64900	1	2		
9081.979	11007.80	298	9081.978	64437	55355	55355	2	1	1.126(0.010)	1.500(0.010)
9082.936	11006.64	42	9082.936	55817	64900	64900	2	2	1.428	1.198(0.010)
9097.703	10988.78	50	9097.701	63296	54199	54199	2	2	1.455(0.010)	1.762
9103.901	10981.29	79	9103.900	55817	64921	64921	2	3	1.433(0.010)	1.107(0.010)
9107.678	10976.74	10	9107.674	58592	67700	67700	2	2		
9136.751	10941.84	50	9136.729	63296	54160	54160	2	1	1.453	2.400
9150.322	10925.58	22								
9156.396	10918.34	1879	9156.394	46652	55809	55809	1	0	1.909(0.003)	
9158.756	10915.55	6	9158.733	64826	55667	55667	1	2		
9208.927	10856.05	153	9208.927	54880	64088	64088	2	1	1.227(0.020)	1.227(0.020)
9243.490	10815.46	14	9243.489	55677	64921	64921	3	3		
9252.572	10804.85	6								
9298.578	10751.39	8	9298.577	54683	63982	63982	1	0		
9327.103	10718.51	5								
9395.138	10640.89	3	9395.138	58826	68222	68222	3	3		
9397.945	10637.71	36								
9405.112	10629.60	60	9405.111	54683	64088	64088	1	1	0.707	1.213(0.050)
9415.592	10617.77	4								
9433.663	10597.19	161	9433.663	57114	66548	66548	2	3	1.103(0.020)	1.176
9470.819	10555.66	43	9470.819	64826	55355	55355	1	1		
9471.014	10555.64	5								
9478.411	10547.40	15								
9512.269	10509.86	197	9512.268	64047	54535	54535	3	3	1.470(0.010)	1.637
9523.444	10497.53	27	9523.445	64058	54535	54535	2	3		

Tableau I (suite 13)

NOMBRES D ONDES MESURES(cm ⁻¹)	LONGUEURS D ONDE ΔIR (Å)	INTENSITE	NOMBRES D ONDES CALCULÉS(cm ⁻¹)	NIVEAUX		NIVEAUX		J	J	G	G
				IMPAIRS	PAIRS	IMPAIRS	PAIRS				
9527.022	10493.57	745	9527.032	64062	54535	4	3	1.477(0.020)	1.637		
9595.004	10419.24	3									
9629.638	10381.74	16	9629.655	58592	68222	2	3				
9634.031	10377.03	5									
9684.409	10323.05	205	9684.409	54880	64564	2	2	1.224	0.815(0.005)		
9705.549	10300.56	397	9705.551	56842	66548	3	3	1.352(0.010)	1.178(0.010)		
9727.673	10277.13	6									
9794.425	10207.09	51	9794.424	63993	54199	1	2	1.460(0.020)	1.763		
9805.018	10196.06	32	9805.018	63965	54160	0	1		2.379(0.020)		
9823.915	10176.45	171	9823.915	57114	66938	2	3	1.080	1.130(0.050)		
9833.452	10166.58	149	9833.452	63993	54160	1	1	1.471(0.005)	2.390(0.005)		
9844.129	10155.56	33	9844.129	57114	66958	2	1				
9848.492	10151.06	296	9848.491	64047	54199	3	2	1.476(0.010)	1.763		
9852.232	10147.15	27	9852.231	55851	65703	1	1				
9858.755	10140.49	65	9858.755	55851	65710	1	2				
9859.669	10139.55	174	9859.668	64058	54199	2	2	1.439(0.020)	1.763		
9868.208	10130.74	15	9868.208	55851	65719	1	2				
9877.278	10121.47	34	9877.276	55826	65703	0	1		0.379(0.020)		
9879.223	10119.46	82	9879.224	55817	65696	2	3				
9874.494	10119.20	34	9879.494	55816	65695	4	4				
9880.594	10118.04	381	9880.593	54683	64564	1	2	0.630(0.030)	0.800(0.030)		
9885.769	10112.78	9	9885.769	57114	66999	2	2				
9886.507	10112.02	12	9886.504	55817	65703	2	1				
9887.120	10111.40	33	9887.119	55851	65738	1	1				
9892.356	10106.05	279	9892.351	55816	65708	4	5	1.473(0.020)	1.386(0.020)		

Tableau I (suite 14)

NOMBRES D'ONDES MESURES (cm ⁻¹)	LONGUEURS D'ONDE AIR (Å)	INTENSITE	NOMBRES D'ONDES		NIVEAUX		J	PAIRS	IMP	G	G
			CALCULÉS (cm ⁻¹)	IMP	PAIRS	PAIRS					
9892.976	10105.41	49	9892.978	55817	65710	2	2				
9897.150	10101.14	49	9897.162	55817	65714	2	3				
9898.696	10099.57	104	9898.696	64058	54140	2	1				
9907.094	10091.01	4097	9907.094	44253	54140	2	1	1.960(0.005)	2.386(0.005)		
9912.116	10085.90	27	9912.114	55826	65738	0	1				
9930.938	10066.76	44									
9946.122	10051.41	5950	9946.122	44253	54199	2	2	1.958(0.005)	1.761(0.005)		
10011.429	9985.85	45	10011.429	58592	68603	2		1.125(0.020)	1.125(0.020)		
10017.991	9979.31	136	10017.991	55677	65695	3	4				
10018.811	9978.49	29	10018.812	55677	65696	3	3				
10020.177	9977.13	325	10020.177	54880	64900	2	2	1.240(0.020)	1.213(0.020)		
10032.570	9964.80	2	10032.566	55677	65710	3	2				
10036.750	9960.65	17	10036.751	55677	65714	3	3				
10037.475	9959.93	37	10037.477	55677	65715	3	4				
10041.142	9956.30	689	10041.141	54880	64921	2	3	1.226(0.010)	1.114(0.010)		
10095.581	9902.61	118	10095.583	56842	66938	3	3	1.349(0.010)	1.190(0.010)		
10109.017	9889.45	4	10109.017	64308	54199	1	2				
10130.046	9868.92	532	10130.047	56842	66972	3	4	1.345(0.010)	1.250(0.010)		
10148.045	9851.41	13	10148.045	64308	54160	1	1				
10152.340	9847.25	2	10152.322	55851	66003	1	0				
10157.437	9842.30	109	10157.437	56842	66999	3	2				
10163.504	9836.43	5									
10202.779	9798.56	6									
10216.361	9785.54	186	10216.361	54683	64900	1	2	0.673(0.005)	1.209(0.005)		
10282.345	9722.74	5662	10282.345	44253	54535	2	3	1.958(0.003)	1.636(0.002)		

Tableau I (suite 15)

NOMBRES D ONDES MESURES (cm ⁻¹)	LONGUEURS D ONNE AIR (A)	INTENSITE	NOMBRES D ONDES CALCULÉS (cm ⁻¹)	NIVEAUX		J		G	
				IMPAIRS	PAIRS	IMP	PAIRS	IMP	PAIRS
10356.380	9653.24	5							
10423.760	9590.84	2	10423.755	64622	54199	3	2		
10440.351	9575.61	6							
10441.799	9574.27	8	10441.798	66109	55667	1	2		
10550.556	9475.57	7							
10557.877	9469.00	12	10557.877	10557	5	0	2	1.037(0.003)	1.460(0.004)
10585.910	9443.93	2	10585.901	57114	67700	2	2		
10677.002	9362.59	6							
10730.790	9316.42	2	10730.778	55817	66548	2	3		
10753.886	9296.41	5	10753.884	66109	55355	1	1		
10816.454	9242.63	6	10816.465	54880	65696	2	3		
10823.760	9236.40	3	10823.745	54880	65703	2	1		
10840.901	9221.79	4							
10857.570	9207.64	17	10857.569	56842	67700	3	2		
10858.582	9206.78	15	10858.583	54880	65738	2	1		
10870.366	9196.80	12	10870.367	55677	66548	3	3		
10916.452	9158.83	7							
11019.929	9071.96	7	11019.929	54683	65703	1	1		
11026.415	9066.64	2	11026.402	54683	65710	1	2		
11054.767	9043.39	18	11054.767	54683	65738	1	1		
11078.453	9024.05	4							
11102.673	9004.37	81	11102.672	44253	55355	2	1	1.060	1.507(0.008)
11107.900	9000.13	2	11107.883	57114	68222	2	3		
11133.871	8979.14	4							
11152.983	8963.75	7							

Tableau I (suite 16)

NOMBRES D ONDES MESURES (cm ⁻¹)	LONGUEURS D ONDE AIR (Å)	INTENSITE	NOMBRES D ONDES CALCULÉS (cm ⁻¹)	NIVEAUX		J		G	
				IMPAIRS	PAIRS	IMP	PAIRS	IMP	PAIRS
11260.430	8878.24	2	11260.399	55677	66938	3	3		
11294.802	8851.15	18	11294.863	55677	66972	3	4		
11319.970	8831.52	12	11319.970	54683	66003	1	0		
11322.260	8829.73	3	11322.253	55677	66999	3	2		
11390.534	8776.81	7							
11397.474	8771.47	5	11397.475	65932	54535	2	3		
11414.759	8758.18	205	11414.758	44253	55667	2	2		
11489.657	8701.09	12	11489.655	57114	68603	2			
11737.700	8520.85	2	11733.697	65932	54199	2	2		
11761.350	8500.09	2	11761.323	56842	68603	3			
11791.104	8478.64	4							

73

Tableau II

Niveaux d'énergie des configurations paires.

Energie (cm ⁻¹)	J	g (U.L.)	Energie (cm ⁻¹)	J	g (U.L.)
0.000	2	1.460 (0.004)	65 708.569	5	1.39 (0.02)
4 706.5	0		65 710.288	2	0.945 (0.010)
4 750.712	1	1.514 (0.010)	65 714.473	3	1.10 (0.02)
10 557.877	2	1.037 (0.003)	65 715.198	4	1.24 (0.02)
(23 198.392)	0		65 719.741	2	0.72 (0.04)
54 160.094	1	2.388 (0.002)	65 738.652	1	0.84 (0.05)
54 199.122	2	1.762 (0.001)	66 003.855	0	
54 535.345	3	1.636 (0.003)	66 548.089	3	1.173 (0.006)
55 355.672	1	1.504 (0.003)	66 938.121	3	1.19 (0.01)
55 667.758	2	1.496 (0.005)	66 958.335	1	
55 809.132	0		66 972.585	4	1.25 (0.01)
63 556.707	1	1.704 (0.004)	66 999.975	2	
63 610.819	2	1.709 (0.010)	67 700.107	2	
63 669.944	1	1.764 (0.005)	68 216.527	3	
63 741.112	3	1.63 (0.02)	68 216 843	4	
63 921 485	2	1.47 (0.03)	68 217.456	2	
63 982.463	0		68 217.685	5	
64 088.997	1	1.235 (0.018)	68 222.089	3	
64 564.479	2	0.815 (0.005)	68 603.861	2 ou 3	
64 900.247	2	1.206 (0.007)			
64 921.211	3	1.111 (0.005)			
65 695.713	4	≈ 1.14			
65 696.534	3	1.16 (0.02)			
65 703.814	1	0.38 (0.02)			

Tableau III

Niveaux d'énergie des configurations impaires.

Energie (cm ⁻¹)	J	g (U.L.)	Energie (cm ⁻¹)	J	g (U.L.)
44 253.0	2	1.960 (0.003)	64 622.877	3	1.30 (0.01)
46 652.738	1	1.909 (0.003)	64 826.491	1	
54 683.886	1	0.674 (0.005)	65 932.819	2	
54 880.070	2	1.224 (0.005)	66 109.556	1	
55 677.722	3		68 362.604	2	
55 816.219	4	1.47 (0.02)	68 407.675	1	
55 817.311	2	1.428 (0.014)	68 611.963	1 ou 2	
55 826.538	0		68 920.236	1 ou 2	
55 851.533	1				
56 842.538	3	1.352 (0.005)			
57 114.206	2	1.08 (0.03)			
58 592.434	2	1.112 (0.001)			
58 746.074	1	0.532 (0.004)			
58 826.951	3	1.310 (0.010)			
60 629.789	2	1.957 (0.002)			
61 133.258	1	1.920 (0.001)			
63 296.823	2	1.456 (0.003)			
63 965.112	0				
63 993.546	1	1.475 (0.005)			
64 047.613	3	1.475 (0.010)			
64 058.790	2	1.44 (0.02)			
64 062.377	4	1.48 (0.01)			
64 308.139	1				
64 437.650	2	1.125 (0.010)			

Tableau IV

Classification des raies ultraviolettes mesurées par
J. C. McLENNAN [1] et de quelques raies infrarouges
et visibles observées par J. E. RUEDY [2].

Nombres d'ondes mesurés (cm^{-1})	Inten- sité	Nombres d'ondes calculés (cm^{-1})	$\Delta\sigma$	Classification J
Ruedy [2]				
9 019.2	1	9 015.020	4.2	55 667 (2) - 46 652 (1)
9 160.0	1	9 156.394	3.6	55 809 (0) - 46 652 (1)
9 850.4	8	9 848.492	1.9	64 047 (3) - 54 199 (2)
9 881.5	8	9 880.593	0.9	54 683 (1) - 64 564 (2)
9 909.1	30	9 907.094	2.0	44 253 (2) - 54 160 (1)
9 948.1	40	9 946.122	2.0	44 253 (2) - 54 199 (2)
10 019.7	15	{ 10 017.991 10 020.177		{ 55 677 (3) - 65 695 (4) 54 880 (2) - 64 900 (2)
10 042.0	14	10 041.142	0.9	54 880 (2) - 64 921 (3)
10 097.3	7	10 095.583	1.7	56 842 (3) - 66 938 (3)
10 132.0	10	10 130.046	2.0	56 842 (3) - 66 972 (4)
10 159.2	7	10 157.437	1.8	56 842 (3) - 66 999 (2)
10 218.5	8	10 216.361	2.1	54 683 (1) - 64 900 (2)
10 284.0	50	10 282.345	1.7	44 253 (2) - 54 535 (3)
10 859.1	5	{ 10 857.570 10 858.582		{ 56 842 (3) - 67 700 (2) 54 880 (2) - 65 738 (1)
11 020.7	6	11 019.929	0.8	54 683 (1) - 65 703 (1)
11 056.3	8	11 054.767	1.5	54 683 (1) - 65 738 (1)
11 103.6	30	11 102.672	0.9	44 253 (2) - 55 355 (1)
11 296.0	15	11 294.862	1.1	55 677 (3) - 66 972 (4)
11 321.4	15	11 319.970	1.4	54 683 (1) - 66 003 (0)
11 397.8	4	11 397.475	0.3	65 932 (2) - 54 535 (3)

Tableau IV (suite 1)

Nombres d'ondes mesurés (cm^{-1})	Intensité	Nombres d'ondes calculés (cm^{-1})	$\Delta\sigma$	Classification
11 415.3	50	11 414.758	0.5	44 253 (2) - 55 667 (2)
11 490.3	20	11 489.657	0.6	57 114 (2) - 68 603 (?)
11 732.0	12	11 733.697	-1.7	54 199 (2) - 65 932 (2)
11 760.4	8	11 761.323	-0.9	68 603 () - 56 842 (3)
11 772.3	8	11 772.726	-0.4	54 160 (1) - 65 932 (2)
12 059.2	10	12 058.052	+1.2	66 938 (3) - 54 880 (2)
12 078.9	10	12 078.266	0.6	66 958 (1) - 54 880 (2)
12 401.4	30		-	$5f \ ^5F$ - $5d \ ^5D$
12 539.0	20	{ 12 538.806 12 539.121	{ - -	{ 68 216 (3) - 55 677 (3) 68 216 (4) - 55 677 (3)
13 826.9	4	13 827.259	-0.4	54 535 (3) - 68 362 (2)
14 163.3	4	14 163.481	-0.2	54 199 (2) - 68 362 (2)
17 017.7	3	17 017.206	+0.5	63 669 (1) - 46 652 (1)
17 269.1	8	17 268.747	+0.4	63 921 (2) - 46 652 (1)
17 328.9	6	17 329.725	-0.8	63 982 (0) - 46 652 (1)
17 436.5	7	17 436.259	+0.2	64 088 (1) - 46 652 (1)
19 303.7	4	19 303.707	0.0	63 556 (1) - 44 253 (2)
19 417.0	7	19 416.944	+0.1	63 669 (1) - 44 253 (2)
19 667.9	8	19 668.485	-0.6	63 921 (2) - 44 253 (2)
Mc LENNAN [1]				
31 485.5	3	31 485.494	0.0	$p^4 \ ^1S_0$ - 54 683 (1)
34 975.8	1			
36 095.0	6	36 094.861	0.1	$p^4 \ ^1D_2$ - 46 652 (1)
39 502.4	6	39 502.288	0.1	$p^4 \ ^3P_1$ - 44 253 (2)
41 110.7	3	41 109.747	1.0	$p \ s$ - 64 308 (1)
41 308.0	3			

Tableau IV (suite 2)

Nombres d'ondes mesurés (cm ⁻¹)	Intensité	Nombres d'ondes calculés (cm ⁻¹)	$\Delta\sigma$	Classification
41 902.6	17	41 902.026	0.6	$p^4 \ ^3P_1$ - 46 652 (1)
41 946.9	15	41 946.238	0.7	$p^4 \ ^3P_0$ - 46 652 (1)
44 126.3	10	44 126 009	0.3	$p^4 \ ^1D_2$ - 54 683 (1)
44 253.2	12	44 253.000	0.2	$p^4 \ ^3P_2$ - 44 253 (2)
44 322.5	10	44 322.193	0.3	$p^4 \ ^1D_2$ - 54 880 (2)
45 260.5	9	45 259.434	1.1	$p^4 \ ^1D_2$ - 55 817 (2)
46 286.2	8	46 284.661	1.5	$p^4 \ ^1D_2$ - 56 842 (3)
46 557.8	9	46 556.329	0.5	$p^4 \ ^1D_2$ - 57 114 (2)
46 654.2	20	46 652.738	1.5	$p^4 \ ^3P_2$ - 46 652 (1)
48 037.8	12	48 034.557	3.2	$p^4 \ ^1D_2$ - 58 592 (2)
48 273.	8	48 269.074	4.0	$p^4 \ ^1D_2$ - 58 826 (3)
49 934.	8	49 933.174	0.8	$p^4 \ ^3P_1$ - 54 683 (1)
49 979.	6	49 977.386	1.6	$p^4 \ ^3P_0$ - 54 683 (1)
50 130.	7	50 129.358	0.6	$p^4 \ ^3P_1$ - 54 880 (2)
51 068.	3	51 066.599	1.4	$p^4 \ ^3P_1$ - 55 817 (2)
51 078.	4	51 075.826		$p^4 \ ^3P_1$ - 55 826 (0)
51 146.	2	51 145.033	1.0	$p^4 \ ^3P_0$ - 55 851 (1)
52 363.	3	52 363.494	-0.5	$p^4 \ ^3P_1$ - 57 114 (2)
52 738.	4	52 738.846	-0.8	$p^4 \ ^1D_2$ - 63 296 (2)
53 751.	6	53 750.262	+0.7	$p^4 \ ^1D_2$ - 64 308 (1)
53 845.	8	53 841.722	+3.3	$p^4 \ ^3P_1$ - 58 592 (2)
53 906.	2			
53 943.	6			
53 993.	6	53 995.362	-2.4	$p^4 \ ^3P_1$ - 58 746 (1)
54 037.	6	54 039.574	-2.6	$p^4 \ ^3P_0$ - 58 746 (1)

Tableau IV (suite 3)

Nombres d'ondes mesurés (cm ⁻¹)	Intensité	Nombres d'ondes calculés (cm ⁻¹)	$\Delta\sigma$	Classification
Mc LENNAN [1] U.V. à vide				
54 176.	3			
54 678.	4	54 683.886	-5.9	$p^4 \ ^3P_2$ - 54 683 (1)
54 780.	6			
54 873.	10	54 880.070	-7.0	$p^4 \ ^3P_2$ - 54 880 (2)
55 605.	3			
55 670.	6	55 677.722		$p^4 \ ^3P_2$ - 55 677 (3)
55 689.	6			
55 810.	2	55 817.311	-7.3	$p^4 \ ^3P_2$ - 55 817 (2)
55 844.	4	55 841.533	-7.5	$p^4 \ ^3P_2$ - 55 851 (2)
56 262.	3			
56 338.	5			
56 376.	3	56 382.546	-6.5	$p^4 \ ^3P_1$ - 61 133 (1)
56 838.	5	56 842.538	-4.5	$p^4 \ ^3P_2$ - 56 842 (3)
57 110.	6	57 114.206	-4.2	$p^4 \ ^3P_2$ - 57 114 (2)
57 703.	3			
57 783.	2			
58 099.	3			
58 384.	3			
58 548.	5	58 546.111	+1.9	$p^4 \ ^3P_1$ - 63 296 (2)
58 593.	3	58 592.534	+0.5	$p^4 \ ^3P_2$ - 58 592 (2)
58 824.	6	58 826.951	-3.0	$p^4 \ ^3P_2$ - 58 826 (3)
59 224.	5			
60 129.	3			
60 408.	3			
60 790.	3			

Tableau V

Configurations attendues dans le spectre de Te I .

configurations	termes prévus				
$5s^2 5p^4$	$5S$	$2P$	$2D$		
$5s 5p^5$		$1P$	$3P$		
$5p^6$	$1S$				
	ns $n \geq 6$	np $n \geq 6$	nd $n \geq 5$	nf $n \geq 4$	ng $n \geq 5$
$5s^2 5p^3 (4S)n\ell$	$5S$ $3S$	$5P$ $3P$	$5D$ $3D$	$5F$ $3F$	$5G$ $3G$
$5s^2 5p^3 (2D)n\ell$	$3D$ $1D$	$3(P D F)$ $1(P D F)$	$3(SP D F G)$ $1(SP D F G)$	$3(P D F G H)$ $1(P D F G H)$	$3(D F G H I)$ $1(D F G H I)$
$5s^2 5p^3 (2P)n\ell$	$3P$ $1P$	$3(S P D)$ $1(S P D)$	$3(P D F)$ $1(P D F)$	$3(D F G)$ $1(D F G)$	$3(F G H)$ $1(F G H)$

Tableau VI

Paramètres radiaux des configurations impaires $5s^2 5p^3$ ($6s+7s+5d+6d$) de Te I (en cm^{-1})
 (l'absence d'écart-type indique que le paramètre correspondant a été fixé).

Paramètres radiaux	$5s^2 5p^3 6s$	$5s^2 5p^3 7s$	$5s^2 5p^3 5d$	$5s^2 5p^3 6d$
E_0	65 750. (90.)	80 574.8 (83.)	77 741. (69.)	84 166. (80.)
$F^2(5p, 5p)$	30 584.47 (127.)	30 584.47	30 584.47	30 584.47
ζ_{5p}	4 319.16 (98.7)	4 319.16	4 319.16	4 319.16
$G^1(5p, ns)$	1 846. (48.7)	811. (Fixé)		
$F^2(5p, nd)$			5 500. (Fixé)	2 500. (Fixé)
$G^1(5p, nd)$			4 027. (266.)	1 402. (Fixé)
$G^3(5p, nd)$			2 452. (352.)	1 909. (Fixé)
ζ_{nd}			17.3 (Fixé)	0. (Fixé)
Paramètres entre configurations	$5s^2 5p^3$ ($6s+7s+5d+6d$)			
$R^2(5p6s, 5p5d)$	- 5 622.7 (314.)			
$R^1(5p6s, 5d5p)$	- 1 284.3 (367.)			

Tableau VI (suite)

Paramètres entre Configurations		
R ² (5p6s,5p6d)	- 3 224. (Fixé)	$\Delta E = \left[\frac{\sum (E_c - E_{exp})^2}{N - p} \right]^{\frac{1}{2}} = 34.5$ $\overline{\Delta E} = 24.9$
R ¹ (5p6s,6d5p)	- 2 037. (Fixé)	
R ² (5p7s,5p5d)	- 1 654. (Fixé)	
R ¹ (5p7s,5p5d)	- 1 500. (Fixé)	
R ² (5p7s,5p6d)	- 1 748. (Fixé)	
R ¹ (5p7s,6d5p)	- 956. (Fixé)	
R ¹ (5p6s,7s5p)	2 064. (Fixé)	
R ² (5p5d,5p6d)	2 990. (Fixé)	
R ¹ (5p5d,6d5p)	2 915. (Fixé)	
R ³ (5p5d,6d5p)	1 670. (Fixé)	
ζ _{5d,6d}	2.7 (Fixé)	

Tableau VII

Interprétation des niveaux d'énergie des configurations impaires $5s^2 5p^3$ ($6s+7s+5d+6d$).

Les fonctions d'onde sont représentées par rapport à la base des fonctions IS.

Pour chaque composante on donne le carré du coefficient en pourcentage et le signe du facteur de phase.

$E_{\text{exp.}}$	$E_{\text{calc.}}$	ΔE	$\xi_{\text{exp.}}$	$\xi_{\text{calc.}}$	Δg	Composition
J=0						
55 826.538	55 804.46	22.04				$5d^5 D_0(-91.)$; $5d''^3 P_0(-4.87)$; $6d^5 D_0(-3.6)$
63 419.	63 419.					$6s''^3 P_0(83.)$; $5d^1 3 P_0(12.)$
63 965.112	64 036.9	-71.92				$6d^5 D_0(-89.5)$; $6d''^3 P_0(-5.)$; $5d^5 D_0(3.)$
66 879.	66 879.					$5d^1 1 S_0(82.)$; $5d''^3 P_0(8.)$; $6d^1 1 S_0(3.)$
J=1						
46 652.738	46 644.7	8.0	1.909 ± 0.003	1.922	-0.013	$6s^3 S_1(91.)$; $6s''^1 P_1(4.)$; $6s''^3 P_1(-2.4)$;
54 683.886	54 676.0	7.8	0.674 ± 0.005	0.682	-0.008	$6s^1 3 D_1(-73.7)$; $6s''^1 P_1(6.8)$; $6s^3 S_1(-4.2)$; $6s''^3 P_1(-4.2)$
55 851.533	55 859.1	-8.1		1.459		$5d^5 D_1(-87.6)$; $5d''^3 P_1(-3.6)$; $6d^5 D_1(-3.4)$; $6s^1 3 D_1(-3.1)$
58 746.074	58 729.6	16.4	0.532 ± 0.004	0.534	-0.002	$5d^3 D_1(88.2)$; $6s^1 3 D_1(-3.3)$; $5d''^1 P_1(2.5)$; $5d''^3 D_1(-2.1)$
61 133.258	61 143.2	-9.9	1.920 ± 0.001	1.928	-0.008	$7s^3 S_1(89.7)$; $7s''^1 P_1(3.7)$; $5d^1 3 S_1(2.2)$; $7s''^3 P_1(-2.1)$
63 745.	63 745.			1.364		$6s''^3 P_1(-60.7)$; $6s''^1 P_1(-19.7)$; $5d^1 3 P_1(-7.8)$; $5d^1 1 P_1(-5.)$
63 993.546	64 034.4	-40.8	1.475 ± 0.005	1.477	0.009	$6d^5 D_1(-87.9)$; $6d''^3 P_1(-3.7)$; $5d^5 D_1(2.9)$;

Tableau VII (suite 1)

$E_{exp.}$	$E_{calc.}$	ΔE	$g_{exp.}$	$g_{calc.}$	Δg	Composition
64 826.491	64 751.2	75.0		0.548		$6d^3D_1(80.6)$; $5d^1^3D_1(10.2)$; $6d^{III}P_1(2.5)$
	66 154.4			1.032		$5d^1P_1(-30.8)$; $6s^{II}P_1(-18.8)$; $6s^{III}P_1(11.5)$; $6s^1^3D_1(-11.5)$; $5d^1^3P_1(9.)$
J=2						
(44 253.000)	44 261.3	-8.3	1.960 ± 0.003	1.967	-0.007	$6s^5S_2(92.)$; $6s^{III}P_2(5.3)$;
54 880.070	54 879.0	1.1	1.224 ± 0.005	1.239	-0.015	$6s^1^3D_2(-61.8)$; $6s^{II}P_2(-12.7)$; $6s^1D_2(-10.5)$; $5d^5D_2(7.)$
55 817.311	55 849.9	-32.6	1.428 ± 0.014	1.440	-0.012	$5d^5D_2(79.4)$; $6s^1D_2(6.1)$; $6d^5D_2(3.2)$; $6s^1^3D_2(3.2)$
57 114.206	57 132.8	-18.6	1.08 ± 0.03	1.093	-0.013	$6s^1D_2(50.5)$; $5d^3D_2(-22.9)$; $6s^1^3D_2(-11.5)$; $5d^5D_2(-4.5)$
58 592.434	58 610.0	-17.6	1.112 ± 0.001	1.123	-0.009	$5d^3D_2(-58.9)$; $6s^1D_2(-21.3)$; $6s^1^3D_2(10.2)$; $5d^1^3D_2(-3.4)$
60 629.789	60 620.1	9.7	1.957 ± 0.002	1.963	-0.006	$7s^5S_2(-91.9)$; $7s^{II}P_2(-5.5)$; $6s^5S_2(1.5)$
64 058.790	64 020.5	38.4	1.44 ± 0.02	1.481	-0.041	$6d^5D_2(89.9)$; $5d^5D_2(-3.2)$; $6d^{III}D_2(2.9)$; $6d^{III}P_2(2.)$
64 437.650	64 418.8	18.9	1.125 ± 0.010	1.125	0.000	$6d^3D_2(74.7)$; $5d^1^3D_2(5.8)$; $5d^1^3F_2(-4.6)$; $6d^{III}D_2(3.9)$
	65 936.			0.926		$5d^1^3F_2(53.6)$; $6s^{III}P_2(-11.2)$; $5d^1^3P_2(-6.3)$; $5d^{III}F_2(4.8)$
	66 431.			1.290		$6s^{III}P_2(-41.4)$; $5d^1^3P_2(-19.)$; $5d^1^3F_2(-15.6)$; $6s^1^3D_2(7.2)$; $6s^1D_2(6.2)$

Tableau VII (suite 2)

$E_{\text{exp.}}$	$E_{\text{calc.}}$	ΔE	$\xi_{\text{exp.}}$	$\xi_{\text{calc.}}$	$\Delta \xi$	Composition
J=3						
55 677.722	55 649.3	28.4		1.459		$5d^5 D_3(77.)$; $6s^1 {}^3 D_3(-10.5)$; $5d^{III} {}^3 D_3(3.7)$; $6d^5 D_3(3.1)$
56 842.538	56 824.6	18.0	1.352 ± 0.005	1.355	-0.003	$6s^1 {}^3 D_3(82.9)$; $5d^5 D_3(12.6)$; $5d^3 D_3(2.4)$
58 826.951	58 831.8	-4.8	1.310 ± 0.010	1.313	-0.003	$5d^3 D_3(-85.6)$; $6s^1 {}^3 D_3(3.7)$; $5d^1 {}^1 F_3(-3.6)$
64 047.613	64 020.5	27.1	1.475 ± 0.010	1.481	-0.006	$6d^5 D_3(90.)$; $6d^{III} {}^3 D_3(3.5)$; $5d^5 D_3(-3.2)$
64 622.877	64 628.1	-6.1	1.30 ± 0.01	1.304	0.004	$6d^3 D_3(76.7)$; $5d^1 {}^3 D_3(9.9)$; $6d^{II} {}^1 F_3(3.)$
	66 568.			1.057		$5d^1 {}^3 F_3(-57.7)$; $5d^1 {}^3 G_3(17.4)$; $5d^{II} {}^1 F_3(-5.6)$; $5d^{III} {}^3 D_3(-5.)$; $6d^3 D_3(-4.4)$; $5d^1 {}^3 D_3(4.3)$
	66 636			0.891		$5d^1 {}^3 G_3(61.8)$; $5d^1 {}^3 F_3(15.)$; $5d^{II} {}^3 F_3(8.8)$; $6d^3 D_3(2.9)$
J=4						
55 816.219	55 815.2	1.0	1.47 ± 0.02	1.483	0.013	$5d^5 D_4(90.3)$; $5d^{II} {}^3 F_4(5.2)$; $6d^5 D_4(3.6)$
64 062.377	64 027.8	34.6	1.48 ± 0.01	1.482	0.002	$6d^5 D_4(90.)$; $6d^{III} {}^3 F_4(5.3)$; $5d^5 D_4(-3.4)$
	66 615.7			1.079		$5d^1 {}^3 G_4(-51.6)$; $5d^1 {}^1 G_4(-28.4)$; $5d^{III} {}^3 F_4(-14.2)$
J=5						
	68 412.6			1.200		$5d^1 {}^3 G_5(97.3)$; $6d^1 {}^3 G_5(2.7)$

Tableau VIII

Paramètres radiaux des configurations paires $5s^2 5p^5 (6p+7p)$ de Te I (en cm^{-1})
 (l'absence d'écart-type indique que le paramètre correspondant a été fixé).

Paramètres	$5s^2 5p^3 6p$	$5s^2 5p^3 7p$
E_0	75 072.4 (40.1)	83 570.97 (42.4)
$F^2(5p,5p)$	30 895.8 (64.9)	30 895.8
ζ_{5p}	4 509.1 (46.7)	4 509.1
$F^2(5p,np)$	4 200. Fixé	1.800. Fixé
$G^0(5p,np)$	716.3 (34.9)	74.86 (58.)
$G^2(5p,np)$	655.3 (77.0)	336.9 (159.8)
ζ_{np}	271.76 (17.0)	126.2 (34.4)
Paramètres entre Configurations	$5s^2 5p^3 (6p+7p)$	
$R^2(5p6p,5p7p)$	2 729.6 (450.)	$\Delta E = \left[\frac{\sum (E_c - E_o)^2}{N - 1} \right]^{\frac{1}{2}} = 33.9$ $\overline{\Delta E} = 22.8$
$R^0(5p6p,7p5p)$	189. Fixé	
$R^2(5p6p,7p5p)$	577.	
ζ_{6p-7p}	253.	

Tableau IX

Interprétation des niveaux d'énergie des configurations paires $5s^2 5p^3$ ($6p+7p$).

Les fonctions d'onde sont représentées par rapport à la base des fonctions LS.

Pour chaque composante on donne le carré du coefficient en pourcentage et le signe du facteur de phase.

$E_{exp.}$	$E_{calc.}$	ΔE	$\xi_{exp.}$	$\xi_{calc.}$	$\Delta \xi$	Composition
J=0						
55 809.132	55 785.5	23.5				$6p^3 P_0(94.)$; $6p''^3 P_0(-2.8)$; $6p''^1 S_0(2.7)$
63 982.463	63 974.9	10.9				$7p^3 P_0(89.)$; $7p''^1 S_0(3.8)$; $6p^1 P_0(3.6)$
(66 003.855)	66 210.	(207.)				$6p^1 P_0(83.)$; $6p''^1 S_0(-10.)$; $7p^3 P_0(-4.)$
J=1						
54 160.094	54 146.8	13.3	2.388 ± 0.002	2.395	-0.007	$6p^5 P_1(89.)$; $6p^3 P_1(-3.5)$; $6p''^3 P_1(-2.8)$
55 355.345	55 343.6	12.4	1.504 ± 0.003	1.504	0.000	$6p^3 P_1(84.)$; $6p''^1 P_1(4.7)$; $6p^5 P_1(4.0)$
63 556.707	63 558.0	-1.3	1.704 ± 0.004	1.767	-0.063	$7p^5 P_1(-44.)$; $7p^3 P_1(25.)$; $6p^1 P_1(-11.5)$
63 669.944	63 665.3	4.6	1.764 ± 0.015	1.710	0.054	$7p^5 P_1(-46.)$; $6p^1 P_1(18.6)$; $7p^3 P_1(-12.6)$; $6p^1 P_1(10.3)$
64 088.997	64 097.7	-9.7	1.235 ± 0.018	1.231	0.004	$7p^3 P_1(-53.)$; $6p^1 P_1(-22.6)$; $6p^1 P_1(-9.1)$
65 738.652	65 781.0	-43.0		1.156		$6p^1 P_1(-36.8)$; $6p^1 P_1(-26.1)$; $6p^1 P_1(20.3)$; $6p^1 P_1(-9.3)$
(66.958.335)	67 267.4	(309.)		1.261		$6p^1 P_1(55.)$; $6p^1 P_1(-27.7)$; $6p^1 P_1(9.6)$
J=2						
54 199.122	54 198.3	0.8	1.762 ± 0.001	1.767	0.005	$6p^5 P_2(-84.)$; $6p^3 P_2(7.4)$; $6p^1 P_2(-3.7)$

Tableau IX (suite)

$E_{\text{exp.}}$	$E_{\text{calc.}}$	ΔE	$\epsilon_{\text{exp.}}$	$\epsilon_{\text{calc.}}$	Δg	Composition
55 667.758	55 706.1	-38.3	1.496 ± 0.005	1.498	0.002	$6p^3P_2(85.)$; $6p^5P_2(8.3)$; $6p''^1D_2(3.8)$
63 610.819	63 608.9	1.88	1.709 ± 0.01	1.751	-0.042	$7p^5P_2(80.)$; $7p^3P_2(-10.4)$; $7p''^3P_2(3.3)$; $7p''^3D_2(2.5)$
63 921.485	63 928.8	-7.3	1.47 ± 0.03	1.505	-0.035	$7p^3P_2(80.)$; $7p^5P_2(11.2)$; $7p''^1D_2(3.6)$; $7p''^3P_2(1.9)$
64 564.479	64 565.8	-1.3	0.815 ± 0.005	.880	-0.065	$6p^3P_2(62.)$; $6p^3D_2(12.5)$; $6p''^3D_2(8.2)$; $6p^1D_2(5.2)$
64 900.247	64 833.0	67.2	1.206 ± 0.007	1.140	0.066	$6p^3D_2(-51.)$; $6p^3F_2(18.4)$; $6p''^3P_2(-9.3)$; $6p^3P_2(8.6)$; $6p''^1D_2(-5.7)$
(66 999.975)	67 271.5	(271.)		1.384		$6p^3P_2(-65.)$; $6p^3D_2(-22.4)$; $6p^1D_2(8.3)$
J=3						
54 535.345	54 545.3	-9.9	1.636 ± 0.003	1.641	-0.004	$6p^5P_3(93.)$; $6p''^3D_3(5.9)$
63 741.112	63 743.9	-2.9	1.63 ± 0.02	1.639	-0.009	$7p^5P_3(-92.6)$; $7p''^3D_3(-6.0)$
64 921.211	64 955.4	-34.2	1.111 ± 0.005	1.118	-0.007	$6p^3F_3(51.5)$; $6p^1F_3(29.6)$; $6p''^3D_3(14.6)$; $6p^5P_3(-3.5)$
66 548.089	66 546.3	1.8	1.173 ± 0.006	1.188	-0.015	$6p^3D_3(50.1)$; $6p^1F_3(-26.3)$; $6p^3F_3(23.1)$
66 938.121	66 929.3	8.8	1.19 ± 0.01	1.175	0.015	$6p^3D_3(48.6)$; $6p^1F_3(36.2)$; $6p^3F_3(-15.1)$
J=4						
66 972.585	66 969.5	3.0	1.25 ± 0.01	1.250	0.00	$6p^3F_4(99.97)$

Tableau X

Niveaux d'énergie expérimentaux des configurations

 $5s^2 5p^3 ({}^4S) 4f$ et $5s^2 5p^3 ({}^4S) 5f$, $5s^2 5p^3 9p$.

Configuration	Terme	J	Niveaux (cm^{-1})	$g_{\text{exp.}}$ (U.L.)
$5s^2 5p^3 [{}^4S] 4f$	5F	1	65 703.814	0.38 ± 0.02
	5F	2	65 710.288	0.945 ± 0.010
	5F	3	65 696.534	1.16 ± 0.02
	5F	4	65 695.713	≈ 1.14
	5F	5	65 708.569	1.39 ± 0.02
$5s^2 5p^3 [{}^4S] 4f$	3F	2	65 719.741	0.72 ± 0.04
	3F	3	65 714.473	1.10 ± 0.02
	3F	4	65 715.198	1.24 ± 0.02
$5s^2 5p^3 [{}^4S] 5f$	5F	1		
		2	68 217.456	
		3	68 216.527	
		4	68 216.843	
		5	68 217.685	
	3F	3	68 222.089	
$5s^2 5p^3 9p$?	1,2	68 603.861	

Tableau XI

Niveaux d'énergie expérimentaux des configurations

 $5s5p^5$, $5s^2 5p^3 8s$, $5s^2 5p^3 9s$.

Configuration	Terme	J	Energie (cm^{-1})	g_{exp} (U.L.)
$5s5p^5$	3P	2	63 296.823	1.456 (0.003)
	3P	1	64 308.139	
$5s^2 5p^3 8s$	5S	2	65 932.819	
	3S	1	66 109.556	
$5s^2 5p^3 9s$	5S	2	68 362.604	
	3S	1	68 407.675	

III - 4

ARTICLE n°3

ETUDE DE LA TRANSITION "INTERDITE" ${}^2P_{1/2} \rightarrow {}^2P_{3/2}$
DE LA CONFIGURATION np^5 DANS LE BROME
ET L'IODE PAR SPECTROMETRIE DE FOURIER

E. LUC-KOENIG, C. MORILLON et J. VERGÈS

*Laboratoire Aimé Cotton, C.N.R.S. II,
91405, Orsay, France*

Reçu le 22 Mai 1973

Résumé

La transition ${}^2P_{1/2} \rightarrow {}^2P_{3/2}$ de la configuration np^5 , interdite en émission dipolaire électrique a été observée par spectrométrie de Fourier, dans le brome à $3685,15 \text{ cm}^{-1}$ et dans l'iode à $7602,98 \text{ cm}^{-1}$. La structure hyperfine des raies observées a permis de déterminer avec précision les constantes $A({}^2P_{1/2})$ de ${}^{127}\text{I}$, ${}^{79}\text{Br}$ et ${}^{81}\text{Br}$. On rend compte de la grande valeur de cette constante, par les effets relativistes.

Synopsis

In this paper, the spontaneous emission of atomic bromine and iodine was experimentally investigated by Fourier transform spectrometry. The ${}^2P_{1/2} \rightarrow {}^2P_{3/2}$ transitions inside the np^5 configuration, which are forbidden with respect to electric dipole radiation, are observed at $\sigma = 3685.15 \text{ cm}^{-1}$ for bromine and at $\sigma = 7602.98 \text{ cm}^{-1}$ for iodine. The study of the hyperfine structure (hfs) of these lines allowed the precise determination of the hfs constants $A({}^2P_{1/2})$ of ${}^{79}\text{Br}$, ${}^{81}\text{Br}$ and ${}^{127}\text{I}$. It is shown that the relativistic effects have a strong influence and give a qualitative interpretation of the rather large values of the $A({}^2P_{1/2})$ constants.

1. *Introduction.* Plusieurs transitions radiatives ont déjà été observées dans le visible entre niveaux d'un même multiplet fondamental donnant lieu à l'émission spontanée de rayonnement dipolaire magnétique et quadropolaire électrique¹). Bien que les probabilités de transition dipolaire magnétique et quadropolaire électrique soient extrêmement faibles (respectivement 10^{+5} et 10^{+7} fois plus faibles que pour le rayonnement dipolaire électrique environ), ces rayonnements deviennent observables lorsque le niveau excité de la transition est métastable relativement au caractère dipolaire électrique. Il faut noter également que plus l'atome est lourd, moins les probabilités de transition dipolaire magnétique et quadropolaire électrique sont faibles. Ceci est dû aux effets relativistes dont on sait l'importance croissante avec le numéro atomique des éléments.

L'intensité de ces raies est souvent faible, mais peut varier dans d'importantes proportions suivant les conditions d'excitation. Dans l'infrarouge, entre 1 et 3,5 μm la puissance émise est plus faible que dans le visible, toutes choses égales par ailleurs (population du niveau supérieur et force de raie) proportionnellement à la puissance 4ème du nombre d'ondes pour le rayonnement dipolaire magnétique, et à la puissance 6ème pour le rayonnement quadrupolaire électrique. D'autre part les récepteurs ont une détectivité beaucoup plus faible que les photomultiplicateurs ou les plaques photographiques utilisés dans le visible. Pourtant dès 1968, l'un de nous²⁾ observait une raie forte dans le spectre de l'iode à 7603 cm^{-1} et l'identifiait comme étant due à la transition "interdite" $^2\text{P}_{1/2} \rightarrow ^2\text{P}_{3/2}$ de la configuration fondamentale $5p^5$. Cette raie déjà observée en 1954 n'avait pas été classée³⁾.

Dans plusieurs éléments les transitions théoriquement observables entre les niveaux métastables du multiplet fondamental se trouvent dans l'infrarouge. Les progrès réalisés ces dernières années dans l'analyse des spectres d'émission infrarouge grâce à la méthode de spectrométrie par transformation de Fourier nous permettent d'étudier dans de bonnes conditions de rapport signal sur bruit, et avec des pouvoirs de résolution jamais atteints dans cette région, ces rayonnements dipolaire magnétique et quadrupolaire électrique.

Nous présentons ici l'étude de la raie $np^5 \ ^2\text{P}_{1/2} \rightarrow ^2\text{P}_{3/2}$ de l'iode I et du brome I.

2. *Méthodes expérimentales.* 2.1. Spectrométrie par transformation de Fourier. L'emploi de la spectrométrie de Fourier pour les problèmes à haute résolution entre 1 et 3,5 μm s'est généralisé au Laboratoire Aimé Cotton depuis quelques années⁵⁾. Les interféromètres utilisés permettent d'atteindre couramment une différence de marche de 2 m, soit une limite de résolution instrumentale comprise entre $2,5 \times 10^{-3}$ et $5 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$ suivant l'apodisation effectuée sur la fonction d'appareil. La rapidité du déplacement autorise des durées d'enregistrement de quelques heures seulement pour obtenir, avec une résolution maximale, l'interférogramme d'une tranche spectrale de plusieurs milliers de cm^{-1} .

En ce qui concerne les calculs du spectre sur ordinateur⁵⁾ des progrès importants ont permis de réduire considérablement leur durée. Par exemple la durée du calcul de la transformation de Fourier d'un interférogramme de 10^6 points, donnant un spectre échantillonné de 10^6 points également est de 3 min 57 s sur un ordinateur IBM 370/165⁶⁾ ce qui devient presque négligeable devant le temps total nécessaire à l'ensemble des opérations effectuées pour obtenir le spectre à partir de l'interférogramme. Les enregistrements du spectre de l'iode ont été effectués en 5 heures pour une bande spectrale comprise entre 1,10 et 1,50 μm . La différence de marche maximale était de 78 cm, soit une limite de résolution instrumentale de $6,40 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$, pour une fonction d'appareil non apodisée. La raie étudiée est représentée sur la fig. 1. Le tracé du spectre a été fait sans apodisation; le fait qu'aucune ondulation ne soit visible aux pieds des raies montre que la largeur

d'une composante émise par la source est supérieure à la largeur instrumentale. La raie du spectre du brome est représentée sur la fig. 4. Elle a été obtenue à partir d'un interférogramme effectué en 8 heures pour une bande spectrale comprise entre 2,5 et 3,3 μm . La différence de marche maximale de cet interférogramme est de 110 cm d'où une limite de résolution instrumentale de $4,5 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$ sans apodisation, ce qui est inférieur à la largeur de raie émise par la source.

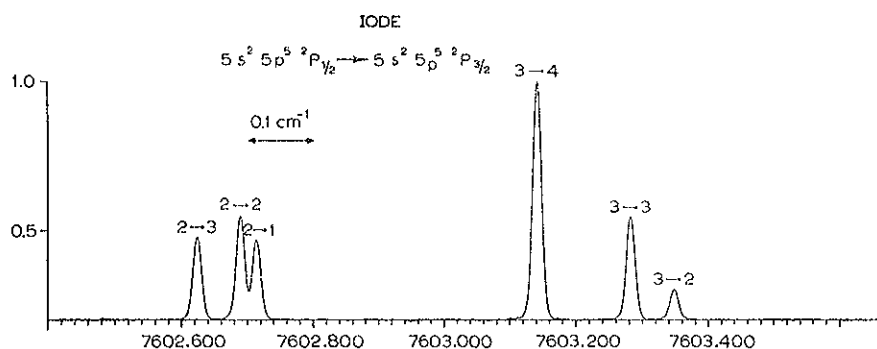


Fig. 1. Iode 127. Structure hyperfine de la transition $5s^2 5p^5\ ^2P_{1/2} \rightarrow 5s^2 5p^5\ ^2P_{3/2}$. En abscisse les nombres d'ondes sont exprimés en cm^{-1} . La largeur d'une composante est d'environ $0,015 \text{ cm}^{-1}$. La largeur instrumentale est de l'ordre de $0,006 \text{ cm}^{-1}$.

Avec l'avantage multiplex de la méthode de spectrométrie par transformation de Fourier, les interférogrammes obtenus pour l'iode et pour le brome fournissent des renseignements qui ne se limitent pas aux 2 structures étudiées ici. Toutes les raies d'émission dipolaire électrique sont en cours d'étude et permettront d'établir la liste de raies infrarouges observables, d'améliorer la classification, d'effectuer des études de structure hyperfine.

2.2. Les sources. Les sources utilisées sont analogues à des tubes sans électrodes, excités par un champ haute fréquence fourni par un magnétron à 2450 MHz soit dans une cavité, soit par une antenne. Ces sources sont constituées d'un tube en silice relié d'une part à un banc de pompage, d'autre part à une réserve contenant l'élément à étudier et dont on peut faire varier la température. L'ensemble de ces 2 dispositifs permet de faire varier la pression de vapeur jusqu'à obtenir les conditions optimales pour l'observation des transitions étudiées. L'intensité des raies étudiées semble favorisée par des pressions de vapeur assez élevées (quelques mm de Hg)⁷ et par des sections de tube importantes à l'endroit où se produit la décharge, ce qui signifierait que le dépeuplement se fait surtout au niveau des parois. D'autres facteurs dont le rôle est difficile à définir rigoureusement, en particulier ceux qui concernent le processus de peuplement du niveau métastable,

doivent avoir un effet important. C'est de façon empirique que les conditions d'excitation donnant des raies intenses et fines ont été déterminées. En ce qui concerne la largeur des raies la contribution principale est due à la largeur Doppler qu'on peut estimer à $0,010 \text{ cm}^{-1}$ pour la raie de l'iode à 7603 cm^{-1} , et à $0,006 \text{ cm}^{-1}$ pour la raie du brome à 3685 cm^{-1} . L'intérêt d'observer des structures dans l'infrarouge aussi lointain que possible réside essentiellement dans la réduction de cette largeur Doppler. L'iode naturel, qui ne contient qu'un seul isotope de masse atomique 127, a été utilisé. On a pu faire varier la pression de vapeur dans la source entre quelques mm et 10^{-2} mm de Hg, en variant la température de la réserve entre 25°C et -15°C . Les enregistrements les meilleurs ont été obtenus à une pression de 1 mm de Hg, les raies ont alors une largeur de l'ordre de $0,015 \text{ cm}^{-1}$.

En cours de fonctionnement, les tubes sans électrodes, scellés, utilisés ordinairement fonctionnent avec des pressions difficiles à apprécier. Les enregistrements obtenus avec ces tubes donnent un signal plus intense, mais les raies ont alors une largeur de l'ordre de $25 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$.

Le brome naturel a été utilisé. Il contient 2 isotopes, l'un de masse atomique 79, dont l'abondance est de 51 %, l'autre de masse atomique 81, dont l'abondance est de 49 %. Au voisinage de 0°C , la tension de vapeur saturante du brome étant trop élevée cette pression a été réduite par pompage jusqu'à quelques mm de Hg. Des raies fines dont la largeur enregistrée est de l'ordre de $8 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$ ont ainsi été obtenues.

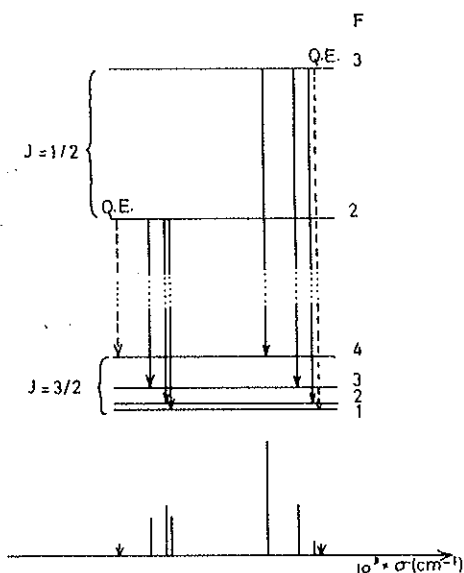


Fig. 2. Iode 127. Spin nucléaire: $I = 5/2$. Schéma des niveaux de la transition $5s^25p^5 \ ^2P_{1/2} \rightarrow 5s^25p^5 \ ^2P_{3/2}$. Les transitions de type purement quadrupolaire électrique sont indiquées par une ligne discontinue et leurs positions en nombres d'ondes indiquées par des flèches sur l'axe situé en bas de la figure.

3. *Résultats expérimentaux.* 3.1. L'iode. La raie d'émission spontanée correspondant à la transition $^2P_{1/2} \rightarrow ^2P_{3/2}$ de la configuration fondamentale $5s^25p^5$ est une des raies les plus intenses du spectre infrarouge de l'iode. Le rapport signal sur bruit obtenu est supérieur à 400 et la largeur enregistrée d'une composante simple de structure hyperfine est inférieure à $15 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$. Le spin nucléaire de l'iode de masse atomique 127 est $I = 5/2$. La structure totale s'étend sur environ $0,800 \text{ cm}^{-1}$. L'interprétation de cette structure est indiquée sur l'enregistrement (fig. 1) et sur le schéma (fig. 2).

Cette transition $^2P_{1/2} \rightarrow ^2P_{3/2}$ peut donner lieu simultanément à un rayonnement dipolaire magnétique et à un rayonnement quadrupolaire électrique; toutes les transitions hyperfines observées sur la fig. 1 peuvent être dues à ces deux types de rayonnement. Le tableau I compare les intensités théoriques pour l'émission dipolaire magnétique, aux intensités relatives expérimentales. Aux incertitudes de mesure près, elles sont égales ce qui permet de penser que le rayonnement quadrupolaire électrique est très faible et que nous pouvons avec une bonne approximation attribuer ces transitions hyperfines au rayonnement dipolaire magnétique.

TABLEAU I

Iode: $I = 5/2$ transition $^2P_{1/2} - ^2P_{3/2}$. Comparaison des intensités relatives expérimentales, aux intensités relatives théoriques en émission dipolaire magnétique

$J = 1/2$	$J = 3/2$	I_{exp}	I_{th}
$F = 3$	$F = 4$	100	100
$F = 3$	$F = 3$	$43,3 \pm 0,5$	43,2
$F = 3$	$F = 2$	$12,6 \pm 0,5$	12,3
$F = 2$	$F = 3$	$34,6 \pm 0,5$	34,6
$F = 2$	$F = 2$	$43,5 \pm 0,5$	43,2
$F = 2$	$F = 1$	$33,4 \pm 0,5$	33,3

Toutefois, certains interférogrammes, obtenus dans des conditions de pression plus élevée nous ont permis de détecter la composante $F = 2 \rightarrow F = 4$, purement quadrupolaire électrique. Sur la fig. 3 la trace supérieure, qui est amplifiée 15 fois par rapport à la trace inférieure, montre cette petite composante vers les faibles nombres d'ondes. La composante $F = 3 \rightarrow F = 1$ qui serait située vers les grands nombres d'ondes n'est pas visible car la distance entre $F = 3 \rightarrow F = 2$ et $F = 3 \rightarrow F = 1$ est de $24 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$, ce qui est l'ordre de grandeur de la largeur des composantes sur cet enregistrement. L'augmentation de la largeur des raies entre la fig. 1 et la fig. 3 est due à l'effet de pression. Expérimentalement l'intensité de la

TABLEAU II

A_m : Probabilités de transition dipolaire magnétique. A_Q : Probabilités de transition quadropolaire électrique, réf. 8			
Spectre	Configuration	A_m (s ⁻¹)	A_Q (s ⁻¹)
Br I	4p ⁵	0,89	$0,83 \times 10^{-3}$
Kr II	4p ⁵	2,8	$3,0 \times 10^{-3}$
Rb III	4p ⁵	7,2	$9,4 \times 10^{-3}$
I	5p ⁵	7,8	55×10^{-3}
Xe II	5p ⁵	21	170×10^{-3}
Cs III	5p ⁵	48	450×10^{-3}

composante $F = 2 \rightarrow F = 4$ par rapport à la plus grande des composantes $F = 3 \rightarrow F = 4$ est de 3,5 pour 1000 environ.

Ceci est en accord avec les calculs effectués par Garstang⁸⁾ sur les probabilités de transitions dipolaire magnétique et quadropolaire électrique, dont les valeurs sont portées dans le tableau II. Les écarts mesurés entre les différentes composantes permettent de déterminer les distances entre les sous-niveaux hyperfins des niveaux $^2P_{1/2}$ et $^2P_{3/2}$. Les résultats sont présentés dans le tableau III ainsi que les valeurs obtenues pour les constantes d'interaction $A_{1/2}$, $A_{3/2}$ et $B_{3/2}$; en outre les valeurs de $A_{3/2}$ et $B_{3/2}$ sont comparées aux mesures beaucoup plus précises

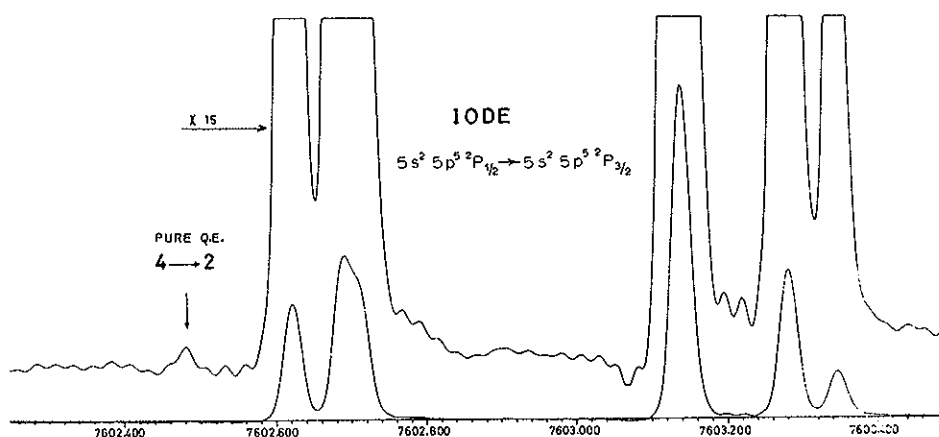


Fig. 3. Structure hyperfine de la transition $^2P_{1/2} \rightarrow ^2P_{3/2}$ de l'iode, faisant apparaître la composante de type purement quadropolaire $^2P_{1/2} F=2 \rightarrow ^2P_{3/2} F=4$. Le bruit présent dans l'enregistrement se manifeste par la présence d'ondulations au voisinage des raies intenses et est caractéristique de la méthode de spectrométrie par T.F. Le rapport signal sur bruit pour cette composante peut être estimé à 2.

TABLEAU III

Iode: $I = 5/2$ - Isotope de masse atomique 127.
(Dans la réf. 9 les grandeurs étant exprimées en MHz, nous avons utilisé pour la transformation en cm^{-1} : $c = 299792456,2$ m/s)

	Ecart hyperfins ($\times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$)		Constantes d'interaction ($\times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$)	
	Présent travail	Réf. 9	Présent travail	Réf. 9
^{127}I				
$^2P_{1/2}$ $\left\{ \begin{array}{l} F=3 - F=2 \\ F=4 - F=3 \end{array} \right.$	$659,2_4 \pm 0,3$ $140,9_2 \pm 0,3$	$140,96992 \pm 0,0005$	$A_{1/2} = 219,7_5 \pm 0,1$ $A_{3/2} = 27,59 \pm 0,05$	$27,59459 \pm 0,0001$ $38,23832 \pm 0,0003$
$^2P_{3/2}$ $\left\{ \begin{array}{l} F=3 - F=2 \\ F=2 - F=1 \end{array} \right.$	$65,6_0 \pm 0,3$ $24,6_4 \pm 0,3$	$65,57483 \pm 0,0003$ $24,60008 \pm 0,0003$	$B_{3/2} = 38,18 \pm 0,1$ $C_{3/2} \equiv 0$	$0,0000817 \pm 0,00001$

TABLEAU V

Brome: $I = 3/2$ - Isotopes de masses atomiques 79 et 81.
(Dans la réf. 14 les grandeurs étant exprimées en Hz, nous avons utilisé pour la transformation en cm^{-1} : $c = 299792456,2$ m/s)

	Ecart hyperfins ($\times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$)		Constantes d'interaction ($\times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$)	
	Présent travail	Réf. 14	Présent travail	Réf. 14
^{79}Br				
$^2P_{1/2}$ $\left\{ \begin{array}{l} F=2 - F=1 \\ F=3 - F=2 \end{array} \right.$	$356,0 \pm 0,3$ $75,6 \pm 0,3$	$75,704227$ (3)	$A_{1/2}^79 = 178,0 \pm 0,1$ $A_{3/2}^79 = 29,49 \pm 0,1$	$29,514077$ (2)
$^2P_{3/2}$ $\left\{ \begin{array}{l} F=2 - F=1 \\ F=1 - F=0 \end{array} \right.$	$71,8 \pm 0,3$ $42,3 \pm 0,3$	$71,866344$ (3) $42,352667$ (15)	$B_{3/2}^79 = -12,83 \pm 0,1$ $C_{3/2}^79 \equiv 0$	$-12,838309$ (8) $0,0000129$ (3)
^{81}Br				
$^2P_{1/2}$ $\left\{ \begin{array}{l} F=2 - F=1 \\ F=3 - F=2 \end{array} \right.$	$383,4 \pm 0,3$ $84,65 \pm 0,3$	$84,718328$ (3)	$A_{3/2}^{81} = 191,7 \pm 0,1$ $A_{1/2}^{81} = 31,79 \pm 0,1$	$31,814282$ (2)
$^2P_{3/2}$ $\left\{ \begin{array}{l} F=2 - F=1 \\ F=1 - F=0 \end{array} \right.$	$74,30 \pm 0,3$ $42,51 \pm 0,3$	$74,353231$ (3) $42,539547$ (15)	$B_{3/2}^{81} = -10,72 \pm 0,1$ $C_{3/2}^{81} \equiv 0$	$-10,724896$ (8) $0,0000143$ (3)

effectuées par résonance magnétique⁹). Nous n'avons pas évalué la constante $C_{3/2}$ correspondant au moment octupolaire magnétique du noyau compte tenu de sa petitesse (tableau IV) et de la précision de nos mesures. Le nombre d'ondes dans le vide du centre de gravité de la structure, qui donne l'écart entre les niveaux $^2P_{1/2}$ et $^2P_{3/2}$ est à $7602,977 \text{ cm}^{-1}$. Cette valeur est inférieure de $0,180 \text{ cm}^{-1}$ à la valeur donnée par Minnhagen¹⁰).

Notre mesure absolue de nombre d'ondes dans le vide est faite par comparaison à la raie du $^{136}\text{Xe I}$ dont le nombre d'ondes vaut $2850,642 \text{ cm}^{-1}$, qui a été elle-même comparée directement à la raie étalon de longueur du krypton sur un interféromètre du même type^{11,12}).

L'erreur commise sur la mesure absolue du nombre d'ondes dans le vide est certainement inférieure à $0,003 \text{ cm}^{-1}$ soit une incertitude relative de l'ordre de 2×10^{-6} .

Une intense émission stimulée due à cette transition a été obtenue par photodissociation des molécules CF_3I et $\text{C}_3\text{F}_7\text{I}$. L'effet laser a été obtenu pour 3 des composantes de structure hyperfine de cette raie; mais l'écart hyperfin du niveau $^2P_{1/2}$ restait inconnu⁴).

3.2. Le brome. La transition $^2P_{1/2} \rightarrow ^2P_{3/2}$ de la configuration fondamentale $4p^5$ de Br I donne lieu à l'émission spontanée d'une raie dont l'intensité est comparable à l'intensité moyenne des raies de caractère dipolaire électrique du spectre infrarouge. De plus elle se situe à 3685 cm^{-1} , dans une région où l'absorption par l'eau atmosphérique est particulièrement forte. Toutefois, cette raie est observable avec l'interféromètre dans l'air, car elle se trouve très exactement située entre deux raies de l'eau, comme on peut le constater sur la fig. 4 où sont superposés le spectre d'absorption de l'eau et le spectre d'émission du brome obtenus dans les mêmes conditions d'enregistrement. Seules les composantes situées vers les faibles nombres d'ondes sont légèrement absorbées. Humphreys et Paul¹³) ont observé une raie à une longueur d'onde voisine et l'ont attribuée par erreur à la transition dipolaire électrique $4d \ ^4F_{3/2} - 6p \ ^4P_{5/2}^0$. Comme pour la raie de l'iode cette transition peut donner lieu à l'émission spontanée de rayonnement mixte dipolaire magnétique et quadrupolaire électrique. Ici encore l'importance du rayonnement quadrupolaire électrique doit être très faible devant celle du rayonnement

TABLEAU IV

	μ (Magnétons nucl.)	Q (barns)	Ω (nm-barns)	Réf.
^{79}Br	2,106	0,29	+0,116	14
^{81}Br	2,270	0,26	+0,129	14
^{127}I	2,808	-0,79	+0,18	9

dipolaire magnétique, mais d'une part l'influence de l'absorption par l'eau, et d'autre part la présence des 2 isotopes du brome naturel, ne nous permettent pas de le vérifier en effectuant une comparaison théorie-expérience.

L'enregistrement présenté dans la fig. 4 montre la présence de 2 structures hyperfines, chacune correspondant à un isotope du brome naturel. Ces 2 isotopes ont le même spin nucléaire $I = 3/2$ mais les valeurs des moments nucléaires varient légèrement de l'un à l'autre comme le montre le tableau IV.

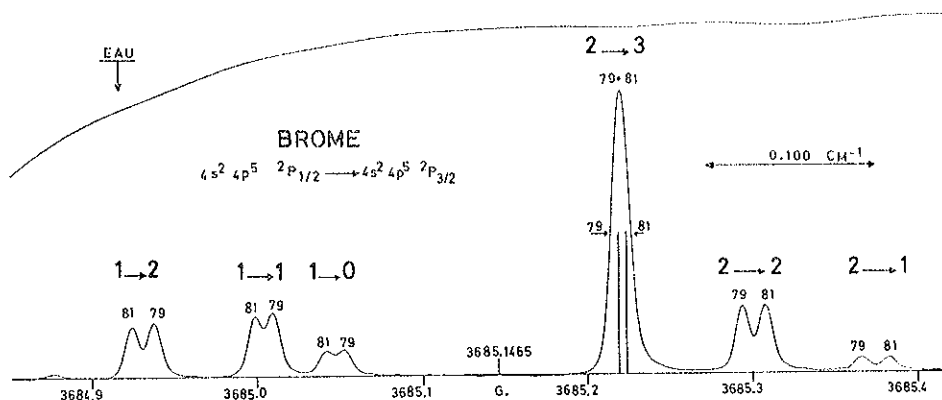


Fig. 4. Brome naturel contenant 2 isotopes de masses atomiques 79 et 81. Transition $4s^2 4p^5\ ^2P_{1/2} \rightarrow 4s^2 4p^5\ ^2P_{3/2}$. La largeur d'une composante est d'environ $0,008\text{ cm}^{-1}$. La largeur instrumentale est de l'ordre de $0,0045\text{ cm}^{-1}$. La trace supérieure montre l'absorption par la vapeur d'eau. En abscisse les nombres d'ondes sont exprimés en cm^{-1} .

Les différences d'intensité observées entre les composantes identiques des 2 isotopes ne sont pas dues uniquement aux abondances différentes; une légère dissymétrie de la fonction d'appareil d'une part, et la raie d'absorption de l'eau d'autre part perturbent fortement les intensités. Les deux structures enchevêtrées doivent donc être interprétées comme l'indiquent la fig. 4 et le schéma de la fig. 5. Une raie faible vers les petits nombres d'ondes est visible sur quelques enregistrements. Il est sûr qu'il ne s'agit pas de la transition quadrupolaire électrique $F = 3 \rightarrow F = 1$ semblable à celle observée dans l'iode, car sa position est très différente de celle attendue. Il s'agit vraisemblablement d'une faible transition dipolaire électrique ($4d\ ^4F_{3/2} - 6p\ ^4P_{5/2}^0$). Les écarts entre sous-niveaux hyperfins des 2 niveaux $^2P_{1/2}$ et $^2P_{3/2}$ sont présentés dans le tableau V ainsi que les valeurs des constantes d'interaction $A_{1/2}$, $A_{3/2}$ et $B_{3/2}$. Nous avons négligé la constante $C_{3/2}$ provenant du moment octupolaire, très faible¹⁴⁾ et négligeable à la précision de nos mesures. Les mesures effectuées par résonance¹⁴⁾ magnétique sur le niveau $^2P_{3/2}$ sont indiquées à titre de comparaison.

Le rapport des moments dipolaires magnétiques du noyau est égal à 0,92775, alors que le rapport des constantes $A^{79\frac{1}{2}}/A^{81\frac{1}{2}}$ vaut $0,9279 \pm 0,005$. Aucune anomalie de structure hyperfine n'est donc mise en évidence, compte tenu de la précision de nos mesures.

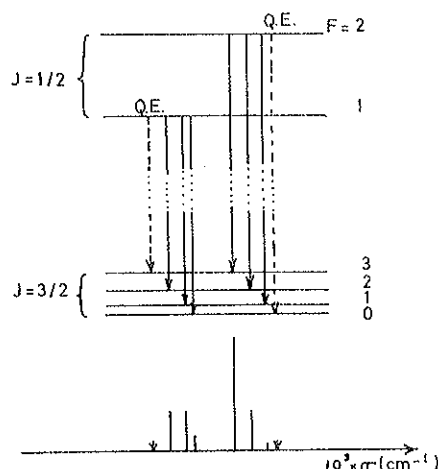


Fig. 5. Brome. Spin nucléaire: $I = 3/2$. Transition $4s^2 4p^5 \ ^2P_{1/2} \rightarrow 4s^2 4p^5 \ ^2P_{3/2}$. Schéma des sous-niveaux hyperfins. Les transitions de type purement quadrupolaire électrique, non observées expérimentalement, sont indiquées par des lignes discontinues et leurs positions en nombres d'ondes indiquées par des flèches sur l'axe situé en bas de la figure.

La détermination expérimentale des centres de gravité a été faite en utilisant les positions expérimentales des composantes et leurs intensités théoriques.

Le déplacement isotopique de masse normal est de $0,6 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$. La distance observée entre les centres de gravité des 2 structures de l'ordre de 10^{-3} cm^{-1} , peut être attribuée à cet effet, compte tenu de la précision de nos mesures.

Le nombre d'ondes dans le vide du centre de gravité est à $3685,1465 \text{ cm}^{-1} \pm 0,003 \text{ cm}^{-1}$, ce qui est sensiblement différent de la valeur annoncée par Tech¹⁵⁾, soit $3685,240 \text{ cm}^{-1}$.

4. *Interprétation théorique.* Dans l'hypothèse du champ central, si on néglige les effets relativistes et ceux des interactions de configurations, les constantes de structure hyperfine dipolaire magnétique et quadrupolaire électrique des niveaux 2P_j de la configuration p^5 ont pour expression:

$$A(^2P_{1/2}) = \frac{8}{3}a_p, \quad A(^2P_{3/2}) = \frac{8}{15}a_p \quad \text{et} \quad B(^2P_{3/2}) = -\frac{2}{5}b_p,$$

avec

$$a_p = \frac{2\beta\beta_N\mu_N}{I} \langle r^{-3} \rangle_p, \quad b_p = e^2 Q \langle r^{-3} \rangle_p,$$

β , β_N représentent le magnéton de Bohr et le magnéton nucléaire. I est le spin du noyau, μ_N (en unité β_N) son moment dipolaire magnétique, Q son moment quadripolaire électrique.

TABLEAU VI

	Valeurs du rapport $A(^2P_{1/2})/A(^2P_{3/2})$			
	Expérience	Valeurs théoriques		
		classique	relativiste approché	relativiste paramétrique
^{79}Br	$6,026 \pm 0,005$	5	5,4	5,66
^{81}Br	$6,024 \pm 0,005$	5	5,4	5,66
^{127}I	$7,96 \pm 0,01$	5	6,13	7,04
^{129}Xe conf. paire	$7,35 \pm 0,13$	5	6,19	6,43
conf. impaire	$6,72 \pm 0,52$	5	6,19	6,43

Nous présentons dans le tableau VI les valeurs des rapports $A(^2P_{1/2})/A(^2P_{3/2})$ obtenues expérimentalement pour le brome, l'iode et à titre de comparaison pour le xénon^{16,18}).

Les valeurs observées sont nettement supérieures à la valeur classique et croissent du brome à l'iode. Or les effets relativistes comme les interactions de configurations contribuent à modifier la valeur de ce rapport.

Dans un précédent article¹⁷) nous avons montré dans l'étude *a priori* de la structure hyperfine du xénon, comment il était possible d'étudier l'influence des effets relativistes. C'est la même méthode que nous avons utilisée ici. Nous en rappelons brièvement le principe.

Les états relativistes monoélectroniques sont représentés dans la théorie de Dirac par des spineurs à quatre composantes :

$$|nljm\rangle = \begin{bmatrix} \frac{1}{r} G_{nlj}(r) |ljm\rangle \\ \frac{i}{r} F_{nlj}(r) |ljm\rangle \end{bmatrix},$$

où $l = 2j - l$; un état non relativiste ayant pour expression :

$$|nljm\rangle = (1/r) R_{nl}(r) |ljm\rangle.$$

Les constantes de structure hyperfine des niveaux 2P_j de la configuration p^5 , ont pour expression

$$A_R({}^2P_j) = \frac{2\beta_N \mu_N}{I} \frac{\kappa}{j(j+1)} P_j, \quad B_R({}^2P_{3/2}) = -\frac{2}{3} e^2 Q R_{3/2},$$

où

$$\kappa = (-1)^{l+j+1/2} (j+1/2), \quad P_j = \int_0^\infty \frac{G_{P_j} F_{P_j}}{r^2} dr,$$

$$R_{3/2} = \int_0^\infty \frac{G_{P_{3/2}}^2 + F_{P_{3/2}}^2}{r^3} dr.$$

A la limite non relativiste :

$$P_j \rightarrow \frac{\hbar}{2mc} (\kappa + 1) \langle r^{-3} \rangle_p, \quad R_{3/2} \rightarrow \langle r^{-3} \rangle_p.$$

Les fonctions radiales relativistes F_{nlj} et G_{nlj} nécessaires à une étude *a priori* sont déterminées par la méthode du potentiel central paramétrique¹⁷). Si on ne tient pas compte des interactions hyperfines et si on traite le terme de Breit comme une perturbation du premier ordre, l'hamiltonien de l'atome s'écrit $H = H^0 + H^1$; H^0 est la somme d'hamiltoniens de Dirac monoélectroniques $h_D(i)$ correspondant au potentiel central $U(r_i)$, et

$$H^1 = -\sum_i \left(U(r_i) + \frac{Z}{r_i} \right) + \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}}.$$

La résolution de l'équation aux valeurs propres $(h_D - \epsilon) |nljm\rangle = 0$ permet d'obtenir numériquement les fonctions radiales F_{nlj} et G_{nlj} . Le potentiel $U(r)$ est décrit sous une forme analytique dépendant d'un petit nombre de paramètres θ_K ; dans le cas présent ces paramètres sont obtenus en minimisant l'énergie totale du niveau fondamental calculée au 1er ordre. Dans le cas de l'iode par exemple nous avons introduit 5 paramètres θ_K , un par nombre quantique n des électrons du coeur.

Nous donnons dans le tableau VI les valeurs obtenues pour le rapport $A({}^2P_{1/2})/A({}^2P_{3/2})$ par cette méthode, ainsi que les valeurs obtenues dans un traitement relativiste approché²¹). Nous voyons que les effets relativistes permettent de rendre compte en grande partie du phénomène observé.

Pour être complet notre traitement devrait tenir compte des interactions de

TABLEAU VII

Etude du rapport $A(^2P_{1/2})/A(^2P_{3/2})$ pour le brome, réf. 19				
	HF	UHF	DHF	Exp
$A(^2P_{1/2})/A(^2P_{3/2})$	5	5,29	5,78	6,03

configurations. Puisque l'opérateur de structure hyperfine est la somme d'opérateurs monoélectroniques, le traitement au second ordre des interactions de configurations ne fait intervenir que des excitations monoélectroniques; pour être complet un tel traitement doit tenir compte de toutes les excitations possible, y compris des excitations vers des états du continuum. Les excitations $np \rightarrow n'p$ sont sans doute prépondérantes dans notre cas, et la majeure partie de leur effet ne modifie pas le rapport $A(^2P_{1/2})/A(^2P_{3/2})$. A titre indicatif nous donnons dans le tableau VII les résultats concernant le brome obtenus par Desclaux¹⁹), par un traitement Hartree-Fock (HF), Hartree-Fock avec polarisation du coeur (UHF) et Hartree-Fock relativiste (DHF). Nous voyons que les effets de polarisation du coeur ne modifient que peu ce rapport.

Dans le tableau VIII nous donnons les valeurs obtenues dans un calcul au premier ordre, pour les constantes de structure hyperfine de ^{127}I et ^{79}Br , ainsi que les valeurs calculées par Desclaux. Nous avons utilisé dans nos calculs les valeurs des moments dipolaires et quadrupolaires du noyau données par Fuller et Cohen²⁰).

Les valeurs *a priori* sont en assez bon accord avec les valeurs expérimentales. Les effets relativistes permettent donc d'expliquer en grande partie la valeur élevée de la constante $A(^2P_{1/2})$. Un traitement complet des interactions de configurations serait souhaitable, mais est un peu prématuré dans l'état actuel de notre travail.

TABLEAU VIII

Constantes de structure hyperfine de ^{79}Br et ^{127}I (mK)					
	Exp	Potentiel paramétrique	HF	Hartree - Fock UHF	DHF
^{79}Br					
$A(^2P_{1/2})$	$178,0 \pm 0,1$	191,3	141,0	153,8	166,3
$A(^2P_{3/2})$	29,49	33,77	28,19	29,05	28,78
$B(^2P_{3/2})$	-12,83	-14,02	-12,34	-13,84	-12,84
^{127}I					
$A(^2P_{1/2})$	$219,7 \pm 0,2$	220,9			
$A(^2P_{3/2})$	27,59	31,37			
$B(^2P_{3/2})$	38,24	42,66			

5. *Conclusion.* L'émission des raies de type dipolaire magnétique, correspondant à la transition entre les 2 niveaux de la configuration fondamentale np^5 , a pu être observée pour le brome et l'iode naturels. Avec les sources utilisées l'élargissement dû à l'effet Doppler constitue pour notre méthode une limitation fondamentale. Toutefois ces transitions ont l'avantage de donner lieu à un rayonnement infrarouge, de telle sorte que cette largeur est suffisamment faible pour que les structures hyperfines soient entièrement résolues. De plus, dans le cas du brome on a pu résoudre les structures hyperfines enchevêtrées des 2 isotopes constituant le mélange naturel.

La méthode de spectrométrie par transformation de Fourier nous a permis d'observer ces structures grâce à sa grande résolution instrumentale, avec un très bon rapport signal sur bruit. Dans le cas de l'iode l'observation d'une composante de type purement quadrupolaire magnétique a été possible grâce à la dynamique importante de cette méthode.

L'observation de ces raies a permis la mesure des écarts hyperfins des niveaux $^2P_{1/2}$ qui, à notre connaissance, n'avaient encore pu être déterminés. Les résultats obtenus pour les niveaux $^2P_{3/2}$ sont en très bon accord avec les mesures effectuées par la méthode de résonance magnétique effectuée sur jet atomique. Si la précision de nos mesures n'est pas comparable à celle obtenue par cette dernière méthode dans le cas des niveaux $^2P_{3/2}$, elle est suffisante pour éprouver les théories existantes en structure hyperfine, et en particulier les résultats relatifs au rapport des constantes $A(^2P_{1/2})/A(^2P_{3/2})$.

Ce rapport des constantes $A(^2P_{1/2})/A(^2P_{3/2})$ est supérieur à la valeur prévue par la théorie classique: 6 pour le brome et 8 pour l'iode, au lieu de 5. Les corrections relativistes de Casimir, sont insuffisantes à rendre compte de ce fait, mais la méthode de calcul *a priori* donne une estimation de ce rapport très voisin du rapport expérimental, ce qui tend à prouver que les effets relativistes sont très largement prépondérants devant les interactions entre configurations.

RÉFÉRENCES

- 1) Mrozowski, S., Rev. Mod. Phys. **13** (1944) 153.
- 2) Verges, J., Spectrochim. Acta **24B** (1969) 177.
- 3) Eshbach, F.E. and Fischer, R.A., J.O.S.A. **44** (1954) 868.
- 4) Belousova, I.M., Kiselev, V.M. et Kurzenkov, V.N., Optics and Spectrosc. **33** (1972) 203.
- 5) Connes, J., Delouis, H., Connes, P., Guelachvili, G., Maillard, J.P. et Michel, G., Nouv. Revue Opt. Appl. **1** (1970) 3.
- 6) Delouis, H., Thèse d'Etat, Orsay (1973).
- 7) Martin, W.C. and Corliss, C.H., J. Res. Nat. Bur. Stand. **64A** (1960) 443.
- 8) Garstang, R.H., J. Res. Nat. Bur. Stand. **68A** (1964) 61.
- 9) Jaccarino, V., King, J.G., Satten, R.A. and Stroke, H.H., Phys. Rev. **94** (1954) 1798.
- 10) Minnhagen, L., Ark. Fys. **21** (1967) 415.
- 11) Pinard, J., Thèse de Doctorat d'Etat, Orsay (1968).

- 12) Guelachvili, G., Thèse de Doctorat d'Etat, Orsay (1973).
- 13) Humphreys, C.S. and Paul, E., J.O.S.A. **62** (1972) 432.
- 14) Brown, H.H. and King, J.G., Phys. Rev. **142** (1966) 53.
- 15) Tech, J.L., J. Res. Nat. Bur. Stand. **67A** (1963) 505.
- 16) Liberman, S., Thèse de Doctorat d'Etat, Orsay (1971).
- 17) Koenig, E., Physica **62** (1972) 393.
- 18) Luc-Koenig, E., J. Phys. **33** (1972) 847.
- 19) Desclaux, J.P. and Bessis, N., Phys. Rev. **A2** (1970) 1623.
- 20) Fuller, G.W. and Cohen, V.W., Nuclear Data Tables **5**. Academic Press (New York, London, 1969).
- 21) Kopferman, H., Nuclear Moments, Academic Press (New York, London, 1958).

III - 5

ARTICLE n°4

Etude des configurations fondamentales
 $5s^2 5p^4$ de Te I et I II par l'observation
des raies multipolaires infrarouges.

C. MORILLON et J. VERGÈS

Laboratoire Aimé Cotton, C. N. R. S. II, Bâtiment 505, 91405 - ORSAY, FRANCE.

Résumé :

Etude des configurations fondamentales $5s^2 5p^4$ de Te I et I II par
l'observation des raies multipolaires infrarouges. C. MORILLON et J. VERGÈS
(Laboratoire Aimé Cotton, C.N.R.S.II, Bât. 505, 91405-ORSAY, FRANCE).

Physica Scripta.

Plusieurs raies infrarouges de types dipolaire magnétique et quadru-
polaire électrique, dues à des transitions entre les niveaux de la configu-
ration $5s^2 5p^4$, ont été observées dans le spectre d'étincelle de l'iode
et dans le spectre d'arc du tellure. L'effet Zeeman des raies du tellure
de nombre de masse 130 a permis de remesurer les facteurs de Landé des ni-
veaux $[^3P_2]$, 3P_1 et $[^1D_2]$. D'autre part il a permis l'observation directe
de l'effet "d'interférence" entre les rayonnements dipolaire magnétique et
quadrupolaire électrique sur la transition $[^1D_2] \rightarrow [^3P_2]$. La structure

hyperfine du tellure de nombre de masse 125 et de spin nucléaire $I = \frac{1}{2}$ a été observée sur 4 transitions, ce qui a permis de déterminer les constantes d'interaction $A([{}^3P_2])$, $A({}^3P_1)$ et $A([{}^1D_2])$. L'étude de la structure hyperfine de la raie $5p^4 {}^3P_1 \rightarrow 5p^4 {}^3P_2$ du spectre d'étincelle de l'iode naturel, de nombre de masse 127, et de spin nucléaire $I = \frac{5}{2}$, a permis de déterminer les constantes $A([{}^3P_2])$, $A({}^3P_1)$, $B([{}^3P_2])$ et $B({}^3P_1)$. Une étude paramétrique de structure hyperfine effectuée sur la configuration $5p^4$ pour Te I et I II a permis de montrer l'importance des effets relativistes d'une part, et de la polarisation du coeur d'autre part.

Abstract :

Study of the ground configuration $5s^2 5p^4$ of Te I and I II, by observation of multipole infrared lines. C. MORILLON and J. VERGES (Laboratoire Aimé Cotton, C.N.R.S. II, Bât. 505, 91405-ORSAY, FRANCE). Physica Scripta.

Many infrared lines permitted for second order radiation, magnetic dipole, electric quadrupole of mixed types, have been observed in the arc spectrum of tellurium and in the spark spectrum of iodine. These lines are due to transitions between the levels of the ground configuration $5s^2 5p^4$. The Zeeman effect of the lines of tellurium (isotope 130) has supplied Landé factors for the $[^3P_2]$, 3P_1 and $[^1D_2]$ levels. Furthermore, a direct observation of the "interference effect" between magnetic dipole and electric quadrupole radiations has been made on the $[^1D_2] \rightarrow [^3P_2]$ transition. The hyperfine structure of tellurium (isotope 125, nuclear spin $I = \frac{1}{2}$) was observed for four transitions, by means of which the interaction constants $A([^3P_2])$, $A(^3P_1)$ and $A([^1D_2])$ have been determined. The hyperfine structure observed on the $^3P_1 \rightarrow [^3P_2]$ line of $^{127}\text{I II}$ (nuclear spin $I = \frac{5}{2}$) supplied the constants $A([^3P_2])$, $A(^3P_1)$, $B([^3P_2])$, $B(^3P_1)$. Parametric studies of these hyperfine structures suggest that relativistic and core polarization effects are predominant.

I. Introduction

Les transitions entre niveaux appartenant à la même configuration sont interdites par la règle de parité pour le rayonnement dipolaire électrique ; elles sont permises pour des rayonnements de second ordre de type dipolaire magnétique ou quadrupolaire électrique ou des 2 types à la fois (rayonnement mixte). Elles ont d'ailleurs été observées dans plusieurs configurations fondamentales de type p^N [1], dans la région spectrale qui correspond au domaine de sensibilité de la plaque photographique. L'extension à l'infrarouge, dans la région spectrale couverte par les cellules au sulfure de plomb, a été rendue possible par la méthode de spectrométrie par transformation de Fourier. La structure hyperfine des configurations np^5 de $^{79}\text{Br I}$, $^{81}\text{Br I}$ et $^{127}\text{I I}$ [2] a ainsi été étudiée récemment et le présent travail correspond à une entreprise semblable sur les configurations np^4 de Te I et de I II . L'observation des raies infrarouges permet d'atteindre des niveaux de la configuration fondamentale, et de déterminer ainsi très précisément leurs énergies par rapport au fondamental. D'autre part, grâce à la diminution de l'élargissement dû à l'effet Doppler, des structures Zeeman et hyperfines, bien résolues, sont obtenues, permettant une étude précise de ces phénomènes.

II. Observation des raies infrarouges interdites.

II-1 Règles de sélection et forces de raie :

La configuration p^4 contient 5 niveaux, $^3P_{2,1,0}$, 1D_2 et 1S_0 représentés sur le schéma de la figure 1 pour Te I et I II .

Pour le rayonnement quadrupolaire électrique la probabilité de transition totale d'un niveau αJ vers un niveau $\alpha' J'$ est donnée par l'expression :

$$A_Q(\alpha J, \alpha' J') = \frac{1}{2J+1} \times \frac{(2\pi)^5}{10} \frac{\sigma^5}{c^5 \pi} S_Q(\alpha J, \alpha' J')$$

où σ est le nombre d'ondes et où $S_Q(\alpha J, \alpha' J')$ est la force de raie au sens de CONDON and SHORTLEY [3]. Les règles de sélection pour le rayonnement quadrupolaire électrique sont données par la relation triangulaire $\Delta(J, J', 2)$.

En couplage L-S pur, on doit ajouter les règles de sélection $\Delta S = 0$ et $\Delta(L, L', 2)$.

En ce qui concerne le rayonnement dipolaire magnétique, la probabilité de transition totale d'un niveau αJ vers un niveau $\alpha' J'$ est donnée par l'expression :

$$A_m(\alpha J, \alpha' J') = \frac{1}{2J+1} \frac{4}{3} \frac{(2\pi)^3}{c^3} \frac{\sigma^3}{\pi} S_m(\alpha J, \alpha' J')$$

où $S_m(\alpha J, \alpha' J')$ est la force de raie pour le rayonnement dipolaire magnétique.

Les règles de sélection sur le nombre quantique J sont les mêmes que celles du rayonnement dipolaire électrique et sont fournies par la relation triangulaire $\Delta(J, J', 1)$. En couplage L-S pur, les règles $\Delta S = 0$, $\Delta L = 0$, imposent que le rayonnement dipolaire magnétique ne peut être observé que pour une transition entre deux niveaux appartenant au même terme.

Le diagramme d'énergie (figure 1) indique la nature du rayonnement pour chacune des transitions entre les niveaux des configurations $5p^4$ de Te I et I II. Il est clair que les transitions dipolaires magnétiques entre 1S , 1D et 3P ne peuvent être observées que dans la mesure où le couplage

s'éloigne du couplage L-S. Les probabilités de transition de ces divers types de rayonnement ont été évaluées théoriquement par GARSTANG [4] et sont rappelées dans le tableau I pour I II et Te I. Elles permettent de comprendre pourquoi certaines transitions sont observées et pas d'autres. Dans ce tableau, et dans la suite du texte, on désignera les niveaux par leur nom L-S, mais en utilisant un crochet de manière à indiquer que ce ne sont pas des niveaux L-S purs (exemple : [3P_2]).

II.2 Techniques expérimentales.

La méthode de spectrométrie par transformation de Fourier d'un interférogramme échantillonné a été décrite par J. CONNES et al. [5], et son application à l'étude des spectres atomiques est devenue classique.

Les sources utilisées sont des tubes sans électrodes excités dans une cavité par un champ haute fréquence, et déjà décrites dans des publications antérieures ; pour l'iode [2], l'isotope stable, de nombre de masse 127 a été utilisé. Pour le tellure [6], l'isotope de nombre de masse 130 a été utilisé pour la classification et l'étude de l'effet Zeeman ; l'isotope de nombre de masse 125, a été employé pour l'étude de la structure hyperfine. La méthode utilisée pour mesurer les nombres d'ondes dans le vide [6], donne une incertitude absolue de l'ordre de $0,005 \text{ cm}^{-1}$, ce qui permet de déterminer directement avec une très bonne précision l'énergie des niveaux de la configuration fondamentale.

a) Iode II

MARTIN et CORLISS [7] ont observé 2 transitions interdites, dans le spectre d'étincelle de l'iode : [1S_0] \rightarrow 3P_1 et [1D_2] \rightarrow [3P_2], dont les nombres d'ondes sont indiqués dans le tableau I.

Par spectrométrie de Fourier la transition ${}^3P_1 \rightarrow [{}^3P_2]$ a été observée. Cette transition est permise à la fois pour le rayonnement dipolaire magnétique et le rayonnement quadrupolaire électrique. L'isotope de nombre de masse 127 ayant un spin nucléaire $I = \frac{5}{2}$ cette transition présente une structure hyperfine complexe (fig. VI) qui est analysée au chapitre suivant. Le centre de gravité de la structure, $\sigma = 7\,086.888 \pm 0.010 \text{ cm}^{-1}$, détermine l'énergie du niveau $5p^4 {}^3P_1$ avec une marge d'incertitude dix fois inférieure à celle de MARTIN et CORLISS [7].

b) Spectre d'arc du tellure

ERIKSSON [8] a observé 4 transitions dans la région du visible et de l'infrarouge proche : $[{}^1S_0] \rightarrow [{}^3P_2]$, $[{}^1S_0] \rightarrow {}^3P_1$, $[{}^1S_0] \rightarrow [{}^1D_2]$ et $[{}^1D_2] \rightarrow [{}^3P_2]$. Les mesures très précises des longueurs d'onde de ces raies ont permis à cet auteur de déterminer les énergies des niveaux de la configuration $5p^4$ de Te I, sauf celle de $[{}^3P_0]$. Par spectrométrie infrarouge 4 transitions ont pu être observées : ${}^3P_1 \rightarrow [{}^3P_2]$, $[{}^1D_2] \rightarrow {}^3P_1$, $[{}^1D_2] \rightarrow [{}^3P_2]$ (mixte) et $[{}^3P_0] \rightarrow [{}^3P_2]$ (quadrupolaire électrique pur).

Les nombres d'ondes dans le vide de ces raies ont été mesurés sur le spectre de ${}^{130}\text{Te I}$ et sont donnés dans le tableau I. Les intensités des raies y sont indiquées, à l'aide d'une échelle linéaire, dont l'unité est à peu près égale à l'amplitude du bruit présent dans le spectre. Si les intensités relatives de 2 raies de nombres d'ondes voisins sont bien respectées, il faut s'attendre toutefois à une diminution importante de la sensibilité des détecteurs vers 1μ . En particulier, entre les raies situées vers $4\,500 \text{ cm}^{-1}$ et celle située vers $10\,000 \text{ cm}^{-1}$, un facteur correctif important, qui n'a pas encore été mesuré, devrait être appliqué.

III. Effet Zeeman des raies interdites de Te I

III.1 Mesure des facteurs de Landé

La méthode expérimentale pour l'étude de l'effet Zeeman de Te I a déjà été décrite dans une publication antérieure [6]. Les sources contenant du tellure de masse atomique 130 et du néon comme gaz porteur sous une pression de 5 mm de Hg sont placées dans un champ magnétique de 10 000 Oersteds environ. En observation transversale et sans polariseur, les composantes π et σ sont obtenues simultanément. Ceci nous a permis de déterminer les facteurs de Landé g des niveaux $[^3P_2]$, 3P_1 et $[^1D_2]$ dont les valeurs sont données dans le tableau II.

Nos résultats sont en très bon accord avec les mesures effectuées par HELDT [9] dans la région photographique, sur les raies interdites $[^1S_0] \rightarrow ^3P_1$, $[^1S_0] \rightarrow [^1D_2]$ et $[^1S_0] \rightarrow [^3P_2]$.

III.2 Effet "d'interférence" sur la raie $[^1D_2] \rightarrow [^3P_2]$ de Te I.

La spectrométrie par transformation de Fourier respecte bien les intensités relatives des composantes d'une structure. Ceci est illustré par la figure III qui représente la structure Zeeman de la raie dipolaire électrique $\sigma = 6\,430.669\text{ cm}^{-1}$ dont la classification est : $60\,629 (7s\ ^5S_2) - 54\,199 (6p\ ^5P_2)$; cette structure peut être comparée à la structure théorique de la figure IVa, puisque les intensités relatives des structures de raies dipolaire magnétique et dipolaire électrique sont identiques ; seules les composantes π et σ sont échangées, ce qui ne peut pas être observé ici.

La structure Zeeman correspondant à la transition $5p^4 [^1D_2] \rightarrow 5p^4 [^3P_2]$, (fig. II), qui donne lieu à un rayonnement mixte, présente une distribution

remarquable des intensités relatives des composantes. Si l'on considère que la contribution du rayonnement quadrupolaire électrique est faible devant celle du rayonnement dipolaire magnétique les structures des figures II et III devraient être identiques et représentées par le schéma figure IVa. L'addition des intensités dues au rayonnement quadrupolaire électrique (figure IVc) ne peut pas rendre compte des intensités relatives expérimentales. L'effet "d'interférence" entre les rayonnements dipolaire magnétique et quadrupolaire électrique (fig. IVc) est responsable, pour la plus grande partie, de l'écart observé entre les intensités relatives observées et les intensités relatives théoriques pour le rayonnement dipolaire magnétique, ceci sur les composantes π uniquement ($\Delta M = \pm 1$). Les composantes σ ($\Delta M = 0$) sont de type dipolaire magnétique pur puisque ces transitions ne donnent pas lieu à l'observation du rayonnement quadrupolaire électrique dans une direction perpendiculaire au champ magnétique. Cet effet fut prédit théoriquement par plusieurs auteurs [10] et fut observé expérimentalement pour la première fois par JENKINS et MROZOWSKI [11] sur la transition $6p^2 [^1D_2] \rightarrow 6p^2 [^3P_1]$ de Pb I. Toutefois leur expérience était faite avec du plomb naturel contenant 22 % d'isotope 207, donnant une structure hyperfine dont les composantes se mélangeaient à la structure Zeeman des isotopes pairs. HULTS [12] reprit cette étude sur du plomb enrichi en isotopes pairs et observa la structure Zeeman à l'aide d'un interféromètre de Fabry-Perot. Pour obtenir une résolution suffisante des composantes, un recouvrement d'ordres était inévitable, et ce problème fut élégamment résolu en travaillant avec des valeurs bien déterminées du champ magnétique de manière à avoir des superpositions exactes de composantes différentes, appartenant à des ordres différents. Les intensités totales de ces groupes de composantes,

observées expérimentalement et comparées à leurs valeurs calculées, permettent l'estimation du terme d'interférence, à partir duquel le pourcentage de rayonnement quadrupolaire peut être calculé.

A notre connaissance, la structure Zeeman que nous observons pour la raie $5p^4[{}^1D_2] \rightarrow 5p^4[{}^3P_2]$ illustre pour la première fois d'une manière directe, le phénomène d'interférence. Les mesures d'intensités sur cette structure avec des composantes bien séparées devraient par ailleurs permettre une mesure précise du rapport entre les probabilités de transition dipolaire magnétique et quadrupolaire électrique, et d'en déduire une valeur expérimentale de l'intégrale radiale $s_q = \frac{2}{5} \int_0^\infty r^2 P^2(5p) dr$. Dans ce but, des expériences sont en cours pour obtenir des enregistrements de cette structure avec des polarisations π et σ séparées, et avec un rapport signal sur bruit amélioré. Les résultats seront publiés prochainement.

IV. Etude du couplage intermédiaire dans les configurations $5p^4$.

IV.1 Considérations générales.

Les équations séculaires pour la configuration p^4 sont données dans T. A. S. ([3], p. 274), et les énergies théoriques des niveaux sont représentées ([3], p. 300) en fonction du paramètre $\chi = \frac{1}{5} \frac{\zeta}{F_2} = 5 \frac{\zeta}{F^2}$. Ce diagramme est reproduit sur la figure V. Pour Te I, on trouve $\chi = 0.685$ ($F_2 = 1\,227 \text{ cm}^{-1}$, $\zeta_{5p} = 4\,203 \text{ cm}^{-1}$), la valeur de ce paramètre étant déterminée en faisant coïncider les énergies théoriques et expérimentales pour les points suivants : $E({}^3P_1)$, moyenne de $E([{}^1D_2])$ et $E([{}^3P_2])$, et moyenne de $E([{}^1S_0])$ et $E([{}^3P_0])$.

MARTIN et CORLISS [7] ont effectué une étude semblable pour I II et Xe III . Les points représentatifs sont également portés sur le diagramme de la figure V. L'inversion des niveaux 3P_1 et $[{}^3P_0]$ qui se produit pour $\chi > \frac{2}{3}$, permet de caractériser le couplage à l'intérieur de cette configuration. On observe le déplacement du point représentatif vers le couplage jj extrême, quand le degré d'ionisation augmente au sein de la séquence isoélectronique. Pour ces spectres cette méthode donne un bon accord entre les énergies expérimentales et calculées sauf pour $[{}^1S_0]$, dont la valeur expérimentale est plus haute que la valeur calculée. Comme l'ont fait remarquer les auteurs précédents [7], ceci ne peut s'expliquer par une perturbation de $[{}^1S_0]$, car une interaction avec des configurations excitées devrait au contraire repousser ce niveau vers le bas.

Une étude paramétrique de la configuration $5p^4$ a été effectuée par GARSTANG [4] et GRUZDEV [13] pour la séquence isoélectronique Te I , I II , Xe III . Dans ces études la correction effective $\propto L(L+1)$ [14], rendant partiellement compte des interactions de configurations lointaines, est introduite. L'accord entre les énergies expérimentales et calculées est bon, mais l'inversion entre les niveaux $[{}^3P_0]$ et 3P_1 n'est pas respecté.

Nous avons effectué la diagonalisation des matrices pour les configurations p^4 de Te I et I II de manière à obtenir les fonctions d'onde nécessaires à l'interprétation de la structure hyperfine.

IV.2 Tellure.

Pour Te I les résultats sont rassemblés dans le tableau II. La composition des fonctions d'onde des niveaux est indiquée par rapport à la base des fonctions d'onde du couplage L-S. Pour chaque composante on indique

le carré du coefficient, et son signe. Les facteurs de Landé calculés dans le couplage intermédiaire sont comparés aux valeurs expérimentales. L'écart

quadratique moyen sur les énergies : $\Delta E = \left(\frac{\sum (E_c - E_{exp})^2}{N - P} \right)^{\frac{1}{2}}$ est de 103 cm^{-1}

(N : nombre de niveaux, P : nombre de paramètres libres).

Les valeurs des paramètres utilisés pour la diagonalisation sont indiquées dans le tableau II avec leurs écarts-types entre parenthèses.

IV.3 L'iode.

Pour I II les résultats sont présentés de la même manière dans le tableau III. L'écart quadratique moyen sur les énergies

$$\overline{\Delta E} = \left[\frac{\sum (E_{exp} - E_{cal})^2}{N - P} \right]^{\frac{1}{2}} \text{ est égal à } 106 \text{ cm}^{-1}.$$

Une étude plus approfondie tenant compte du mélange avec les configurations excitées $5p^3np$ en particulier, semble nécessaire pour affiner le couplage intermédiaire à la fois pour Te I et pour I II. Le facteur de Landé expérimental du niveau 3P_1 , dans ces 2 spectres est supérieur à 1.500 de manière significative, ce qui semble bien prouver cette influence des configurations np . Mais une étude paramétrique paraît difficile à effectuer, sinon impossible, compte tenu du nombre important de paramètres nécessaires.

V. Etude expérimentale de la structure hyperfine des raies interdites de la configuration $5p^4$ pour I II et Te I .

V.1 Multiplets de structure hyperfine pour les transitions de type dipolaire magnétique et quadrupolaire électrique.

Le couplage du vecteur de spin nucléaire \vec{I} et du moment cinétique électronique \vec{J} , conduit au moment cinétique total de l'atome, $\vec{F} = \vec{I} + \vec{J}$, de la même manière que le couplage Russell-Saunders pur de \vec{L} et \vec{S} , conduit à \vec{J} pour la structure fine. Si l'on connaît les formules donnant les rapports d'intensité entre composantes d'un multiplet de structure fine pour un type de rayonnement donné, il suffit de faire la substitution habituelle :

$$\begin{aligned} \vec{L} &\rightarrow \vec{J} \\ \vec{S} &\rightarrow \vec{I} \\ \vec{J} &\rightarrow \vec{F} \end{aligned}$$

pour obtenir les intensités des composantes de structure hyperfine. En ce qui concerne le rayonnement dipolaire magnétique, les règles d'intensité sont bien connues puisqu'elles sont identiques à celle du rayonnement dipolaire électrique. Celles du rayonnement quadrupolaire électrique sont moins classiques. La formule qui permet de calculer les intensités relatives des composantes de structure hyperfine pour un rayonnement quelconque est la suivante :

$$I_{\text{HFS}}(\alpha J F, \alpha' J' F') \propto N(F, M_F) \times h\nu \times \alpha(T^K) \times [F] \times [F'] \left\{ \begin{matrix} F & K & F' \\ J & I & J \end{matrix} \right\}^2 S(\alpha J, \alpha' J') \quad (1)$$

$N(F, M_F)$ est la population d'un état hyperfin $|(J I) F M_F\rangle$,

$\alpha(T^K)$ est un coefficient qui dépend du type de rayonnement (T^K : opérateur moment multipolaire) :

a) pour $K = 1$, rayonnement dipolaire (magnétique ou électrique)

$$\alpha(T^1) = \frac{64\pi^4 \sigma^3}{3h}$$

b) pour $K = 2$, rayonnement quadrupolaire électrique

$$\alpha(T^2) = \frac{32\pi^6 \sigma^5}{5h} .$$

Pour un multiplet de structure hyperfine, $\alpha(T^K)$ et $S(\alpha J, \alpha'J')$ sont des constantes, et on peut considérer avec une bonne approximation que $N(F, M_F)$ et ν varient peu d'une composante à l'autre, de sorte que les tableaux donnant les intensités relatives d'un multiplet sont calculés avec l'expression : $[F]. [F'] \left\{ \begin{matrix} F & K & F' \\ J' & I & J \end{matrix} \right\}^2$.

V.2 Détermination expérimentale des écarts entre sous-niveaux hyperfins, et des constantes de structure hyperfine.

Les structures présentant un bon rapport signal sur bruit sont analysées avec un ordinateur (UNIVAC 1110) à l'aide d'un programme écrit au Laboratoire Aimé Cotton [HFSMØR - non publié] et basé sur des études effectuées par O. ROBAUX [15]. Le principe consiste à calculer une structure hyperfine en attribuant à toutes les composantes le même profil et à chacune une intensité relative et une position données. Le profil est fourni par une composante simple bien isolée de la structure considérée, ou d'une structure de longueur d'onde voisine. L'intensité relative est donnée par les formules classiques du multiplet ; la position des sous-niveaux hyperfins par rapport au centre de gravité d'un niveau est donnée par la formule de Casimir :

$$\Delta W_{\alpha J F} = \frac{1}{2} A_{\alpha J} \cdot C + B_{\alpha J} \cdot \frac{3C(C+1) - 4I(I+1)J(J+1)}{8I(2I-1)J(2J-1)}$$

où $C = F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)$.

La position d'une composante à l'intérieur de la structure est donc calculée en fonction des constantes $A_{\alpha J}$ et $B_{\alpha J}$ du niveau supérieur, et des constantes $A_{\alpha' J'}$ et $B_{\alpha' J'}$ du niveau inférieur.

On compare point par point la structure calculée et la structure expérimentale, le pas d'échantillonnage étant le pas du spectre obtenu par T. F. de l'interférogramme. Les constantes de structure hyperfine $A_{\alpha J}$ et $B_{\alpha J}$, $A_{\alpha' J'}$ et $B_{\alpha' J'}$ des 2 niveaux, sont considérées comme 4 paramètres ajustables. On détermine par un processus itératif les valeurs de ces grandeurs qui rendent minimal l'écart quadratique moyen entre la structure calculée et la structure expérimentale.

En ce qui concerne les structures de I II et Te I toutes les raies étudiées étaient dues à un rayonnement mixte (D.M. + Q.E.). Avec une bonne approximation les contributions du rayonnement quadrupolaire ont été négligées compte tenu des très petites probabilités de transition. Par conséquent les valeurs choisies pour les intensités relatives sont celles d'un rayonnement dipolaire magnétique pur.

V.3 Transition $^3P_1 \rightarrow [^3P_2]$ de I II.

La structure hyperfine de cette transition a été obtenue pour l'isotope de masse 127 et de spin nucléaire $I = \frac{5}{2}$.

La figure (VI) montre la structure observée. L'interprétation est indiquée à l'aide du diagramme des niveaux d'énergie, et du schéma indiquant la position et l'intensité théoriques de chaque composante.

Cette figure illustre en même temps la technique de mesure des constantes de structure hyperfine expliquée plus haut. La grande composante ($F = \frac{7}{2} \rightarrow F' = \frac{9}{2}$), assez bien isolée, a été choisie comme raie de référence

pour définir le profil. Cette structure contient 9 composantes, dont 2 ne sont pas résolues. La structure dessinée en trait continu a été calculée avec les valeurs optimisées des constantes de structure hyperfine. Chaque composante est dessinée en ligne tiretée.

La ligne pointillée représente la structure expérimentale issue du spectre transformé de Fourier de l'interférogramme. L'accord entre les 2 courbes est bon ; il ne peut pas être amélioré compte tenu du bruit, dont on peut voir l'importance de chaque côté de la structure. L'incertitude sur les valeurs optimisées des paramètres pourrait être déterminée à l'aide de l'écart-type du bruit ; mais cette méthode est complexe pour le nombre de paramètres ajustables dont nous disposons. C'est donc de manière approximative que les incertitudes ont été estimées.

Les résultats sont portés dans le tableau IV. Pour chaque niveau on trouve les écarts entre sous-niveaux hyperfins et les constantes d'interaction magnétique, A , et électrique, B , de la structure hyperfine. A titre de comparaison les estimations théoriques a priori des constantes $A([{}^3P_2])$ et $B'([{}^3P_2])$ effectuées par MARTIN et al. [7] sont rappelées. L'accord est très bon pour $A([{}^3P_2])$; la définition de la constante $B'([{}^3P_2])$ de la réf. [7] n'est pas celle que nous avons prise. La relation entre les 2 grandeurs B et B' est la suivante :

$$B' = \frac{3}{8} \frac{B}{I(2I-1)J(2J-1)} \quad [16]$$

Dans ces conditions, la valeur donnée par MARTIN et CORLISS devient $B([{}^3P_2]) = -27.2 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$, ce qui est d'un ordre de grandeur comparable à celui de notre valeur expérimentale.

V.4 Structure hyperfine des raies de Te I .

La structure hyperfine du tellure enrichi à 95,56 % en isotope de nombre de masse 125 a été observée pour 4 raies interdites de la configuration $5p^4$. Les isotopes pairs du tellure constituent les 4,44 % restants, à savoir ^{124}Te , ^{126}Te (2.6 %) , ^{128}Te (1.08 %) et ^{130}Te .

L'isotope de nombre de masse 125 a un spin nucléaire $I = \frac{1}{2}$ d'où des structures plus simples que celle de l'iode. Parmi les structures hyperfines observées, trois résultent de transitions mixtes :

$$\begin{aligned} {}^3P_1 &\rightarrow [{}^3P_2] \text{ à } \sigma = 4\,750.712 \text{ cm}^{-1} \text{ , fig. VII} \\ [{}^1D_2] &\rightarrow [{}^3P_2] \text{ à } \sigma = 10\,557.912 \text{ cm}^{-1} \text{ , fig. VIII} \\ [{}^1D_2] &\rightarrow {}^3P_1 \text{ à } \sigma = 5\,807.169 \text{ cm}^{-1} \text{ , fig. IX .} \end{aligned}$$

Les contributions du rayonnement quadrupolaire électrique, dont les forces de raie sont faibles devant celles du rayonnement dipolaire magnétique, ont été négligées pour la détermination des constantes de structure hyperfine. Sur chaque figure, les nombres quantiques F et F' de chaque composante sont indiqués. L'interprétation de chaque structure est donnée par le diagramme des niveaux d'énergie et le schéma de la structure précisant la position et l'intensité de chaque composante. On remarque la présence d'une petite raie, due aux isotopes pairs résiduels, qui se trouve au centre de gravité de la structure.

Les structures de ${}^3P_1 \rightarrow [{}^3P_2]$ et $[{}^1D_2] \rightarrow [{}^3P_2]$ ont pu être étudiées sur ordinateur. Les valeurs des constantes de structure hyperfine des niveaux $[{}^3P_2]$, 3P_1 et $[{}^1D_2]$ ont ainsi été déterminées avec une bonne précision, en grandeur et en signe. L'accord est excellent entre les 2 mesures de $A([{}^3P_2])$. A partir des valeurs des constantes $A([{}^1D_2])$ et $A({}^3P_1)$ la structure de la raie $\sigma = 5\,807 \text{ cm}^{-1}$ correspondant à la transition $[{}^1D_2] \rightarrow {}^3P_1$, dont

l'intensité était un peu faible pour permettre un dépouillement sur ordinateur, peut être calculée et comparée à la structure expérimentale. On remarque que si l'on n'avait observé qu'une seule structure, on aurait pu déterminer en valeur absolue deux constantes d'interaction A et A' mais sans pouvoir les attribuer chacune à un niveau.

La transition $5p^4[{}^3P_0] \rightarrow 5p^4[{}^3P_2]$ observée à $4\,706.495\text{ cm}^{-1}$ avec l'isotope de masse 130, est due au rayonnement quadrupolaire électrique pur. Avec l'isotope impair de masse 125, on observe une structure hyperfine qui se réduit à 2 composantes dues au dédoublement du niveau fondamental $5p^4[{}^3P_2]$, $F = \frac{5}{2}$ et $F = \frac{3}{2}$. Le niveau supérieur reste simple : $5p^4[{}^3P_0]$, $F = \frac{1}{2}$. Le rapport signal sur bruit de cette structure est faible ; dix interférogrammes de cette région spectrale ont été enregistrés dans des conditions identiques. La moyenne des 10 spectres obtenus a été calculée et le tracé du spectre moyen est montré sur la figure X. L'interprétation de cette structure y est indiquée par le schéma. Du point de vue des intensités des composantes de structure hyperfine, l'application de la formule (1) permet de déterminer leur rapport ; en supposant que le rayonnement émis est de type quadrupolaire électrique pur on obtient la valeur $\frac{2}{3}$ pour le rapport : $I(\frac{1}{2} \rightarrow \frac{3}{2}) : I(\frac{1}{2} \rightarrow \frac{5}{2})$. Expérimentalement on obtient 0.75 ± 0.1 . On peut se demander si, à cause de la proximité des niveaux 3P_1 et 3P_0 , il n'existe pas un mélange des états hyperfins pour $F = \frac{1}{2}$, auquel cas, la transition $5p^4[{}^3P_0], F = \frac{1}{2} \rightarrow 5p^4[{}^3P_2], F = \frac{3}{2}$, pourrait être partiellement dipolaire magnétique. Dans une telle hypothèse, il est à prévoir que la composante $\frac{1}{2} \rightarrow \frac{3}{2}$ observée serait exaltée, puisqu'elle est seule présente en rayonnement dipolaire magnétique. Tel est bien l'effet qui semble apparaître, mais la valeur expérimentale du rapport est ici trop imprécise pour pouvoir aller plus loin.

VI. Etude paramétrique de structure hyperfine.

VI.1 Considérations théoriques générales.

a) Traitement classique.

Le hamiltonien non relativiste décrivant l'interaction entre le moment dipolaire magnétique du noyau et le champ magnétique produit par les électrons s'écrit :

$$H_{\mu} = \frac{2\beta \beta_N \mu_N}{I} \left[\sum_i \frac{\vec{N}_i \cdot \vec{I}}{r_i^3} + \frac{8\pi}{3} \sum_i \delta(\vec{r}_i) \vec{s}_i \cdot \vec{I} \right]$$

où $\vec{N}_i = \vec{\ell}_i - \sqrt{10} \left\{ s^{(1)} C^{(2)} \right\}_i^{(1)}$

$\vec{\ell}_i$ et $\vec{s}_i \equiv s^{(1)}$ sont respectivement les moments orbital et de spin pour l'électron i . $C^{(2)}$ est le tenseur de rang 2 défini par

$$C_q^{(2)} = \sqrt{\frac{4\pi}{5}} Y_q^{(2)}(\theta, \varphi) .$$

L'interaction entre les électrons et le noyau, en ce qui concerne le moment quadrupolaire électrique nucléaire, s'écrit :

$$H_Q = \frac{-e^2 Q}{I(2I-1)} \sum_i (C_i^{(2)} \cdot K^{(2)}) .$$

Les opérateurs nucléaires sont $\vec{I} \equiv I^{(1)}$, vecteur de spin, et

$$K^{(2)} = \sqrt{\frac{3}{2}} \left\{ I^{(1)} I^{(1)} \right\}^{(2)},$$
 tenseur sphérique de rang 2.

Pour la configuration $5s^2 5p^4$ le 2ème terme de H_{μ} , ou terme de contact de Fermi, n'intervient pas. Donc un seul paramètre devrait suffire pour interpréter la structure hyperfine magnétique de cette configuration.

b) Effets relativistes

Pour le tellure et l'iode dont les numéros atomiques sont respectivement 52 et 53 les effets relativistes doivent être pris en considération.

Pour en tenir compte, P. G. H. SANDARS et J. BECK [17] ont montré qu'on pouvait utiliser un opérateur effectif H_{μ}^{eff} , dont les éléments de matrice entre états non relativistes sont égaux par définition aux éléments de matrice du hamiltonien relativiste entre états relativistes.

$$\text{C'est-à-dire, } H_{\mu}^{\text{eff}} = (I^{(1)} \cdot X^{(1)})$$

$$\text{où } X^{(1)} = \sum_{n\ell} a_s(n\ell) s^{(1)} + a_{\ell}(n\ell) \ell^{(1)} + a_{sC}(n\ell) \cdot \{s^{(1)} C^{(2)}\}^{(1)}$$

L'étude de la structure hyperfine dipolaire magnétique, pour tenir compte des effets relativistes nécessite donc 3 paramètres radiaux $a_s(n\ell)$, $a_{\ell}(n\ell)$ et $a_{sC}(n\ell)$ pour les configurations p^N .

Pour la partie quadrupolaire électrique, le hamiltonien effectif utilisé pour tenir compte des effets relativistes s'écrit :

$$H_Q^{\text{eff}} = (Y^{(2)} \cdot K^{(2)})$$

$$\text{où } Y^{(2)} = b(11) w^{(11)2} + b(13) w^{(13)2} + b(02) w^{(02)} .$$

$$\text{Avec } W^{(\kappa k)K} = \sum_{i=1}^n w_i^{(\kappa k)K} ; \text{ les } w^{(\kappa k)K} \text{ sont les opérateurs couplés}$$

tels que $w^{(\kappa k)K} = \left\{ \begin{matrix} \kappa & k \\ t & v \end{matrix} \right\} (K)$ où $t^{(\kappa)}$ agit sur le spin et $v^{(k)}$ sur la partie orbitale.

Les 2 premiers termes de $Y^{(2)}$ sont purement relativistes et tendent vers zéro dans l'approximation non relativiste, alors que le 3ème terme tend vers :

$$H_Q = \frac{-e^2 Q}{I(2I-1)} \sum_i \frac{1}{r_i^3} (C_i^{(2)} \cdot K^{(2)}) .$$

Pour les configurations p^n les éléments de matrice de $w^{(13)2}$ sont nuls, ce qui réduit à deux le nombre de paramètres radiaux nécessaires pour tenir compte des effets relativistes, soit $b_{5p}(02)$ et $b_{5p}(11)$.

c) Effet des interactions avec les configurations lointaines.

B. R. JUDD [18], à la suite des résultats de HARVEY [19], a montré que, pour rendre compte des effets d'interaction de configuration, on devait ajouter à la partie électronique du hamiltonien de structure hyperfine, un opérateur agissant sur les électrons des couches couvertes. Les configurations perturbatrices à considérer sont obtenues par l'excitation d'un seul électron.

Les excitations $s \rightarrow s'$ d'un électron s appartenant à une sous-couche fermée, vers une sous-couche ouverte, donnent lieu à l'effet de polarisation du coeur, et peuvent être prises en compte par l'introduction d'un même paramètre pour toute la configuration, $a_s(n\ell)$. Dans une étude paramétrique, ce paramètre tient compte à la fois de la polarisation du coeur et d'une partie des effets relativistes.

Pour les autres types d'excitation, les effets de l'interaction des configurations peuvent être reproduits en utilisant, à la place du paramètre radial $a_{n\ell} = 2\beta \beta_N \frac{\mu_N}{I} \langle r^{-3} \rangle$, 2 paramètres $a_\ell(n\ell)$ et $a_{sC}(n\ell)$ associés respectivement aux parties orbitale ($\vec{\ell}$) et de spin ($sC^{(2)}$) du hamiltonien de HFS magnétique. Toutefois pour les excitations de type $n\ell^N \rightarrow n\ell^{N-1}n'\ell$ (couche ouverte vers couche vide) ceci n'est vrai que pour un terme αSL donné de la configuration. On peut admettre que ces types d'excitation ont un effet qui est faible et, en première approximation, considérer que 2 paramètres suffisent pour tenir compte des effets de ces interactions de configurations, autres que l'effet de polarisation du coeur.

En résumé, avec trois paramètres on peut interpréter la structure hyperfine magnétique des configurations $5p^4$ de Te I et I II, en tenant compte à la fois des effets relativistes et, avec une bonne approximation, des effets d'interaction de configurations lointaines.

Pour la partie quadrupolaire électrique un seul paramètre est nécessaire pour tenir compte des effets d'interaction de configuration, $\frac{e^2 Q}{I(2I-1)} \langle r_q^{-3} \rangle$, où $\langle r_q^{-3} \rangle = (1+\Delta_q) \langle r^{-3} \rangle$. ; la valeur de ce paramètre est déterminée à la fois par les effets relativistes et les effets d'interaction de configurations de manière indiscernable. Par conséquent 2 paramètres $b_{5p}(02)$ et $b_{5p}(11)$ suffisent pour interpréter la structure hyperfine quadrupolaire électrique dans les configurations $5p^4$ de Te I et I II, ceci en tenant compte des effets relativistes et d'interaction de configuration.

VI.2 Interprétation paramétrique de HFS magnétique pour Te I et I II .

a) Te I

En utilisant le couplage intermédiaire défini au paragraphe IV, les coefficients angulaires ont été calculés et fournissent le système d'équations suivant :

$$A([{}^3P_2]) = 0.4625 a_s(5p) + 0.5375 a_l(5p) - 0.0192 a_{sc}(5p)$$

$$A({}^3P_1) = 0.5 a_s(5p) + 0.5 a_l(5p) - 0.5 a_{sc}(5p)$$

$$A([{}^1D_2]) = 0.0375 a_s(5p) + 0.9625 a_l(5p) + 0.1192 a_{sc}(5p)$$

Si l'on se place dans l'approximation non relativiste, et sans interaction de configuration, $A({}^3P_1)$ est identiquement nul, puisque $a_s(5p)$ est nul, et que $a_l(5p) \equiv a_{sc}(5p)$. Or dans Te I, $A({}^3P_1) = 26$ mK. Les effets relativistes, ou les interactions de configurations, ou les deux ensemble sont responsables de la non nullité de cette constante (Dans I II, $A({}^3P_1) = -20.1$ mK, cette remarque est encore vraie).

Les résultats de l'étude paramétrique sont portés dans les tableaux VI et VII. Nous disposons de 3 valeurs expérimentales $A({}^3P_1)$, $A([{}^3P_2])$

et $A([{}^1D_2])$, d'où un système de 3 équations à 3 inconnues qui ne permet pas de vérifier la cohérence de nos résultats expérimentaux. E. LUC-KOENIG [20] a calculé a priori les paramètres $a_s(5p)$, $a_\ell(5p)$ et $a_{sC}(5p)$ pour la configuration $5p^4$ de Te I à l'aide d'une méthode déjà décrite [21] et qui tient compte des effets relativistes.

Une étude paramétrique (Param 2), effectuée en fixant le rapport $\frac{a_{sC}(5p)}{a_\ell(5p)}$ à la valeur obtenue par le calcul a priori, fournit des écarts-types sur $a_s(5p)$ et $a_\ell(5p)$, et permet d'apprécier la cohérence de nos résultats.

On constate l'excellent accord entre les valeurs a priori et les valeurs expérimentales, en particulier pour les paramètres a_ℓ et a_{sC} , ce qui permet de conclure que les effets dûs aux interactions avec des configurations faisant intervenir des excitations autres que celles de type $s \rightarrow s'$ sont négligeables devant les effets relativistes. Par contre, la valeur a priori du paramètre $a_s(5p)$ est trop faible par rapport à la valeur expérimentale, ce qui conduit à penser que l'effet de polarisation du coeur a, lui, une importance non négligeable.

Un calcul Hartree-Fock, sans restriction sur le spin, (SUHF), effectué par J. BAUCHE [22] a permis d'estimer la contribution de polarisation du coeur au paramètre $a_s(5p)$. Cette contribution est égale à $+8.4 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$, ce qui confirme de manière tout-à-fait remarquable les résultats de l'étude paramétrique et des calculs relativistes a priori, puisque la somme des effets relativistes et de l'effet dû à la polarisation du coeur, donnent une valeur de $a_s(5p) = 17.5 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$ alors que l'étude paramétrique donne environ $23 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$. Une étude semblable effectuée dans Xe I, sur les configurations impaires par M. COULOMBE [23] donne des résultats tout-à-fait analogues, ce qui généralise notre conclusion en ce qui concerne la

contribution, d'une part, des effets relativistes, d'autre part, des effets d'interaction avec des configurations lointaines.

b) Iode.

En ce qui concerne la structure hyperfine de I II nous ne disposons que de 2 valeurs $A([{}^3P_2])$ et $A({}^3P_1)$. La méthode ne peut donc plus s'appliquer, et nous avons déterminé $a_s(5p)$ et $a_\ell(5p)$ en fixant le rapport $\frac{a_{sc}(5p)}{a_\ell(5p)}$ à une valeur obtenue par le calcul a priori effectué par E. LUC-KOENIG dans la configuration $5p^5$ du spectre d'arc de l'iode [2].

Les valeurs expérimentales des paramètres pour I I et I II sont rapportées dans le tableau VI et comparées aux valeurs a priori. Les remarques faites au sujet du tellure sont encore valables pour l'iode. Les effets relativistes et la polarisation du coeur sont importants et permettent d'interpréter la structure hyperfine magnétique. On constate, par ailleurs, l'augmentation en valeur absolue des paramètres $a_\ell(5p)$ et $a_{sc}(5p)$ quand on passe du spectre d'arc au spectre d'étincelle de l'iode.

La valeur de la constante $A([{}^1D_2])$ obtenue à l'aide des valeurs expérimentales des paramètres, 87 mK, est en assez bon accord avec l'estimation a priori de MARTIN et CORLISS [7], 78 mK.

VI.3 Interprétation de la structure hyperfine quadrupolaire électrique de I II.

Avec le couplage intermédiaire donné au chapitre IV, le système d'équations pour la structure hyperfine quadrupolaire électrique est le suivant :

$$B([{}^3P_2]) = 4.0881 b_{5p}(02) - 3.9485 b_{5p}(11)$$

$$B({}^3P_1) = -2.8868 b_{5p}(02) - 4.0825 b_{5p}(11)$$

$$B([{}^1D_2]) = -9.8614 b_{5p}(02) - 4.2167 b_{5p}(11)$$

Le rapport $\frac{B([{}^3P_2])}{B({}^3P_1)}$ est égal expérimentalement à -1.50 alors que sa valeur théorique en couplage L-S est -2, et en couplage intermédiaire -1.42 si l'on néglige $b_{5p}(11)$.

La résolution du système de 2 équations correspondant à $[{}^3P_2]$ et 3P_1 donne $b_{5p}(02) = -8.22$ mK et $b_{5p}(11) = 0.40$ mK. Ceci permet d'estimer $B([{}^1D_2])$ à 79.4 mK.

Cette valeur est en assez bon accord avec la valeur de MARTIN et CORLISS [7], à condition d'effectuer la correspondance indiquée au chapitre V et telle que $B'([{}^1D_2]) = 42$ mK, donne $B([{}^1D_2]) = 67.1$ mK.

Conclusion

L'observation des raies infrarouges de types dipolaire magnétique et quadrupolaire électrique correspondant aux transitions entre les niveaux des configurations $5p^4$ de I II et Te I a été possible grâce à la méthode de spectrométrie par transformation de Fourier. Les énergies des niveaux $[^3P_0]$ de Te I et 3P_1 de I II ont ainsi pu être déterminées avec précision.

L'étude de l'effet Zeeman des raies de Te I a permis, d'une part, de remesurer les facteurs de Landé des niveaux 3P_1 , 3P_2 et 1D_2 et, d'autre part, d'observer sur la raie $^1D_2 \rightarrow ^3P_2$ l'effet d'interférence entre les types de rayonnement dipolaire magnétique et quadrupolaire électrique de façon particulièrement évidente. Ceci ouvre des perspectives intéressantes, en ce qui concerne la détermination précise des rapports des probabilités de transition des deux types de rayonnement, c'est-à-dire

de la valeur de l'intégrale $s_q = \frac{2}{5} \int_0^\infty r^2 P^2(5p) dr$.

Les valeurs précises des constantes de structures hyperfines ont conduit à des valeurs des paramètres $a_s(5p)$, $a_\ell(5p)$ et $a_{sC}(5p)$. La comparaison de ces valeurs à des valeurs calculées a priori, qui ne tiennent compte que des effets relativistes permet de conclure à l'importance prépondérante de ces effets et de la polarisation du coeur.

Références

- [1] MROZOWSKI, S., Rev. Mod. Phys., 16, 153 (1944).
- [2] LUC-KOENIG, E., MORILLON, C. et VERGÈS, J., Physica, 70, 175 (1973)
- [3] CONDON, E. U., SHORTLEY, G. H., The Theory of Atomic Spectra,
Cambridge at the University Press.
- [4] GARSTANG, R. H., J. Research NBS, 68A, 61 (1964).
- [5] CONNES, J., DELOUIS, H., CONNES, P., GUELACHVILI, G., MAILLARD, J.-P.
et MICHEL, G., Nouv. Rev. Opt. Appl. I, 1 (1970).
- [6] MORILLON, C. et VERGÈS, J., Physica Scripta, à paraître.
- [7] MARTIN, W. C. et CORLISS, C. H., J. Research NBS, 64A, 443 (1960).
- [8] ERIKSSON, K. B. S., Phys. Lett., 44A, 73 (1973).
- [9] HELDT, J., J. Opt. Soc. Am., 57, 865 (1967).
- [10] Voir par exemple : SHORTLEY, G. H., ALLER, L. H., BAKER, J. C.,
MENZEL, D. H., Astrophys. J., 93, 178 (1941).
- [11] JENKINS, F. A., MROZOWSKI, S., Phys. Rev., 60, 225 (1941).
- [12] HULTS, M. E., J. Opt. Soc. Am., 56, 1298 (1966).
- [13] GRUZDEV, P. F., Optics and Spectroscopy, 27, 479 (1969).
- [14] TREES, R. E., Phys. Rev., 83, 1089 (1951).
- [15] ROBAUX, O., Thèse, Orsay, 1971.
- [16] SOBEL'MAN, I. I., An Introduction to the Theory of Atomic Spectra,
p. 211, at the Pergamon Press.
- [17] SANDARS, P. G. H. et BECK, J., Proc. Roy. Soc., A289, 97 (1965).
- [18] JUDD, B. R., La Structure Hyperfine des Atomes et des Molécules,
Editions du C. N. R. S., n° 164, Paris, 1967.
- [19] HARVEY, J. S. M., Proc. Roy. Soc. (London), A285, 581 (1965).
- [20] LUC-KOENIG, E., Communication personnelle.

- [21] KOENIG, E., *Physica*, 62, 393 (1972).
- [22] BAUCHE, J., Communication personnelle .
- [23] COULOMBE, M., à paraître dans *J. Phys.* (Paris).

COMPLEMENT NON PUBLIE.

Calcul de l'effet "d'interférence" et mesure du rapport entre les probabilités de transition dipolaire magnétique et quadrupolaire électrique.

I. RAPPELS THEORIQUES.

(Voir par exemple SHORE et MENZEL, Principles of Atomic Spectra, WILEY, 1968 et cours S. FENEUILLE interne Lab. Aimé Cotton).

La probabilité pour qu'un photon soit émis spontanément dans une direction caractérisée par le vecteur d'onde \vec{k} et avec la polarisation $\vec{\epsilon}$ par unité de temps et d'angle solide peut s'écrire :

$$w_{i \rightarrow f} = \frac{e^2}{m^2 c^3 \hbar} \cdot \frac{\omega}{2\pi} \left| \langle \Psi_f | T(\vec{k}, \vec{\epsilon}) | \Psi_i \rangle \right|^2$$

$T(\vec{k}, \vec{\epsilon})$ est un opérateur qui, à l'approximation des grandes longueurs d'onde ($k \cdot r \ll 1$), donne :

au 1er ordre : $e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}} = 1$ (émission dipolaire électrique)

$$T^{D.E.} = \sum_{j=1}^N T_j^{D.E.} = \sum_{j=1}^N \vec{p}_j \cdot \vec{\epsilon}$$

pour un atome contenant N électrons optiques,

$$\text{d'où : } w_{i \rightarrow f} = \frac{4\pi^2 v^3}{3hc^3} |\langle \Psi_f | \vec{D} \cdot \vec{\epsilon} | \Psi_i \rangle|^2$$

$$\text{avec } \vec{D} = e \sum_j \vec{r}_j$$

au 2ème ordre : (émission dipolaire magnétique et quadrupolaire électrique).

$$T_2 = T^{\text{D.M.}} + T^{\text{Q.E.}} = \sum_{j=1}^N i \frac{\hbar}{2} [(\vec{l}_j + 2\vec{s}_j) \cdot (\vec{k} \times \vec{\epsilon}) + \pi v m (\vec{\epsilon} \cdot \vec{r}_j) \cdot (\vec{k} \cdot \vec{r}_j)] ,$$

le 1er terme $T^{\text{D.M.}}$ correspond à l'émission dipolaire magnétique, le second $T^{\text{Q.E.}}$ à l'émission quadrupolaire électrique.

L'intensité d'une composante Zeeman correspondant à une transition $i \rightarrow f$ est proportionnelle à $|\langle \Psi_j | T^{\text{D.M.}} + T^{\text{Q.E.}} | \Psi_i \rangle|^2$ que nous nous proposons de calculer, en se limitant au cas de l'observation transversale.

Soit un trièdre trirectangle : $\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z$;

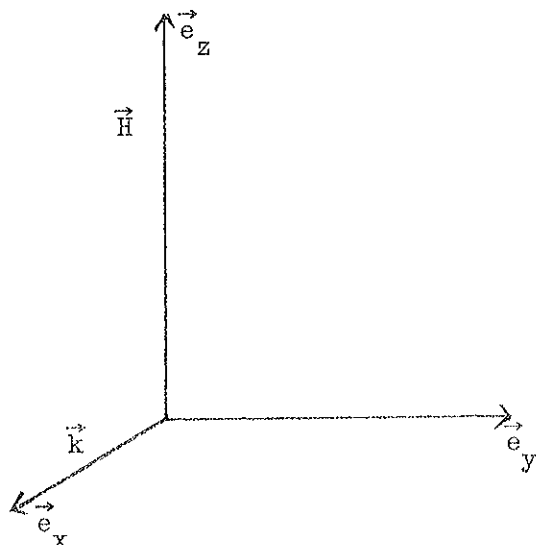
le champ magnétique externe $\vec{H} = H \cdot \vec{e}_z$

le vecteur d'onde $\vec{k} = k \cdot \vec{e}_x$

et la polarisation $\vec{\epsilon} = \epsilon_1 \cdot \vec{e}_z + \epsilon_2 \cdot \vec{e}_y$

avec a) $\vec{\epsilon} \perp \vec{H}$: polarisation perpendiculaire au champ magnétique si $\epsilon_1 = 1$ et $\epsilon_2 = 0$ (composantes π),

b) $\vec{\epsilon} \parallel \vec{H}$: polarisation parallèle au champ si $\epsilon_1 = 0$ et $\epsilon_2 = 1$ (composantes σ).



On utilisera les vecteurs unitaires sphériques tels que

$$\vec{e}_{+1} = -\frac{1}{\sqrt{2}} (\vec{e}_x + i \vec{e}_y)$$

$$\vec{e}_0 = \vec{e}_z$$

$$\vec{e}_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\vec{e}_x - i \vec{e}_y)$$

A l'aide de ces définitions on montre que :

$$\vec{k} \times \vec{\epsilon} = -\frac{i}{\sqrt{2}} k \epsilon_1 (\vec{e}_{+1} + \vec{e}_{-1}) + \epsilon_2 k \vec{e}_0$$

$$\text{d'où } T^{\text{D.M.}} = i \frac{\hbar k}{2} (\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot (\vec{k} \times \vec{\epsilon})$$

$$= \epsilon_1 \frac{\hbar k}{2\sqrt{2}} [M_{+1}^{(1)} + M_{-1}^{(1)}] + i \epsilon_2 \frac{\hbar k}{2} M_0^{(1)}$$

en posant $M^{(1)} \equiv \vec{M} = \vec{L} + 2\vec{S}$ tenseur de rang 1 et dont $M_q^{(1)}$ est une composante.

De même, pour la partie quadrupolaire électrique on montre que :

$$(\vec{\epsilon} \cdot \vec{r}_j) (\vec{k} \cdot \vec{r}_j) = \epsilon_1 \frac{k}{\sqrt{6}} r_j^2 [C_{-1}^{(2)} - C_{+1}^{(2)}] + i \epsilon_2 \frac{k}{\sqrt{6}} r_j^2 [C_{-2}^{(2)} - C_{+2}^{(2)}]$$

en utilisant les tenseurs sphériques de Racah $(C_m^{(l)}) = \sqrt{\frac{2\pi}{2l+1}} \cdot Y_{lm}$

$$r^{(1)} = r C^{(1)}$$

$$\text{et } \begin{cases} r_{\pm 1}^{(1)} r_{\pm 1}^{(1)} = \sqrt{\frac{2}{3}} r^2 C_{\pm 2}^{(2)} \\ r_0^{(1)} r_{\pm 1}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{3}} r^2 C_{\pm 1}^{(2)} \\ r_0^{(1)} r_0^{(1)} + r_{+1}^{(1)} r_{-1}^{(1)} = r^2 C_0^{(2)} \end{cases}$$

$$\begin{aligned}
\text{d'où } T^{Q.E.} &= \pi v m \sum_{j=1}^N (\vec{\epsilon} \cdot \vec{r}_j) (\vec{k} \cdot \vec{r}_j) \\
&= \pi \frac{v m k}{\sqrt{6}} \sum_j \left[\epsilon_1 r_j^2 (c_{-1}^{(2)}(j) - c_{+1}^{(2)}(j)) \right. \\
&\quad \left. + i \epsilon_2 r_j^2 (c_{-2}^{(2)}(j) - c_{+2}^{(2)}(j)) \right]
\end{aligned}$$

L'élément de matrice de $(T^{D.M.} + T^{Q.E.})$ élevé au carré fait apparaître un terme rectangle, "le terme d'interférence".

II. STRUCTURE ZEEMAN DE RAIES MULTIPOLAIRES (D.M. + Q.E.)

EN OBSERVATION TRANSVERSALE.

1) Rayonnement dipolaire magnétique seul :

a) Composantes π : $\epsilon_1 = 1$ et $\epsilon_2 = 0$

$$I_{\pi}^{D.M.} (M \rightarrow M \pm 1) \propto \frac{\hbar^2 k^2}{8} \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & \pm 1 & M \mp 1 \end{pmatrix}^2 |\langle \gamma J \| M^{(1)} \| \gamma' J' \rangle|^2$$

règles de sélection : $\Delta J = 0, \pm 1$ ($0 \not\leftrightarrow 0$) ; $\Delta M = \pm 1$

b) Composantes σ : $\epsilon_1 = 0$ et $\epsilon_2 = 1$

$$I_{\sigma}^{D.M.} (M \rightarrow M) \propto \frac{\hbar^2 k^2}{4} \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & 0 & M \end{pmatrix}^2 |\langle \gamma J \| M^{(1)} \| \gamma' J' \rangle|^2$$

règles de sélection : $\Delta J = 0, \pm 1$ ($0 \not\leftrightarrow 0$) $\Delta M = 0$ ($0 \not\leftrightarrow 0$ si $\Delta J=0$)

2) Rayonnement quadrupolaire électrique seul :a) Composantes π :

$$I_{\pi}^{Q.E.} (M, M \pm 1) \propto \frac{\pi^2 v^2 m^2 k^2}{6} \begin{pmatrix} J & 2 & J' \\ -M & \pm 1 & M \mp 1 \end{pmatrix}^2 |\langle \gamma J \| C^{(2)} \| \gamma' J' \rangle|^2 \left[\int_0^{\infty} R_{\gamma}(r) R_{\gamma'}(r) r^2 dr \right]^2$$

règles de sélection : $\Delta J = 0, \pm 1, \pm 2$ ($0 \not\leftrightarrow 0, \frac{1}{2} \not\leftrightarrow \frac{1}{2}, 1 \not\leftrightarrow 1$)

b) Composantes σ :

$$I_{\sigma}^{Q.E.} (M \rightarrow M \pm 2) \propto \frac{\pi^2 v^2 m^2 k^2}{6} \begin{pmatrix} J & 2 & J' \\ -M & \pm 2 & M \mp 2 \end{pmatrix}^2 |\langle \gamma J \| C^{(2)} \| \gamma' J' \rangle|^2 \left[\int_0^{\infty} R_{\gamma}(r) R_{\gamma'}(r) r^2 dr \right]^2$$

règles de sélection : $\Delta J = 0, \pm 1, \pm 2$ ($0 \not\leftrightarrow 0, \frac{1}{2} \not\leftrightarrow \frac{1}{2}, 1 \not\leftrightarrow 1$)

$$\Delta M = \pm 2$$

Remarque : En observation transversale on n'observe pas les composantes correspondant aux transitions $\Delta M = 0$.

3) Terme d'interférence dans le cas du rayonnement mixte :

a) Composantes π : Il faut ajouter à $I_{\pi}^{D.M.} + I_{\pi}^{Q.E.}$

$$I_{\pi}^{int} \propto \frac{\pi v m \hbar k^2}{2 \sqrt{12}} \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & \pm 1 & M \mp 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J & 2 & J' \\ -M & \pm 1 & M \mp 1 \end{pmatrix} |\langle \gamma J \| M^{(1)} \| \gamma' J' \rangle| \times \langle \gamma J \| C^{(2)} \| \gamma' J' \rangle \int_0^{\infty} R_{\gamma}(r) R_{\gamma'}(r) r^2 dr$$

règles de sélection : $\Delta J = 0, \pm 1$ et $\Delta M = \pm 1$

b) Composantes σ : Le terme d'interférence est nul. Comme on n'observe pas les transitions $\Delta M = 0$ en observation transversale pour le rayonnement Q.E., ces transitions donnent lieu à l'émission d'un rayonnement dipolaire magnétique pur.

III. PROBABILITE TOTALE D'EMISSION SPONTANEE.

Si nous considérons une vapeur contenant $N(i)$ atomes excités ($i \equiv \gamma J M$) par unité de volume, le taux d'émission spontanée par unité de temps et de volume est :

$$N(i) \cdot w(i \rightarrow f) \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1} \quad (f \equiv \gamma' J' M')$$

d'où une puissance : $\pi \omega_{if} N(\gamma J M) \cdot w(\gamma J M \rightarrow \gamma' J' M')$.

En l'absence de champ magnétique la puissance totale émise d'obtient en sommant sur toutes les composantes, sur les 2 polarisations et sur tout l'espace.

On obtient alors une puissance totale : $\pi \omega_{if} N(\gamma J) \cdot W(\gamma J \rightarrow \gamma' J')$

où $W(\gamma J \rightarrow \gamma' J')$ est la probabilité totale d'émission spontanée.

1) Dipolaire magnétique seul :

$$W^{D.M.}(\gamma J \rightarrow \gamma' J') = \frac{4}{3} \frac{k^3}{\pi} \cdot \frac{1}{2J+1} |\langle \gamma J || \beta \cdot M^{(1)} || \gamma' J' \rangle|^2 \quad \text{avec} \quad \beta = \frac{e\hbar}{2mc}$$

2) Quadrupolaire électrique seul :

$$W^{Q.E.}(\gamma J \rightarrow \gamma' J') = \frac{1}{15} \frac{k^5}{\pi} \frac{1}{2J+1} |\langle \gamma J || e^2 r^2 C^{(2)} || \gamma' J' \rangle|^2 \quad .$$

On peut donc relier la probabilité de transition entre sous états Zeeman $w(\gamma J M \rightarrow \gamma' J' M')$ aux probabilités de transition entre niveaux $W(\gamma J \rightarrow \gamma' J')$, ce qui s'écrit pour les composantes π ($\Delta M \pm 1$)

$$w(\gamma J M \rightarrow \gamma' J' M \pm 1) = \frac{3}{16\pi} W^{D.M.}(\gamma J \rightarrow \gamma' J') \times (2J+1) \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & \pm 1 & M \mp 1 \end{pmatrix}^2$$

$$+ \frac{15}{48\pi} W^{Q.E.}(\gamma J \rightarrow \gamma' J') \times (2J+1) \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & \pm 1 & M \mp 1 \end{pmatrix}^2$$

$$\mp \sqrt{\frac{3}{16\pi} \times \frac{15}{48\pi}} \sqrt{W^{D.M.} \cdot W^{Q.E.}} \times (2J+1) \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & \pm 1 & M \mp 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J & 2 & J' \\ -M & \pm 1 & M \mp 1 \end{pmatrix}$$

Du point de vue des intensités, si l'on admet que les sous-niveaux

Zeeman sont également peuplés, et en posant $\rho^2 = \frac{W^{Q.E.}(\gamma J \rightarrow \gamma' J')}{W^{D.M.}(\gamma J \rightarrow \gamma' J')}$,

on obtient un système d'équations :

$$I^\pi(\gamma J M \rightarrow \gamma' J' M \pm 1) = K \left[\begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & \pm 1 & M \mp 1 \end{pmatrix}^2 + \frac{5}{3} \rho^2 \begin{pmatrix} J & 2 & J' \\ -M & \pm 1 & M \mp 1 \end{pmatrix}^2 \right]$$

$$\mp \rho \sqrt{\frac{5}{3}} \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & \pm 1 & M \mp 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J & 2 & J' \\ -M & \pm 1 & M \mp 1 \end{pmatrix}$$

où K est un facteur de proportionnalité qui dépend des unités, et qui contient des valeurs numériques.

Sur la figure II (*), qui représente la structure Zeeman de la transition $5p^4 [^1D_2] \rightarrow 5p^4 [^3P_2]$ de Te I, les intensités relatives des composantes σ ($\Delta M=0$) purement dipolaire magnétique, ainsi que la symétrie de la structure (si l'on tient compte d'une légère variation du zéro, et au bruit près), permettent de penser que les états du niveau $5p^4 [^1D_2]$ sont également peuplés. Les intensités des

composantes π ne peuvent donc pas s'expliquer par des populations différentes des sous-niveaux Zeeman. Les mesures d'intensité effectuées sur les 8 composantes $\Delta M = \pm 1$ de la figure II fournissent un système de 8 équations à 2 inconnues, K et ρ . La méthode des moindres carrés appliquée à ce système donne :

$$\rho^2 = \frac{A_{Q.E.}}{A_{D.M.}} = (7.5 \pm 2) \times 10^{-2} .$$

Les estimations théoriques de GARSTANG [4] (*) fournissent :

$$\frac{A_{Q.E.}}{A_{D.M.}} = \frac{0.077}{3.3} = 2.3 \times 10^{-2} .$$

L'écart quadratique moyen entre les intensités expérimentales et calculées à l'aide de la valeur optimisée du rapport $\frac{A_{Q.E.}}{A_{D.M.}}$ est de 1.7 alors que la valeur quadratique moyenne des intensités expérimentales est de 22.6 (unités de mesure arbitraires).

Le rapport signal sur bruit de la structure Zeeman de cette raie $[^1D_2] \rightarrow [^3P_2]$ de Te I devrait être amélioré dans des observations prochaines. Des modifications des interféromètres (mise sous vide) n'ont pas permis de les faire avant la présentation de cet exposé.

Quoi qu'il en soit, on peut espérer gagner un facteur 10 sur la précision de la mesure du rapport $\frac{A_{Q.E.}}{A_{D.M.}}$, ce qui donnera une valeur expérimentale précise de l'intégrale radiale

$$s_q = \frac{2}{5} \int_0^\infty R_\gamma(r) R_{\gamma'}(r) r^2 dr .$$

(*) Voir figure et référence de l'article III-5 (P4) .

Te I

¹²⁷I II

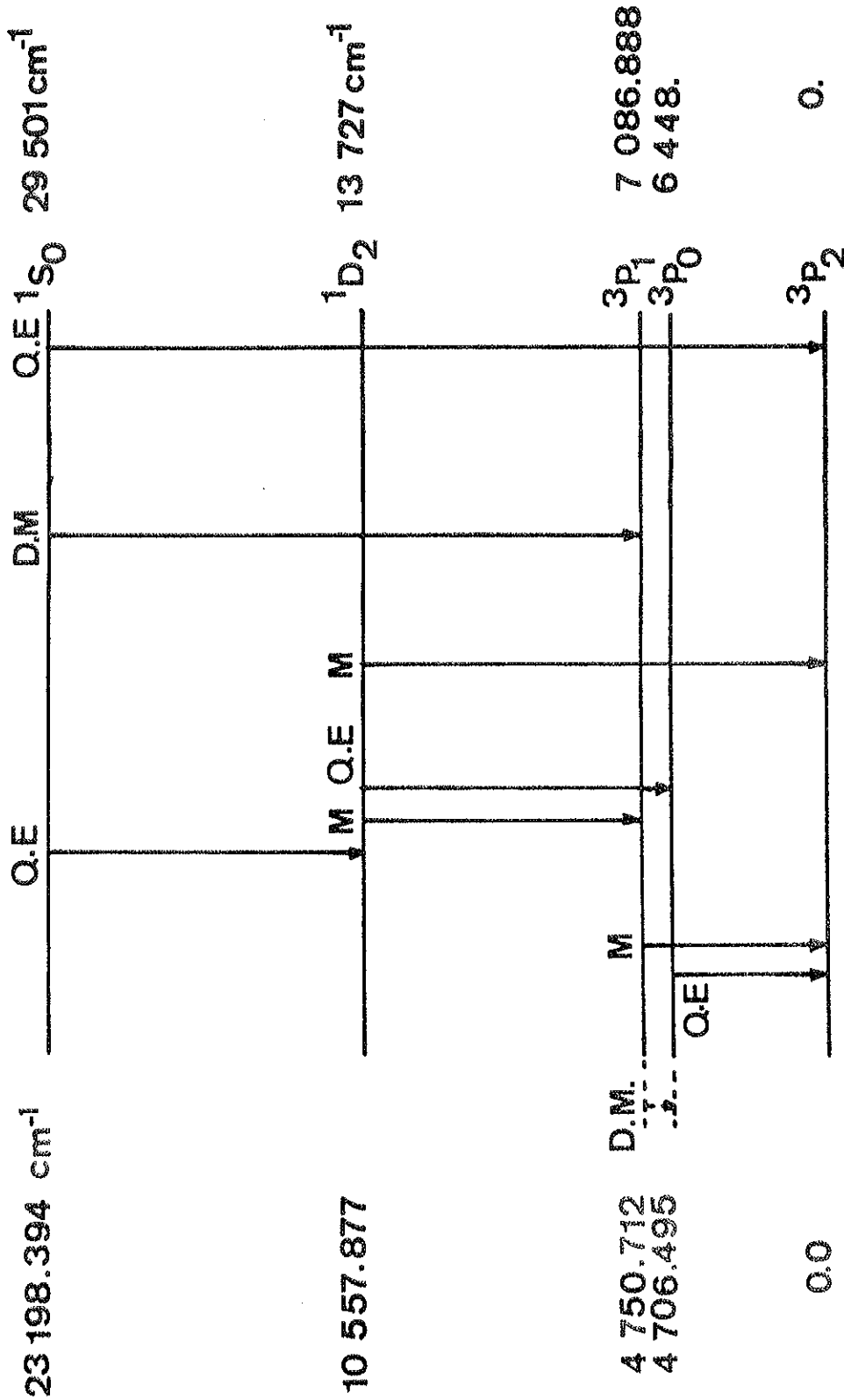


Figure I : Niveaux de la configuration 5s⁵p⁴ de Te I et I II (échelle non respectée). Les flèches indiquent les transitions observables. La nature du rayonnement est indiquée : D.M. = dipolaire magnétique pur, Q.E. = quadrupolaire électrique pur, M. = mixte.

$\Delta M=0$

$5p^4 1D_2 \rightarrow 5p^4 3P_2$
 $g(1D_2) = 1.037 \pm 0.003$
 $g(3P_2) = 1.460 \pm 0.004$

$^{130}\text{Te I}$

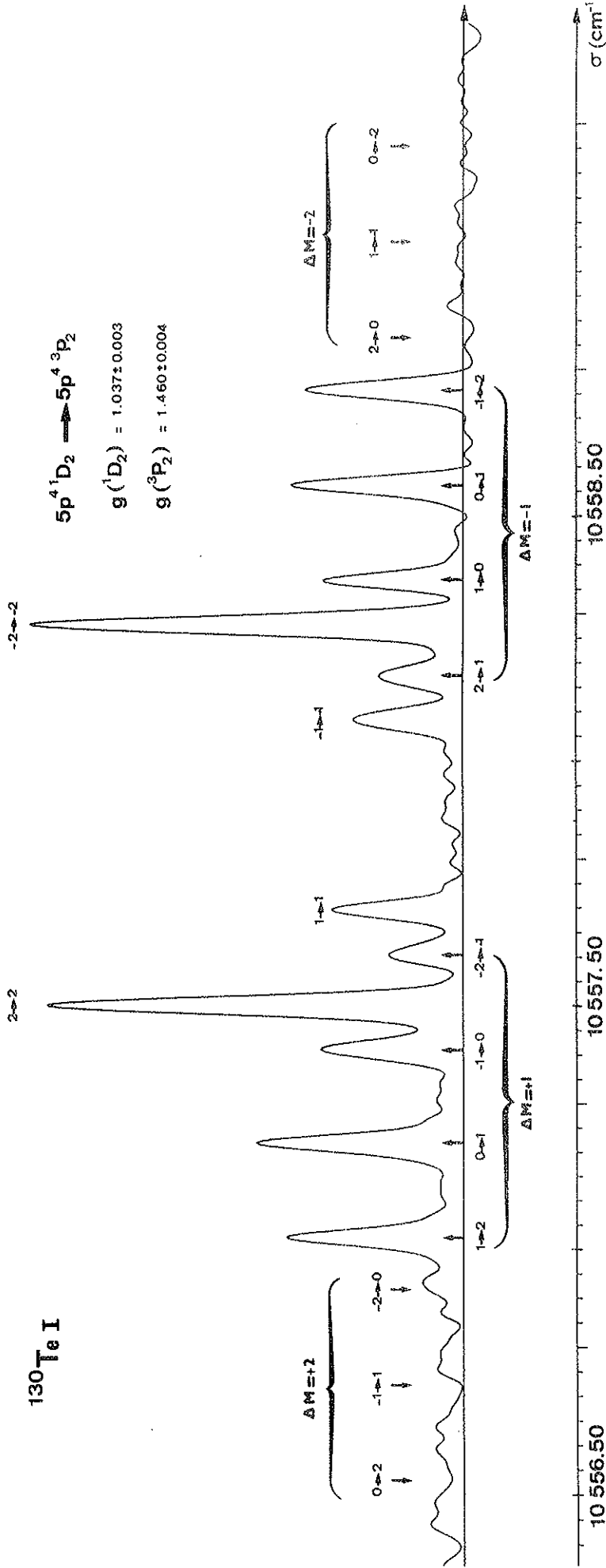


Figure II : Structure Zeeman de la raie $5p^4 [1D_2] \rightarrow 5p^4 [3P_2]$ en observation transversale avec un champ $H = 9\,895$ Oersteds. Les composantes σ , $\Delta M=0$ sont purement dipolaires magnétiques. Les composantes σ , $\Delta M=\pm 2$ pour le rayonnement quadrupolaire électrique, ne sont pas observées. Le phénomène d'interférence entre les 2 types de rayonnement (D.M.+ Q.E.) est observable directement sur les composantes π ($\Delta M=\pm 1$).

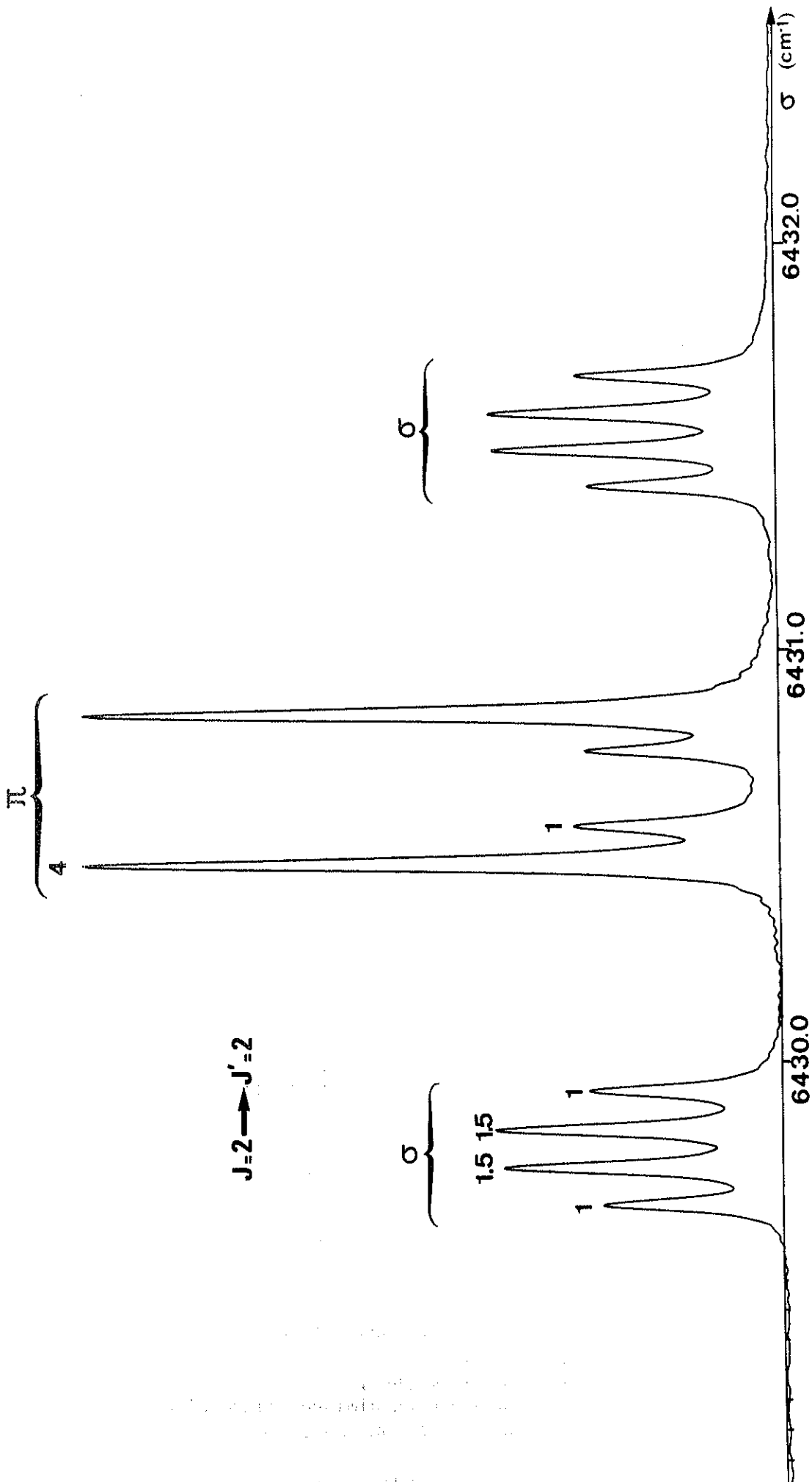


Figure III : Te I . Structure Zeeman de la raie $\sigma = 6430.669 \text{ cm}^{-1}$ dont la classification est $60\ 629 (7s\ ^5S_2) - 54\ 199 (6p\ ^5P_2)$, $\Delta J=0$, et observée simultanément avec la raie $5p^4 [^1D_2] \rightarrow 5p^4 [^3P_2]$. Les intensités des composantes sont ici très voisines des intensités théoriques pour le rayonnement dipolaire (voir diagramme figure IV-a).

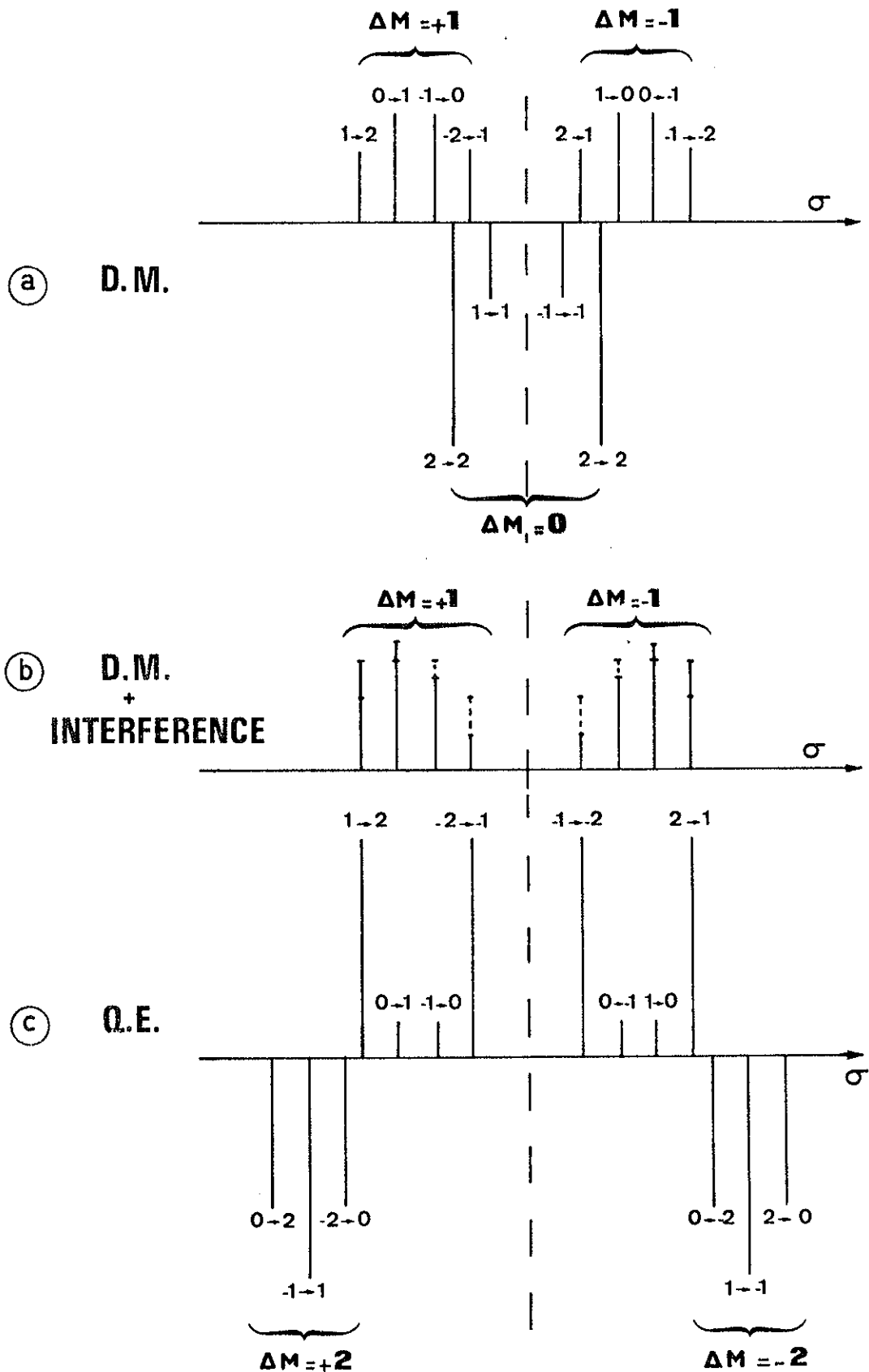


Figure IV : Structures Zeeman théoriques pour une transition $J=2 \rightarrow J'=2$ en observation transversale :

- a) rayonnement dipolaire magnétique pur ;
- b) le terme d'interférence augmente ou diminue l'intensité des composantes π d'une quantité Δ ou 2Δ . Les composantes $\sigma(\Delta M=0)$ ne sont pas modifiées ;
- c) rayonnement quadrupolaire électrique pur (les proportions ne sont pas respectées entre les rayonnements Q. E. et D. M.).

TeI π Xeπ

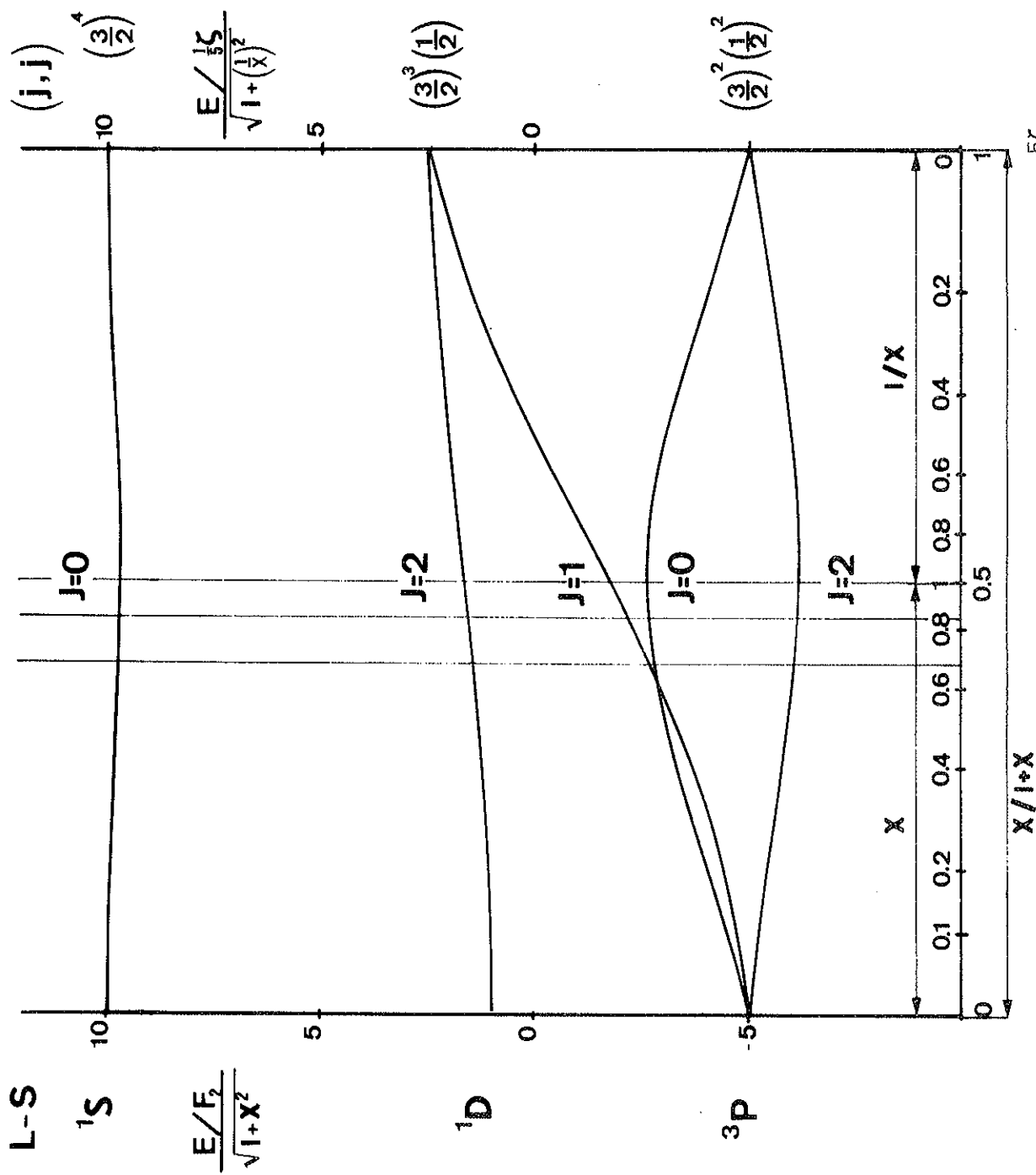


Figure V : Diagramme d'énergie des niveaux de la configuration p^4 en fonction de $x = \frac{5\zeta_5}{F^2(5p, 5p)}$ [3, p. 301]

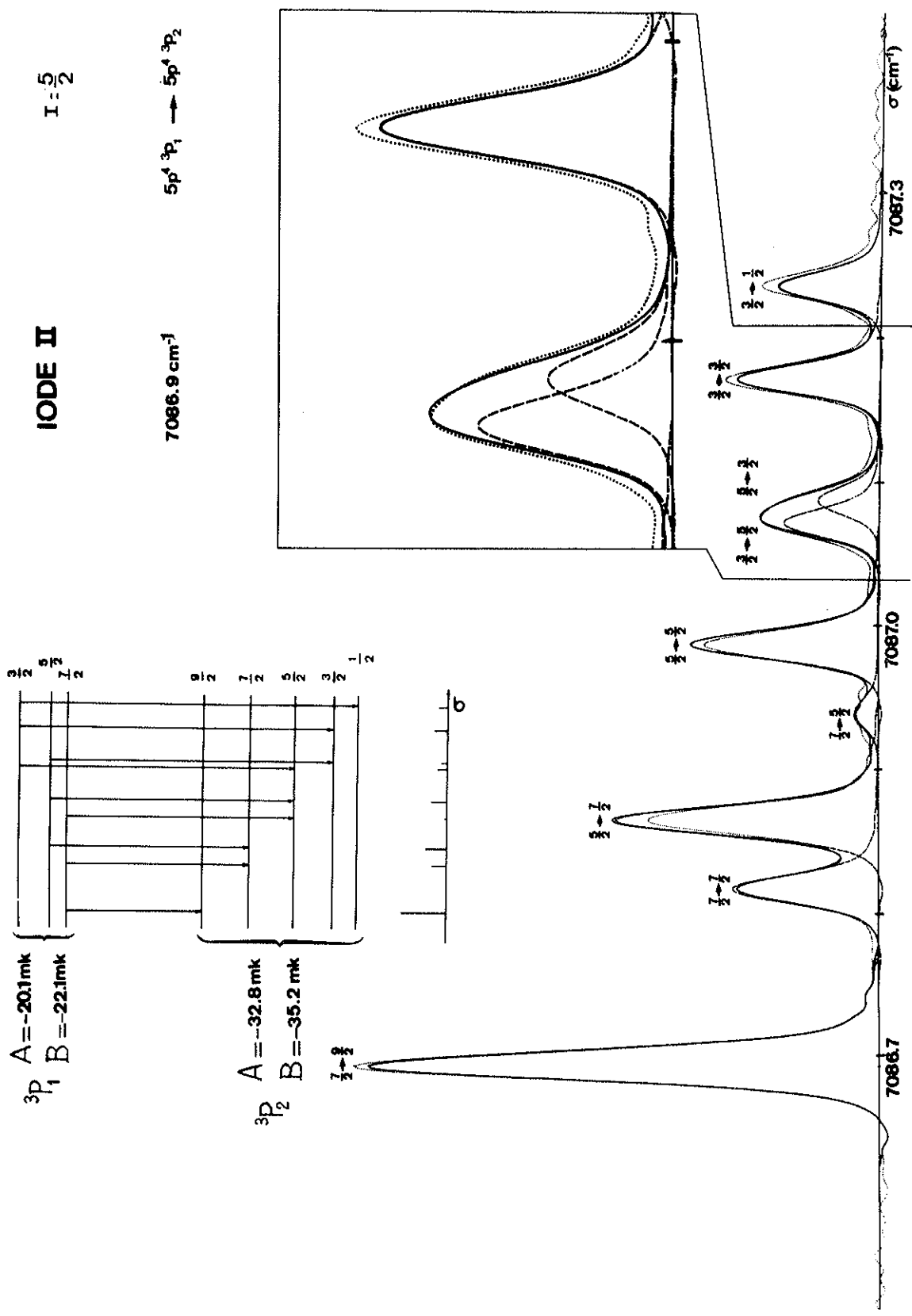


Figure VI : Structure hyperfine de la raie $5p^4 \ ^3P_1 \rightarrow 5p^4 \ [{}^3P_2]$ de I II .

La structure expérimentale est dessinée avec une ligne pointillée. Chaque composante est dessinée avec une ligne tiretée et la structure calculée avec une ligne continue.

$^{125}_{52}\text{Te I}$

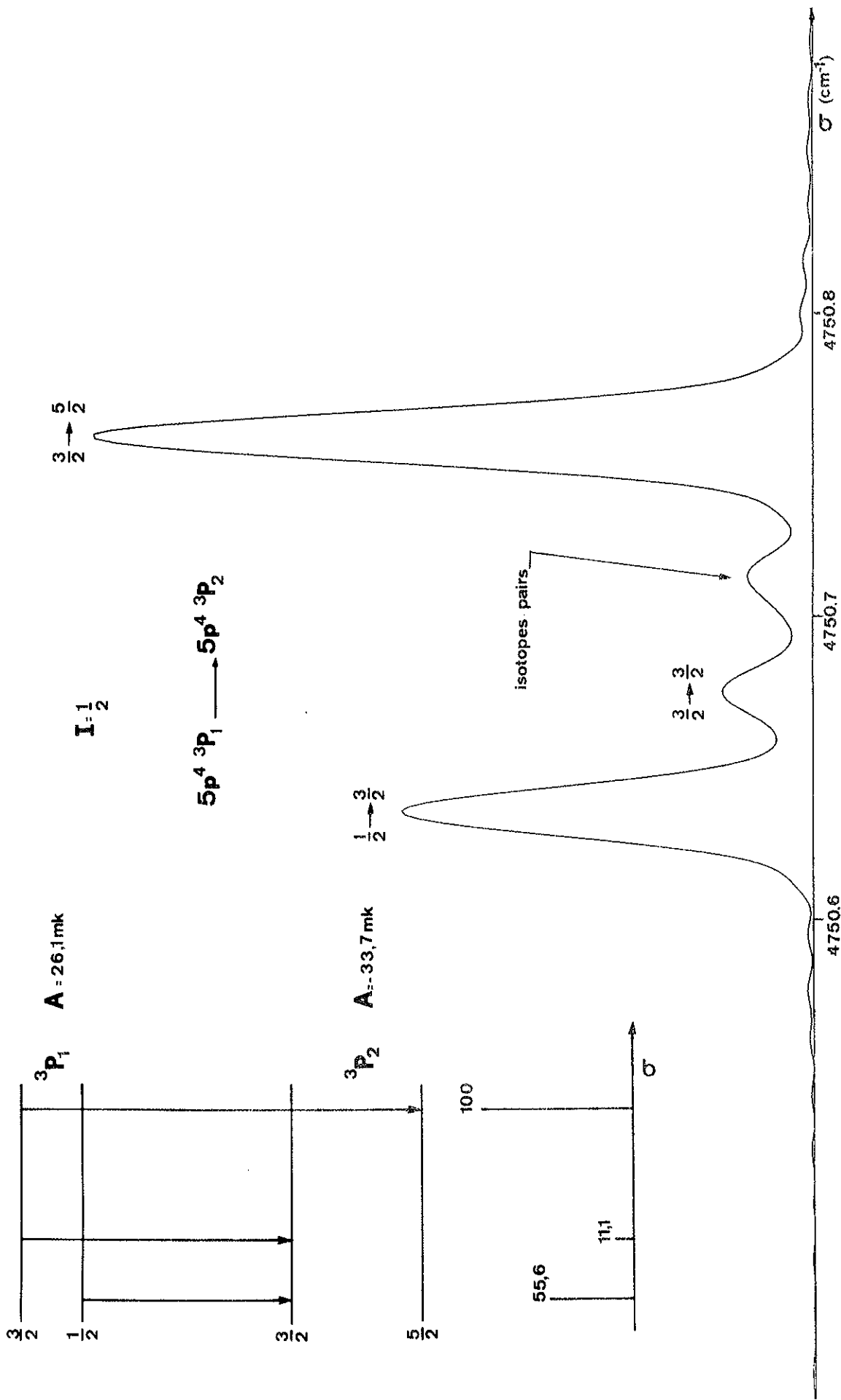


Figure VII : Structure hyperfine de la raie $5p^4 \text{ } ^3P_1 \rightarrow 5p^4 \text{ } [^3P_2]$, à $\sigma = 4\,750,712 \text{ cm}^{-1}$ dans $^{125}\text{Te I}$, de spin nucléaire $I = \frac{1}{2}$.

$^{125}_{52}\text{Te}$ I

$I = \frac{1}{2}$

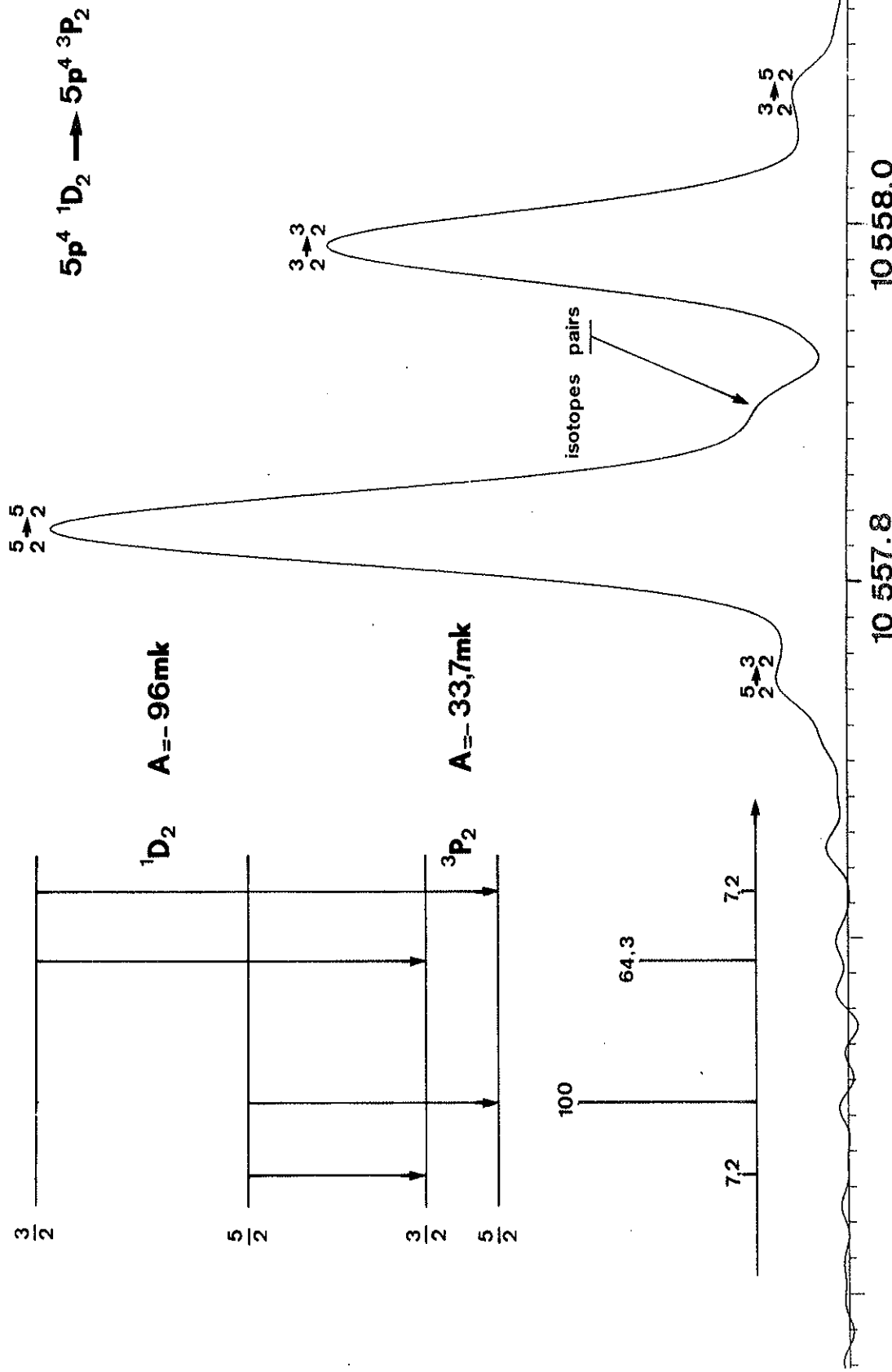


Figure VIII : Structure hyperfine de la raie $5p^4 \ [^1D_2] \rightarrow 5p^4 \ [^3P_2]$, à $\sigma = 10557.912 \text{ cm}^{-1}$ dans ^{125}Te I, de spin nucléaire $I = \frac{1}{2}$.

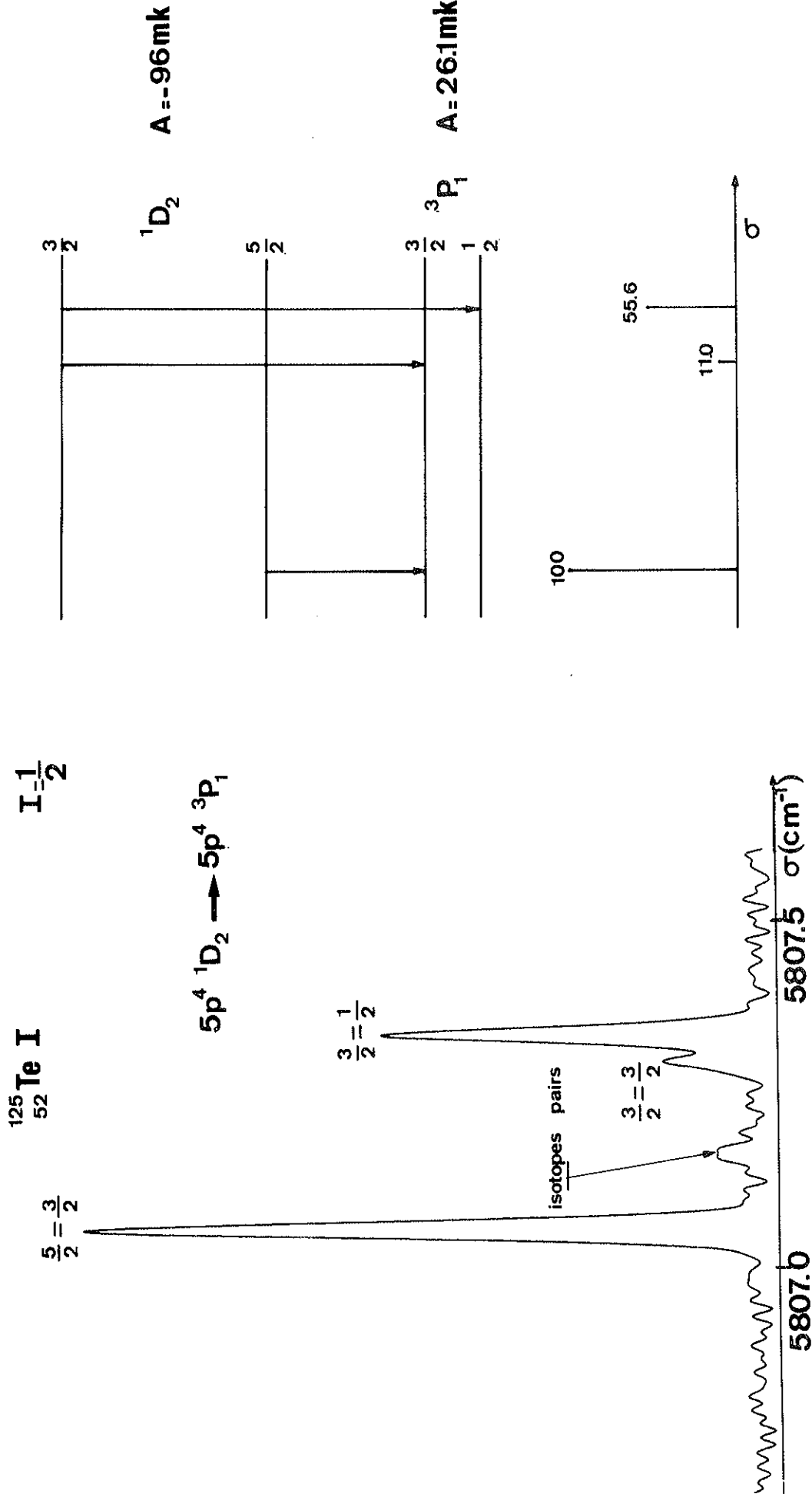


Figure IX : Structure hyperfine de la raie $5p^4 \ [^1D_2] \rightarrow 5p^4 \ ^3P_1$, à $^{125}\text{Te I}$, de spin nucléaire $I = \frac{1}{2}$.

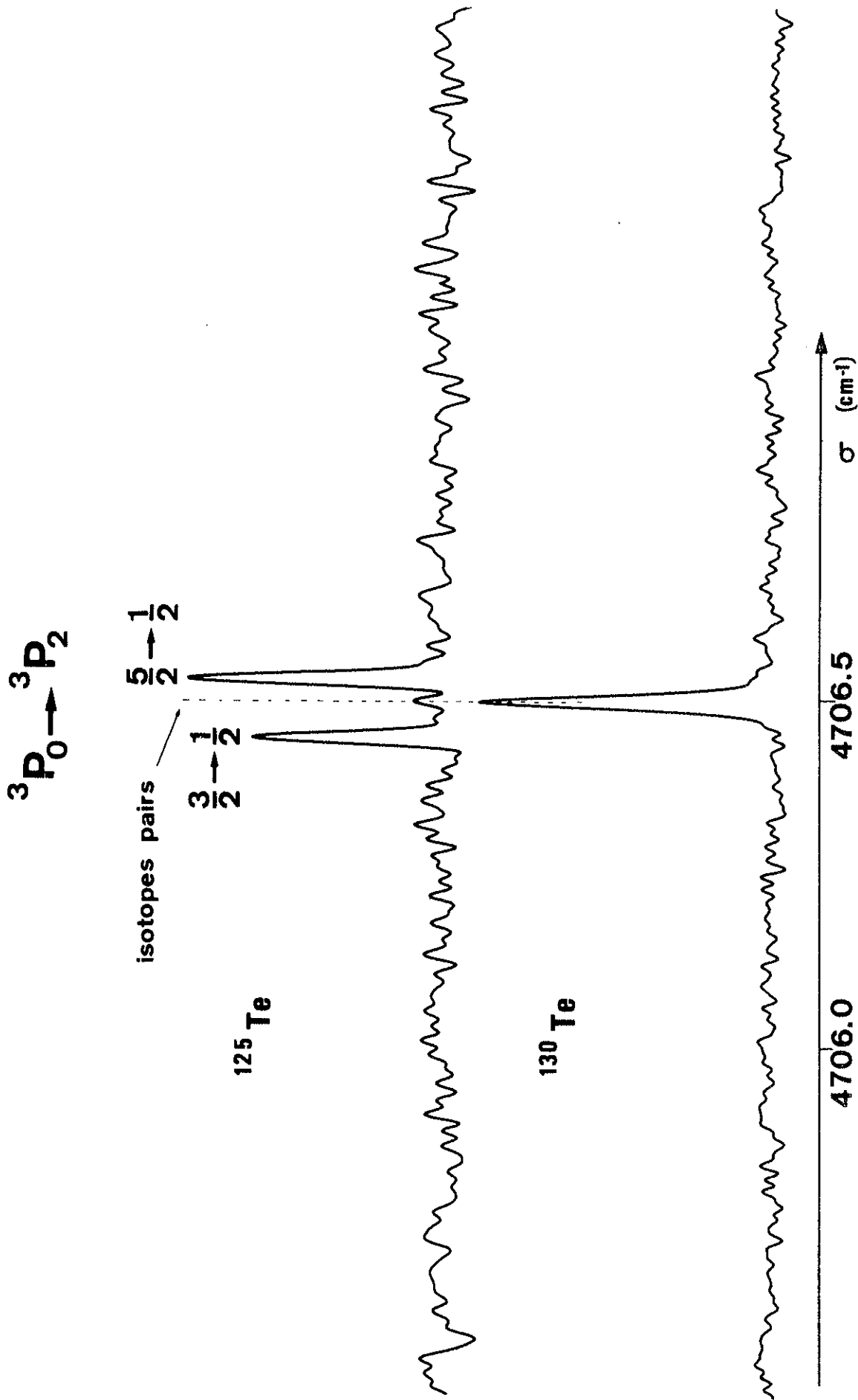


Figure X : Structure hyperfine de la raie quadrupolaire électrique pure $5p^4 [{}^3P_0] \rightarrow 5p^4 [{}^3P_2]$,
à $\sigma = 4\,706.495 \text{ cm}^{-1}$ dans ${}^{125}\text{Te I}$ dont le spin nucléaire I est égal à $\frac{1}{2}$.

Tableau I : Transitions dipolaires magnétiques et quadrupolaires électriques observées entre les niveaux de la configuration fondamentale $5p^4$ dans Te I et I II .

Probabilités de transitions dipolaires magnétiques (A_M) et quadrupolaires électriques (A_Q) d'après GARSTANG [4] .

H.F.S. : pour structure hyperfine. Z.E. : pour effet Zeeman.

	I II			Te I			Nature du Rayonnement		
	σ_V (cm^{-1})	OBS. Réf.	A_M (s^{-1})	A_Q (s^{-1})	σ_V (cm^{-1})	OBS. Réf.		A_M (s^{-1})	A_Q (s^{-1})
$[^1S_0]-[^1D_2]$	15 774		0	5.5	12 640.513	[8] [9] Z.E.	0	3.1	Q. E. pur
$[^1S_0]-^3P_1$	22 414.3	[7] Z.E.	84	0	18 447.683	[8] [9] Z.E.	37	0	D. M. pur
$[^1S_0]-[^3P_0]$			0	0			0	0	interdit
$[^1S_0]-[^3P_2]$	29 501.		0	1.6	23 198.394	[8] [9] Z.E.	0	0.79	Q. E. pur
$[^1D_2]-^3P_1$	6 640.		0.36	8.6×10^{-4}	5 807.169 (11)	* H F S	0.20	6.0×10^{-4}	Mixte
$[^1D_2]-[^3P_0]$	7 279.		0	0.0012	5 851.4		0	4.7×10^{-4}	Q. E. pur
$[^1D_2]-[^3P_2]$	13 727.14	[7] HFS Z. E.	8.8	0.21	10 557.879 .877 (12)	[8] * Z.E.+HFS	3.3	0.077	Mixte
$^3P_1-[^3P_0]$	639.		0.004	0	44.10		1.4×10^{-6}	0	D. M. pur
$^3P_1-[^3P_2]$	7 086.888	* HFS	7.2	0.020	4 750.709 (1023)	* Z.E.+HFS	2.2	0.0044	Mixte
$[^3P_0]-[^3P_2]$	6 448.		0	0.022	4 706.495 (=2)	* HFS	0	0.0073	Q. E. pur

* : raie observée par les auteurs.

Tableau II : Niveaux d'énergie de la configuration $5p^4$ dans Te I et couplage intermédiaire.
 Les valeurs expérimentales et calculées de l'énergie et des facteurs de Landé sont indiquées ainsi que la composition (LS) de chaque état (on donne le signe et le carré du coefficient).

Energie Expérimentale (cm^{-1})	Energie Calculée (cm^{-1})	ΔE	ξ_{exp}^*	ξ_{exp} AXENSTEN	ξ_{exp} HELDT	ξ_{calc}	Composition L-S (%)
J=0							
4 706.495	4 791.6	-85.1	-	-	-	-	$5p^4 \ ^3P_0$ (-89.7) ; $5p^4 \ ^1S_0$ (10.3)
(23 198.392)	23 193.6	4.8	-	-	-	-	$5p^4 \ ^1S_0$ (89.7) ; $5p^4 \ ^3P_0$ (10.3)
J=1							
4 750.712 (.709)	4 707.8	42.9	1.514 ± 0.010	-	1.495	1.500	$5p^4 \ ^3P_1$ (100.)
J=2							
0.000	-41.0	+41.0	1.460 ± 0.004	1.4618	1.472	1.462	$5p^4 \ ^3P_2$ (92.5) ; $5p^4 \ ^1D_2$ (7.5)
10 557.877 (.879)	10 561.0	-3.1	1.037 ± 0.003	-	1.040	1.038	$5p^4 \ ^1D_2$ (92.5) ; $5p^4 \ ^3P_2$ (-7.5)

Paramètres

$$E(^1S) = 21\,301.3 \text{ cm}^{-1}$$

$$E(^3P) = 2\,731.6 \text{ cm}^{-1}$$

$$E(^1D) = 9\,764.5 \text{ cm}^{-1}$$

$$\zeta_{5p} = 3\,952.3 \text{ cm}^{-1}$$

$$\Delta E = \left[\frac{\sum (E_c - E_0)^2}{N - P} \right]^{\frac{1}{2}} = 103. \text{ cm}^{-1}$$

Tableau III : Niveaux d'énergie de la configuration $5p^4$ dans I II et couplage intermédiaire.
 Les valeurs expérimentales et calculées de l'énergie et des facteurs de Landé sont indiqués, ainsi que la composition en fonction de la base (LS) de chaque état (on donne le signe et le carré du coefficient).

Energie Expérimentale (cm^{-1})	Energie Calculée (cm^{-1})	ΔE	g_{exp} [7]	g_{calc}	Δg	Composition L-S (%)
J=0						
6 447.9 [7]	6 534.7	- 86.8	-	-	-	$5p^4 \ ^3P_0$ (-85.12) ; $5p^4 \ ^1S_0$ (14.88)
29 501.3 [7]	29 488.1	13.2	-	-	-	$5p^4 \ ^1S_0$ (85.12) ; $5p^4 \ ^3P_0$ (14.88)
J=1						
7 086.888 *	7 062.2	+ 24.7	1.51	1.500	0.01	$5p^4 \ ^3P_1$ (100.)
J=2						
0.0	- 54.65	+ 54.7	1.457	1.451	0.006	$5p^4 \ ^3P_2$ (90.28) ; $5p^4 \ ^1D_2$ (9.72)
13 727.2	13 733.2	- 6.0	1.046	1.049	-0.003	$5p^4 \ ^1D_2$ (90.28) ; $5p^4 \ ^3P_2$ (-9.72)

$$E(^1S) = 26\ 072\ \text{cm}^{-1}$$

$$E(^3P) = 4\ 173.6\ \text{cm}^{-1}$$

$$E(^1D) = 12\ 328.3\ \text{cm}^{-1}$$

$$\zeta_{5p} = 5\ 776\ \text{cm}^{-1}$$

$$\Delta E = \left(\frac{\Sigma(E_{\text{exp}} - E_{\text{cal}})^2}{N - P} \right)^{\frac{1}{2}} = 106\ \text{cm}^{-1}$$

Tableau IV

Ecartis entre sous-niveaux hyperfins et constantes d'interaction pour les niveaux $5p^4 \ ^3P_1$ et $5p^4 \ [^3P_2]$ de $^{127}\text{I II}$ de spin nucléaire $I = 5/2$.

3P_1	$F = 7/2 - F = 5/2 = -0.0471 \text{ cm}^{-1}$
	$F = 5/2 - F = 3/2 = -0.0834 \text{ cm}^{-1}$
	$A(^3P_1) = -20.1 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$
	$B(^3P_1) = 22.1 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$
$[^3P_2]$	$F = 9/2 - F = 7/2 = 0.1238 \text{ cm}^{-1}$
	$F = 7/2 - F = 5/2 = 0.1210 \text{ cm}^{-1}$
	$F = 5/2 - F = 3/2 = 0.0996 \text{ cm}^{-1}$
	$F = 3/2 - F = 1/2 = 0.0650 \text{ cm}^{-1}$
	$A([^3P_2]) = 32.8 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1} (33. \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1} [7])$
	$B([^3P_2]) = -35.2 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1} \left(\begin{array}{l} B' = -0.17 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1} [7] \\ B = -27.2 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1} \end{array} \right)$

TABEAU V : Ecartes entre sous-niveaux hyperfins et constantes d'interaction des niveaux $[^3P_2]$, 3P_1 et $[^1D_2]$ de la configuration fondamentale $5p^4$ de ^{125}Te I dont le spin nucléaire I est égal à $1/2$.

		$^3P_1 \rightarrow [^3P_2]$	$[^3P_0] \rightarrow [^3P_2]$	$[^1D_2] \rightarrow [^3P_2]$	$[^1D_2] \rightarrow [^3P_2]$	$[^1D_2] \rightarrow ^3P_1$	Moyenne
$[^3P_2]$	$F = \frac{5}{2} - F = \frac{3}{2}$	- 0.08397			- 0.08336		- 0.0837 (3)
	$A([^3P_2])$	- 0.03359			- 0.03334		- 0.0335 (3)
3P_1	$F = \frac{3}{2} - F = \frac{1}{2}$	0.03933					
	$A(^3P_1)$	0.02622					
$[^1D_2]$	$F = \frac{5}{2} - F = \frac{3}{2}$				- 0.24065		
	$A([^1D_2])$				- 0.09626		

Tableau VI : Etude paramétrique de structure hyperfine pour la configuration $5p^4$ de ^{125}Te I et ^{127}I II . Les valeurs des paramètres radiaux sont comparées à celles obtenues précédemment pour ^{127}I I [2] (grandeurs exprimées en 10^{-3}cm^{-1}). Param.:étude paramétrique.- A.P.:calcul relativiste a priori [20] [21] .- SUHF : polarisation du coeur [22] .

	Te I			SUHF [22]	A.P.[20]	I II Param.	I I $5p^5$	
	Param. 1	Param. 2	Param. 2				A.P.[20]	Param. [2]
$a_s(5p)$	22.9	25.0 (1.2)	8.4	9.1	-13.85	-8.39	-17.685	
$a_\ell(5p)$	-86.6	-87.3 (0.7)		-86.4	77.91	69.99	68.58	
$a_{sc}(5p)$	-115.8	-113.5		-112.4	104.26	93.66	91.77	
$a_{sc}(5p)/a_\ell(5p)$	1.335	1.300 (Fixé)		1.300	1.338 (Fixé)	1.338	1.338 (Fixé)	

Tableau VII : Constantes de structure hyperfine magnétique. Valeurs expérimentales, valeurs calculées à l'aide des paramètres a_s , a_ℓ et a_{sc} donnés au tableau VI; valeurs estimées par MARTIN et CORLISS [7] dans le cas de I II .

	Te I			I II		
	Param. 1	Param. 2	exp.	Param.	Martin et Corliss [7]	exp.
$A(^3P_1)$	26.10	25.62	26.10	-20.10		-20.10
$A(^3P_2)$	-33.70	-33.15	-33.70	32.80	33.	32.80
$A(^1D_2)$	-96.30	-96.62	-96.30	87.57	78.	

III - 6

ARTICLE n°5

Etude expérimentale et théorique de l'Iode atomique :

Observation du spectre d'arc infrarouge,
classification et structure hyperfine.

LUC-KOENIG, E., MORILLON, C. et VERGES, J.

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

Résumé :

Etude expérimentale et théorique de l'Iode atomique : observation du spectre d'arc infrarouge, classification et structure hyperfine.

LUC-KOENIG, E., MORILLON, C. et VERGES, J. (Laboratoire Aimé Cotton, C.N.R.S. II, Bât. 505, 91405 - ORSAY, FRANCE). Physica Scripta.

Le spectre infrarouge de l'isotope naturel de l'iode, de nombre de masse 127 et de spin nucléaire $I=5/2$, a été observé à haute résolution entre 3 000 et 11 500 cm^{-1} en utilisant la méthode de spectrométrie par transformation de Fourier. 440 structures ont été observées. La mesure précise des nombres d'ondes des centres de gravité de ces structures a permis de déterminer l'énergie des niveaux avec une marge d'erreur

inférieure à 0.005 cm^{-1} . 130 structures hyperfines ont été analysées, permettant de déterminer les constantes de structure hyperfine dipolaire magnétique et quadrupolaire électrique de 37 niveaux pairs et de 42 niveaux impairs. Le couplage intermédiaire et le mélange des configurations ont été étudiés pour les configurations paires $5s^2 5p^4 (6s+7s+5d+6d) + 5s5p^6$, et pour les configurations impaires $5s^2 5p^4 (6p+7p)$ d'une part, et $5s^2 5p^4 4f$ d'autre part. A l'aide des fonctions d'onde obtenues, les études paramétriques de structure hyperfine magnétique et électrique ont été effectuées, permettant de déterminer les constantes de structure hyperfine monoélectroniques $a(nl)$ et $b(nl)$. Une étude a priori de la structure hyperfine utilisant la méthode du potentiel central relativiste a permis de mettre en évidence la contribution importante des effets relativistes, et fait penser que les effets perturbateurs dus aux configurations lointaines sont négligeables dans les configurations excitées qui ont été étudiées.

Summary :

Experimental and theoretical studies in atomic Iodine : Infrared arc spectrum observations, classification and hyperfine structure.

LUC-KOENIG, E., MORILLON, C. and VERGES, J. (Laboratoire Aimé Cotton, C.N.R.S. II, Bât. 505, 91405 - ORSAY, FRANCE). Physica Scripta.

The infrared spectrum of ^{127}I , nuclear spin $I=5/2$, has been observed between 3 000 and 11 500 cm^{-1} at high resolution by means of the Fourier transform spectrometry method. We have observed 440 structures. Precise measurements of the centre of gravity of these structures give energy levels with an error less than 0.005 cm^{-1} . We have analyzed 130 hyperfine structures, giving the magnetic dipole and the electric quadrupole hyperfine structure constants for 37 even levels and 42 odd levels. The intermediate coupling has been studied for the even configurations $5s^2 5p^4 (6s+7s+5d+6d) + 5s5p^6$ simultaneously, and for the odd configurations $5s^2 5p^4 (6p+7p)$ and $5s^2 5p^4 4f$. Using the wavefunctions obtained, hyperfine structure parametric studies have been performed, giving the H. F. S. monoelectronic constants $a(nl)$ et $b(nl)$. An a priori study of hyperfine structure, using the relativistic central potential method makes clear the important contribution of relativistic effects and leads one to think that far configurations interactions effects are negligible in the excited configurations which have been studied.

I - INTRODUCTION

Le spectre d'arc de l'iode a été essentiellement étudié par MINNHAGEN à partir des observations effectuées par différents auteurs [1]. La classification qu'il a proposée s'appuie sur des estimations théoriques de l'énergie des niveaux dans le couplage $|(5p^4)S_C L_C J_C, \ell \rangle K s J \rangle$ et permet d'interpréter la totalité des niveaux connus. Nous avons entrepris l'observation infrarouge du spectre d'arc de l'iode par la méthode de spectrométrie de Fourier à haute résolution dans le but d'étudier la structure hyperfine. A l'occasion de l'étude de la transition interdite $^2P_{1/2} \rightarrow ^2P_{3/2}$ de la configuration fondamentale $5s^2 5p^5$ nous avons pu constater que la plupart des structures de transitions "permises" (dipolaires électriques) présentaient une résolution suffisante permettant d'effectuer des mesures précises des constantes de structure hyperfine des niveaux. La partie expérimentale de notre travail a donc consisté à obtenir à haute résolution le spectre de l'iode entre 3 000 et 11 500 cm^{-1} et à en tirer le maximum d'informations concernant la structure hyperfine.

L'interprétation théorique des résultats de structure hyperfine qui nécessite la connaissance des fonctions d'onde a été précédée d'une étude particulièrement complexe du couplage intermédiaire et du mélange des configurations. Les résultats obtenus par MINNHAGEN nous ont beaucoup aidés dans ce travail.

II - METHODE ET RESULTATS EXPERIMENTAUX.

1) Les sources :

Les sources utilisées pour l'observation du spectre infrarouge de I_I ont déjà été décrites dans une publication consacrée à l'étude de la transition interdite $^2P_{1/2} \rightarrow ^2P_{3/2}$ de la configuration fondamentale $5s^2 5p^5$ [2]. La pression de vapeur dans ces lampes peut être maintenue à une valeur fixe, dans un domaine d'étendant de 10^{-2} à 10 torrs environ ; elle a été choisie de manière à exciter préférentiellement le spectre d'arc et à obtenir des raies d'émission aussi fines que possible. Le nombre de masse de l'isotope naturel de l'iode est relativement grand ($M=127$), et permet d'obtenir des largeurs Doppler faibles dans l'infrarouge. Pour des raies dont le nombre d'ondes est voisin de $6\ 000\ \text{cm}^{-1}$ ($\lambda \approx 1.7\mu$), et dans les conditions normales de fonctionnement de ces sources, la largeur Doppler peut être estimée à $10 \pm 2\ \text{mK}$ ($1\text{mK} = 10^{-3}\ \text{cm}^{-1}$). Dans ces lampes l'iode moléculaire n'est pas entièrement dissocié comme en témoigne l'émission d'un important spectre de bandes dans une partie du domaine visible et ultraviolet. Toutefois aucune bande moléculaire n'est observée dans la région infrarouge qui fait l'objet de cette étude, c'est-à-dire entre $3\ 000$ et $11\ 500\ \text{cm}^{-1}$. L'élargissement par collision de l'atome émetteur avec d'autres atomes ou molécules n'est pas important et peut être estimé à quelques mK, pour une pression de l'ordre de 1mm de Hg. Cette pression de fonctionnement est obtenue en maintenant une partie de l'enceinte contenant la vapeur d'iode à une température voisine de 25°C (point froid).

2) Spectrométrie par transformation de Fourier.

Cette technique d'observation des spectres a déjà été exposée [3] ; les interféromètres utilisés pour l'infrarouge entre 3 000 et 11 500 cm^{-1} ont été décrits et leurs performances largement discutées [4, 5] . Pour obtenir une limite de résolution instrumentale, ou largeur de la fonction d'appareil, de l'ordre de 6 ou 7 mK, il a été nécessaire de découper le domaine en 5 tranches spectrales isolées par filtres interférentiels. En effet, pour chaque échantillon le temps d'intégration du signal est de 35 ms ; le temps de déplacement du miroir mobile de l'interféromètre, puis de stabilisation de la différence de marche, de 20 ms . Pour un interférogramme de 500 000 échantillons, le temps d'enregistrement est de 10 heures environ. Pour chaque tranche un interférogramme a été enregistré avec les caractéristiques suivantes :

- entre 3 000 et 5 900 cm^{-1} , 550 000 échantillons pour une différence de marche maximale de 67.5 cm . La largeur de la fonction d'appareil non apodisée est alors de 7,4 mK ,
- entre 5 850 et 7 000 cm^{-1} , 280 000 échantillons, pour une différence de marche maximale de 77 cm, soit une largeur instrumentale de 6.5 mK,
- entre 6 850 et 7 950 cm^{-1} , 250 000 échantillons, pour une différence de marche maximale de 78 cm, soit une largeur instrumentale de 6.4 mK,
- entre 7 500 et 10 000 cm^{-1} , 400 000 échantillons, pour une différence de marche maximale de 79.8 cm, soit une largeur instrumentale de 6.25 mK,
- entre 8 500 et 11 500 cm^{-1} , 730 000 échantillons, pour une différence de marche maximale de 87 cm, soit une largeur instrumentale de 5.75 mK .

3) Résultats expérimentaux.

440 raies du spectre d'arc de l'iode ont pu être observées entre 3 050 et 11 490 cm^{-1} . Beaucoup de ces raies présentent une structure hyperfine s'étendant sur 0,1 à 0,5 cm^{-1} ; les figures 1, 2, 3, 4 en donnent quelques exemples. La largeur enregistrée d'une composante, pour une structure située vers 6 000 cm^{-1} , est de l'ordre de 15 mK.

Pour les structures hyperfines qui ont été analysées, le centre de gravité a été mesuré avec précision. Les nombres d'ondes déterminés de cette manière sont connus avec une incertitude de l'ordre de 1 mK. Diverses causes d'erreur instrumentales, déjà citées dans des travaux antérieurs [4, 5] doivent être prises en considération, de sorte que la marge d'erreur sur la mesure absolue du nombre d'ondes d'une raie peut être évaluée à 5 mK. Les nombres d'ondes des structures qui n'ont pas donné lieu à une analyse détaillée, sont donnés avec une incertitude variant entre 10 et 50 mK. Dans le Tableau I sont portés : le nombre d'ondes dans le vide du centre de gravité de la raie, la longueur d'onde dans l'air exprimée en Å° , et l'intensité ; celle-ci est donnée approximativement dans une échelle linéaire, telle que la plus faible intensité, $I=1$, (prise comme unité), corresponde à une raie dont le rapport signal sur bruit est compris entre 1 et 2. L'intensité maximale enregistrée dans le spectre est de 10 000 .

4) Niveaux d'énergie.

Les niveaux d'énergie déterminés par MINNHAGEN [1] permettent de classer la plupart des raies infrarouges observées. Grâce à la précision avec laquelle le centre de gravité de plusieurs structures a pu être mesuré, nous avons déterminé l'énergie des niveaux par rapport au niveau excité le plus bas, $5s^2 5p^4 ({}^3P_2) 6s [2] 5/2$, dont la hauteur par rapport au fondamental a été fixée à la valeur de $54\,633,460\text{ cm}^{-1}$ publiée par MINNHAGEN. Les autres énergies sont calculées de proche en proche. Les résultats sont donnés dans les Tableaux II et III ; l'incertitude sur l'énergie d'un niveau est de l'ordre de 5 mK. Nous avons gardé la notation de MINNHAGEN, qui correspond au couplage $J_c \ell$, $5p^4(S_c, L_c, J_c) n\ell [K] J$.

Les niveaux qui ont une énergie supérieure à $80\,000\text{ cm}^{-1}$ ne donnent généralement pas lieu à l'observation de raies infrarouges, aussi ne les avons-nous pas reportés dans ces tableaux.

Les écarts entre les valeurs des énergies données par MINNHAGEN et celles que nous proposons, sont généralement inférieurs à $0,1\text{ cm}^{-1}$. Seul le niveau $73\,477\text{ cm}^{-1}$ était entaché d'une erreur de $0,5\text{ cm}^{-1}$, ceci à cause de sa très grande structure hyperfine. Pour ce niveau la valeur du moment cinétique total est $J=1/2$ et les 2 sous-niveaux hyperfins $F=2$ et $F=3$ sont séparés de $0,9\text{ cm}^{-1}$ environ.

Les énergies de deux nouveaux niveaux pairs, de nombre quantique $J=1/2$, ont été déterminées à $75\,714\text{ cm}^{-1}$ et $79\,393\text{ cm}^{-1}$. Avec la notation adoptée par MINNHAGEN, nous proposons de les nommer respectivement $5s^2 5p^4 ({}^3P_2) 6d [0] 1/2$ et $5s^2 5p^4 ({}^3P_2) 7d [0] 1/2$.

5) Résultats expérimentaux de structure hyperfine.

Quelques études de la structure hyperfine du spectre d'arc de l'iode ont déjà été publiées ; leurs buts étaient d'une part d'aider à la classification, et d'autre part de déterminer le spin, puis les moments dipolaire magnétique, quadrupolaire électrique, et enfin octupolaire électrique du noyau ^{127}I [6, 7, 8, 9] .

Les mesures de structure hyperfine effectuées par MURAKAWA [9] pour aider à la classification ne sont pas très précises. Celles qui ont pour objet la détermination des moments nucléaires peuvent atteindre une bonne précision avec le spectromètre Fabry-Perot. JACCARINO et al. [8] ont étudié avec une précision tout à fait remarquable le niveau fondamental $^2\text{P}_{3/2}$; grâce à la méthode de résonance magnétique sur un jet atomique ils ont mis en évidence pour la première fois l'existence d'un moment octupolaire magnétique qu'ils ont mesuré.

Les observations infrarouges effectuées par la spectrométrie de Fourier, ont l'avantage de fournir des renseignements sur un grand nombre de structures, avec une résolution instrumentale comparable à celle qu'on peut obtenir raie par raie dans le visible avec le spectromètre Fabry-Perot et avec une meilleure résolution effective des composantes du fait de la diminution de l'élargissement Doppler.

Le noyau de l'iode naturel, de nombre de masse 127, a un spin $I=5/2$, un moment dipolaire magnétique $\mu = 2.808$ magnétons nucléaires, un moment quadrupolaire électrique $Q = -0.79$ barn et un moment octupolaire magnétique $\Omega = 0.18$ nm-barn (d'après les tables publiées par FULLER et COHEN [10]) .

La plupart des structures observées comportent un nombre important de composantes ; par exemple, pour une transition s'effectuant entre 2 niveaux de moment cinétique total $J=5/2$, il existe 15 composantes dont 14 ont des intensités non négligeables. Il est clair que dans la plupart des cas toutes les composantes ne sont pas résolues.

L'interprétation des structures est donc en général assez complexe. Pour déterminer avec précision les constantes de structure hyperfine des niveaux nous avons écrit un programme qui permet d'analyser la structure de la raie. La méthode, fondée sur des études effectuées par O. ROBAUX [11], a déjà été utilisée dans le cas d'enregistrements obtenus avec un spectromètre Fabry-Perot. Le principe consiste à reconstituer point par point la structure hyperfine d'une raie et à la comparer à la structure expérimentale échantillonnée, issue directement de la transformée de Fourier de l'interférogramme. Les positions des composantes sont calculées en fonction des constantes de structure hyperfine A et B des 2 niveaux, selon la formule de Casimir

$$\Delta W = \frac{1}{2} A_{\alpha J} \cdot C + B_{\alpha J} \frac{3C(C+1) - 4I(I+1)J(J+1)}{8I(2I-1)J(2J-1)}$$

où $C = F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)$.

Nous avons négligé le moment octupolaire dans nos calculs, compte tenu de sa très faible influence [8]. Le profil des composantes est déduit du profil d'une composante bien isolée de la structure ou d'une structure voisine dans le spectre. Les intensités relatives du multiplet de structure hyperfine sont fixées à leurs valeurs théoriques. Par un processus itératif les constantes A et B des 2 niveaux sont optimisées jusqu'à rendre minimal l'écart entre la structure calculée et la structure expérimentale.

130 structures ont été analysées de cette manière. La précision avec laquelle les valeurs des constantes A et B des deux niveaux sont déterminées dépend du rapport signal sur bruit de la structure expérimentale. Lorsque les composantes sont bien séparées, il est clair que la précision est meilleure, et les structures les plus éloignées dans l'infrarouge sont particulièrement intéressantes en raison de la faible largeur Doppler des composantes. D'une manière générale l'incertitude sur la constante A est généralement très inférieure à 1 mK et le plus souvent de l'ordre de 0.1 mK ; l'incertitude sur la constante B est de l'ordre de 1 mK. Dans le Tableau I, pour chaque structure analysée, on trouve les valeurs des constantes A et B, ainsi qu'une estimation de la marge d'erreur.

Les constantes de structure hyperfine ont été déterminées pour 37 niveaux pairs (Tableau II) et 42 niveaux impairs (Tableau III). Pour chaque niveau, les valeurs portées dans ces tableaux sont des moyennes des différentes valeurs obtenues pour ce niveau. L'incertitude indiquée correspond à l'écart type de cette série de mesures, lorsque le nombre des mesures est supérieur ou égal à 3.

III - CLASSIFICATION, COUPLAGE INTERMEDIAIRE ET MELANGE DE CONFIGURATIONS.

1) Généralités :

La configuration fondamentale de I_I $5s^2 5p^5$ contient un terme 2P inversé. Les configurations excitées que l'on s'attend à trouver sont toutes du type $5s^2 5p^4 n\ell$. La hauteur de la configuration $nsnp^6$ dans le spectre d'arc des halogènes suscite quelques controverses [12,13]. Dans le cas de l'iode, $n=5$, nous avons été amenés à tenir compte de cette configuration qui joue un rôle important pour les niveaux $J=1/2$ des configurations paires. Les niveaux des configurations du type $5s^2 5p^4 n\ell$ de I_I se répartissent en plusieurs groupes, chacun d'eux correspondant à un niveau de l'ion $5s^2 5p^4$: $^3P_{2,1,0}$, 1D_2 ou 1S_0 . En fait on ne peut distinguer que 4 groupes de niveaux, ceux qui sont basés sur 3P_1 et 3P_0 ayant des énergies comparables.

MINNHAGEN [1] a interprété l'ensemble des niveaux connus grâce au schéma de couplage par paires $(\{p^4(S_C, L_C) J_C \ell\} K, s)J$ qui est le plus approprié pour décrire la distribution des niveaux dans certaines configurations de ce spectre.

Pour interpréter les résultats de structure hyperfine il faut connaître les fonctions d'onde de façon aussi exacte que possible. L'étude effectuée par MINNHAGEN, très utile pour la classification, n'est cependant pas suffisante pour l'étude de la structure hyperfine. Aussi avons-nous repris l'étude du couplage intermédiaire et du couplage de configurations proches. Toutes les matrices de coefficients pour les configurations $5s5p^6$ et $5s^2 5p^4 n\ell$, pour $\ell=s,p,d,f$ ont été construites en utilisant le formalisme des opérateurs tensoriels et grâce aux programmes de calcul

mis au point au Laboratoire Aimé Cotton [14]. Le schéma de couplage de base utilisé est le couplage L-S $(p^4(S_C, L_C), n \ell) S L J$. Toutefois du point de vue de la classification, les niveaux seront toujours désignés avec la notation du couplage $J_C \ell$ utilisée par MINNHAGEN.

Comme pour la plupart des spectres où interviennent les configurations $p^N \ell$, la difficulté essentielle provient du grand étalement en énergie de ces configurations ; pour l'iode, chaque configuration s'étend sur $30\,000\text{ cm}^{-1}$ environ, ce qui est très supérieur à la distance entre les centres de gravité de 2 configurations voisines. De plus, pour les configurations excitées tous les niveaux d'énergie connus sont situés au-dessous de la limite d'ionisation, c'est-à-dire du niveau $5s^2 5p^4 \text{ } ^3P_2$ de I_{II} qui se trouve à $84\,295\text{ cm}^{-1}$. Pour la configuration la plus basse $5s^2 5p^4 6s$ la position du niveau $5s^2 5p^4 ({}^1S_0) 6s \text{ } ^2S_{1/2}$ est estimée à $84\,500\text{ cm}^{-1}$, si bien que même dans le cas de cette configuration tous les niveaux ne sont pas connus.

Pour chaque parité plusieurs configurations parmi les plus basses ont été traitées simultanément en tenant compte explicitement de leur mélange. Il est clair que l'étude paramétrique est mal adaptée à ce genre de problème car le nombre de paramètres devient très rapidement supérieur au nombre de niveaux expérimentaux connus.

Quoi qu'il en soit notre étude a permis d'obtenir des fonctions d'onde qui semblent satisfaisantes pour la plupart des niveaux dont l'énergie est inférieure à $78\,000\text{ cm}^{-1}$. Les études théoriques de structure hyperfine fourniront un test de qualité pour les fonctions d'onde.

2) Configurations paires .

Les estimations théoriques de l'énergie des niveaux des configurations $5p^4 6s$ et $5p^4 7s$ effectuées par MINNHAGEN sont basées sur la connaissance des niveaux parents ${}^3P_{2,1,0}$, 1D_2 et 1S_0 , et utilisent une valeur de l'intégrale d'échange $G^1(5p, ns)$ obtenue à partir des niveaux $({}^3P_2) [2] 5/2$, $({}^3P_2) [2] 3/2$ et $({}^3P_2) [1] 3/2$. A l'examen de la distribution des niveaux des configurations paires, on remarque qu'au-dessous de $78\,000\text{ cm}^{-1}$, 4 configurations sont présentes : $5s^2 5p^4 (6s+7s)$ et $5s^2 5p^4 (5d+6d)$. Nous avons donc étudié ces 4 configurations simultanément. Par ailleurs il est apparu que la configuration $5s5p^6$, qui perturbe notablement les niveaux pairs $J=1/2$ devait être introduite.

Pour l'étude paramétrique de ces configurations, 23 intégrales radiales monoconfigurationnelles sont nécessaires. Il faut ajouter 17 intégrales pour tenir compte du mélange des 5 configurations paires ; 40 intégrales au total sont à considérer. Ce nombre trop élevé nous a conduit d'une part à en fixer quelques-unes à des valeurs calculées a priori, d'autre part à imposer des relations entre certaines autres. En effet, en utilisant la propriété selon laquelle les fonctions radiales des électrons $n\ell$ et $(n+1)\ell$ sont approximativement affines près du noyau sur leurs $(n-\ell-1)$ premières "bosses", il est possible de fixer la valeur du rapport de 2 intégrales d'échange qui font intervenir le recouvrement des orbitales $n\ell$ et $(n+1)\ell$ avec l'orbitale $5p$, à celle du rapport des intégrales de spin-orbite $\zeta_{n\ell}/\zeta_{(n+1)\ell}$ [15].

Nous avons ainsi imposé les relations suivantes :

$$p^2 = \frac{G^1(5p,7s)}{G^1(5p,6s)} \quad q^2 = \frac{G^1(5p,6d)}{G^1(5p,5d)} = \frac{G^3(5p,6d)}{G^3(5p,5d)} = \frac{\zeta_{6d}}{\zeta_{5d}}$$

$$p = \frac{R^1(5p5p,5s7s)}{R^1(5p5p,5s6s)} = \frac{R^1(5p6s,7s5p)}{G^1(5p,6s)}$$

$$q = \frac{R^1(5p5p,5s6d)}{R^1(5p5p,5s5d)} = \frac{R^1(5p6s,6d5p)}{R^1(5p6s,5d5p)}$$

Les valeurs a priori des paramètres d'interaction et celles des rapports ci-dessus ont été calculées par la méthode du potentiel paramétrique [16] à l'aide du programme MAPPAC [17]. $F^2(5p,5p)$ et ζ_{5p} ont été déterminées par une étude paramétrique monoconfigurationnelle. Les valeurs des paramètres, ainsi que celles des rapports p et q , sont données dans le tableau IV. L'écart quadratique moyen $\Delta E = \left[\frac{\sum \Delta E^2}{N-P} \right]^{1/2}$ est de 104 cm^{-1} avec $N=39$ niveaux expérimentaux et $P=14$ paramètres libres.

Les valeurs expérimentales et calculées des énergies et des facteurs de Landé des niveaux sont données dans le Tableau V. Pour les facteurs de Landé l'accord entre les valeurs calculées et les valeurs expérimentales de KIESS et CORLISS [18] n'est pas très bon pour quelques niveaux. Dans A. E. L. [19], pour le niveau $70\,354 \text{ cm}^{-1}$, la valeur expérimentale égale à 1.96 semble erronée, puisque la valeur maximale des facteurs de Landé des niveaux $J=3/2$ est $g_1(4P_{3/2}) = 1.73$ (pour cette parité il n'y a pas de terme $4S$).

Le développement de la fonction d'onde d'un niveau donné fait intervenir avec des poids comparables plusieurs niveaux de base L-S dont

les facteurs de Landé sont généralement très différents ; il s'ensuit que les facteurs de Landé calculés sont très sensibles à de faibles variations dans les fonctions d'onde, dans ce cas particulier. En ce qui concerne la désignation des niveaux peu de modifications sont à apporter à la classification de MINNHAGEN. Les niveaux $68\,549$ et $70\,354\text{ cm}^{-1}$ ($J=3/2$), attribués respectivement à $5p^4 6s$ et $5p^4 5d$ sont en fait constitués d'un mélange de niveaux appartenant aux 2 ensembles de niveaux $5p^4(^1D)6s$ et $5p^4(^3P)5d$. De même, pour cette valeur de J , les niveaux $76\,136$ et $76\,746\text{ cm}^{-1}$ appartiennent à peu près pour moitié aux 2 ensembles de niveaux $(^3P)5d$ et $(^3P)6d$.

Par rapport aux résultats publiés par MINNHAGEN il semble nécessaire de modifier la classification des niveaux $J=1/2$. En effet, un calcul a priori du spectre effectué à l'aide du programme MAPPAC [17] permet d'estimer la position de la configuration $5s5p^6$ à $100\,000\text{ cm}^{-1}$ au-dessus du fondamental, tandis que MINNHAGEN lui attribue la valeur $73\,114\text{ cm}^{-1}$; ce calcul montre aussi que le niveau $5s^2 5p^4(^1D)5d\ ^2S_{1/2}$ est fortement perturbé par le niveau $5s5p^6\ ^2S_{1/2}$. C'est pourquoi J. BAUCHE [20] a étudié par la méthode de Hartree-Fock l'interaction entre les deux niveaux $5s^2 5p^4(^1D)5d\ ^2S_{1/2}$ et $5s5p^6\ ^2S_{1/2}$. Les énergies totales des niveaux (1) $\equiv 5s^2 5p^5\ ^2P_{3/2}$, (2) $\equiv 5s^2 5p^4(^1D)5d\ ^2S_{1/2}$ et (3) $\equiv 5s5p^6\ ^2S_{1/2}$ sont respectivement :

$$E_1 = -6\,917.998 \text{ unités atomiques (u.a.) (FROESE-FISCHER [21]) ,}$$

$$E_2 = -6\,917.6474 \text{ u.a. ,}$$

$$E_3 = -6\,917.566 \text{ u.a. .}$$

Les hauteurs des niveaux (2) et (3) par rapport au niveau fondamental sont donc au premier ordre égales respectivement à

$$E_2' = 76\,948. \text{ cm}^{-1}$$

et $E_3' = 94\,681. \text{ cm}^{-1}$.

L'étude au second ordre de l'interaction entre ces 2 niveaux montre l'existence d'une répulsion réciproque de :

$$\Delta E = \frac{2}{3} \frac{[R^1(5s5d,5p5p)]^2}{E_3' - E_2'} = 5\,992 \text{ cm}^{-1} .$$

Ce qui permet d'estimer à $E_2'' = E_2' - \Delta E \approx 70\,956 \text{ cm}^{-1}$ la hauteur du niveau $5s^25p^4(^1D)5d^2S_{1/2}$ et à $E_3'' = E_3' + \Delta E \approx 100\,673 \text{ cm}^{-1}$ celle du niveau $5s5p^6^2S_{1/2}$. De plus la fonction d'onde du niveau $5s^25p^4(^1D)5d^2S_{1/2}$ contiendrait environ 20% du niveau $5s5p^6^2S_{1/2}$, ce qui doit lui donner une très grande structure hyperfine. Nous avons déjà signalé au Chapitre II que le niveau d'énergie $73\,477 \text{ cm}^{-1}$ possède une structure hyperfine notablement plus grande que celle des autres niveaux, ce qui nous a conduit pour l'étude paramétrique à l'identifier à $5s^25p^4(^1D)5d^2S_{1/2}$ en notation L-S (ou $5s^25p^4(^1D_2)5d [0] 1/2$ en notation $J_c \ell$) . Dans cette nouvelle classification nous identifions à $5s^25p^4(^3P_1)5d [1] 1/2$ le niveau dont l'énergie est égale à $73\,114 \text{ cm}^{-1}$.

Pour l'étude paramétrique nous avons fixé à $100\,000 \text{ cm}^{-1}$ l'énergie de la configuration $5s5p^6$, et les intégrales d'interaction entre cette configuration et les autres configurations paires ont été choisies égales aux valeurs a priori obtenues dans le calcul MAPPAC.

3) Configurations impaires.3)-1 Configurations $5p^4(6p+7p)$.

Une estimation théorique des énergies des paires en couplage J_c a été effectuée sur ces configurations par MINNHAGEN en se basant sur l'énergie des niveaux parents de l'ion et en utilisant une valeur de l'intégrale directe $F^2(5p,np)$ obtenue à partir de $(^3P_2)_{np}$ [3] $7/2$ et $(^3P_2)_{np}$ [2] $5/2$.

B. KJÖLLERSTRÖM et al. [22] on repris l'étude de ces configurations en tenant compte de toutes les intégrales radiales nécessaires, c'est-à-dire, en plus de l'intégrale directe $F^2(5p,np)$, des intégrales d'échange $G^K(5p,np)$, $K=0$ et 2 , et de l'intégrale de spin-orbite de l'électron np . De plus ces auteurs ont étudié le mélange possible de la configuration $5p^46p$ avec la configuration fondamentale $5s^25p^5$. Leurs résultats montrent que ce mélange est faible ; en effet, l'écart quadratique moyen entre les valeurs expérimentales et calculées des énergies, n'est que légèrement amélioré lorsque ce mélange est pris en compte (217 cm^{-1} au lieu de 231 cm^{-1}).

L'étude paramétrique que nous avons effectuée tient compte du mélange des configurations $5p^4(6p+7p)$. Le mélange avec la configuration fondamentale n'a pas été considéré, ni le mélange avec les configurations $5p^4nf$.

L'étude du couplage intermédiaire dans une configuration $5p^4np$ seule nécessite 7 intégrales radiales et le mélange des configurations $5p^4(6p+7p)$ 5 intégrales supplémentaires. Pour une étude paramétrique 19 paramètres au total doivent donc être considérés. De manière à limiter le nombre de

ces paramètres, les valeurs de certains d'entre eux ont été soit liées par des rapports, soit fixées à des valeurs calculées a priori, comme il a déjà été indiqué dans l'étude des configurations paires. On a ainsi défini le rapport r :

$$r^2 = \frac{G^0(5p,7p)}{G^0(5p,6p)} = \frac{G^2(5p,7p)}{G^2(5p,6p)} = \frac{\zeta_{7p}}{\zeta_{6p}}$$

$$r = \frac{R^0(5p6p,7p5p)}{G^0(5p,6p)} = \frac{R^2(5p6p,7p5p)}{G^2(5p,6p)} = \frac{\zeta_{6p-7p}}{\zeta_{6p}}$$

Dans le Tableau VI on indique les valeurs des paramètres, leur écart-type lorsqu'ils sont libres ou le rapport de proportionnalité qui les fixe. Enfin l'intégrale directe $R^0(5p6p,5p7p)$ entre les deux configurations a été fixée à zéro, puisque l'effet de ce paramètre peut être introduit par l'intermédiaire des paramètres A donnant la position des deux configurations.

L'écart quadratique moyen $\overline{\Delta E} = \left[\frac{\sum \Delta E^2}{N-P} \right]^{\frac{1}{2}}$ entre les valeurs calculées et expérimentales des énergies est égal à 102.5 cm^{-1} pour 32 niveaux d'énergie et 11 paramètres libres.

Pour chaque configuration, et avec la définition utilisée par B. KJÖLLERSTRÖM et al. [22] $\overline{\Delta E} = \left[\frac{\sum \Delta E^2}{N} \right]^{\frac{1}{2}}$, nous obtenons pour 6p, 68.3 cm^{-1} avec 19 niveaux (B. KJÖLLERSTRÖM, 217 cm^{-1}), pour 7p, 108 cm^{-1} avec 13 niveaux (B. KJÖLLERSTRÖM, 131 cm^{-1}). Le tableau VII donne les valeurs expérimentales et calculées des énergies et des facteurs de Landé.

Le niveau $80\ 039 \text{ cm}^{-1}$, dont la classification en couplage $J_c \ell$ est $5p^4(1D_2)6p [2] 3/2$ ($g_{J_c \ell} = 0.8$) ou en couplage L-S $5p^4(1D)6p^2D_{3/2}$

($g_{IS} = 0.8$) a un facteur de Landé calculé de 0.851. Si l'on admet que la valeur expérimentale de 1.50 donnée dans A. E. L. [19], mais qui ne figure pas dans les listes de KIESS et CORLISS, est douteuse, l'écart quadratique moyen sur les facteurs de Landé, compte non tenu de ce niveau, est $\left[\frac{\sum \Delta g^2}{N} \right]^{\frac{1}{2}} = 0.096$. Le mélange des configurations $5p^4(6p+7p)$ est assez faible et, tout au moins pour les niveaux les plus bas, une étude paramétrique monoconfigurationnelle aurait pu donner des résultats assez satisfaisants.

$$3)-2 : \underline{5s^2 5p^4 4f} .$$

Le couplage intermédiaire a été déterminé pour le groupe de niveaux $5s^2 5p^4 ({}^3P_2) 4f$, dont quelques structures hyperfines ont pu être déterminées. 7 paramètres sont nécessaires pour traiter la configuration complète. Les intégrales $F^2(5p, 5p)$ et ζ_{5p} ne peuvent pas être considérées comme des paramètres libres, puisqu'un seul terme parent 3P intervient. Le paramètre d'interaction spin-orbite pour l'électron $4f$, ζ_{4f} , a été fixé à zéro compte tenu de sa très faible valeur obtenue a priori. L'optimisation a été effectuée avec 4 paramètres libres pour 10 niveaux expérimentaux. Les valeurs des paramètres ainsi que leurs écarts-type sont portés dans le Tableau VIII. Les valeurs expérimentales et calculées des énergies, les valeurs calculées des facteurs de Landé, sont également indiquées dans le Tableau VIII. L'écart quadratique moyen sur les énergies est faible, 2.4 cm^{-1} , mais compte tenu du faible domaine d'énergie considéré, environ 100 cm^{-1} , cette optimisation n'est pas meilleure que les précédentes. A notre connaissance aucun facteur de Landé n'a été déterminé expérimentalement pour ces niveaux.

IV - ETUDE THEORIQUE DE LA STRUCTURE HYPERFINE.1) Généralités.a) - Hamiltonien de structure hyperfine.

Pour un atome à N électrons possédant un spin nucléaire $I^{(1)}$, on peut exprimer l'hamiltonien de structure hyperfine dipolaire magnétique intervenant dans l'étude d'une configuration donnée sous la forme :

$$H_M = \sum_{i=1}^N (X_i^{(1)} \cdot I^{(1)}) = (X^{(1)} \cdot I^{(1)})$$

$$\text{où } X_i^{(1)} = \sum_{nl} a_s(nl) s_i^{(1)}(nl) + a_\ell(nl) \ell_i^{(1)}(nl) - \sqrt{10} a_{sc}(nl) \{s^{(1)}_C(2)\}_i^{(1)}(nl)$$

la sommation étant étendue à toutes les couches ouvertes de la configuration considérée.

Dans cette expression les éléments de matrice réduits des opérateurs angulaires $s^{(1)}(nl)$, $\ell^{(1)}(nl)$, $\{s^{(1)}_C(2)\}_i^{(1)}(nl)$ ne sont différents de zéro que s'ils sont évalués entre fonctions correspondant toutes deux à l'orbitale nl .

La constante de structure hyperfine dipolaire magnétique d'un niveau de fonction d'onde $|\alpha J\rangle$ est définie par :

$$A_{\alpha J} = \frac{(\alpha J \| X^{(1)} \| \alpha J)}{\sqrt{J(J+1)(2J+1)}} .$$

De même pour un atome possédant un moment quadrupolaire électrique Q, l'hamiltonien de structure hyperfine quadrupolaire électrique peut s'écrire :

$$H_Q = \sum_{i=1}^N (Y_i^{(2)} \cdot K^{(2)}) = (Y^{(2)} \cdot K^{(2)})$$

$$\text{où } Y_i^{(2)} = \sum_{nl} (b_{02}(nl) w_i^{(02)2}(nl, nl) + b_{11}(nl) w_i^{(11)2}(nl, nl) + b_{13}(nl) w_i^{(13)2}(nl, nl)).$$

Dans cette expression l'opérateur $K^{(2)}$ est un opérateur purement nucléaire défini par $K^{(2)} = \sqrt{\frac{2}{2}} \{I^{(1)} I^{(1)}\}^{(2)}$.

Les opérateurs w sont les opérateurs tensoriels doubles introduits par FENEUILLE [23] et définis par leurs éléments de matrice réduits :

$$\langle n_a \ell_a || w^{(nk)}(n\ell, n'\ell') || n_b \ell_b \rangle = \delta(n_a \ell_a, n\ell) \delta(n_b \ell_b, n'\ell') \{2k+1\} \{2n+1\}^{\frac{1}{2}}.$$

La constante de structure hyperfine quadrupolaire électrique du niveau $|\alpha J\rangle$ est définie par :

$$B_{\alpha J} = 2I(2I-1) \sqrt{\frac{J(2J-1)}{(2J+1)(2J+3)(J+1)}} (\alpha J || Y^{(2)} || \alpha J).$$

L'étude du mélange explicite de deux configurations différant par les nombres quantiques d'une seule orbitale notée respectivement $n_1 \ell_1$ et $n_2 \ell_2$, conduit à introduire dans l'hamiltonien de structure hyperfine des opérateurs du type $\sum_i w_i^{(nk)K}(n_1 \ell_1, n_2 \ell_2)$, où K vaut 1 pour l'interaction dipolaire magnétique et 2 pour l'interaction quadrupolaire électrique.

b) - Traitement a priori non relativiste de la structure hyperfine.

Dans l'étude de la structure atomique, on introduit généralement un modèle à champ central pour décrire les états atomiques. Dans l'approximation non relativiste la fonction d'onde de l'atome est une combinaison linéaire de déterminants de Slater construits sur les fonctions d'onde monoélectroniques

$$\varphi_{NR} = \frac{1}{r} R_{n\ell}(r) \left| \frac{1}{2} \ell j m \right\rangle.$$

Une étude au premier ordre du champ central permet d'écrire les constantes de structure hyperfine monoélectroniques $a(n\ell)$ et $b(n\ell)$ sous

la forme suivante :

$$\text{si } \ell \neq 0 \quad a_s(n\ell) = 0 \quad a_\ell(n\ell) = a_{sC}(n\ell) = 2\beta\beta_N \frac{\mu_N}{I} \langle r^{-3} \rangle_{n\ell-n\ell}$$

$$b_{11}(n\ell) = b_{13}(n\ell) = 0; \quad b_{02}(n\ell) w_{(n\ell, n\ell)}^{(02)2} = \frac{-e^2 Q}{I(2I-1)} C^{(2)} \langle r^{-3} \rangle_{n\ell-n\ell}$$

pour $\ell=0$ seul $a_s(ns)$ est non nul ; $a_s(ns) = \frac{16\pi}{3} \beta\beta_N \frac{\mu_N}{I} |\Psi_{ns-ns}(0)|^2$.

Dans ces expressions β et β_N désignent respectivement le magnéton de Bohr et le magnéton nucléaire et μ_N la valeur du moment dipolaire magnétique nucléaire exprimée en magnétons nucléaires.

Les grandeurs radiales apparaissant dans les constantes monoélectroniques sont du type

$$\langle r^{-3} \rangle_{n\ell, n'\ell'} = \int_0^\infty R_{n\ell}^*(r) \frac{1}{r^3} R_{n'\ell'}(r) dr \quad \text{si } \ell+\ell' \neq 0$$

$$|\Psi_{ns-n's}(0)|^2 = \int_{\text{espace}} \Psi_{ns}^*(\vec{r}) \delta(\vec{r}) \Psi_{n's}(\vec{r}) d\tau$$

JUDD [24] a étudié au second ordre du champ central les effets dus aux configurations lointaines dans le cas des configurations $C np^N$; ce travail a été étendu aux configurations mélangées $C n\ell^N n'\ell'$ par BAUCHE-ARNOULT [25] ; C désigne un ensemble de couches complètes $(n_c \ell_c)^{4\ell_c+2}$. Ces auteurs ont montré de façon générale que les excitations

$$(n_c \ell_c)^{4\ell_c+2} (n\ell)^N n'\ell' \rightarrow (n_c \ell_c)^{4\ell_c+1} (n\ell)^N n'\ell' n_a \ell_a ,$$

qui constituent la polarisation de coeur, ne modifient pas la forme de l'hamiltonien de structure hyperfine, mais que les constantes $a_s(n\ell)$, $a_\ell(n\ell)$, $a_{sC}(n\ell)$ et $b_{02}(n\ell)$ ne peuvent plus être reliées directement aux intégrales radiales $\langle r^{-3} \rangle$ et $|\Psi(0)|^2$; en particulier pour $\ell \neq 0$, $a_s(n\ell) \neq 0$ et $a_\ell(n\ell) \neq a_{sC}(n\ell)$.

La valeur $a_s(nl)$ non nulle correspond à la polarisation de spin ; parmi les perturbations dues aux configurations lointaines, cet effet est en général le plus important.

c) - Etude relativiste de la structure hyperfine.

Dans une étude relativiste de la structure atomique, un état relativiste monoélectronique est donné dans l'approximation du champ central par l'expression :

$$|n \ell j m\rangle = \begin{bmatrix} \frac{1}{r} G_{n\ell j}(r) |\ell j m\rangle \\ \frac{i}{r} F_{n\ell j}(r) |\bar{\ell} j m\rangle \end{bmatrix} \quad \text{où } \bar{\ell} = 2j - \ell .$$

Cet état est solution de l'équation de DIRAC [26] associée au potentiel central $U(r)$, et les fonctions radiales $G_{n\ell j}(r)$ et $F_{n\ell j}(r)$ sont solutions d'un système d'équations différentielles couplées du premier ordre.

SANDARS et BECK [27] ont montré en utilisant le formalisme des opérateurs équivalents que l'hamiltonien relativiste de structure hyperfine pouvait s'écrire sous une forme semblable à celle qui apparaît dans un traitement non relativiste. Les constantes monoélectroniques de structure hyperfine a et b s'expriment respectivement à l'aide des intégrales radiales

$$P_{jj'}(n\ell, n'\ell') = \int_0^\infty \left(G_{n\ell j}(r) F_{n'\ell' j'}(r) + F_{n\ell j}(r) G_{n'\ell' j'}(r) \right) \frac{1}{r^2} dr$$

$$\text{et } R_{jj'}(n\ell, n'\ell') = \int_0^\infty \left(G_{n\ell j}(r) G_{n'\ell' j'}(r) + F_{n\ell j}(r) F_{n'\ell' j'}(r) \right) \frac{1}{r^3} dr .$$

Les constantes $a_\ell(n\ell)$ et $a_{sc}(n\ell)$ ne sont plus égales et $a_s(n\ell)$, $b_{11}(n\ell)$ et $b_{13}(n\ell)$ ($\ell \neq 0$) ne sont plus nulles.

Nous pouvons calculer a priori la valeur de ces constantes en déterminant les fonctions radiales relativistes à l'aide de la méthode du potentiel central relativiste [28] dont nous rappelons brièvement les points principaux.

Au premier ordre l'hamiltonien atomique est la somme d'hamiltoniens de Dirac correspondant à un potentiel central $U(r)$; ce dernier est écrit sous une forme analytique dépendant d'un petit nombre de paramètres θ . Dans le cas de l'iode il y a 6 paramètres, les 4 premiers sont associés aux couches complètes de nombre quantique $1 \leq n \leq 4$ et les 2 derniers correspondent respectivement aux électrons $5s^2$ et $5p^4$ de l'ion iode II. Ces paramètres sont optimisés en minimisant l'énergie totale du niveau fondamental $5p^5 \ ^2P_{3/2}$.

d) - Etude paramétrique de la structure hyperfine.

Dans un traitement paramétrique de la structure hyperfine la partie angulaire des opérateurs de structure hyperfine est calculée simplement à partir des fonctions d'onde obtenues dans l'étude paramétrique des niveaux d'énergie des configurations considérées. Les constantes de structure hyperfine monoélectroniques a (ou b) sont considérées comme des paramètres que l'on ajuste par la méthode des moindres carrés de façon à reproduire au mieux les valeurs expérimentales des constantes de structure hyperfine $A_{\text{exp}}(i)$ (ou $B_{\text{exp}}(i)$) pour N niveaux. L'écart quadratique moyen est défini par :

$$\overline{\Delta A} = \left[\frac{1}{N-p} \sum_{i=1}^N (A_{\text{exp}}(i) - A_{\text{cal}}(i))^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

où p désigne le nombre de paramètres libres.

Les paramètres obtenus dans un traitement empirique de la structure hyperfine tiennent compte simultanément des effets relativistes et des contributions dues au mélange avec les configurations lointaines. Pour pouvoir connaître l'importance relative de ces deux phénomènes il faut évaluer a priori la contribution de l'un d'eux et la comparer aux résultats du traitement paramétrique. La méthode du potentiel central relativiste permet par exemple d'obtenir la contribution des effets relativistes ; par contre un traitement Hartree-Fock avec polarisation de spin, qui introduit pour une orbitale $n\ell$ deux fonctions radiales $R_{n\ell+}$ et $R_{n\ell-}$ différentes correspondant aux deux projections $m_s = \pm \frac{1}{2}$ du spin, permet d'évaluer partiellement la contribution de la polarisation du coeur à la structure hyperfine magnétique.

Dans l'étude paramétrique de la structure hyperfine, pour diminuer le nombre de paramètres indépendants, on peut fixer entre eux les rapports de certains paramètres en tenant compte du fait que les fonctions radiales $n\ell$ et $(n+1)\ell$ (relativistes ou non) sont affines sur leurs $(n-\ell-1)$ premières "bosses".

Ainsi pour des orbitales $n\ell$ et $n'\ell$ on considère des relations analogues à celles introduites dans l'étude de la structure fine. Dans le cas de la structure hyperfine magnétique

$$\frac{a_s(n'\ell)}{a_s(n\ell)} = \frac{a_\ell(n'\ell)}{a_\ell(n\ell)} = \frac{a_{sC}(n'\ell)}{a_{sC}(n\ell)} = \frac{\zeta_{n'\ell}}{\zeta_{n\ell}} = \frac{G^K(5p n'\ell)}{G^K(5p n\ell)} = P^2 \quad \text{pour } \ell \neq 0$$

$$\text{et } \frac{a_s(n's)}{a_s(ns)} = \frac{G^1(5p n's)}{G^1(5p ns)} = Q^2 \quad .$$

Pour les paramètres d'interaction on a de même :

$$\frac{a_s(n\ell, n'\ell)}{a_s(n\ell)} = \frac{a_\ell(n\ell, n'\ell)}{a_\ell(n\ell)} = \frac{a_{SC}(n\ell, n'\ell)}{a_{SC}(n\ell)} = P$$

et $\frac{a_s(ns, n's)}{a_s(ns)} = Q$.

Si nous avons imposé les mêmes relations pour les paramètres $a_s(n\ell)$ ($\ell \neq 0$) que pour les paramètres $a_\ell(n\ell)$ et $a_{SC}(n\ell)$ c'est parce que, pour un atome lourd, il est raisonnable de penser que les effets relativistes sont plus importants que ceux dus aux mélanges de configurations lointaines.

Pour la structure hyperfine quadrupolaire on peut de même poser

$$\frac{b_{02}(n'\ell)}{b_{02}(n\ell)} = \frac{b_{11}(n'\ell)}{b_{11}(n\ell)} = \frac{b_{13}(n'\ell)}{b_{13}(n\ell)} = P^2 \quad .$$

Les paramètres $b_{11}(n\ell)$ et $b_{13}(n\ell)$ qui n'apparaissent que dans un traitement relativiste sont souvent inférieurs de plusieurs ordres de grandeur au paramètre $b_{02}(n\ell)$, si bien qu'il n'est pas toujours possible d'obtenir leurs valeurs dans une étude paramétrique.

Le paramètre $b_{13}(n\ell)$ n'apparaît que si ℓ est supérieur ou égal à 2 .

2) Etude de la structure hyperfine dipolaire magnétique.

a) Configurations paires.

Pour étudier la structure hyperfine magnétique des configurations paires $5s^2 5p^4 (6s+5d+7s+6d) + 5s 5p^6$ nous avons introduit les 4 paramètres indépendants $a_s(5p)$, $a_\ell(5p)$, $a_{sC}(5p)$ et $a_s(5s)$. Nous avons fixé à zéro la valeur des constantes associées aux orbitales 5d et 6d, ainsi qu'à l'interaction 5d-6d, car dans l'étude du couplage intermédiaire nous avons trouvé que les constantes de couplage spin-orbite ζ_{5d} et ζ_{6d} sont plus de 50 fois plus faibles que ζ_{5p} ; le calcul a priori des valeurs des constantes $a(5d)$ et $a(6d)$ justifie cette approximation. Nous avons également fixé à zéro les paramètres d'interaction associés aux opérateurs $\sum_i w_i^{(12)} 1(ns, n'd)$, les valeurs calculées a priori étant négligeables.

En utilisant les relations mentionnées ci-dessus nous avons fixé les rapports entre les paramètres $a_s(6s)$, $a_s(7s)$, $a_s(6s,7s)$ et le paramètre libre $a_s(5s)$. En fait, les configurations $5s^2 5p^4 n\ell$ et $5s 5p^6$ ne comportent pas le même ensemble de couches complètes, et l'on pourrait se demander si la polarisation du coeur n'apporte pas des contributions différentes d'une part au paramètre $a_s(5s)$, d'autre part aux paramètres $a_s(6s)$, $a_s(7s)$ et $a_s(6s,7s)$. C'est pourquoi nous avons effectué une étude préliminaire faisant intervenir les deux paramètres libres $a_s(5s)$ et $a_s(6s)$; le rapport des valeurs de ces deux paramètres $a_s(5s)/a_s(6s) \approx 27.1$ est très voisin du rapport entre les deux intégrales de Slater $[R^1(5p6s, 5s5p)/G^1(5p, 6s)]^2 = 30.1$, ce qui montre que la polarisation du coeur modifie de la même façon les deux paramètres $a_s(5s)$ et

$a_s(6s)$ et nous permet dans l'étude définitive de ne garder qu'un seul paramètre $a_s(5s)$ libre.

Finalement, avec 4 paramètres indépendants, nous avons pu interpréter les valeurs des constantes de structure hyperfine magnétique $A_{\text{exp}}(i)$ de 34 niveaux, avec un écart quadratique moyen $\overline{\Delta A} = 9.83 \text{ mK}$. Les valeurs obtenues pour les paramètres figurent dans le tableau IX qui contient les valeurs calculées a priori (PCR). Nous donnons dans le Tableau II les valeurs des constantes de structure hyperfine $A_{\text{cal}}(i)$ calculées avec les paramètres issus de l'étude empirique.

L'étude paramétrique de la structure hyperfine magnétique des configurations paires de l'iode conduit à une valeur élevée de l'écart quadratique moyen, ce qui montre que le couplage intermédiaire n'est pas déterminé de façon totalement satisfaisante. C'est en particulier pour les niveaux de nombre quantique $J=1/2$ que l'écart $|A_{\text{exp}}(i) - A_{\text{cal}}(i)|$ est le plus important. Or, comme nous l'avons déjà signalé, ces niveaux sont notablement perturbés par le niveau $5s5p^6 \ ^2S_{1/2}$ dont l'énergie n'est pas connue expérimentalement, ce qui ne permet pas d'obtenir de façon précise la contribution de ce niveau perturbateur dans les fonctions d'onde $5s^2 5p^4 n\ell$. Or la constante de structure hyperfine magnétique $a_s(5s)$ est 30 fois plus grande que les autres constantes, ce qui fait que les valeurs des constantes A_{cal} des niveaux $J=1/2$ sont presque entièrement déterminées par le poids de la composante $5s5p^6 \ ^2S_{1/2}$ dans la fonction d'onde correspondante.

L'accord entre les valeurs a priori et empirique obtenues pour le paramètre $a_s(6s)$ est très satisfaisant, par contre il y a un facteur 2

entre les valeurs obtenues pour le paramètre $a_s(5s)$, ce qui permet de penser que le poids de la configuration $5s5p^6$ dans les fonctions d'onde est sans doute sous-estimé.

b) Configurations impaires.

Pour étudier la structure hyperfine dipolaire magnétique dans les configurations $5s^25p^4(6p+7p)$ nous avons introduit les 3 paramètres libres $a_s(5p)$, $a_l(5p)$ et $a_{sC}(5p)$. Les paramètres $a(np)$ ($n=6,7$) ainsi que les paramètres d'interaction $a(6p-7p)$ sont déterminés en fixant leur rapport avec les 3 paramètres libres à l'aide des relations ci-dessus. Nous n'avons pas introduit le paramètre associé à l'opérateur $\sum_i w_i^{(11)1}(6p,7p)$ car la valeur obtenue dans un calcul a priori est négligeable.

Nous avons pu interpréter à l'aide des paramètres figurant dans le Tableau IX, les valeurs expérimentales des constantes de structure hyperfine magnétique de 23 niveaux ; l'écart quadratique moyen correspondant est $\overline{\Delta A} = 2.54$ mK et le Tableau III contient les valeurs calculées des constantes de structure hyperfine magnétique.

L'étude paramétrique de la structure hyperfine magnétique des niveaux de la configuration $5p^44f$ effectuée en introduisant les seuls paramètres $a(5p)$, n'est pas significative ; en effet, les valeurs obtenues pour ces paramètres sont totalement différentes de celles correspondant aux autres configurations. Ceci est dû au fait que tous les niveaux dont on connaît la structure hyperfine sont construits sur le même niveau $5p^4(^3P_2)$ de l'ion parent ; les diverses équations apparaissant dans l'étude paramétrique ne sont donc pas totalement indépendantes. Nous avons cependant calculé les valeurs des constantes de structure hyperfine magnétique en

utilisant les résultats de l'étude paramétrique des configurations $5p^4(6p+7p)$; les résultats figurent dans le Tableau III et correspondent à un écart quadratique moyen $\overline{\Delta A} = \left[\frac{\sum \Delta A^2}{N} \right]^{\frac{1}{2}} = 2,2 \text{ mK}$ alors que la valeur moyenne est $\overline{A} = \frac{\sum |A|}{N} = 13,8 \text{ mK}$.

c) Conclusion.

Il est possible de comparer les résultats des deux études empiriques des constantes de structure hyperfine magnétiques aux valeurs calculées a priori par la méthode du potentiel central relativiste. Les valeurs obtenues pour les constantes $a(5p)$ figurent dans le Tableau IX ; nous présentons également les résultats obtenus dans l'étude de la configuration fondamentale $5p^5$. Les constantes de structure hyperfine des deux niveaux s'expriment de la façon suivante :

$$A(^2P_{3/2}) = \frac{1}{3} a_s(5p) + \frac{2}{3} a_\ell(5p) - \frac{2}{15} a_{sC}(5p)$$

$$A(^2P_{1/2}) = -\frac{1}{3} a_s(5p) + \frac{4}{3} a_\ell(5p) + \frac{4}{3} a_{sC}(5p) .$$

Pour obtenir la valeur de deux constantes monoélectroniques, il faut imposer une relation pour la troisième constante. Ainsi nous avons d'une part fixé la valeur du rapport $a_{sC}(5p) / a_\ell(5p)$ à la valeur calculée a priori, d'autre part fixé le paramètre $a_s(5p)$ au résultat obtenu a priori. La comparaison entre ces deux traitements permet d'évaluer un ordre de grandeur sur l'incertitude attachée aux 3 paramètres.

Le rapport $a_{sC}(5p) / a_\ell(5p)$ vaut 1,33 dans le calcul a priori ; cette valeur est très différente de la valeur 1 obtenue dans un traitement non relativiste, ce qui montre que les effets relativistes apportent une contribution importante à la structure hyperfine magnétique de l'iode.

La valeur obtenue dans le traitement paramétrique des configurations impaires est en très bon accord avec la valeur calculée a priori ; de plus, pour la configuration fondamentale $5p^5$, si on fixe la valeur de ce rapport, les paramètres $a_{\ell}(5p)$ et $a_{sC}(5p)$ ont des valeurs très voisines de celles obtenues a priori. Enfin l'étude des configurations paires est beaucoup moins significative, compte tenu de l'incertitude portant sur la détermination du couplage intermédiaire ; cependant, compte tenu des écarts-types sur les deux paramètres $a_{\ell}(5p)$ et $a_{sC}(5p)$, la valeur pour le rapport $a_{sC}(5p) / a_{\ell}(5p)$ est assez voisine de la valeur a priori. Ceci montre que la contribution au second ordre des mélanges de configurations lointaines modifie peu la valeur des deux paramètres $a_{\ell}(5p)$ et $a_{sC}(5p)$.

Les valeurs empiriques obtenues pour le paramètre $a_s(5p)$ dans l'étude des configurations paires ou impaires sont en assez bon accord avec la valeur obtenue a priori, ce qui laisse supposer que la polarisation du coeur est négligeable pour les configurations excitées $5p^4 n\ell$; il faut cependant noter que le paramètre $a_s(5p)$ est affecté d'un grand écart-type. Pour savoir si la valeur $-18,07$ obtenue dans l'étude de la configuration fondamentale est significative il faudrait calculer directement la polarisation de spin dans la configuration fondamentale $5p^5$ de I_I , et la comparer à celle du niveau $5p^4 ({}^3P_2)$ de I_{II} . On ne peut prédire les résultats d'un traitement Hartree-Fock avec polarisation de spin, mais pour les deux configurations que nous venons de citer les résultats peuvent être assez différents comme le suggèrent les calculs effectués sur la configuration $5p^5$ de Xe II [25] et $5p^4 [{}^3P_2]$ de Te I [19].

3) Étude de la structure hyperfine quadrupolaire électrique.a) Configurations paires.

La configuration $5s5p^6$ ne comporte qu'un niveau de moment angulaire total $J=1/2$ et par conséquent ne possède pas de structure hyperfine quadrupolaire électrique.

Dans l'étude de la structure hyperfine quadrupolaire électrique des configurations $5p^4(6s+5d+7s+6d)$ nous n'avons introduit que le seul paramètre libre $b_{02}(5p)$, le paramètre $b_{11}(5p)$ ne prenant pas de valeur significative. Nous n'avons introduit ni les paramètres des orbitales $5d$ et $6d$, ni les paramètres d'interaction $b(5d,6d)$, car les valeurs correspondantes obtenues a priori sont négligeables ; il en est de même des paramètres d'interaction associés aux opérateurs $\sum_i w_i^{(02)2}(ns,n'd)$ et $\sum_i w_i^{(12)2}(ns,n'd)$.

Le seul paramètre $b_{02}(5p)$ permet d'interpréter avec un écart quadratique moyen $\overline{\Delta B} = 4$ mK les valeurs des constantes de structure hyperfine électrique de 26 niveaux expérimentaux. Ce paramètre prend la valeur $b_{02}(5p) = -(8,23 \pm 0,28)$ mK ; nous donnons dans le Tableau II les valeurs calculées pour les constantes B . L'écart-type $\overline{\Delta B}$ est supérieur à la moyenne de l'erreur expérimentale sur les constantes B , ce qui provient sans doute de la qualité médiocre des fonctions d'onde. D'autre part, la constante $b_{02}(5p)$ est en général affectée de façon non négligeable par les effets dus au mélange des configurations lointaines et ceux-ci ne sont pas les mêmes pour les 4 configurations étudiées simultanément.

On peut remarquer que pour le niveau d'énergie égale à $66\,015\text{ cm}^{-1}$,

identifié à $5p^4(^3P_2)5d [3] 7/2$, l'accord entre les valeurs observée et calculée pour la constante B est assez mauvais. alors qu'en général, pour une valeur élevée du nombre quantique J , les fonctions d'onde sont bien déterminées. On peut penser que la présence du niveau d'énergie $66\ 020\ \text{cm}^{-1}$ noté $5p^4(^3P_2)5d [3] 5/2$ perturbe la structure hyperfine du niveau $66\ 015\ \text{cm}^{-1}$. Notre méthode de dépouillement utilise la formule de Casimir et néglige par conséquent totalement l'interaction entre multiplets hyperfins.

b) Configurations impaires.

Nous avons étudié la structure hyperfine quadrupolaire électrique des configurations $5p^4(6p+7p)$ à l'aide des deux paramètres libres $b_{02}(5p)$ et $b_{11}(5p)$. Nous avons utilisé les relations données plus haut pour déterminer les paramètres des orbitales $6p$ et $7p$, ainsi que les paramètres d'interaction $b(6p,7p)$. Seul le paramètre associé à l'opérateur $\sum_i w_i^{(12)2}(6p,7p)$ n'a pas été introduit, compte tenu de sa faible valeur obtenue a priori.

Nous avons interprété avec un écart quadratique moyen $\overline{\Delta B} = 4\ \text{mK}$ les valeurs des constantes de structure hyperfine quadrupolaire électrique de 17 niveaux. Les valeurs obtenues pour les deux paramètres sont respectivement :

$$b_{02}(5p) = -(7,69 \pm 0,24)\ \text{mK} \quad \text{et} \quad b_{11}(5p) = (0,56 \pm 0,32)\ \text{mK} .$$

Le Tableau III contient les valeurs calculées des constantes.

c) Conclusion.

Le Tableau IX contient les valeurs obtenues empiriquement et a priori pour les constantes $b_{02}(5p)$ et $b_{11}(5p)$. Il contient aussi les résultats de l'étude de la configuration fondamentale $5p^5$ pour laquelle :

$$B(^2P_{3/2}) = -\frac{10}{\sqrt{3}} (b_{02}(5p) + \sqrt{2} b_{11}(5p)) .$$

Pour obtenir la valeur de la constante $b_{02}(5p)$ à partir de la valeur expérimentale nous avons effectué deux calculs en fixant le paramètre $b_{11}(5p)$ soit à zéro, soit à la valeur obtenue a priori.

L'accord entre les différentes valeurs du paramètre $b_{5p}(02)$ est satisfaisant et montre que la contribution de la polarisation du coeur n'est pas très importante.

REFERENCES

- [1] MINNHAGEN, L., Ark. Fys. 21, 415 (1965)
- [2] LUC-KOENIG, E., MORILLON, C. et VERGES, J., Physica 70, 175 (1973)
- [3] CONNES, J., DELOUIS, H., CONNES, P., GUELACHVILI, G., MAILLARD, J.-P.
et MICHEL, G., Nouv. Revue Opt. Appl. 1, 3 (1970)
- [4] MORILLON, C. et VERGES, J., Physica Scripta, à paraître
- [5] MORILLON, C. et VERGES, J., Physica Scripta, soumis à publication
- [6] TOLANSKY, S., Proc. Roy. Soc. London (A), 152, 663 (1935)
- [7] SCHMIDT, Th., Z. Physik 112, 199 (1939)
- [8] JACCARINO, V., KING, J. G., SATTEN, R. A. et STROKE, H. H.,
Phys. Rev. 94, 1798 (1954)
- [9] MURAKAWA, K., J. Phys. Soc. Japan 13, 484 (1958)
- [10] FULLER, G. W. et COHEN, V. W., Nuclear Data Tables 5
Academic Press (New York, London, 1969)
- [11] ROBAUX, O., Thèse, ORSAY (1972)
- [12] RADZIEMSKI, L. J. et KAUFMAN, V., J. Opt. Soc. Am. 59, 424 (1969)
- [13] TECH, J. L., J. Res. Nat. Bur. Stand. 67A, 505 (1963)
READER, J., J. Opt. Soc. Am. 64, 1017 (1974)
- [14] CARLIER, A. et BORDARIER, Y., Programmes du Laboratoire Aimé Cotton,
(Non publiés)
- [15] LIBERMAN, S., Thèse, ORSAY (1971), J. Phys., 30, 53 (1969)
- [16] KLAPISCH, M., Thèse, ORSAY (1969)
- [17] KLAPISCH, M., Comput. Phys. Commun. 2, 239 (1971)
- [18] KIESS, C. C. et CORLISS, C. H., J. Res. Nat. Bur. Std., 63A, 1 (1959)
- [19] MOORE, C. E. "Atomic Energy Levels", III, Natl. Bur. Std., Circ. N° 467
Government Printing Office, Washington, D. C., 1958.

- [20] BAUCHE, J., Communication personnelle
- [21] FROESE-FISCHER, C., Atomic Data, 4, 301 (1972)
- [22] KJÖLLERSTRÖM, B., MÖLLER, N. H. et SVENSSON, H.
Ark. Fys. 29, 275 (1965)
- [23] FENEUILLE, S., J. Physique (Paris) 28, 61 (1967)
- [24] JUDD, B. R., Hyperfines structures in the atomic 2p shell.
"La structure hyperfine des atomes et des Molécules"
Ed. C.N.R.S. (1967), Proc. Phys. Soc., 82, 874 (1963)
- [25] BAUCHE-ARNOULT, C., Thèse, ORSAY (1972)
BAUCHE-ARNOULT, C. et BAUCHE, J., Proc. Roy. Soc. Lond. A 322, 361 (1971)
- [26] BETHE, H. A. et SALPETER, E. E., "Quantum mechanics of one and two-
electron Atoms", Springer-Verlag, BERLIN
- [27] SANDARS, P. G. H. et BECK, J., Proc. Roy. Soc., A 289, 97 (1965)
- [28] LUC-KOENIG, E., Physica, 62, 393 (1972)
- [29] MORILLON, C. et VERGES, J., à paraître dans Physica Scripta
- [30] COULOMBE, M., à paraître dans J. Phys. (Paris).

IODE $I=5/2$

7620.875 cm^{-1}

73477 \rightarrow 65856
 $J=1/2$ $J=1/2$
 $A=294.8$ $A=57.3$

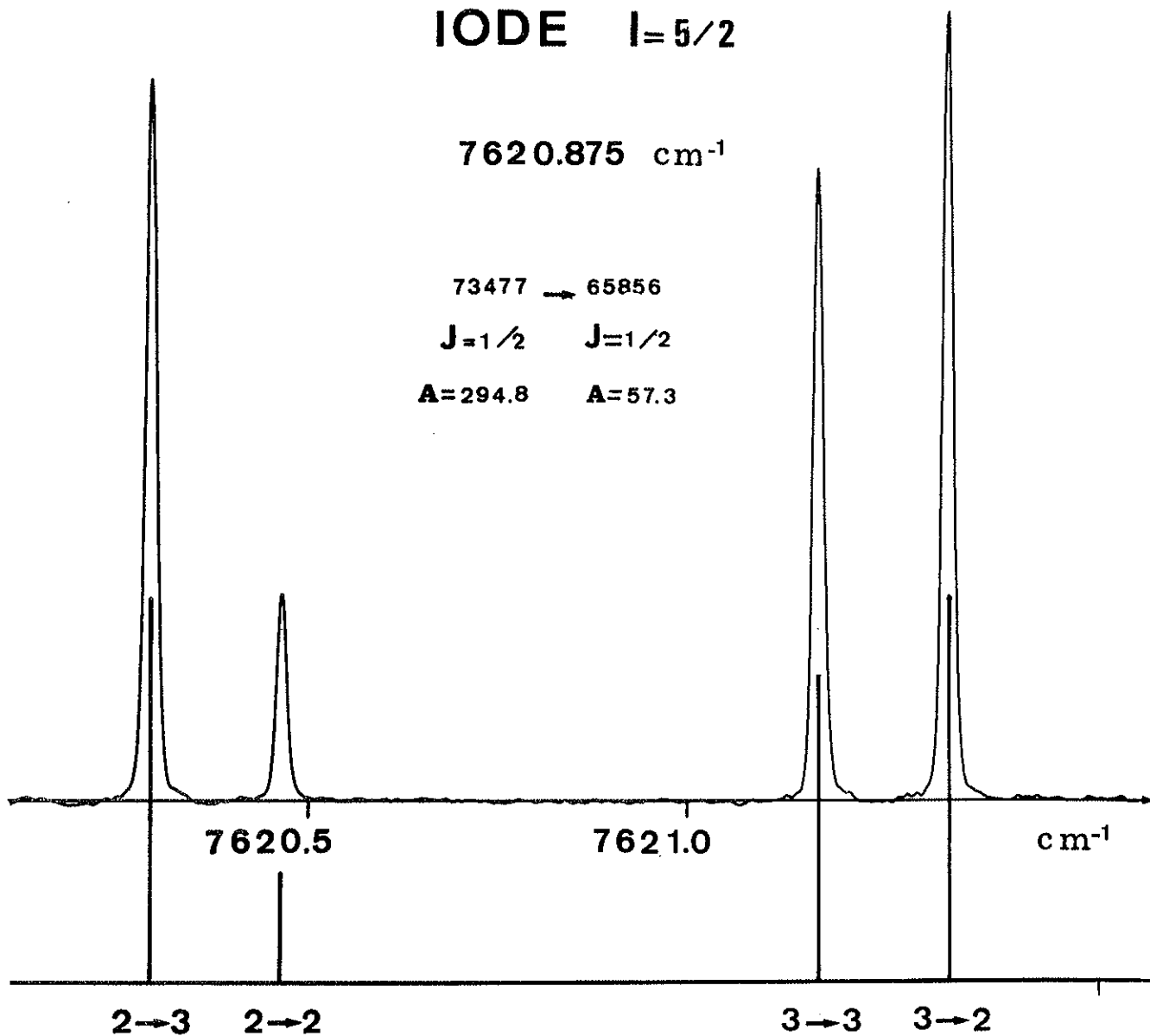
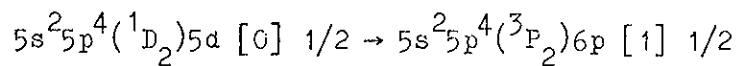


Figure I

Structure hyperfine de la transition



caractérisée par la très grande séparation du niveau 73 477 cm^{-1} .

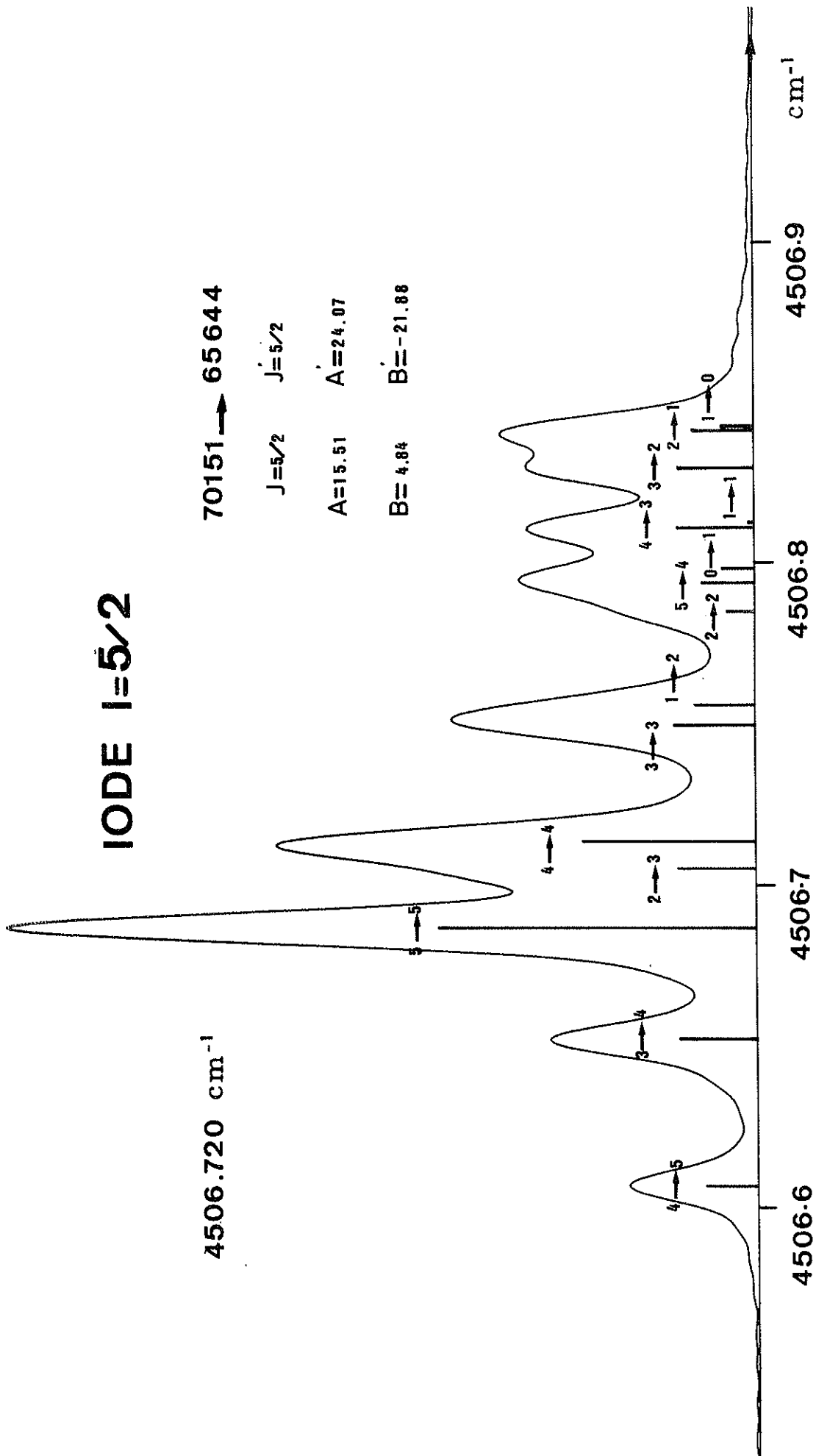
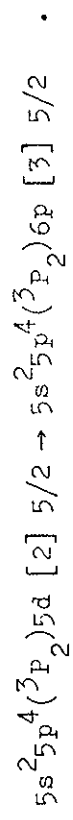


Figure II Structure hyperfine de la transition



15 composantes, dont 14 d'intensité non négligeable.

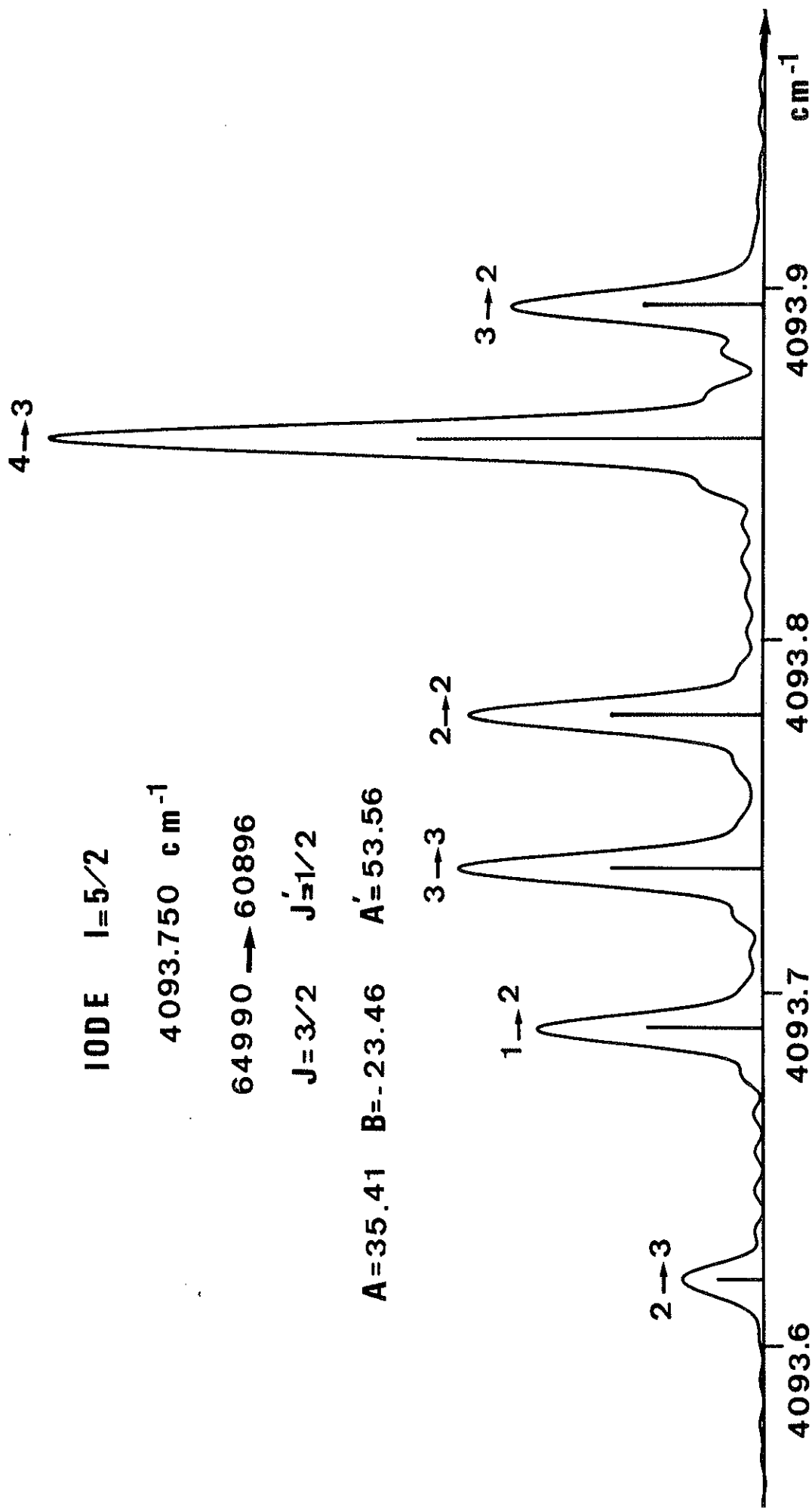
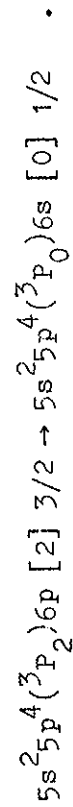


Figure III Structure hyperfine de la transition



6 composantes bien séparées.

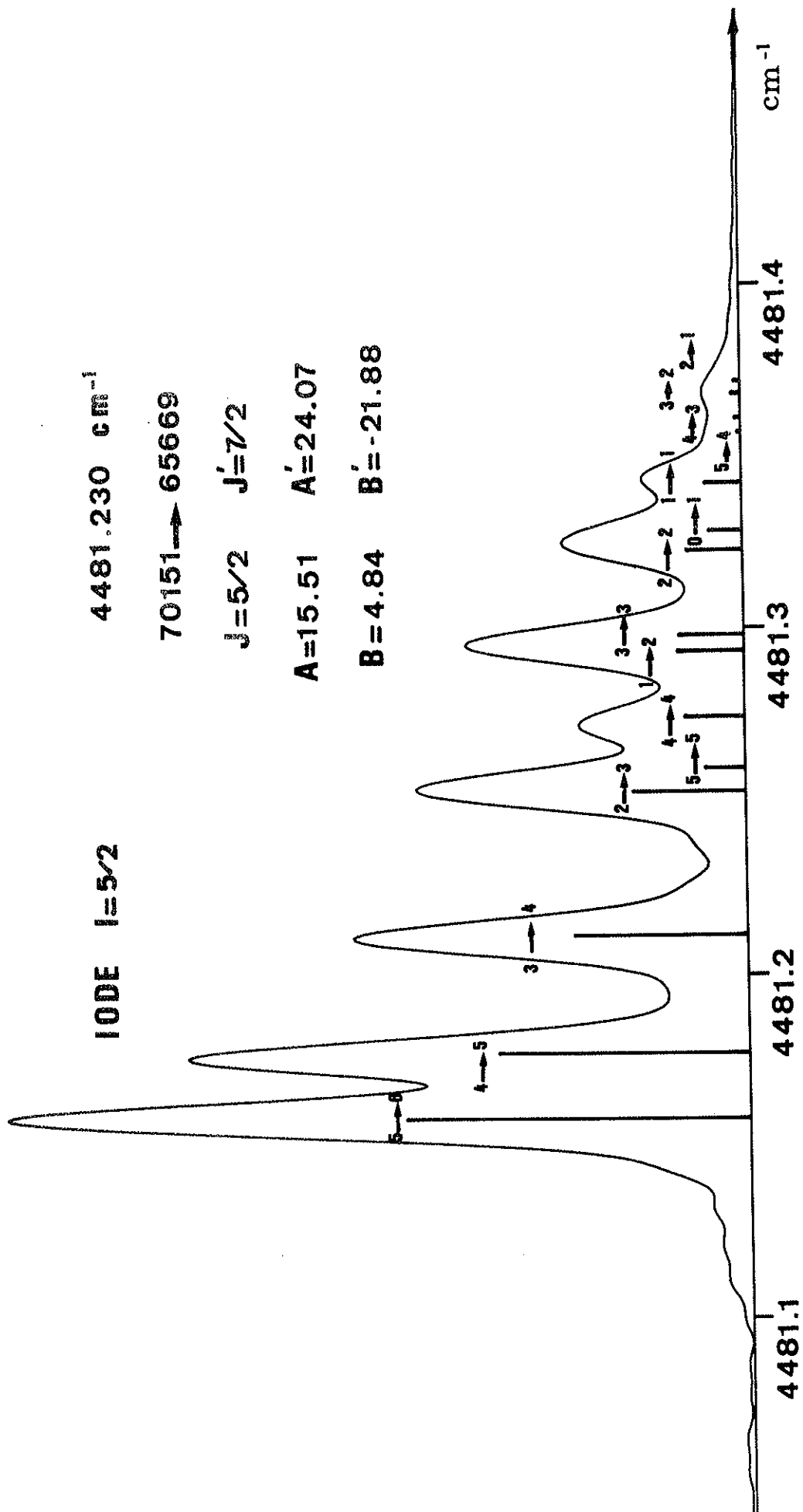
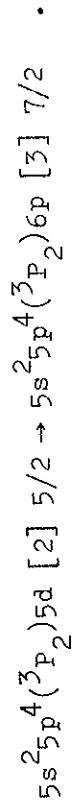


Figure IV Structure hyperfine de la transition



Les composantes $\Delta F = -1$ sont les plus grandes,

les composantes $\Delta F = 1$ sont très petites.

TABLEAU I

Tableau I : Spectre d'arc de l'iode entre 3000 et 11 500 cm^{-1} . Les constantes de structure hyperfine des niveaux sont exprimées en mK ($1 \text{ mK} = 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$).

NOMBRES D'ONDES WAVELENGTHS (cm^{-1})	LONGUEURS D'ONDE WAVELENGTHS (\AA)	INTENSITE INTENSITY	NOMBRES D'ONDES WAVELENGTHS (cm^{-1})	IMPAIRS ODD	PAIRS EVEN	J	IMP	PAIRS	A IMP	B IMP	A PAIR	B PAIR
3001.90	32756.02	1	3051.950	73054	76106	3/2	5/2					
3001.099	32650.57	2	3061.898	74965	71903	5/2	5/2	24.67	-24.18	30.39	-33.66	
3066.50	32390.32	1	3086.511	64906	61819	5/2	3/2					
3069.06	32363.27	5	3089.071	67062	70151	3/2	5/2	29.28	-0.97	15.56	3.98	
3091.70	32335.22	1	3091.729	72807	75898	3/2	5/2					
3113.95	32073.90	1										
3123.75	31983.00	1										
3145.75	31780.25	3	3145.777	75049	71903	3/2	5/2					
3145.75	31780.25	3	3145.87	82431	79285	3/2	1/2					
3267.60	30409.03	1	3287.601	75191	71903	5/2	5/2					
3290.321	30383.58	5	3290.319	75194	71903	7/2	5/2	18.88	-35.64	30.32	-33.14	
3292.70	30361.93	10	3292.704	67062	70354	3/2	3/2	29.13	0.05	21.08	23.17	
3299.43	30300.00	1	3299.384	72807	76106	3/2	5/2					
3299.43	30300.00	1	3299.456	79003	75704	7/2	9/2					
3326.546	30053.01	3	3326.546	75621	72294	3/2	3/2	27.75	0.26	33.44	-21.54	
3326.844	30032.27	1	3328.844	77306	73977	9/2	7/2	10.36	7.89	-1.89	1.77	
3329.00	30025.45	1	3329.565	77307	73977	7/2	7/2					
3329.00	30025.45	1	3329.618	77307	73977	5/2	7/2					
3359.77	29755.53	1	3359.794	73387	76746	1/2	3/2					
3361.00	29744.94	1	3361.041	71976	68615	3/2	1/2					
3369.75	29667.70	1	3369.711	72529	75898	5/2	5/2					
3385.10	29533.17	1	3385.087	77362	73977	9/2	7/2					
3403.60	28863.62	1	3463.600	79881	76417	3/2	1/2					
3403.95	28850.90	1	3463.95	79881	76417	1/2	1/2					
3511.937	26466.55	2	3511.953	77307	73795	7/2	5/2	13.64	40.8	2.33	3.9	

Tableau I (suite) (3)

NOMBRES D ONDES MESURES (CM ⁻¹)	LONGUEURS D ONDE AIR (Å)	INTENSITE	NOMBRES D ONDES CALCULES (CM ⁻¹)		NIVEAUX		J	IMP	J	PAIRS	A IMP	B IMP	A PAIR	B PAIR
			IMPAIRS	PAIRS	IMPAIRS	PAIRS								
3893.80	25574.65	1	3893.827	75049	78943	3/2	5/2							
3922.10	25489.27	1	3922.117	71976	75898	3/2	5/2							
3922.54	25486.73	1												
3923.18	25482.57	1												
3925.60	25465.56	1	3925.552	74965	78891	5/2	3/2							
3926.60	25460.58	3	3926.528	77404	73477	1/2	1/2							
3929.00	25444.63	6	3928.950	77406	73477	3/2	1/2							
3930.41	25384.03	3	3938.426	74965	78904	5/2	7/2							
3939.76	25375.20	1	3939.813	72807	76746	3/2	3/2							
3940.76	25368.89	1												
3941.25	25365.74	1	3941.273	79840	75898	5/2	5/2							
3941.25	25365.74	1	3941.322	72529	68587	5/2	5/2							
3941.58	25363.62	1												
3945.50	25338.10	1	3945.576	79844	75898	5/2	5/2							
3948.80	25317.24	1	3948.790	79847	75898	7/2	5/2							
3959.20	25250.74	7	3959.213	75191	79150	5/2	7/2							
3977.706	25133.26	4	3977.706	74965	78943	5/2	5/2			24.58	-25.46	17.68	-6.20	
3981.478	25109.45	2	3981.479	75049	79030	3/2	3/2			38.06	-23.67	21.20	5.46	
3982.20	25104.90	1	3982.208	75303	79285	1/2	1/2			65.08				6.18
4005.20	24960.73	1	4005.157	78592	74587	5/2	3/2							
4011.00	24924.04	1	4011.001	79834	75823	3/2	3/2							
4020.58	24865.25	1	4020.560	79844	75823	5/2	3/2							
4037.10	24763.01	1	4037.182	65856	61819	1/2	3/2							
4055.40	24591.12	1	4055.357	74965	79031	5/2	3/2							
4092.80	24426.13	1	4092.832	75303	79395	1/2	3/2							

Tableau I (suite) (4)

WAVELENGTHS (CM ⁻¹)	LONGUEURS D'ONDE AIR (Å)	INTENSITE	NOMBRES D'ONDES CALCULES (CM ⁻¹)		NIVEAUX IMPAIRS		NIVEAUX PAIRS		J IMP	J PAIRS	A IMP	B IMP	A PAIR	B PAIR
			IMPAIRS	PAIRS	IMPAIRS	PAIRS								
4093.75	24420.82	32	4093.751	64990	60896	3/2	1/2	35.41	-23.46	53.56				
4096.12	24406.59	7	4096.104	72807	76903	3/2	5/2							
4120.40	24262.40	1	4120.487	79834	75714	3/2	1/2							
4125.40	24232.99	1	4125.460	79829	75704	9/2	9/2							
4129.80	24207.47	1	4129.772	71976	76106	3/2	5/2							
4154.87	24061.58	5	4154.870	79858	75704	11/2	9/2							
4166.040	23982.09	1	4168.641	73387	77555	1/2	3/2	-31.57		36.07		-22.81		
4184.93	23888.74	1	4184.915	74965	79150	5/2	7/2							
4191.44	23851.64	2	4191.430	72807	68615	3/2	1/2	-0.51	16.24	94.41				
4212.97	23729.75	1	4212.942	71501	75174	1/2	1/2	8.51		25.22				
4217.77	23702.74	1	4217.796	72529	76746	5/2	3/2							
4219.299	23694.15	2	4219.305	72807	68587	3/2	5/2	-0.50	16.29	82.97			71.24	
4227.122	23650.14	1	4227.152	75191	79418	5/2	5/2	22.78	-19.68	15.06			4.30	
4235.77	23602.02	1	4235.760	75049	79285	3/2	1/2							
4241.02	23588.55	5	4241.829	77556	73114	3/2	1/2	3.40	1.33	33.39				
4259.50	23506.11	2	4289.556	77404	73114	1/2	1/2	-43.40		28.82				
4292.00	23292.80	1	4291.978	77406	73114	3/2	1/2	-21.97	-4.67	29.0				
4305.96	23227.97	1	4303.84	81207	76903	7/2	5/2							
4313.40	23150.14	5	4318.470	79829	75511	9/2	7/2							
4321.60	23132.06	1	4321.825	79833	75511	7/2	7/2							
4322.40	23128.72	2	4322.429	71501	75823	1/2	3/2							
4322.40	23128.72	2	4322.445	71813	76136	1/2	3/2							
4325.72	23111.23	1	4325.696	75621	79947	3/2	3/2							
4335.50	23053.51	1	4336.553	79847	75511	7/2	7/2							
4343.70	23015.57	1	4343.691	75049	79393	3/2	1/2							

Tableau I (suite) (6)

NUMERES D ONDES MEASURES (CM ⁻¹)	LONGUEURS D ONDE ALK (Å)	INTENSITE	NOMBRES D ONDES CALCULES (CM ⁻¹)		NIVEAUX IMPAIRS		NIVEAUX PAIRS		J IMP	J PAIRS	A IMP	B IMP	A PAIR	B PAIR
			1	2	IMPAIRS	PAIRS	IMPAIRS	PAIRS						
4755.766	21021.28	1	4755.786	75191	79947	5/2	3/2	22.94	-20.91	36.98	-23.95			
4770.20	20957.76	1	4770.202	71976	76746	3/2	3/2							
4771.43	20952.36	1	4771.449	73387	68615	1/2	1/2							
4806.10	20792.56	1	4808.07	81225	76417	1/2	1/2							
4809.45	20786.72	1	4809.42	81227	76417	3/2	1/2							
4814.46	20765.09	4	4814.434	74965	70151	5/2	5/2	24.7	-24.5	15.5	4.5			
4850.53	20670.34	2	4836.503	75191	70354	5/2	3/2							
4837.45	20666.41	6	4837.440	73387	68549	1/2	3/2	-31.43		60.55	36.11			
4841.60	20648.69	10	4841.606	67062	71903	3/2	5/2	29.08	-0.61	30.34	-34.23			
4847.26	20624.50	1												
4865.19	20548.57	1	4865.168	75049	79914	3/2	5/2							
4897.62	20412.51	1	4897.609	75049	79947	3/2	3/2							
4898.33	20409.55	1	4898.312	75049	70151	3/2	5/2							
4921.527	20313.35	1	4921.527	72529	77450	5/2	5/2	-5.75	12.67	27.55	-34.99			
4935.94	20262.25	2												
4937.40	20248.05	2	4937.413	78415	73477	3/2	1/2	60.38	15.44	294.77				
4946.251	20203.75	3	4948.231	75303	70354	1/2	3/2	65.02		21.14	22.71			
4949.05	20200.58	2	4949.047	74965	79914	5/2	5/2							
4955.55	20182.93	1	4953.272	78592	73639	5/2	3/2							
4957.20	20167.17	1	4957.11	80651	75704	7/2	9/2							
4960.717	20152.67	9	4960.717	65856	60896	1/2	1/2	57.29		53.55				
5012.445	19944.59	1	5012.452	77307	72294	5/2	3/2	10.78	-5.44	33.54	-20.7			
5025.90	19891.50	1	5025.881	79003	73977	7/2	7/2							
5026.624	19888.64	1	5026.643	72529	77555	5/2	3/2							
5040.136	19835.32	7	5040.136	75191	70151	5/2	5/2	22.53	-19.0	15.15	4.41			

Tableau I (suite) (8)

NOMBRES D'ONDES MILLIMÈRES (CM ⁻¹)	LONGUEURS D'ONDE AIR (Å)	INTENSITE	NOMBRES D'ONDES CALCULES (CM ⁻¹)		NIVEAUX IMPAIRS	NIVEAUX PAIRS	J IMP	J PAIRS	A IMP	B IMP	A PAIR	B PAIR
			IMPAIRS	PAIRS								
5354.84	18034.80	2	5354.840	64990	70354	3/2	3/2					
5380.57	18580.32	1										
5384.10	18568.14	1										
5387.88	18555.11	1	5387.85	75303	80690	1/2	3/2					
5390.93	18544.01	1	5390.88	75303	80693	1/2	1/2					
5409.721	18490.20	2	5409.723	77313	71903	7/2	5/2	8.96	7.26	30.29	-34.76	
5448.544	18348.52	22	5448.544	64906	70354	5/2	3/2	25.18	-19.18	20.90	23.07	
5452.40	18335.54	1	5452.364	80039	74587	3/2	3/2					
5455.63	18324.01	1	5455.849	77359	71903	5/2	5/2					
5458.91	18313.67	1	5458.865	71813	66355	1/2	3/2					
5470.25	18275.71	17	5470.226	75621	70151	3/2	5/2					
5474.01	18263.16	1	5473.934	71976	77450	3/2	5/2					
5479.40	18245.19	1	5479.38	75303	80782	1/2	3/2					
5482.10	18236.21	1	5482.09	75194	80676	7/2	7/2					
5484.85	18227.06	1	5484.81	75191	80676	5/2	7/2					
5488.00	18223.24	1	5486.04	75194	80680	7/2	5/2					
5495.60	18191.41	1	5495.59	81199	75704	9/2	9/2					
5502.35	18169.09	2	5502.338	73387	78889	1/2	1/2					
5503.35	18147.65	2	5508.836	72807	67298	3/2	1/2	-0.69	16.1	37.6		
5513.02	18133.93	2	5512.88	81217	75704	11/2	9/2					
5576.31	17921.08	3	5578.26	75191	80772	7/2	9/2					
5608.505	17825.19	4	5608.509	72807	78415	3/2	1/2	-0.44	15.93	13.58		
5630.80	17755.23	1	5630.58	75049	80680	3/2	5/2					
5641.45	17721.10	1	5641.40	75049	80680	3/2	3/2					
5677.72	17607.68	1	5677.80	75191	80869	5/2	7/2					

Tableau I (suite) (9)

NUMÉRIQUES DES LIGNES (CM ⁻¹)	LONGUEURS D'ONDE AIR (Å)	INTENSITÉ	NOMBRES D'ONDES		NIVEAUX		J	A IMP	B IMP	A PAIR	B PAIR
			CALCULÉS (CM ⁻¹)	IMPAIRS	PAIRS	IMP					
5080.65	17574.13	1	5668.68	51199	75511	9/2	7/2				
5090.60	17569.04	1	5690.49	51201	75511	7/2	7/2				
5090.95	17566.96	1	5690.92	75191	80682	5/2	5/2				
5110.55	17506.73	1	5710.51	74965	80676	5/2	7/2				
5114.50	17494.57	1	5714.46	74965	80690	5/2	5/2				
5125.30	17461.56	1	5725.28	74965	80690	5/2	5/2				
5140.90	17395.93	1	5746.822	79224	73477	3/2	1/2				
5150.20	17367.59	2	5756.270	73354	67298	3/2	1/2				
5154.92	17133.52	2	5834.924	73354	78689	3/2	1/2				
5156.59	17128.61	2	5836.589	73354	78691	3/2	3/2			6.38	19.07
5163.80	16976.75	1	5888.743	73354	78943	3/2	5/2				
5190.06	16950.04	1	5898.090	73387	79285	1/2	1/2				
5190.20	16784.47	1	5956.307	71976	66020	3/2	5/2				
5190.05	16645.59	3	6006.021	73387	79393	3/2	1/2				
5182.352	16436.52	1	6062.357	72807	78689	3/2	1/2				
5184.04	16431.96	2	6084.022	72807	78691	3/2	3/2				
5185.87	16418.92	3	6086.855	73387	87298	1/2	1/2	-31.49		37.60	
5185.90	16213.60	3	6165.667	67062	60696	3/2	1/2			53.62	
5174.059	16192.50	2	6174.069	72829	66355	5/2	3/2	-5.78	14.70	32.61	10.90
5230.67	16045.25	1	6230.576	73354	79285	3/2	1/2				
5235.75	16037.55	150	6235.748	65669	71903	7/2	5/2				
5259.56	15971.56	3	6259.261	65644	71903	5/2	5/2				
5299.57	15869.76	1									
5331.74	15789.13	4	6331.58	82035	75704	9/2	9/2				
5331.74	15789.13	1	6331.90	82036	75704	11/2	9/2				

TABLEAU I (suite) (10)

LONGUEUR D ONDES MESURÉE (CM-1)	LONGUEURS D ONDES AIR (Å)	INTENSITE	NUMERES D ONDES CALCULÉS (CM-1)	NUMERES TYPICALS	NUMERES TYP	U PAIRS	A TYP	B TYP	A PAIR	B PAIR
6430.00	15772.05	5	6435.657	73050	79593	3/2	1/2			
6441.32	15765.28	4	6441.300	73054	79595	5/2	3/2			
6452.000	15714.02	7	6451.015	72529	78891	5/2	3/2	-5.62	1.441	5.48 14.0
6474.90	15602.24	4	6474.879	72529	79004	5/2	7/2			
6477.75	15575.25	4	6477.775	74955	85587	5/2	5/2			
6480.50	15512.19	4	6480.549	79981	73477	5/2	1/2			
6485.10	15505.05	4	6485.095	74958	85559	5/2	7/2			
6487.72	15552.01	40	6487.704	87062	73477	5/2	1/2	25.14	-0.28	294.79
6490.70	15502.51	4	6490.692	74955	85549	5/2	3/2			
6493.00	15535.07	4	6493.079	78049	86615	5/2	1/2			
6497.30	15525.05	106	6497.322	85956	72294	1/2	3/2			33.46 -20.63
6500.72	15525.02	24	6500.695	73479	78415	5/2	1/2			
6501.00	15473.70	2	6501.654	75049	83537	5/2	5/2			
6503.14	15432.55	2	6503.109	72637	79235	5/2	1/2			
6505.20	15445.01	4	6505.227	78750	72294	1/2	3/2			
6507.80	15380.59	4	6507.771	75049	86649	5/2	3/2			
6501.80	15576.04	2	6501.812	78529	79032	5/2	3/2			
6508.715	15535.92	4	6508.743	72629	86649	5/2	5/2	-5.71	1.442	21.46 7.92
6511.10	15447.00	4	6511.153	72629	86615	5/2	7/2			
6514.07	15440.04	4	6514.030	73354	72294	5/2	5/2			
6515.00	15424.65	4	6515.046	75134	81760	7/2	9/2			
6517.172	15199.95	6	6517.110	87062	72639	5/2	3/2	29.14	-1.25	9.04 -9.04
6519.04	15179.45	6	6519.041	72637	79595	5/2	1/2			
6520.70	15175.24	4	6520.700	72637	79595	5/2	3/2			
6523.00	15150.02	4	6523.056	73481	84970	5/2	7/2			

Tableau I (suite) (11)

NUMEROS D ONDES MESURES (CM ⁻¹)	LONGUEURS D ONDE AIR (Å)	INTENSITE	NOMBRES D ONDES		NIVEAUX IMPAIRS	NIVEAUX PAIRS	J IMP	J PAIRS	A IMP	B IMP	A PAIR	B PAIR
			CALCULES (CM ⁻¹)	IMPAIRS								
6601.73	15143.41	1	6601.712	71815	78415	1/2	1/2					
6611.55	15121.57	1	6611.325	72807	79418	3/2	5/2					
6631.82	15074.70	15	6631.797	75191	68559	5/2	7/2					
6634.50	15068.01	1	6634.516	75194	68559	7/2	7/2					
6641.50	15052.50	1	6641.594	75191	68549	5/2	3/2					
6645.10	15044.57	1										
6650.407	15032.57	225	6650.405	65644	72294	5/2	3/2	24.08	-22.45	33.49	-21.07	
6652.45	15027.95	1				/2	/2					
6657.50	14949.53	1	6687.331	75303	68615	1/2	1/2					
6697.50	14926.56	1				/2	/2					
6699.505	14922.40	1	6699.505	73054	66355	3/2	3/2	2.13	-14.05	32.59	11.48	
6733.22	14847.68	3	6733.197	67062	73795	3/2	5/2					
6753.30	14803.53	1	6753.322	75303	68549	1/2	3/2					
6754.15	14801.67	1										
6758.50	14792.58	2										
6759.70	14730.05	1	6736.695	72807	66020	3/2	5/2					
6828.50	14640.50	1	6828.495	78732	71903	5/2	5/2					
6859.70	14559.06	1	6856.716	72529	79395	5/2	3/2					
6913.741	14450.00	100	6913.742	64990	71903	3/2	5/2	35.38	-23.43	30.41	-33.68	
6914.190	14459.06	5	6914.189	71501	78415	1/2	1/2	8.48		13.51		
6914.43	14458.56	1	6914.411	71976	78891	3/2	3/2					
6929.770	14426.55	1	6929.775	79224	72294	3/2	3/2	36.72	6.55	33.94	-20.55	
6940.567	14404.11	1	6940.566	78844	71903	7/2	5/2	18.76	-24.51	29.75	-28.18	
6952.46	14379.47	5	6952.499	77307	70354	5/2	3/2					
6959.00	14350.28	1	6966.565	71976	78943	3/2	5/2					

Tableau I (suite) (12)

LONGUEURS D ONDES MESUREES (CM-1)	LONGUEURS D ONDE AIR (Å)	INTENSITE	NOMBRES D ONDES CALCULES (CM-1)		NIVEAUX IMPAIRS	NIVEAUX PAIRS	J IMP	J PAIRS	A IMP	B IMP	A PAIR	B PAIR
			IMPAIRS	PAIRS								
6997.448	14287.02	200	6997.446	64906	71903	5/2	5/2	25.33	-19.17	30.41	-32.98	
7004.50	14272.02	35	7004.751	77359	70354	5/2	3/2					
7033.50	14213.79	1	7033.567	75621	68587	3/2	5/2					
7049.50	14181.53	1	7049.528	77404	70354	1/2	3/2					
7051.95	14176.50	15	7051.950	77406	70354	3/2	3/2					
7071.50	14136.51	1	7071.684	75621	68549	3/2	3/2					
7077.229	14125.95	5	7077.229	71813	78891	1/2	3/2	-5.85		6.61	13.04	
7110.50	14059.57	1										
7130.15	13970.18	7	7156.132	77307	70151	5/2	5/2					
7152.255	13958.27	140	7162.258	77313	70151	7/2	5/2	8.21	19.12	14.66	11.41	
7205.40	13958.91	25	7208.384	77359	70151	5/2	5/2					
7217.034	13952.52	1	7217.034	71813	79031	1/2	3/2	-5.97		21.23	5.11	
7255.60	13778.59	1	7255.583	77406	70151	3/2	5/2					
7257.85	13774.42	22	7257.847	65856	73114	1/2	1/2			28.86		
7304.667	13685.72	45	7304.887	64990	72294	3/2	3/2	35.33	-23.40	33.48	-20.62	
7305.50	13678.96	1	7308.498	71976	79285	3/2	1/2					
7359.70	13528.65	1	7389.706	71501	78891	1/2	3/2					
7405.75	13497.51	1	7406.710	79701	72294	1/2	3/2	158.67				
7410.45	13479.85	5	7416.430	71976	79393	3/2	1/2					
7457.642	13387.45	15	7457.641	75194	67726	7/2	9/2	18.98	-34.03	13.64	-29.76	
7529.512	13277.44	1	7529.512	71501	79031	1/2	3/2	8.67		21.09	5.55	
7579.20	13180.40	1	7579.247	71813	79393	1/2	1/2					
7581.95	13185.61	2	7581.939	71813	79395	1/2	3/2					
7602.970	13149.16	60	7602.970	7603	0	1/2	3/2					
7620.875	13118.27	40	7620.874	65856	73477	1/2	1/2	57.31		294.77		

Tableau I (suite) (13)

NOMBRES D ONDES MESURES (CM ⁻¹)	LONGUEURS D ONDE AIR (Å)	INTENSITE	NOMBRES D ONDES CALCULES (CM ⁻¹)		NIVEAUX IMPAIRS PAIRS		J IMP	J PAIRS	A IMP	B IMP	A PAIR	B PAIR
			IMPAIRS	PAIRS	IMPAIRS	PAIRS						
7685.431	13008.07	1	7685.432	73387	81072		1/2	3/2				
7700.85	12982.03	1										
7709.65	12967.21	1										
7751.20	12897.70	1	7751.186	75049	67298		3/2	1/2				
7762.34	12846.09	4	7782.340	65856	73639		1/2	3/2	57.04		8.97	-9.12
7765.80	12843.68	1	7783.793	71501	79285		1/2	1/2				
7807.50	12707.04	1	7867.47	81506	73639		1/2	3/2				
7891.72	12668.04	1	7891.725	71501	79393		1/2	1/2				
7894.41	12663.73	1	7894.417	71501	79395		1/2	3/2				
8004.75	12489.17	1	8004.737	75303	67298		1/2	1/2			37.34	
8060.50	12462.78	15	8060.413	78415	70354		3/2	3/2				
8124.83	12304.58	150	8124.812	64990	73114		3/2	1/2	35.40	-23.55	28.88	
8125.34	12303.81	25	8125.339	65669	73795		7/2	5/2				
8150.85	12265.30	11	8150.852	65644	73795		5/2	5/2				
8237.737	12135.94	105	8237.738	78592	70354		5/2	3/2	67.47	67.82	21.14	22.42
8261.12	12097.19	13	8264.046	78415	70151		3/2	5/2				
8307.727	12033.69	500	8307.727	65669	73977		7/2	7/2	19.56	-36.57	-1.86	0.71
8314.75	12023.56	34	8314.723	71501	63186		1/2	1/2				
8333.237	11996.86	450	8333.239	65644	73977		5/2	7/2	23.97	-21.00	-1.95	1.56
8487.840	11778.34	320	8487.840	64990	73477		3/2	1/2			294.76	
8527.20	11588.07	37	8527.200	71813	63186		1/2	1/2				
8549.305	11558.46	350	8549.306	64990	73639		3/2	3/2	35.36	-23.67	9.04	-9.30
8594.40	11496.43	18	8594.421	75049	66355		3/2	3/2				
8719.45	11465.47	15	8719.421	77307	68587		7/2	5/2				
8719.45	11465.47	13	8719.474	77307	68587		5/2	5/2				

Tableau I (suite) (15)

NUMEROS D ONDES MEASUREES (CM ⁻¹)	LONGUEURS D ONDE AIR (Å)	INTENSITE	NOMBRES D ONDES CALCULES (CM ⁻¹)		NIVEAUX IMPAIRS	NIVEAUX PAIRS	J IMP	J PAIRS	A IMP	B IMP	A PAIR	B PAIR
			IMPAIRS	PAIRS								
9071.425	11020.61	850	9071.425	64906	73977	5/2	7/2	25.20	-19.30	-1.96	0.8	
9074.275	11017.15	140	9074.273	67062	76136	3/2	3/2	29.13	-0.66	4.64	5.34	
9173.663	10997.63	12	9173.587	75194	66020	7/2	5/2					
9176.634	10994.61	12	9176.313	75191	66015	5/2	7/2					
9179.607	10991.67	12	9179.032	75194	66015	7/2	7/2					
9346.680	10995.92	50	9346.757	79701	70354	1/2	3/2					
9352.666	10989.23	10	9352.60	72807	82159	3/2	3/2					
9355.668	10985.77	73	9355.653	67062	76417	3/2	1/2					
9435.318	10539.72	15	9435.318	79840	70354	5/2	3/2	3.46	12.44	20.44	19.58	
9507.20	10515.43	39	9507.247	65669	75177	7/2	5/2					
9551.596	10466.59	9999	9551.595	65644	56092	5/2	3/2	23.91	-22.54	17.87	-14.44	
9580.17	10435.67	87	9580.144	77306	67726	9/2	9/2					
9597.421	10416.61	100	9597.421	64990	74587	3/2	3/2	35.30	-24.24	17.36	2.18	
9620.42	10391.71	1050	9620.406	72807	63186	3/2	1/2					
9635.713	10375.22	800	9635.713	77362	67726	11/2	9/2	11.21	-1.52	13.33	-33.20	
9666.40	10374.48	16	9636.387	77362	67726	9/2	9/2					
9681.10	10326.67	19	9681.125	64906	74587	5/2	3/2					
9681.75	10325.68	55	9681.702	71501	61819	1/2	3/2					
9684.90	10322.62	25	9684.848	67062	76746	3/2	3/2					
9684.90	10322.62	25	9684.945	80039	70354	3/2	3/2					
9690.50	10310.17	13	9696.461	79847	70151	7/2	5/2					
9704.077	10238.82	1700	9764.079	65956	56092	1/2	3/2	57.08		17.45	-11.71	
9827.668	10172.66	96	9827.388	78415	66587	3/2	5/2	60.35	15.82	82.94	71.54	
9841.141	10158.64	160	9841.139	65669	75511	7/2	7/2	19.57	-36.23	12.80	-11.46	
9857.60	10141.78	57	9857.463	65856	75714	1/2	1/2	57.43				

Tableau I (suite) (16)

LONGUEURS D ONDES MESURES (CM ⁻¹)	LONGUEURS D ONDE AIR (Å)	INTERSITE	NOMBRES D ONDES CALCULES (CM ⁻¹)		NIVEAUX		J IMP	J PAIRS	A IMP	B IMP	A PAIR	B PAIR
			IMPAIRS	PAIRS	IMPAIRS	PAIRS						
9805.60	10133.45	3	9865.504	78415	68549	3/2	3/2					
9807.87	10131.12	400	9867.840	73054	63186	3/2	1/2					
9994.20	10003.06	350	9994.180	71813	61819	1/2	3/2					
10004.713	9992.55	34	10004.713	78592	68587	5/2	5/2	67.54	68.73	82.92	72.60	
10034.14	9963.24	500	10034.151	65669	75704	7/2	9/2					
10042.829	9954.02	160	10042.829	78592	68549	5/2	3/2	67.36	68.90	60.41	37.36	
10053.306	9959.00	34	10058.308	77356	67298	3/2	1/2	0.98	3.87	38.06		
10103.15	9893.23	5										
10108.004	9892.57	14	10106.034	77404	67298	1/2	1/2	-43.61		37.99		
10108.456	9890.00	10	10108.456	77406	67298	3/2	1/2	-21.98	-4.12	38.22		
10107.000	9842.73	94	10156.997	71976	61819	3/2	3/2					
10187.240	9813.51	80	10187.241	64990	75177	3/2	5/2	35.03	-24.17	9.70	-4.99	
10200.424	9800.83	400	10200.426	73387	63186	1/2	1/2					
10270.945	9733.53	130	10270.945	64906	75177	5/2	5/2	25.30	-19.62	9.88	-3.41	
10272.830	9731.75	5400	10272.830	64906	54633	5/2	5/2	25.32	-18.67	47.29	-35.87	
10279.440	9725.45	42	10279.443	67062	76136	3/2	3/2					
10300.534	9653.09	3000	10356.534	64990	54633	3/2	5/2	35.36	-24.20	47.24	-35.23	
10300.255	9649.53	250	10360.256	65644	76004	5/2	7/2	24.10	-22.00	16.03	-20.86	
10413.737	9598.22	300	10415.736	79003	68587	7/2	5/2	49.60	70.95	83.15	69.17	
10433.55	9579.08	5	10436.560	65669	76106	7/2	5/2					
10491.90	9528.55	5	10491.928	65644	76136	5/2	3/2					
10493.73	9526.99	3	10493.694	67062	77555	3/2	3/2					
10533.50	9490.92	3										
10500.622	9466.36	11	10560.823	65856	76417	1/2	1/2	57.45		48.34		
10504.841	9427.07	190	10604.840	64906	75511	5/2	7/2	25.45	-18.98	12.96	-8.85	

Tableau I (suite) (17)

NOMBRES D ONDES MESURÉS (CM ⁻¹)	LONGUEURS D ONDE AIR (Å)	INTENSITE	NOMBRES D ONDES CALCULÉS (CM ⁻¹)		NIVEAUX IMPAIRS	NIVEAUX PAIRS	J IMP	J PAIRS	A IMP	B IMP	A PAIR	B PAIR
			IMPAIRS	PAIRS								
10200.20	9426.71	300	10605.237	71501	60896	1/2	1/2					
10200.20	9424.08	5										
10300.503	9398.74	17	10636.797	79224	68587	3/2	5/2	36.40	2.10	83.05	68.95	
10374.95	9305.16	5	10674.913	79224	68549	3/2	3/2					
10709.403	9335.03	800	10709.403	72529	61819	5/2	3/2	-5.90	15.06	22.46	16.15	
10724.429	9321.95	45	10724.429	64990	75714	3/2	1/2	35.52	-22.82	25.73		
10833.94	9227.72	35	10833.915	64990	75823	3/2	3/2					
10890.00	9180.22	15	10890.018	65856	76746	1/2	3/2					
10917.67	9156.95	33	10917.619	64906	75823	5/2	3/2					
10917.07	9156.95	33	10917.715	71813	60896	1/2	1/2					
10952.245	9128.04	53	10952.240	77307	66355	5/2	3/2	10.06	3.95	32.53	12.05	
10989.20	9113.87	2500	10989.249	67062	56092	3/2	3/2					
10987.42	9098.82	250	10987.386	72807	61819	3/2	3/2					
11001.00	9067.19	30	11001.543	77356	66355	3/2	3/2					
11011.00	9079.34	80	11011.016	65644	54633	5/2	5/2					
11030.528	9058.33	4800	11036.528	65669	54633	7/2	5/2	46.98		-35.55		
11050.54	9022.35	800	11080.532	71976	60896	3/2	1/2					
11110.551	8993.13	27	11116.554	64990	76106	3/2	5/2	35.94	-25.61	7.71	-20.32	
11140.409	8969.04	21	11146.409	64990	76136	3/2	3/2	35.57	-21.44	4.79	5.22	
11151.643	8964.06	29	11151.648	79701	68549	1/2	3/2	158.26		60.48	36.80	
11200.261	8925.91	20	11200.258	64906	76106	5/2	5/2	25.63	-18.83	7.76	-20.34	
11234.80	8898.47	200	11234.819	73054	61319	3/2	3/2					
11250.80	8879.50	5	11258.793	65644	76903	5/2	5/2					
11259.00	8878.71	5	11259.823	79847	68587	7/2	5/2					
11273.45	8867.96	5	11273.415	79833	68559	7/2	7/2					

Tableau I (suite et fin) (18)

NOMBRES D ONDES CALCULES (CM ⁻¹)	LONGUEURS D ONDE AIR (Å)	INTENSITE	NOMBRES D ONDES CALCULES (CM ⁻¹)		NIVEAUX IMPAIRS PAIRS		J IMP	J PAIRS	A IMP	B IMP	A PAIR	B PAIR
			IMPAIRS	PAIRS	IMPAIRS	PAIRS						
11286.85	8557.44	90	11286.812	77307	66020	7/2	5/2					
11286.85	8557.44	90	11286.864	77307	66020	5/2	5/2					
11291.535	8553.76	140	11291.535	77306	66015	9/2	7/2					
11292.25	8553.18	38	11292.257	77307	66015	7/2	7/2					
11292.28	8553.15	38	11292.310	77307	66015	5/2	7/2					
11298.45	8548.34	5	11298.436	77313	66015	7/2	7/2					
11300.03	8547.10	54	11500.030	79859	68559	9/2	7/2					
11335.20	8818.58	5	11336.167	77356	66020	3/2	5/2					
11339.10	8816.62	15	11339.116	77359	66020	5/2	5/2					
11344.53	8812.40	3	11344.562	77359	66015	5/2	7/2					
11371.95	8791.15	3										
11385.20	8780.15	3	11386.315	77406	66020	3/2	5/2					
11427.759	8748.20	11	11427.789	64990	76417	3/2	1/2	35.54	-24.44	48.87		
11451.95	8729.74	5	11451.920	80039	68587	3/2	5/2					
11490.05	8700.77	32	11490.036	80039	68549	3/2	3/2	75.17	30.55	60.30	38.49	

Tableau II : Niveaux d'énergie des configurations paires. Les constantes de structure hyperfine des niveaux sont exprimées en mK ($1 \text{ mK} = 10^{-5} \text{ cm}^{-1}$). Les valeurs calculées sont obtenues à l'aide des valeurs des constantes monoélectroniques portées dans le Tableau IX.

Niveaux d'Energie (cm^{-1})	Configurations paires	$A_{\alpha J}$		$B_{\alpha J}$	
		Expériment. ($\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$)	Calculé ($\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$)	Experiment ($\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$)	Calculé ($\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$)
54 633.460	$5p^4 ({}^3P_2) 6s [2] 5/2$	47.27 (0.1)	38.90	-35.54 (0.3)	-34.6
56 092.881	$[2] 3/2$	17.75 (0.3)	19.20	-13.3 (1.)	-14.3
61 819.779	$5p^4 ({}^3P_1) 6s [1] 3/2$	22.57 (0.1)	21.55	14.5 (1.)	16.2
63 186.758	$[1] 1/2$		14.49		
60 896.243	$5p^4 ({}^3P_0) 6s [0] 1/2$	53.58 (0.05)	59.06		
68 587.859	$5p^4 ({}^1D_2) 6s [2] 5/2$	82.99 (0.1)	62.21	71.76 (1.)	68.3
68 549.743	$[2] 3/2$	60.47 (0.1)	52.76	36.70 (1.)	37.8
71 903.736	$5p^4 ({}^3P_2) 7s [2] 5/2$	30.36 (0.05)	26.11	-33.82 (1.)	-32.4
72 294.881	$[2] 3/2$	33.53 (0.1)	31.83	-20.82 (0.5)	-20.2
78 891.187	$5p^4 ({}^3P_1) 7s [1] 3/2$	6.49 (0.2)	2.28	15.37 (2.)	22.1
79 285.273	$[1] 1/2$	6.2 (0.3)	-3.15		
78 415.670	$5p^4 ({}^3P_0) 7s [0] 1/2$	13.55 (0.05)	6.88		

Tableau II (suite 1)

Niveaux d'Energie (cm^{-1})	Configurations paires	$A_{\alpha J}$		$B_{\alpha J}$	
		Expériment. ($\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$)	Calculé ($\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$)	Experiment ($\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$)	Calculé ($\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$)
77 450.709	$5p^4 ({}^3P_2) 8s [2] 5/2$	27.23 (0.05)		-34.64 (0.5)	
77 555.824	$[2] 3/2$	36.07 (0.2)		-22.81 (0.8)	
79 914.682	$5p^4 ({}^3P_2) 9s [2] 5/2$				
79 947.123	$[2] 3/2$	36.98 (0.1)		-23.95 (1.)	
67 726.415	$5p^4 ({}^3P_2) 5d [4] 9/2$	13.49 (0.1)	13.54	-31.48 (2.)	-34.7
68 559.540	$[4] 7/2$	17.55 (0.1)	15.72	-27.45 (4.)	-23.4
66 015.023	$[3] 7/2$	10.12 (0.1)	10.69	11.24 (1.)	4.3
66 020.469	$[3] 5/2$	21.59 (0.2)	19.09	4. (4.)	4.9
70 151.201	$[2] 5/2$	15.46 (0.1)	19.34	4.10 (0.5)	13.17
70 354.834	$[2] 3/2$	21.08 (0.1)	21.60	22.80 (0.5)	23.4
66 355.093	$[1] 3/2$	32.59 (0.05)	31.01	10.96 (0.5)	8.3
67 298.328	$[1] 1/2$	37.80 (0.2)	51.65		
68 615.734	$[0] 1/2$	94.46 (0.1)	104.68		

Tableau II (suite 2)

Niveaux d'Energie (cm^{-1})	Configurations paires	$A_{\alpha J}$		$B_{\alpha J}$	
		Expériment. ($\times 10^{+3} \text{ cm}^{-1}$)	Calculé ($\times 10^{+2} \text{ cm}^{-1}$)	Expériment. ($\times 10^{+3} \text{ cm}^{-1}$)	Calculé ($\times 10^{+3} \text{ cm}^{-1}$)
73 977.715	$5p^4 (^3P_1) 5d [3] 7/2$	-1.92 (0.1)	1.41	1.21 (0.5)	3.4
75 177.235	$[3] 5/2$	9.79 (0.1)	5.81	-4.20 (1.)	-5.3
75 898.893	$[2] 5/2$	4.33 (0.1)	6.64	11.31	2.9
75 823.909	$[2] 3/2$	11.49 (0.3)	22.86	-3.26 (0.5)	-0.2
74 587.415	$[1] 3/2$	17.47 (0.1)	13.68	1. (1.)	0.9
73 114.807	$[1] 1/2$	28.86 (0.05)	7.81		
73 795.327	$5p^4 (^3P_0) 5d [2] 5/2$	0.70 (1.)	1.23	5.0 (1.)	(-6.15)
73 639.300	$[2] 3/2$	9.01 (0.05)	6.68	-9.34 (0.5)	-10.3
(82 144.51)	$5p^4 (^1D_2) 5d [4] 9/2$				82.2
(82.041.17)	$[4] 7/2$				
(82 235.47)	$[3] 7/2$				
81 072.615	$[3] 5/2$				
	$[2] 5/2$				
	$[2] 3/2$				
	$[1] 3/2$		6.29		-19.4

Tableau II (suite 3)

Niveaux d'Energie (cm^{-1})	Configurations paires	$A_{\alpha J}$		$B_{\alpha J}$	
		Expériment. ($\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$)	Calculé ($\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$)	Expériment. ($\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$)	Calculé ($\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$)
73 477.834	[1] 1/2	294.77 (0.02)	294.88		
75 704.140	[0] 1/2				
76 004.731	$5p^4 (^3P_2) 6d [4] 9/2$		13.58		-35.6
76 511.130	[4] 7/2	16.03 (0.1)	14.81	-20.86 (1.)	-21.9
76 106.548	[3] 7/2	12.88 (0.1)	13.69	-10.15 (1.)	-13.8
76 903.269	[3] 5/2	7.74 (0.1)	10.69	-20.33 (1.)	-14.1
76 746.978	[2] 5/2		11.52		12.7
76 136.403	[2] 3/2		-5.90		1.5
76 417.783	[1] 3/2	4.72 (0.1)	-4.80	5.28 (1.)	8.0
75 714.423	[1] 1/2	48.63 (0.3)	19.33		
79 054.985	[0] 1/2	25.33 (0.4)	39.68		
79 150.550	$5p^4 (^3P_2) 7d [4] 9/2$				
78 904.061	[4] 7/2				
	[3] 7/2				

Tableau II (suite 4)

Niveaux d'Energie (cm^{-1})	Configurations paires	$A_{\alpha J}$		$B_{\alpha J}$	
		Expériment. ($\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$)	Calculé ($\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$)	Expériment. ($\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$)	Calculé ($\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$)
78 943.341	[3] 5/2	17.68 (0.1)		(-6.20) (1.)	
79 418.489	[2] 5/2	15.06 (0.1)		(4.30) (1.)	
79 395.897	[2] 3/2				
79 030.992	[1] 3/2	21.17 (0.1)		5.37 (0.5)	
78 889.521	[1] 1/2				
79 393.205	[0] 1/2				

Tableau III : Niveaux d'énergie des configurations impaires. Les constantes de structure hyperfine des niveaux sont exprimées en mK ($1 \text{ mK} = 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$). Les valeurs calculées sont obtenues à l'aide des valeurs des constantes monoélectriques portées dans le Tableau IX.

Niveaux d'Énergie (cm^{-1})	Configurations impaires	$A_{\alpha J}$		$B_{\alpha J}$	
		Expériment. ($\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$)	Calculé ($\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$)	Expériment. ($\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$)	Calculé ($\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$)
0.000	$5s^2 5p^5$	27.59 (0.05)		38.18 (0.1)	
7 602.970	$2P_{3/2}$ $2P_{1/2}$	219.75 (0.1)			
65 669.988	$5s^2 5p^4 ({}^3P_2) 6p [3] 7/2$	19.57 (0.05)	18.80	-36.84 (0.5)	-35.24
65 644.476	$[3] 5/2$	24.03 (0.1)	23.61	-22.04 (0.5)	-21.43
64 906.290	$[2] 5/2$	25.31 (0.1)	23.52	-18.86 (1.)	-18.39
64 989.994	$[2] 3/2$	35.38 (0.1)	34.45	-23.56 (1.)	-22.85
67 062.130	$[1] 3/2$	29.13 (0.05)	28.30	-0.45 (0.5)	0.08
65 856.960	$[1] 1/2$	57.25 (0.05)	58.11		
72 529.182	$5s^2 5p^4 ({}^3P_1) 6p [2] 5/2$	-5.79 (0.05)	-3.55	14.19 (0.5)	12.08
72 807.164	$[2] 3/2$	-0.53 (0.1)	0.82	16.14 (0.2)	15.70
73 054.598	$[1] 3/2$	2.18 (0.05)	2.57	-14.58 (0.5)	-12.94
73 387.184	$[1] 1/2$	-31.46 (0.05)	-26.75		
71 501.480	$[0] 1/2$	8.50 (0.05)	10.76		

Tableau III (suite 1)

Niveaux d'Énergie (cm^{-1})	Configurations impaires	$A_{\alpha J}$		$B_{\alpha J}$	
		Expériment. ($\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$)	Calculé ($\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$)	Expériment. ($\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$)	Calculé ($\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$)
71 976.775	$5s^2 5p^4 ({}^3P_0) 6p [1] 3/2$		0.54		-1.34
71 813.958	[1] 1/2	-6.01 (0.1)	-4.80		
79 003.596	$5s^2 5p^4 ({}^1D_2) 6p [3] 7/2$	49.60 (0.1)	44.55	70.95 (1.)	70.35
78 592.572	[3] 5/2	67.46 (0.1)	62.30	68.48 (0.5)	65.77
(80 125.45)	[2] 5/2		50.70		33.63
80 039.779	[2] 3/2	75.17 (0.1)	75.01	30.55 (1.)	28.96
78 415.247	[1] 3/2	60.38 (0.1)	63.41	* 15.44 (0.5)	27.97
79 701.591	[1] 1/2	158.47 (0.2)	162.10		
75 194.056	$5s^2 5p^4 ({}^3P_2) 7p [3] 7/2$	18.91 (0.05)	18.37	-35.00 (1.)	-34.60
75 191.337	[3] 5/2	22.75 (0.2)	23.54	-19.86 (1.)	-24.88
74 965.635	[2] 5/2	24.73 (0.2)	22.07	-23.42 (1.)	-18.60
75 049.514	[2] 3/2	38.07 (0.1)	36.43	-23.60 (1.)	-21.05
75 621.427	[1] 3/2	27.76 (0.05)	28.09	0.41 (0.5)	-0.91
75 303.065	[1] 1/2	65.07 (0.05)	65.21		

Tableau III (suite 2)

Niveaux d'Energie (cm^{-1})	Configurations impaires	$A_{\alpha J}$		$B_{\alpha J}$	
		Expériment. ($\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$)	Calculé ($\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$)	Expériment. ($\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$)	Calculé ($\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$)
78 844.303	$5s^2 5p^4 ({}^3P_2) 8p [3] 7/2$	18.76 (1.0)		-24.5 (5.)	
78 854.747	[3] 5/2				
78 732.231	[2] 5/2				
(78 815.44)	[2] 3/2				
79 224.656	[1] 3/2	36.56 (0.2)		4.32 (2.)	
78 780.107	[1] 1/2				
77 362.128	$5s^2 5p^4 ({}^3P_2) 4f [5] 11/2$	11.21 (0.1)	10.7	-1.52 (1.)	
77 362.802	[5] 9/2	14.03 (1.)	13.0	0.95 (2.)	
77 306.559	[4] 9/2	10.37 (0.5)	9.0	7.89 (1.)	
77 307.280	[4] 7/2		11.7		
77 313.459	[3] 7/2	8.93 (0.5)	6.1	9.0 (2.)	
77 307.333	[3] 5/2	10.7 (1.)	8.9	(-5.) douteux	
77 359.585	[2] 5/2	-0.3 (0.1)	0.1	20.0 (1.)	
77 356.636	[2] 3/2	3.25 (0.5)	0.7	2. (1.)	

Tableau III (suite 3)

Niveaux d'Energie (cm^{-1})	Configurations impaires	$A_{\alpha J}$		$B_{\alpha J}$	
		Expériment. ($\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$)	Calculé ($\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$)	Expériment. ($\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$)	Calculé ($\times 10^3 \text{ cm}^{-1}$)
77 406.784	[1] 3/2	-21.98 (0.1)	-19.9	-4.78 (0.1)	
77 404.362	[1] 1/2	-43.49 (0.1)	-39.3		
79 859.01	$5s^2 5p^4 ({}^3P_2) 5f [5] 11/2$				
79 859.570	[5] 9/2				
79 829.600	[4] 9/2				
79 832.955	[4] 7/2				
79 847.683	[3] 7/2				
79 844.469	[3] 5/2				
79 840.152	[2] 5/2	3.46 (1.)		12.44 (2.)	
(79 834.91)	[2] 3/2				
79 881.383	[1] 3/2				
79 881.733	[1] 1/2				

Tableau IV Valeurs obtenues pour les intégrales radiales dans l'étude paramétrique des configurations paires: $5s^2 5p^4 (6s+5d+7s+6d) + 5s5p^6$.

$5s5p^6$	A	100 000.	Fixé
$5s^2 5p^4 6s$	A	81 517.	(117.)
	$F^2(5p,5p)$	34 215.	Fixé
	ζ_{5p}	5 692.	Fixé
	$G^1(5p,6s)$	1 965.	(131.)
$5s^2 6p^4 7s$	A	97 287.	(53.)
	$F^2(5p,5p)$	34 750.	Fixé
	ζ_{5p}	5 692.	Fixé
	$G^1(5p,7s)$	491.	Egal $G^1(5p,7s) \times p^2$
$5s^2 5p^4 5d$	A	81 488.	(88.)
	$F^2(5p,5p)$	38 176.	Fixé
	ζ_{5p}	5 494.	Fixé
	$F^2(5p,5d)$	8 699.	(516.)
	$G^1(5p,5d)$	3 656.	(171.)
	$G^3(5p,5d)$	4 204.	(249.)
ζ_{5d}		98.	(33.)

$$p = 0.5 \quad p^2 = 0.25$$

Tableau IV (suite 1)

$5s^2 5p^4 6d$	A	87 929.	(45.)		
	$F^2(5p, 5p)$	38 176.	Fixé		
	ζ_{5p}	5 494.	Fixé		
	$F^2(5p, 6d)$	3 416.	(613.)		
	$G^1(5p, 6d)$	1 536.	Egal	$G^1(5p, 5d) \times q^2$	$q = 0.65 \quad q^2 = 0.42$
	$G^3(5p, 6d)$	1 766.	Egal	$G^3(5p, 6d) \times q^2$	
	ζ_{6d}	41.	Egal	$\zeta_{5d} \times q^2$	
<hr/>					
$R^1(5p5p, 5s6s)$		-10 791.	Fixé		$5s5p^6 - 5s^2 5p^4 6s$
$R^1(5p5p, 5s7s)$		- 5 395	Egal	$R^1(5p5p, 5s6s) \times p$	$5s5p^6 - 5s^2 5p^4 7s$
$R^1(5p5p, 5s5d)$		13 899.	Fixé		$5s5p^6 - 5s^2 5p^4 5d$
$R^1(5p5p, 5s6d)$		9 034.	Egal	$R^1(5p5p, 5s5d) \times q$	$5s5p^6 - 5s^2 5p^4 6d$
$R^1(5p6s, 5d5p)$		- 2 287.	(311.)		} $5s^2 5p^4 6s - 5s^2 5p^4 5d$
$R^2(5p6s, 5p5d)$		- 5 944.	(441.)		
$R^1(5p6s, 7s5p)$		983.	Egal	$G^1(5p, 6s) \times p$	$5s^2 5p^4 6s - 5s^2 5p^4 7s$
$R^1(5p6s, 6d5p)$		- 1 487.	Egal	$R^1(5p6s, 5d5p) \times q$	} $5s^2 5p^4 6s - 5s^2 5p^4 6d$
$R^2(5p6s, 5p6d)$		0.	Fixé		

Tableau IV (suite 2)

$R^1(5p5d, 7s5p)$	- 1 143.	Egal $R^1(5p5d, 6s5p) \times p$	} $5s^2 5p^4 5d - 5s^2 5p^4 7s$
$R^2(5p5d, 5p7s)$	- 2 321.	(949.)	
$R^1(5p5d, 6d5p)$	2 376.	Egal $G^1(5p, 5d) \times q$	} $5s^2 5p^4 5d - 5s^2 5p^4 6d$
$R^3(5p5d, 6d5p)$	2 733.	Egal $G^3(5p, 5d) \times q$	
$R^2(5p5d, 5p6d)$	4 329.	(295.)	
ζ_{5d-6d}	0.	Fixé	
$R^1(5p7s, 6d5p)$	- 755.	Egal $R^1(5p6s, 5p5d) \times pq$	} $5s^2 5p^4 7s - 5s^2 5p^4 6d$
$R^2(5p7s, 5p6d)$	0.	Fixé	

$$\overline{\Delta E} = \left[\frac{\sum \Delta E^2}{N-P} \right]^{\frac{1}{2}} = 104 \text{ cm}^{-1}$$

$$\overline{\Delta g} = \left[\frac{\sum \Delta g^2}{n} \right]^{\frac{1}{2}} = 0.16$$

N = 39

P = 14

pour n=17 facteurs de Landé expérimentaux

Tableau V Valeurs calculées et expérimentales de l'énergie et des facteurs de Landé des niveaux des configurations paires.

Energie Expérimentale	Energie Calculée	Ecart	g expériment.	g calculé
J=1/2				
60 896.	60 629.	267.	2.561	2.496
63 187.	63 162.	25.	0.799	0.849
67 298.	67 386.	-88.		0.722
68 615.	68 431.	184.		1.936
73 115.	73 097.	18.		1.032
73 477.	73 555.	-78.		1.598
75 714.	75 830.	-116.	0.80	1.166
76 418.	76 337.	81.		1.744
78 416.	78 415.	1.		2.208
79 285.	79 168.	117.		1.135
	81 868.			0.431
	83 885.			0.698
J=3/2				
56 093.	56 077.	16.	1.385	1.374
61 819.	61 942.	-123.	1.618	1.625
66 355.	66 338.	17.	0.828	1.164
68 549.	68 600.	-51.		1.035
70 354.	70 401.	-47.	(1.96)	1.148
72 294.	72 286.	8.		1.332
73 639.	73 663.	-24.		0.887
74 587.	74 423.	164.	0.78	0.917
75 823.	75 776.	47.	1.41	1.390
76 136.	76 116.	20.	1.04	1.119
76 746.	76 848.	-102.		1.189
78 891.	78 975.	-84.	1.59 ?	1.651
	81 351.			1.287
	82 135.			0.528
	82 208.			1.215
	83 384.			1.146

Tableau V (suite 1)

Energie Expérimentale	Energie Calculée	Ecart	g expériment.	g calculé
J=5/2				
54 633.	54 708.	-75.	1.576	1.564
66 020.	65 960.	60.	1.258	1.333
68 587	68 650.	-63.		1.245
70 151.	70 134.	17.		1.164
71 903.	71 945.	-42.		1.542
73 795.	73 859.	-64.		1.183
75 177.	75 167.	10.	1.26	1.324
75 899.	75 799.	100.	1.14	1.388
76 106.	76 065.	41.	1.23	0.992
76 903.	76 824.	79.		1.148
	82 159.			1.157
	82 393.			1.318
	82 702.			1.032
	83 023.			1.172
	83 868.			0.937
J=7/2				
66 015.	66 005.	10.		1.377
68 559.	68 597.	-38.		1.147
73 977.	73 968.	9.	1.21	1.248
75 511.	75 560.	-50.		1.336
76 004.	76 024.	-20.	1.15	1.153
	81 140.			0.924
	82 332.			1.273
	83 945.			1.154
J=9/2				
67 726.	67 682.	44.		1.313
75 704.	75 798.	-94.		1.315
	81 246.			1.131

Tableau VI Valeurs des intégrales radiales dans un traitement paramétrique
des configurations impaires: $5s^2 5p^4 (6p+7p)$.

$5s^2 5p^4 6p$	A	90 569.5	(176.)	
	$F^2(5p,5p)$	33 455.5	(311.)	
	ζ_{5p}	5 694.2	(37.3)	
	$F^2(5p,6p)$	4 283.	(237.)	
	$G^0(5p,6p)$	597.8	(36.5)	
	$G^2(5p,6p)$	795.6	(218.)	
	ζ_{6p}	295.	(47.6)	
$5s^2 5p^4 7p$	A	100 782.2	(668.)	
	$F^2(5p,5p)$	35 421.9	(1 156.)	
	ζ_{5p}	5 694.2	Egal ζ_{5p} dans $5s^2 5p^4 6p$	
	$F^2(5p,7p)$	2 744.9	(435.)	
	$G^0(5p,7p)$	206.9	$G^0(5p,7p) = r^2 \times G^0(5p,6p)$	$r^2 = 0.346$
	$G^2(5p,7p)$	275.3	$G^2(5p,7p) = r^2 \times G^2(5p,6p)$	$r = 0.588$
	ζ_{7p}	102.	$\zeta_{7p} = r^2 \zeta_{6p}$	
	$R^0(5p6p,5p7p)$	0.	Fixé	
	$R^2(5p6p,5p7p)$	1 887.	(840.)	
	$R^0(5p6p,7p5p)$	351.5	$R^0(5p6p,7p5p) = r \times G^0(5p,6p)$	
	$R^2(5p6p,7p5p)$	467.8	$R^2(5p6p,7p5p) = r \times G^2(5p,6p)$	
	ζ_{6p-7p}	170.	$\zeta_{6p-7p} = r \times \zeta_{6p}$	

$$\overline{\Delta E} = \left[\frac{\sum \Delta E^2}{N-P} \right]^{\frac{1}{2}} = 102.5 \text{ cm}^{-1}$$

$$\overline{\Delta g} = \left[\frac{\sum \Delta g^2}{n} \right]^{\frac{1}{2}} = 0.096$$

N = 32 niveaux

n = 24 facteur de Landé

P = 11 paramètres libres

expérimentaux

Tableau VII Valeurs calculées et expérimentales de l'énergie et du facteur de Landé des niveaux des configurations impaires.

Energie Expérimentale	Energie Calculée	Ecart	g Expériment.	g calculé
J=1/2				
65 856.	65 886.	-29.	1.556	1.519
71 501.	71 457.	44.	1.239	1.101
71 813.	71 786.	27.	1.377	1.500
73 387.	73 412.	-25.	1.137	1.147
75 303.	75 406.	-104.	1.53	1.486
79 701.	79 568.	133.	1.02	0.813
81 506.	81 512.	-6.		1.126
81 604.	81 855.	-251.		1.473
82 615.	82 606.	9.		1.073
J=3/2				
64 990.	64 983.	7.	1.619	1.602
67 062.	66 990.	71.	1.415	1.399
71 976.	71 931.	45.	1.317	1.335
72 807.	72 802.	5.	1.316	1.268
73 054.	73 144.	-90.	1.329	1.351
75 049.	75 011.	38.	1.506	1.476
75 621.	75 661.	-40.	1.483	1.547
78 415.	78 621.	-206.	1.390	1.392
80 039.	80 036.	3.	(1.500)?	0.851
81 722.	81 668.	54.	1.39	1.340
82 424.	82 214.	209.	1.27	1.050
82 431.	82 485.	-55.		1.559
J=5/2				
64 906.	64 860.	46.	1.524	1.508
65 644.	65 693.	-49.	1.217	1.213
72 529.	73 549.	-20.	1.370	1.385

Tableau VII (suite 1)

Energie Expérimentale	Energie Calculée	Ecart	g Expériment.	g calculé
74 965.	74 852.	113.	1.472	1.513
75 191.	75 235.	-44.	1.24	1.202
78 592.	78 576.	16.	1.00	0.907
80 125.	80 140.	-15.	1.050	1.216
82 213.	82 115.	98.		1.392
J=7/2				
65 669.	65 675.	-5.	1.420	1.399
75 194.	75 233.	-39.	1.42	1.401
79 003.	78 943.	61.	1.37	1.172

Tableau VIII Etude paramétrique de la configuration $5s^2 5p^4 4f$. Valeurs

des intégrales radiales. Energie et facteur de Landé des niveaux.

$5s^2 5p^4 4f$	A	102 487.6	(2.3)
	$F^2(5p,5p)$	35 000.	Fixé
	ζ_{5p}	5 700.	Fixé
	$F^2(5p,4f)$	510.3	(12.3)
	$G^2(5p,4f)$	25.4	(8.6)
	$G^4(5p,4f)$	-33.5	(12.4)
	ζ_{4f}	0.	Fixé

$$\overline{\Delta E} = \left[\frac{\sum \Delta E^2}{N-P} \right]^{\frac{1}{2}} = 2.4 \text{ cm}^{-1}$$

Energie Expérimentale	Energie Calculée	Ecart	g Expériment.	g calculé
J=1/2 77 404.35	77 403.85	0.50		0.064
J=3/2 77 356.64 77 406.77	77 358.54 77 404.77	-1.90 2.00		0.797 1.029
J=5/2 77 307.36 77 359.58	77 316.84 77 359.59 83 726.95	9.48 -0.01		0.989 1.191 0.855
J=7/2 77 307.24 77 313.46	77 306.85 77 315.49 83 723.85	0.39 -2.03		1.075 1.231 1.141
J=9/2 77 306.49 77 362.78	77 303.35 77 362.22	3.14 0.56		1.253 1.108
J=11/2 77 362.11	77 364.80	-2.69		1.255

Tableau IX : Etude paramétrique de structure hyperfine. Les valeurs des constantes monoélectroniques sont exprimées en mK ($1 \text{ mK} = 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$).

$a(nl)$	P.C.R.	$5s^2 5p^4 (6p+7p)$	$N=23$ EQM = 2.54	$P=3$	$5s^2 5p^4 (6s+5d+7s+6d) + 5s5p^6$	$N=34$ EQM = 9.83	$P=4$	$5s^5 5p^5$	[2]
$a_s(5p)$	-8.25	-9.8 ± 3.5			-9.0 ± 6.9			-18.07	-8.25 (Fixé)
$a_l(5p)$	69.80	68.2 ± 1.0			67.3 ± 4.8			68.72	65.05
$a_{sC}(5p)$	92.98	88.3 ± 2.5			70.3 ± 11.6			91.54	97.64
$a_{sC}(5p)/a_l(5p)$	1.332	1.295 ± 0.056			1.045 ± 0.25			1.332 (Fixé)	1.501
$a_s(6p)$	-0.356	-0.51							
$a_l(6p)$	4.458	$3.54 \left\{ a(5p) \times \frac{\zeta_{6p}}{\zeta_{5p}} \right\}$							
$a_{sC}(6p)$	5.572	4.59							
$a_s(7p)$	-0.118	-0.174							
$a_l(7p)$	1.566	$1.22 \left\{ a(5p) \times \frac{\zeta_{7p}}{\zeta_{5p}} \right\}$							
$a_{sC}(7p)$	1.942	1.58							
$a_s(6p-7p)$	-0.205	-0.302							
$a_l(6p-7p)$	2.641	$2.11 \left\{ a(5p) \times \frac{\zeta_{6p} \cdot \zeta_{7p}}{\zeta_{5p}} \right\}$							
$a_{sC}(6p-7p)$	3.288	2.74							
$a_s(5s)$	1 092.9				2 128. ± 79.				
$a_s(6s)$	76.55				$70.7 \left\{ a_s(5s) \times \left[\frac{G^1(5p,6s)}{R^1(5p6s,5s5p)} \right]^2 \right\}$				

Tableau IX (suite 1)

$a(n\ell)$	P.C.R.	$5s^2 5p^4 (6p+7p)$ N=23 P=3 EQM = 2.54	$5s^2 5p^4 (6s+5d+7s+6d) + 5s5p^6$ N=34 P=4 EQM = 9.83	$5s^5 5p^5$ [2]
$a_s(7s)$	21.61		$17.7 a_s(6s) \times \frac{G^1(5p,7s)}{G^1(5p,6s)}$	
$a_s(6s-7s)$	40.67		$37.3 a_s(6s) \times \sqrt{\frac{G^1(5p,7s)}{G^1(5p,6s)}}$	
$b(n\ell)$		$5s^2 5p^4 (6p+7p)$ N=17 P=2 EQM = 3.9	$5s^2 5p^4 (6s+5d+7s+6d)$ N=25 P=1 EQM = 4.0	
$b_{02}(5p)$	-8.110	-7.69 ± 0.24	-8.23 ± 0.28	-6.62
$b_{11}(5p)$	0.508	0.56 ± 0.32	0. Fixé	0. (Fixé)
$b_{02}(6p)$		$0.39 b_{02}(5p) \times \frac{\zeta_{6p}}{\zeta_{5p}}$		
$b_{11}(6p)$		0. Fixé		
$b_{02}(7p)$		$0.14 b_{02}(5p) \times \frac{\zeta_{7p}}{\zeta_{5p}}$		
$b_{11}(7p)$		0. Fixé		
$b_{02}(6p-7p)$		$0.23 b_{02}(5p) \times \sqrt{\frac{\zeta_{6p} \cdot \zeta_{7p}}{\zeta_{5p}}}$		
$b_{11}(6p-7p)$		0. Fixé		

ANNEXE n°1

Etude des spectres d'émission du Samarium, du Néodyme et de l'Uranium entre 2,3 et 4,1 μm avec un spectromètre à grilles*

C. MORILLON

Laboratoire Aimé Cotton, CNRS II, 91 Orsay, France

(Received 25 May 1970)

Résumé—Un spectromètre à grilles de Girard a été équipé pour mesurer les longueurs d'onde des raies d'émission jusqu'à 4,1 μm . La limite de résolution moyenne est de 0,15 cm^{-1} . Cette étude a permis de mesurer 370 raies de l'isotope 152 du Samarium et 470 raies de l'isotope 144 du Néodyme entre 2,3 et 4,1 μm , 300 raies de l'Uranium entre 2,3 et 3,4 μm . 20% d'entre elles, environ, ont été classées.

Abstract—A Girard grid spectrometer has been equipped for measuring wavelengths of emission lines up to 4.1 μm , the average resolution being 0,15 cm^{-1} . By this mean, 370 lines of ^{152}Sm and 470 lines of ^{144}Nd have been measured in the range 2.3 to 4.1 μm , and 300 lines of U in the range 2.3 to 3.4 μm . About 20% of these lines have been classified.

I. INTRODUCTION

LES TRANSITIONS atomiques observées dans le visible et l'ultraviolet font intervenir des niveaux relativement éloignés (de 10 000 à 50 000 cm^{-1}). Or dans les spectres complexes (terres rares et actinides) on s'attend à trouver des configurations de parité différente, mais ayant sensiblement la même énergie; il est donc indispensable d'observer les transitions de nombre d'ondes inférieur à 10 000 cm^{-1} et par conséquent d'enregistrer les spectres infrarouges aussi loin que possible vers les grandes longueurs d'onde. L'étude des spectres d'émission dans l'infrarouge s'est développée rapidement ces dernières années, grâce aux progrès réalisés simultanément sur les spectromètres, sur les sources, sur les détecteurs; mais sa difficulté augmente lorsque la longueur d'onde augmente. L'intensité d'une raie d'émission spontanée est en effet donnée par l'expression:

$$I(A, B) = N(A) \times \frac{h\nu}{c} \times \frac{64\pi^4\nu^3}{3h} \times S(A, B).$$

Elle est donc proportionnelle à la population $N(A)$ du niveau initial, à la force de raie $S(A, B)$ et à la puissance 4^e du nombre d'ondes. Si nous comparons une raie à 5000 Å, et une raie à 4 μm provenant du même niveau supérieur, et ayant des forces de raie identiques, l'intensité de la raie à 4 μm est environ 4000 fois plus faible que l'intensité de la raie à 5000 Å.

Les spectromètres tels que le SISAM de CONNES [1] et le spectromètre à grilles de GIRARD [2-5] dont la luminosité est environ 150 fois plus grande que celle des

* Cette étude a été subventionnée en partie par la Direction des Recherches et Moyens d'Essais.

[1] P. CONNES, Thèse, Paris (1957); *Rev. Opt.* **38**, 157 (1959); *ibid.* **38**, 416 (1959); *ibid.* **39**, 402 (1960).

[2] A. GIRARD, *Optica Acta* **1**, 81 (1960).

[3] A. GIRARD, *Appl. Opt.* **2**, 79 (1963).

[4] A. GIRARD, *Rech. Aéronautique* **99**, 27 (1964).

[5] A. GIRARD, *J. Phys.* **24**, 139 (1963).

spectromètres classiques, à résolution donnée, permettent d'utiliser au mieux l'énergie fournie par la source; mais ce gain important de luminosité est loin de compenser la diminution de la puissance des radiations.

Avec un spectromètre SISAM, les mesures de longueurs d'onde ont été faites entre 0,8 et 2,5 μm sur l'iode, l'uranium et un grand nombre d'éléments du groupe des terres rares [6-9].

Nous avons poursuivi ces mesures des longueurs d'onde des raies d'émission infrarouge entre 2,3 et 4,1 μm , grâce à un spectromètre à grilles de GIRARD.

2. SPECTROMETRE A GRILLES

L'observation des spectres d'émission a été faite entre 2,3 et 4,15 μm avec un spectromètre à grilles de GIRARD [2-5] construit par la Société Générale d'Optique. La particularité de cet appareil est de ne posséder ni fente d'entrée ni fente de sortie mais une grille d'entrée et une grille de sortie, formées d'hyperboles alternativement réfléchissantes et transparentes (Fig. 1). Il se présente par ailleurs comme un spectromètre classique avec un montage de Littrow employant un miroir collimateur parabolique taillé hors de l'axe (Fig. 2). Le disperseur est un réseau de diffraction plan; dans notre cas, il s'agit d'un réseau Bausch and Lomb dont la surface rayée a une largeur de 206 mm sur une hauteur de 128 mm avec 150 traits par mm et un angle de miroitement de $36^{\circ}52'$.

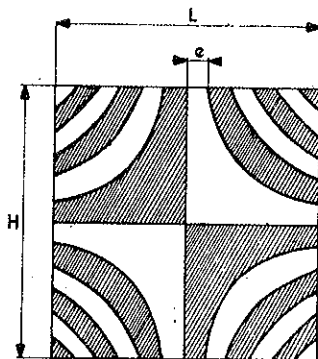


Fig. 1. Schéma d'une grille.

On montre [2] que la résolution obtenue avec cet appareil est à peu près la même que celle que l'on obtiendrait s'il était équipé de fentes de largeur égale au pas le plus fin d'une grille, p , c'est-à-dire à la période spatiale sur le bord de la grille. Le rapport entre les flux admis par l'appareil équipé de grilles et par l'appareil équipé de fentes donnant la même résolution, à hauteurs égales, est donc de l'ordre de $L/2p$, où L est la largeur d'une grille. Les grilles utilisées ayant 30 mm de largeur sur 30 mm de hauteur, le gain obtenu par rapport à un spectromètre identique équipé de fentes est donc de l'ordre de 150, pour des grilles dont le pas le plus fin est de 0,1 mm.

[6] J. VERGES, Thèse d'état, Orsay (1969).

[7] J. VERGES, *Spectrochim. Acta* **24B**, 177 (1969).

[8] P. CAMUS, G. GUELACHVILI et J. VERGES, *Spectrochim. Acta* **24B**, 373 (1969).

[9] J. BLAISE, C. MORILLON, M. G. SCHWEIGHOFER et J. VERGES, *Spectrochim. Acta* **24B**, 405 (1969).

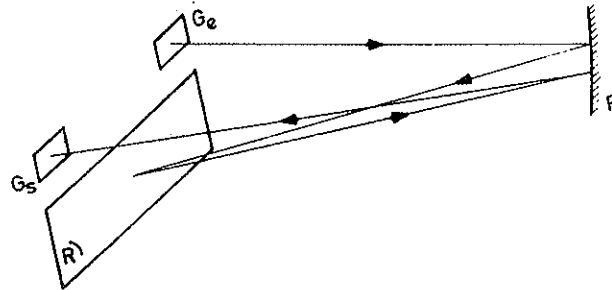


Fig. 2. Schéma optique de l'appareil.

On voit ainsi qu'on peut augmenter la résolution simplement en choisissant des grilles à pas de plus en plus fin, tout en gardant la même étendue de faisceau. L'appareil est d'autant plus intéressant que l'on cherche à obtenir des résolutions plus élevées. On peut en principe atteindre la limite de résolution théorique du réseau. Toutefois, les techniques actuelles de fabrication des grilles ne permettent pas d'obtenir de pas plus petits que 0,05 mm et nous n'obtenons la résolution théorique du réseau, soit $0,04 \text{ cm}^{-1}$ qu'à partir de $4 \mu\text{m}$.

Nous disposons de 3 jeux de grilles à pas différents: 0,2 mm, 0,1 mm et 0,05 mm. Les grilles à 0,1 mm nous donnent une résolution suffisante pour la mesure des longueurs d'onde dans le domaine étudié.

La sélection d'un élément spectral se fait par l'amplitude de la modulation [2-5]. Deux méthodes peuvent être utilisées pour obtenir la modulation: soit à l'aide d'un modulateur permettant de faire la différence entre deux signaux complémentaires, soit par vibration du paraboloïde faisant osciller une image monochromatique de la grille d'entrée devant la grille de sortie. Ce deuxième mode de modulation a été utilisé car il donne une meilleure stabilité de fonctionnement, indispensable pour l'enregistrement de spectres durant plusieurs heures. Il faut noter cependant que cette deuxième méthode de modulation divise par deux la luminosité de l'appareil, toutes choses égales par ailleurs.

La fonction d'appareil obtenue avec des grilles à contour rectangulaire est en $\sin x/x$; sa caractéristique principale est de présenter des maximums secondaires importants. Pour obtenir une apodisation acceptable on a disposé devant la grille d'entrée un cache de contour octogonal régulier (Fig. 3). Deux enregistrements successifs de la même raie (Fig. 4) avec et sans cache, montrent que seul le premier pic négatif demeure gênant bien que sa hauteur ne soit plus que de 5% du maximum au lieu de 20%. On perd moins de 20% du signal et la résolution est diminuée de 20%.

3. SOURCES

(1) On peut résumer les qualités exigées des sources en les classant par ordre d'importance décroissante, de la manière suivante.

(a) *Intensité.* La diminution importante de l'intensité des raies au fur et à mesure que l'on se déplace vers les grandes longueurs d'onde impose des sources très puissantes. Nous cherchons à observer le plus grand nombre possible de transitions, en particulier des transitions faisant intervenir des niveaux élevés; or, ces transitions sont généralement plus faibles que les transitions entre niveaux profonds.

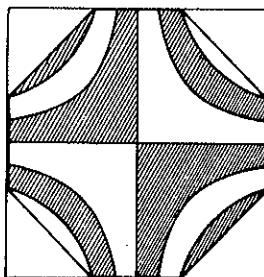


Fig 3. Cache à contour octogonal.

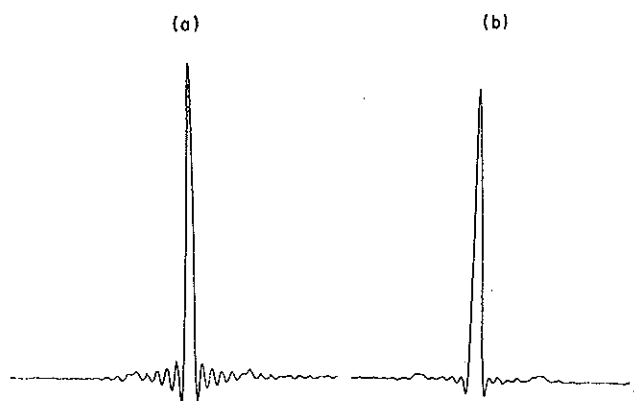


Fig. 4. (a) Fonction d'appareil non apodisée; (b) Fonction d'appareil apodisée.

(b) *Stabilité et longue durée.* Les spectres sont enregistrés élément spectral par élément spectral. Les enregistrements sont toujours de longue durée puisqu'il s'agit d'explorer des régions étendues, et ceci d'autant plus que l'on désire un bon rapport signal sur bruit. Il faut environ 20 s pour explorer $0,150 \text{ cm}^{-1}$, soit de l'ordre de 50 heures pour un enregistrement de 2,3 à $4,1 \mu\text{m}$.

(c) *Grande étendue du faisceau.* Pour profiter de l'avantage du spectromètre à grilles qui est d'admettre une étendue de faisceau importante il faut que la source fournisse un faisceau d'étendue aussi grande que possible.

(d) *Raies fines.* Les études à résolution élevée exigent des raies aussi fines que possible, ce qui est toujours incompatible avec une forte intensité de la source.

(e) *Possibilité d'une excitation préférentielle du spectre d'arc ou du spectre d'étincelle.* Dans certains cas on peut en agissant sur l'excitation, sur la température de fonctionnement, sur la pression, favoriser à volonté l'émission du spectre d'étincelle ou celle du spectre d'arc.

(2) Toutes ces conditions ne sont pas compatibles. Cependant les lampes sans électrodes semblent les mieux appropriées. Ces lampes sont des tubes en silice fondue contenant l'iodure du corps étudié. Elles sont fabriquées au laboratoire suivant la méthode de TOMKINS et FRED [10]. Le tube, placé à l'intérieur d'une cavité en argent, est excité par un champ électrique haute fréquence de 2450 MHz fourni par un magnétron Philips 7090 délivrant une puissance maximale de 200 W [6].

[10] F. S. TOMKINS et M. FRED, *J. Opt. Soc. Am.* **47**, 1087 (1957).

Pour utiliser au mieux l'énergie émise par la colonne lumineuse nous avons utilisé ces sources vues en bout. Le diamètre intérieur des tubes est faible, 2 mm environ, de manière à avoir une bonne concentration de l'énergie et une excitation intense des atomes. Cette petite dimension de la source nous a posé un problème important pour adapter son étendue à l'étendue du spectromètre. Il a été résolu en utilisant un paraboloïde de très faible focale, $f = 5$ cm, et une lentille en fluorine de distance focale $F = 20$ cm (Fig. 5). La lentille est conjuguée de la grille d'entrée et l'image de la source se forme sur le hublot d'entrée de l'appareil, qui est lui-même conjugué du réseau.

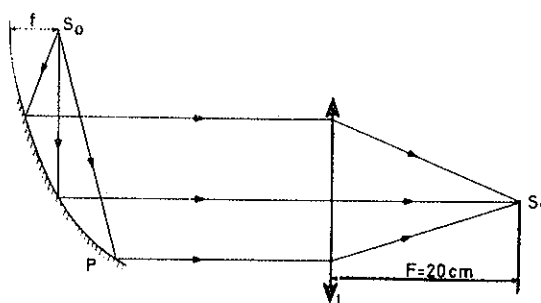


Fig. 5. Optique d'entrée; P : paraboloïde taillé hors de l'axe; L : lentille en fluorine.

Le paraboloïde introduit des aberrations importantes pour les points de la source qui ne sont pas rigoureusement au foyer; d'autre part, le faisceau issu de la source n'est pas bien homogène; l'éclairement du réseau et des grilles n'est donc pas parfaitement uniforme, mais le faisceau garde une symétrie de révolution et la fonction d'appareil enregistrée n'est pas trop déformée. Un réglage soigné est cependant nécessaire pour éviter des déplacements qui entraîneraient une erreur systématique sur la mesure des longueurs d'onde.

Le verre de silice, dont la température de ramollissement est de l'ordre de 1300°C permet de faire fonctionner les lampes sans électrodes à des températures élevées, entre 500°C et 1000°C .

La transmission de la silice, qui est excellente dans l'infrarouge jusqu'à $3\ \mu\text{m}$ diminue ensuite très rapidement. Nous avons poussé les observations le plus loin possible avec ces tubes et nous avons obtenu des résultats jusque vers $4,1\ \mu\text{m}$, en utilisant des parois en silice très minces.

4. RECEPTEURS

Nous avons utilisé d'une part des cellules photoconductrices au sulfure de plomb refroidies à la glace carbonique (-80°C) dans la monture fournie par le constructeur, d'autre part des cellules photovoltaïques à l'antimoniure d'indium avec fenêtre en saphir, refroidies à l'azote liquide (-193°C) (S.A.T.)* Pour ces dernières, nous avons été amenés à faire un montage qui permet de sortir le faisceau de l'enceinte du spectromètre, et de former, au foyer d'un miroir parabolique de faible focale, une image du réseau de dimensions 3×2 mm environ.

* Société Anonyme de Télécommunications.

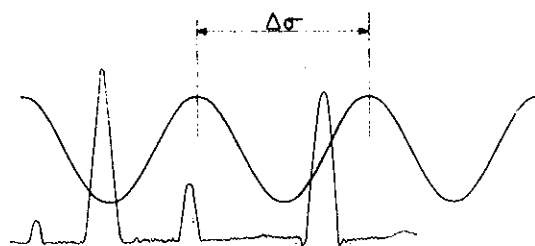


Fig. 6. Spectre étudié et spectre cannelé.

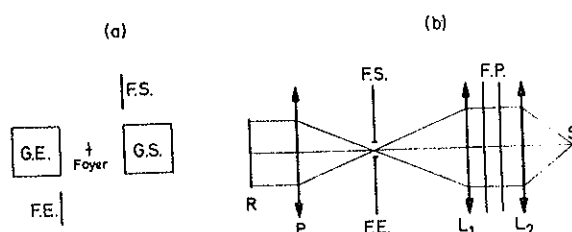


Fig. 7. (a) Grilles et fentes dans le plan focal du paraboloïde; (b) Schéma optique du faisceau référence.

Les cellules au sulfure de plomb ont été utilisées jusqu'à $3,7 \mu\text{m}$, et les cellules à l'antimoniure d'indium à partir de $3,3 \mu\text{m}$. Elles sont supérieures aux cellules à sulfure de plomb à partir de $3,5 \mu\text{m}$. Des cellules au sulfure de plomb, refroidies à l'azote liquide, sont utilisables depuis quelque temps, et permettront vraisemblablement une légère amélioration aux environs de $3,5 \mu\text{m}$.

5. ETALONNAGE EN NOMBRE D'ONDES A L'AIDE D'UN FABRY-PEROT

(1) *Principe de la méthode.* Cette méthode a été décrite et utilisée par plusieurs auteurs [6, 7, 11, 12].

Un Fabry-Perot d'épaisseur fixe e , éclairé en lumière blanche sous une incidence constante, donne un spectre cannelé $I(\sigma)$, qui constitue une échelle graduée dont le degré est l'intervalle spectral libre $\Delta\sigma$.

On explore simultanément le spectre étudié et le spectre cannelé à l'aide du spectromètre. Pour faire une mesure absolue du nombre d'ondes d'une raie, il suffit d'enregistrer une raie étalon dont le nombre d'ondes est connu avec une grande précision (étalon secondaire de Ne, Ar, Kr, ...) et de mesurer la différence entre les nombres d'ondes des deux raies à l'aide du spectre cannelé (Fig. 6).

(2) *Application au spectromètre à grilles.* Le montage optique, illustré par la Fig. 7, est tel que le F.P. et le réseau soient conjugués. L'image de la source blanche se forme sur le trou d'entrée du F.P.

Le spectromètre est utilisé avec deux fentes: une fente d'entrée qui sert en même temps de diaphragme isolateur de sortie du F.P., et une fente de sortie. Ces deux fentes sont symétriques par rapport au foyer du paraboloïde, dans le plan focal.

Pour fournir des informations sur la rotation du réseau à tout instant, le spectre

[11] E. K. PLYLER et ED. TIDWELL, *Extraits des Mémoires de la Société Royale des Sciences de Liège*, 4^{ème} série **18**, 426 (1956).

[12] A. E. DOUGLAS et D. SHARMA, *J. Chem. Phys.* **21**, 448 (1953).

cannelé doit se rapprocher d'une sinusoïde, c'est-à-dire qu'une finesse enregistrée égale à 2 serait souhaitable.

Nous avons choisi un pouvoir réflecteur faible, de l'ordre de 60%, ce qui donne une finesse réflectrice Nr de l'ordre de 6. Dans ces conditions, les défauts des lames sont négligeables.

La hauteur de la fente d'entrée est égale au diamètre du trou qui donnerait une résolution R compatible avec la finesse désirée, suivant la relation $\Omega R = 2\pi$ où Ω est l'angle solide.

La largeur des fentes d'entrée et de sortie est telle que le pouvoir de résolution de ce spectromètre à fentes soit suffisant pour analyser le spectre cannelé, c'est-à-dire soit voisin de R .

Le Fabry-Perot est éclairé en lumière verte obtenue à partir d'une source de lumière blanche (lampe à iode 12 V-100 W), et d'un filtre interférentiel isolant un ordre de diffraction du réseau. Le détecteur est un photomultiplicateur 1P21.

Le réseau travaille dans des ordres très différents pour le spectre infrarouge étudié, et le spectre cannelé visible (2 ou 3 pour 1 I.R. pour le visible). Ceci peut amener à travailler dans des conditions où l'efficacité du réseau est très mauvaise pour le visible; la variation d'incidence nécessaire pour explorer le deuxième et le troisième ordre étant très supérieure à celle qui permet d'explorer les 12^{ème}, 13^{ème}, 14^{ème}, 15^{ème}, 16^{ème}, et 17^{ème} ordres.

6. CALCUL DES NOMBRES D'ONDES ET PRECISION DES MESURES

(1) En faisant le vide dans l'enceinte du spectromètre, nous évitons les corrections qui seraient dues aux valeurs différentes de l'indice du milieu dans lequel se trouve le réseau, pour des ordres différents.

Connaissant l'intervalle $\Delta\sigma$ entre 2 franges du F.P. sous vide, le nombre d'ondes dans le vide des raies étudiées σ_I est calculé directement à partir du nombre d'ondes dans le vide de la raie étalon σ_0 :

$$\sigma_I = \sigma_0 + \Delta\sigma \times \frac{S}{F} (N + n_0 + n_I).$$

S et F sont respectivement les ordres de diffraction du réseau pour les faisceaux infrarouge et visible du spectre cannelé. n_0 et n_I caractérisent respectivement les positions de la raie étalon et de la raie étudiée par rapport aux 2 franges qui les encadrent, en faisant une interpolation linéaire. N est le nombre d'intervalles qui séparent la raie étalon de la raie inconnue.

La distance entre les lames du F.P. étant d'environ 1 mm, et le faisceau normal à ces lames, l'intervalle entre ordre $\Delta\sigma$ est voisin de 5 cm^{-1} . La raie étalon peut être dans un ordre de diffraction du réseau différent de celui où se trouve la raie étudiée

(2) Les facteurs qui limitent la précision des mesures sont les suivants:

- l'incertitude sur la valeur de $\Delta\sigma$;
- les défauts des systèmes d'entraînement et d'enregistrement;
- l'erreur sur la position de la raie étalon (δn_0);
- l'erreur sur la position de la raie étudiée (δn_I).

(a) La précision des mesures est limitée en partie par l'incertitude sur l'intervalle spectral libre du F.P. Il doit être connu avec la meilleure précision possible, et doit rester constant dans le temps. La mesure de $\Delta\sigma$ peut être faite en mesurant l'épaisseur du F.P. par la méthode interférométrique des excédents fractionnaires. La précision obtenue est alors de 10^{-6} sur $\Delta\sigma$. Malheureusement, dans notre montage, le faisceau I.R. issu des grilles, et le faisceau du F.P. issu des fentes ne suivent pas le même chemin dans le spectromètre; les dispersions sont donc légèrement différentes et il s'ensuit un écart non négligeable entre l'intervalle spectral libre $\Delta\sigma$ du spectre cannelé et la différence entre les nombres d'ondes de 2 franges consécutives mesurée sur le spectre I.R. Nous avons donc déterminé l'écart $\Delta\sigma$ entre 2 franges pour le spectre I.R. à l'aide de plusieurs raies étalons du néon suffisamment éloignées les unes des autres. La précision est moins bonne qu'avec la première méthode, soit 10^{-5} environ.

Plusieurs précautions ont été prises pour que cet intervalle reste constant dans le temps. La distance des lames reste stable grâce à des cales en silice, donc de faible coefficient de dilatation, collées aux lames par adhérence moléculaire. Un régulateur limite les variations de température de l'ensemble à $0,5^\circ\text{C}$ au maximum. Les variations d'indice à l'intérieur qui pourraient encore être dues aux fluctuations de la pression atmosphérique ou du degré hygrométrique sont rendues négligeables en mettant le F.P. dans une enceinte sous vide (10^{-1} mm de mercure environ). En conclusion, la précision sur $\Delta\sigma$ étant de 10^{-5} et le nombre N étant inférieur à 200, l'incertitude due à la méthode d'étalonnage est de l'ordre de $0,020\text{ cm}^{-1}$.

(b) Les défauts aléatoires du système d'entraînement du réseau et du système d'enregistrement sont faibles, et nous négligeons l'incertitude qu'ils introduisent devant les incertitudes dues aux autres facteurs. La défiance du système d'entraînement est très faible.

(c) La position d'une raie est repérée dans un interfrange par le rapport n entre la distance de l'axe de la raie et l'axe d'une frange voisine, et la distance des axes de deux franges consécutives (interpolation linéaire). La précision sur la position de la raie dépend du rapport signal sur bruit, à la fois de la raie et du spectre cannelé. On évalue l'incertitude sur la position de la raie par l'expression $\delta\sigma/(S/B)$ où $\delta\sigma$ est la limite de résolution.

Cette limite de résolution varie entre $0,100$ et $0,200\text{ cm}^{-1}$ suivant la région et l'incidence sur le réseau.

Dans les cas les plus favorables, grand rapport signal sur bruit pour la raie et le spectre cannelé, l'incertitude est de l'ordre de $0,01\text{ cm}^{-1}$. Dans les cas les plus défavorables, faible rapport signal sur bruit, l'incertitude peut atteindre $0,2\text{ cm}^{-1}$.

La raie étalon choisie a une intensité telle que l'incertitude sur la position de cette raie ne dépasse pas $0,01\text{ cm}^{-1}$.

En résumé, l'incertitude sur le nombre d'ondes dans le vide varie, suivant l'intensité de la raie, de $0,040\text{ cm}^{-1}$ à $0,250\text{ cm}^{-1}$.

7. RESULTATS OBTENUS

Les spectres de l'isotope 152 du Samarium et de l'isotope 144 du Néodyme ont été observés entre $2,3\ \mu\text{m}$ et $4,1\ \mu\text{m}$, celui de l'Uranium naturel entre $2,3\ \mu\text{m}$ et $3,4\ \mu\text{m}$. L'absorption due à la vapeur d'eau atmosphérique entre $2,6\ \mu\text{m}$ et $2,9\ \mu\text{m}$ rend

Tableau 1

Sigma	Int.	Lambda	Spectre	NIV1	NIV2	J_1	J_2
4196,864	2	23820,823					
4196,232	6	23824,410	1	14154-18350		4-5	
4195,549	1	23828,289					
4195,022	1	23831,282					
4193,147	1	23841,939					
4191,689	2	23850,232					
4191,348	1	23852,172					
4189,396	5	23863,285					
4180,346	1	23914,947					
4177,611	3	23930,604					
4176,542	1	23936,729	1	18176-13999		2-1	
4173,883	60	23951,978	2	14115-18288		9/2-7/2	
4172,726	60	23958,619	1	11406-15579		3-4	
4171,350	40	23966,522	1	15082-19254		6-6	
4164,052	1	24008,527					
4160,934	3	24026,518	1	11406-15567		3-2	
4159,712	2	24033,576					
4156,922	4	24049,706					
4155,885	1	24055,707					
4153,081	10	24071,949					
4152,385	1	24075,984	1	15524-19677		3-2	
4150,073	2	24089,396					
4147,511	40	24104,277	1	14202-18350		5-5	
4146,246	5	24111,631					
4144,799	1	24120,049					
4142,124	2	24135,626	2	19035-23177		5/2-3/2	
4140,825	2	24144,947					
4137,420	6	24163,666	1	18176-22313		2-1	
4135,710	2	24173,057	1	15955-20091		2-1	
4129,032	13	24212,153	1	13458-17587		4-5	
4126,632	5	24226,235					
4124,993	1	24235,860					
4122,398	1	24251,116					
4120,721	1	24260,986					
4119,334	3	24269,155					
4117,162	2	24281,958					
4115,327	3	24292,785					
4114,070	1	24300,207					
4111,596	3	24314,829					
4109,773	1	24325,615	1	14365-18475		2-1	
4107,816	12	24337,204					
4100,949	5	24377,956	1	11406-15507		3-3	
4097,000	1	24401,453	1	13095-17193		6-6	
4093,030	100	24425,121	2	14193-18288		5/2-7/2	
4095,500	30	24410,390	2	14193-18288		5/2-7/2	
4095,500	30	24410,390	1	14202-18298		5-6	
4093,500	2	24422,317					
4089,640	1	24445,368					
4088,980	1	24449,313	1	14920-19009		3-2	
4082,911	1	24485,656	1	29551-33634		3-2	
4082,200	1	24489,921	1	30921-35004		5-4	
4077,415	1	24518,660					
4075,965	1	24527,383					
4073,700	2	24541,020					
4073,396	1	24542,852					
4072,185	1	24550,150					
4071,065	3	24556,905					
4070,650	1	24559,408					
4065,766	1	24588,910					
4065,190	2	24592,394					
4064,492	1	24596,017					
4066,391	2	24645,739					
4065,595	1	24650,576					

Tableau I. (Suite)

Sigma	Int.	Lambda	Spectre	NIVI	NIV2	J_1	J_2
4054,984	2	24654,291					
4053,306	1	24661,455					
4049,181	1	24689,624	1	14026-18075		1-2	
4048,280	1	24695,119					
4046,404	15	24706,568					
4044,174	1	24720,191					
4038,826	1	24752,925					
4031,945	3	24795,168					
4029,608	1	24809,548					
4028,607	1	24815,713					
4026,351	1	24829,617					
4025,109	1	24837,279					
4022,300	2	24854,624					
4016,934	1	24887,826					
4010,647	1	24926,840					
4003,733	1	24969,886					
4003,088	1	24973,909					
4002,490	1	24977,640	1	30148-26146		2-1	
3998,840	1	25000,439					
3987,376	1	25072,317					
3983,431	1	25097,147					
3977,596	1	25133,964					
3975,527	1	25147,045					
3973,635	1	25159,018					
3970,561	3	25178,496					
3960,672	1	25241,362					
3959,299	1	25250,115					
3951,982	1	25296,865					
3939,708	2	25375,677					
3935,460	1	25403,068					
3923,004	20	25483,725					
3897,175	2	25652,622					
3871,254	20	25824,386					
3860,478	1	25896,471					
3809,357	12	26243,998					
3795,516	4	26339,701					
3792,611	4	26359,877					
3791,598	2	26366,919					
3778,687	5	26457,010					
3774,521	2	26486,211	1	13687-17462		2-2	
3763,749	3	26562,015					
3527,873	200	28337,970					
3510,185	100	28480,767	1	29656-26146		1-1	
3504,661	3	28525,658					
3495,122	5	28603,511					
3494,113	1	28611,771	1	14856-18350		5-5	
3492,720	1	28623,182	1	29066-32558		2-2	
3474,706	1	28771,574					
3469,687	1	28813,193					
3464,847	1	28853,442					
3461,446	1	28881,791					
3458,551	1	28905,967					
3457,953	1	28910,966					
3454,376	1	28940,903					
3453,233	1	28950,482					
3452,573	7	28956,017					
3439,473	1	29066,302					
3438,358	1	29075,728					
3437,199	1	29085,532					
3436,709	2	29089,679					
3435,425	2	29100,552	1	29656-26220		1-2	
3433,109	20	29120,183	1	14154-17587		4-5	
3428,024	1	29163,379					

Tableau 1. (Suite)

Sigma	Int.	Lambda	Spectra	NIVI	NIV2	J_1	J_2
3426,474	1	29176,571					
3423,095	2	29205,372					
3414,807	1	29276,255					
3409,668	3	29320,380					
3406,612	1	29346,683					
3404,228	1	29367,235	1	14365-17769		2-1	
3402,852	2	29379,110					
3402,605	2	29381,242					
3401,815	11	29388,065					
3400,639	1	29398,228					
3399,426	1	29408,719	1	33202-29803		6-6	
3396,680	1	29432,494					
3394,670	1	29450,788					
3392,293	1	29470,556					
3389,138	1	29497,991					
3385,528	16	29529,445					
3379,809	120	29579,412					
3377,174	2	29602,491					
3376,452	1	29608,821					
3371,271	1	29654,324					
3370,040	1	29665,156					
3368,878	4	29675,388					
3367,240	1	29689,824					
3365,416	14	29705,915	1	29037-32402		2-1	
3368,455	4	29767,486					
3351,358	10	29830,523					
3336,648	80	29962,034	1	29066-32402		2-1	
3329,374	2	30027,496					
3325,250	1	30064,736					
3323,720	4	30078,575	1	29469-26146		0-1	
3323,322	5	30082,178					
3322,366	4	30090,834					
3321 180	1	30101,579					
3317,635	4	30133,744					
3313,636	2	30170,110					
3312,132	1	30183,810					
3302,739	6	30269,653					
3301,754	5	30278,683	1	14202-17504		5-4	
3296,660	1	30325,286					
3289,960	6	30387,228	1	13458-16748		4-3	
3288,794	2	30398,001	1	30755-34044		3-2	
3284,893	25	30434,100	1	12846-16131		3-4	
3281,800	1	30462,784					
3280,385	2	30475,924	1	14550-17830		2-3	
3279,447	1	30484,641					
3265,911	1	30610,988					
3249,003	150	30770,290	1	13095-16344		6-5	
3232,002	1	30932,148					
3230,944	1	30942,277					
3226,889	2	30981,160					
3221,736	12	31030,713					
3215,469	15	31091,192	1	15082-18298		6-6	
3212,697	1	31118,018					
3205,493	15	31187,953	1	13542-16748		3-3	
3198,505	130	31256,091	1	10801-13999		1-1	
3194,248	65	31297,747	1	12313-15607		2-3	
3188,385	1	31355,299					
3186,932	1	31369,594	1	14056-17243		3-3	
3179,314	1	31444,760					
3177,470	1	31483,008					
3175,407	10	31483,449					
3167,156	14	31565,469					
3163,579	1	31601,159					
3160,420	2	31632,746					

Tableau 1. (Suite)

Sigma	Int.	Lambda	Spectre	NIV1	NIV2	J_1	J_2
3159,837	1	31638,583					
3157,083	1	31666,182					
3148,031	1	31757,236					
3143,800	1	31799,976					
3141,103	1	31827,280					
3140,607	2	31832,307					
3139,602	5	31842,496	1	13551-16690		0-1	
3138,951	5	31849,100	1	13542-16681		3-2	
3133,817	240	31901,277	1	12445-15579		5-4	
3131,849	10	31921,323					
3127,799	1	31962,656					
3115,090	16	32093,058					
3108,975	10	32156,182					
3104,070	1	32206,994					
3092,907	1	32323,237					
3089,335	1	32360,610	1	14154-17243		4-3	
3072,821	1	32534,523					
3066,335	14	32603,341	1	13050-16116		2-2	
3062,326	12	32640,023	1	13050-16112		2-1	
3058,751	1	32684,179					
3057,447	2	32698,119					
3053,510	25	32740,278					
3047,297	5	32807,030	1	14783-17830		2-3	
3044,917	1	32832,673					
3040,055	1	32885,183					
3038,407	200	32903,020	1	11877-14915		4-3	
3030,056	1	32993,702					
3028,207	1	33013,848					
3024,016	2	33059,602					
3023,640	10	33063,713					
3023,465	10	33065,627	1	14563-17587		4-5	
3020,376	1	33099,444					
3003,101	6	33289,845	1	13687-16690		2-1	
3002,793	1	33293,259					
3001,557	1	33306,969					
2995,353	50	33375,955	1	10801-13796		1-0	
2994,079	5	33390,156	1	13687-16681		2-2	
2989,542	4	33440,830					
2974,105	100	33614,403	1	11406-14380		3-2	
2960,900	2	33764,317					
2959,038	5	33785,563					
2958,254	2	33794,518	1	13732-16690		1-1	
2957,829	2	33799,373					
2955,191	6	33829,544					
2954,868	30	33835,533	1	11044-13999		2-1	
2950,541	1	33882,869					
2949,240	1	33897,807	1	13732-16681		1-2	
2945,128	1	33945,135					
2942,743	1	33972,646					
2941,025	1	33992,491	1	17270-20211		8-7	
2940,600	5	33997,404	1	14563-17504		4-4	
2939,418	1	34011,075					
2938,918	1	34016,861					
2938,218	2	34024,966					
2936,491	1	34044,976					
2928,917	1	34133,015					
2928,044	1	34143,191					
2927,647	1	34147,821					
2926,897	6	34156,571					
2923,586	1	34195,254					
2918,585	1	34253,848					
2911,847	1	34333,111	1	14550-17462		2-2	
2910,341	1	34350,877	1	14920-17830		3-3	
2904,705	1	34417,528					

Tableau 1. (Suite)

Sigma	Int.	Lambda	Spectre	NIV1	NIV2	J_1	J_2
2897,092	1	34507,971					
2893,002	1	34556,757					
2892,142	1	34567,033	1	14612-17504		3-4	
2892,142	1	34567,033	1	15524-18416		3-2	
2878,166	1	34734,885	1	14365-17243		2-3	
2864,579	1	34899,637					
2861,217	1	34940,645	1	16392-19254		7-6	
2860,157	1	34953,594					
2859,083	3	34966,724					
2846,022	1	35116,089					
2837,044	1	35238,356	1	16354-19191		4-4	
2833,947	2	35276,866	1	14056-16890		3-4	
2808,744	5	35656,882					
2782,469	1	35929,517					
2752,763	15	36317,245	1	13458-16211		4-3	
2746,043	1	36398,166					
2738,215	1	36510,197					
2736,359	2	36534,560	1	14154-16890		4-4	
2732,954	4	36580,479	1	15617-18350		6-5	
2731,354	2	36601,908	1	14856-17587		5-5	
2726,478	12	36667,367	1	12313-15039		2-2	
2720,672	18	36745,616	1	12846-15567		3-2	
2718,462	1	36775,488					
2715,025	3	36822,043					
2693,097	5	37121,859	1	14550-17243		2-3	
2691,712	3	37140,960	1	14056-16748		3-3	
2688,689	1	37182,719					
2687,771	15	37195,419	1	14202-16890		5-4	
2685,973	1	37220,318					
2684,500	3	37240,741					
2680,914	2	37290,554	1	15617-18298		6-6	
2679,575	3	37309,188	1	14563-17243		4-3	
2673,208	2	37398,051					
2668,989	3	37457,167					
2668,379	2	37465,730	1	13542-16211		3-3	
2660,743	2	37573,252	1	12846-15507		3-3	
2656,473	10	37633,648	1	14202-16859		5-5	
2655,286	7	37650,459	1	14026-16681		1-2	
2654,545	1	37660,969					
2652,992	1	37683,015					
2648,664	15	37746,015	1	14856-17504		5-4	
2639,723	2	37872,435	1	14550-17190		2-2	
2635,800	6	37928,802					
2632,606	3	37974,819					
2630,875	1	37999,805					
2625,644	1	38075,500					
2625,167	4	38082,429	1	14056-16681		3-2	
2603,966	1	38392,489					
2600,619	30	38441,900	1	13050-15650		2-1	
2594,159	20	38537,029	1	16354-18948		4-3	
2584,224	3	38685,786	1	14920-17504		3-4	
2574,734	2	38828,375					
2573,570	15	38845,937	1	13542-16116		3-2	
2571,716	12	38873,941	1	15082-17654		6-6	
2569,858	1	38902,060					
2562,249	15	39017,585	1	28708-26146		1-1	
2550,798	8	39192,743	1	12313-14863		2-1	
2539,786	1	39362,674					
2535,993	2	39421,548					
2515,660	11	39740,175					
2507,446	1	39870,358					
2504,612	6	39915,472	1	15082-17587		6-5	
2496,039	1	40052,567					
2495,030	2	40068,765					

Tableau 1. (Suite)

Sigma	Int.	Lambda	Spectro	NIV1	NIV2	J_1	J_2
2478,566	3	40334,923					
2460,092	5	40637,817	1	14783-17243		2-3	
2455,624	1	40711,758					
2453,753	20	40742,801					
2452,245	2	40767,856					
2436,217	4	41036,069					
2434,771	2	41060,441	1	15524-17959		3-4	

Tableau 2

Sigma	Int.	Lambda	Spectro	NIV1	NIV2	J_1	J_2
4191,985	2	23848,547	1	12065-16257		5-5	
4190,350	2	23857,853					
4189,750	1	23861,269					
4188,557	1	23868,065					
4187,930	1	23871,639					
4182,595	15	23902,088					
4179,970	3	23917,098					
4179,425	1	23920,217					
4178,650	1	23924,654					
4176,890	2	23935,881					
4176,305	3	23938,087					
4175,760	6	23941,211					
4174,425	4	23948,868	1	13798-17973		7-8	
4173,320	2	23955,209					
4170,205	2	23973,103					
4168,880	2	23980,722					
4168,070	12	23985,382	1	9814-13982		4-4	
4165,240	1	24001,679					
4164,840	1	24003,984					
4163,390	5	24012,344					
4162,175	1	24019,354					
4159,465	1	24035,003					
4159,120	4	24036,997					
4158,185	1	24042,402					
4157,000	3	24049,255					
4155,980	3	24055,157	2	19113-14957		13/2-15/2	
4153,645	1	24068,680					
4152,775	1	24073,723					
4151,780	3	24079,492					
4150,420	2	24087,382					
4148,680	30	24097,485					
4146,840	9	24113,992	1	13017-17162		4-5	
4144,890	100	24119,519	1	15073-19218		10-9	
4144,040	20	24124,467	1	12065-16209		5-4	
4140,960	1	24142,410					
4139,890	10	24148,650	1	11486-15625		4-5	
4139,390	9	24151,567					
4137,410	2	24163,125					
4136,555	16	24168,119	1	22705-26842		7-6	
4134,255	1	24181,564					
4132,865	5	24189,698					
4131,515	1	24197,601					
4129,385	2	24210,083	2	9674-13804		5/2-5/2	
4128,340	1	24216,211					
4127,345	1	24222,049	1	14122-18249		5-5	
4126,780	1	24225,366	1	14122-18249		5-6	
4120,230	1	24263,877					
4118,910	3	24271,653	1	14327-18446		7-6	
4117,925	1	24277,459					
4114,690	1	24296,546					

Tableau 2. (Suite)

Sigma	Int.	Lambda	Speetre	NIV1	NIV2	J_1	J_2
4113,880	11	24301,330	1	11486-15599		4-4	
4112,325	8	24310,519					
4111,625	70	24314,657	1	11109-15220		6-6	
4107,490	3	24339,135					
4106,770	3	24343,402	1	13333-17440		8-8	
4106,570	1	24344,588					
4103,580	3	24362,326					
4101,905	1	24372,274					
4099,990	14	24383,658	1	15834-19934		9-10	
4098,000	2	24395,499	2	12276-16374		11/2-9/2	
4098,000	2	24395,499	1	12065-16163		5-5	
4089,735	1	24444,800					
4086,100	2	24466,546	2	6005-10091		9/2-9/2	
4082,875	13	24485,872					
4080,280	2	24501,445					
4079,130	15	24508,352	1	12178-16257		5-5	
4078,410	1	24512,679					
4076,675	1	24529,128					
4075,250	2	24531,686					
4071,515	7	24554,190	1	12056-16128		7-6	
4070,990	8	24557,357	2	8420-12491		9/2-11/2	
4067,005	1	24581,419					
4066,355	3	24585,348					
4062,600	3	24608,072	1	12065-16128		5-6	
4055,935	2	24648,510					
4053,120	1	24665,629					
4050,740	2	24680,121					
4050,460	4	24681,827					
4049,490	2	24687,740					
4047,660	2	24698,901					
4043,200	1	24726,146					
4042,250	1	24731,957	1	13195-17237		6-6	
4040,945	1	24739,944					
4038,020	30	24754,187	1	13798-17837		7-7	
4036,820	7	24765,225	1	11486-15522		4-5	
4036,020	1	24770,134					
4034,770	1	24777,808					
4033,270	3	24787,023	1	10898-17440		8-8	
4031,180	3	24799,874	1	12178-16209		5-4	
4028,295	5	24817,635	1	15834-19862		9-8	
4027,280	1	24823,890					
4024,255	1	24842,550					
4022,175	100	24855,397	1	10774-14797		6-5	
4019,700	50	24870,700	1	13953-17973		9-8	
4005,185	2	24900,958					
4003,940	1	24968,595					
4000,350	1	24991,002					
3998,620	30	25001,814	1	11486-15484		4-3	
3993,385	20	25034,590	1	12065-16059		5-4	
3992,680	1	25039,010					
3985,850	2	25081,916					
3985,190	2	25086,070	1	12178-16163		5-5	
3982,700	15	25101,754					
3974,625	2	25152,752					
3967,785	3	25196,112					
3965,480	2	25210,758					
3962,325	2	25230,832					
3960,870	2	25240,100	2	12276-16237		11/2-11/2	
3960,550	10	25242,140					
3954,325	1	25281,876					
3951,815	5	25297,934					
3949,210	1	25314,621					
3943,015	40	25354,394	1	12902-16845		8-7	
3935,190	100	25404,811	1	10376-14312		5-5	

Tableau 2. (Suite)

Sigma	Int.	Lambda	Spentre	NIV1	NIV2	J_1	J_2
3929,805	12	25439,823	1	14780-13709		8-9	
3928,000	3	25451,313	1	12917-16845		6-7	
3297,450	6	30318,204	1	12917-16844		6-5	
3921,640	4	25492,589	1	14327-18249		7-6	
3918,835	14	25510,836	1	8475-12394		5-5	
3918,835	14	25510,836	1	9814-13733		4-3	
3908,860	4	25575,937					
3908,830	1	25577,442					
3902,960	20	25614,599	1	10774-14677		6-5	
3897,675	2	25649,331					
3886,760	12	25721,361					
3879,330	4	25770,625	1	12917-16796		6-6	
3862,050	20	25885,930	1	11818-15780		7-6	
3860,080	3	25899,141	1	9939-13799		7-7	
3858,190	50	25911,828	1	9814-13672		4-4	
3844,560	4	26003,693					
3844,215	8	26006,027	1	14327-18171		7-6	
3842,430	1	26018,108	1	16092-19934		10-10	
3839,825	4	26037,115	1	12917-16757		6-5	
3812,295	2	26223,773	2	8420-12232		9/2-7/2	
3794,345	2	26347,830					
3790,965	1	26371,322					
3789,435	2	26381,969					
3787,840	1	26393,078					
3785,590	5	26408,765	2	7524-11310		7/2-9/2	
3755,555	1	26619,969					
3741,058	10	26723,124	1	12917-16658		6-6	
3739,925	5	26731,220	1	13017-16757		4-5	
3723,604	10	26848,386	1	12056-15780		7-6	
3714,531	5	26913,965	1	12065-15780		5-6	
3673,166	1	27217,054					
3667,542	2	27258,791	1	14122-17790		5-4	
3666,459	4	27268,842					
3664,397	2	27282,186					
3658,817	2	27323,793					
3653,495	1	27363,595	2	9877-17356		9/2-9/2	
3652,963	1	27367,581	1	12065-15718		5-4	
3649,988	2	27389,887					
3645,980	2	27419,997					
3644,045	4	27434,557					
3641,464	20	27454,002	1	13798-17440		7-8	
3605,865	15	27725,042	1	10376-13982		5-4	
3572,783	3	27981,761					
3572,273	6	27985,756					
3568,729	4	28013,548	1	11109-14677		6-5	
3561,870	20	28067,493	1	13195-16757		6-5	
3559,931	15	28082,780	1	15533-19093		8-8	
3557,729	1	28100,162					
3546,183	6	28191,653					
3544,646	4	28203,877					
3541,329	4	28230,294	1	12056-15598		7-6	
3540,563	50	28236,402					
3540,112	15	28239,999	1	12178-15718		5-4	
3539,661	12	28243,597					
3538,612	4	28251,970					
3537,105	3	28264,007	1	10774-14312		6-5	
3534,175	2	28287,439	1	12065-15599		5-4	
3533,864	7	28289,929	1	8475-12009		5-5	
3521,097	1	28392,504					
3520,764	1	28395,189	2	11373-14894		15/2-15/2	
3517,033	2	28425,312	1	8475-11992		5-4	
3515,876	2	28434,666					
3511,927	35	28466,640	1	13333-16845		8-7	

Tableau 2. (Suite)

Sigma	Int.	Lambda	Spectre	NIV1	NIV2	J_1	J_2
3500,896	35	28483,112	1	14327-17837		7-7	
3495,359	15	28601,572					
3494,695	50	28607,006					
3493,689	4	28615,243					
3493,173	2	28619,470					
3492,540	2	28624,657					
3490,819	15	28638,770	1	13798-17289		7-7	
3483,609	1	28698,043					
3481,769	2	28713,209	2	10883-14365		9/2-11/2	
3478,302	3	28741,829	1	11918-15396		7-7	
3477,608	2	28747,565					
3467,000	25	28760,864					
3474,520	1	28773,115					
3473,825	25	28778,871					
3472,351	1	28791,087					
3470,740	2	28804,451					
3470,099	2	28809,772	1	12917-16387		6-7	
3465,045	3	28844,301					
3463,292	50	28866,397	1	13195-16658		6-6	
3457,135	30	28917,807	1	12065-15522		5-5	
3454,418	1	28940,551					
3453,888	30	28944,992					
3451,354	3	28966,244					
3449,241	1	28983,989					
3447,376	40	28999,668	1	12178-15625		5-5	
3444,334	1	29025,281					
3443,363	6	29033,466					
3441,526	1	29048,963					
3441,041	1	29053,057					
3438,615	10	29073,555	1	13798-17237		7-6	
3437,541	100	29082,638	1	11001-14438		3-3	
3435,035	2	29103,855					
3434,625	1	29107,330					
3433,977	1	29112,822					
3430,027	1	29146,348	2	11709-15139		9/2-11/2	
3429,472	2	29151,065					
3428,526	1	29159,109					
3428,299	3	29161,039					
3426,851	1	29173,361					
3421,378	8	29220,028	1	12178-15594		5-4	
3421,202	3	29221,531	1	14327-17748		7-6	
3419,541	2	29235,725	1	12178-15598		5-6	
3417,468	1	29253,460					
3413,497	5	29287,491					
3406,401	15	29348,501					
3403,917	10	29369,918					
3402,793	3	29379,619					
3401,823	2	29387,996					
3398,255	2	29418,852					
3395,144	1	29445,809					
3394,390	1	29452,350					
3392,340	25	29470,148					
3390,809	25	29483,454					
3388,537	5	29503,223					
3385,641	1	29528,459					
3385,460	1	29530,038					
3383,665	100	29545,703	1	15834-19218		9-9	
3379,978	5	29577,933					
3378,250	5	29593,062					
3377,983	1	29595,401					
3373,214	25	29637,243					
3371,857	1	29649,170					
3371,094	1	29655,881					

Tableau 2. (Suite)

Sigma	Int.	Lambda	Speetre	NIV1	NIV2	J_1	J_2
3370,716	1	29659,207					
3367,230	1	29689,912					
3366,842	4	29693,333					
3365,446	30	29705,650	1	12917-16282		6-7	
3365,129	10	29708,449					
3363,645	3	29721,556	1	14780-18143		8-7	
3361,039	15	29744,801					
3355,343	5	29795,095					
3353,083	10	29815,177					
3350,546	1	29837,753					
3349,960	1	29842,972	2	12887-16237		11/2-11/2	
3347,538	4	29864,564					
3347,039	2	29869,016					
3344,310	30	29893,390					
3342,127	1	29912,916					
3340,376	10	29928,596					
3339,855	4	29933,264					
3338,754	3	29943,135					
3337,151	1	29957,519					
3335,119	20	29975,771					
3331,337	2	30009,802					
3330,807	2	30014,577					
3325,445	1	30062,973					
3322,311	1	30091,332					
3321,633	1	30097,474					
3315,813	60	30150,302					
3308,400	7	30217,859					
3307,690	20	30224,345					
3307,291	24	30277,991					
3305,531	12	30244,086					
3305,186	1	30247,243					
3290,811	1	30379,369					
3288,315	1	30402,429					
3286,207	1	30421,931					
3285,347	22	30429,895	1	14687-17973		9-8	
3281,006	10	30470,156					
3279,613	1	30483,098					
3279,195	1	30486,983					
3277,969	1	30498,386					
3275,869	12	30517,937					
3274,768	3	30528,197					
3273,614	1	30538,959					
3268,580	1	30604,719					
3265,883	1	30611,251					
3264,945	1	30620,045					
3259,385	1	30672,278	1	15834-19093		9-8	
3255,653	3	30707,438					
3251,225	1	30749,260					
3250,317	20	30757,850					
3247,845	1	30781,261					
3246,373	7	30795,218	1	12917-16163		6-5	
3238,886	7	30866,404					
3234,848	10	30904,934					
3224,958	1	30999,710					
3219,812	30	31049,255					
3219,550	2	31051,782					
3217,901	1	31067,694					
3216,378	10	31092,091					
3214,447	1	31101,077					
3210,912	25	31135,317	1	12917-16128		6-6	
3210,385	1	31140,428					
3202,834	1	31213,845	1	11109-14311		6-5	
3197,505	14	31265,866					

Tableau 2. (Suite)

Sigma	Int.	Lambda	Spectre	NIV1	NIV2	J_1	J_2
3193,200	50	31308,018	1	14780-17973		8-8	
3191,834	4	31321,417	1	11486-14677		4-5	
3188,867	4	31350,559					
3186,600	2	31372,863	2	9674-12861		5/2-7/2	
3178,357	3	31454,228					
3175,923	1	31478,334	1	15533-18709		8-9	
3169,797	5	31539,169	1	12065-15235		5-4	
3163,550	1	31601,449					
3160,841	1	31628,533					
3160,404	1	31632,907					
3157,999	1	31656,997					
3155,016	5	31686,928	1	12065-15220		5-6	
3155,016	5	31686,928	2	9908-13063		7/2-9/2	
3160,959	15	31727,726					
3145,920	1	31778,546					
3126,068	20	31980,355	1	12736-15863		3-4	
3126,068	20	31980,355	1	16092-19218		10-9	
3121,227	1	32029,957					
3117,474	2	32068,516					
3115,002	6	32093,965					
3114,167	5	32102,570					
3107,625	1	32170,151					
3094,565	10	32305,919					
3089,278	1	32361,207					
3087,669	1	32378,071					
3080,575	15	32452,631					
3079,552	7	32463,412					
3076,813	2	32492,311					
3072,311	1	32539,924					
3071,550	2	32547,086	1	16791-19862		9-8	
3070,967	1	32554,165					
3070,313	1	32561,099					
3063,793	1	32630,392					
3062,619	2	32642,900	1	13195-16257		6-5	
3057,432	2	32698,279	1	14780-17837		8-7	
3056,920	4	32703,756	1	12178-15235		5-4	
3052,414	1	32752,033					
3046,535	25	32815,236	1	13798-16845		7-7	
3043,800	1	32844,722					
3042,139	25	31816,786	1	12178-15220		5-6	
3034,771	4	32942,441					
3026,759	1	33029,642					
3025,060	1	33048,193					
3022,960	1	33071,151					
3019,608	2	33107,862					
3014,845	4	33160,167					
3007,090	4	33245,685					
3001,769	7	33304,617					
2998,476	1	33341,192					
2983,344	1	33510,305					
2978,891	1	33560,397					
2975,775	12	33595,540					
2971,479	11	33644,110					
2968,617	1	33676,545					
2965,442	1	33712,602					
2963,702	4	33732,395					
2959,690	1	33778,121					
2952,725	3	33857,798					
2939,927	10	34005,187					
2938,466	1	34022,094					
2935,048	1	34051,273					
2930,900	10	34109,921					
2930,360	1	34116,207					

Tableau 2. (Suite)

Sigma	Int.	Lambda	Spectre	NIV1	NIV2	J_1	J_2
2929,000	1	34132,047					
2925,990	2	34167,159					
2912,985	1	34319,699	1	11486-14312		4-5	
2909,683	1	34358,646	1	14327-17237		7-6	
2907,137	2	34388,736					
2901,815	10	34451,806	1	10898-13799		8-7	
2897,357	14	34504,815	1	9939-12837		7-6	
2894,136	20	34543,217	1	9115-12009		6-5	
2885,477	20	34646,877	1	8475-11360		5-4	
2881,850	1	34690,482					
2873,785	4	34787,838					
2862,950	12	34919,495	1	12917-15780		6-6	
2860,510	2	34949,281					
2859,620	1	34960,158	1	13798-16658		7-6	
2853,736	1	35032,241					
2846,290	2	35123,887					
2846,005	1	35127,404					
2845,475	1	35133,947					
2844,931	1	35140,665					
2842,740	1	35167,749					
2842,000	1	35176,906					
2841,164	1	35187,257					
2836,271	1	35247,960					
2835,020	2	35263,514					
2829,910	1	35327,189					
2829,200	1	35336,055					
2825,920	6	35377,069	1	11486-14311		4-5	
2824,519	1	35394,617					
2823,932	1	35401,974					
2815,206	1	35511,706					
2813,150	1	35537,660					
2807,504	1	35609,127					
2804,481	1	35647,511					
2804,208	1	35650,981					
2797,526	1	35736,135					
2795,937	3	35756,445					
2778,484	1	35981,048					
2777,979	10	35987,589					
2777,641	3	35991,969					
2771,906	1	36066,435					
2767,480	2	36124,116					
2766,327	2	36152,241					
2769,672	1	36226,323					
2747,763	9	36383,330	1	12736-15484		3-3	
2746,294	1	36402,792					
2736,130	3	36538,018					
2732,163	4	36591,070					
2731,318	5	36602,391					
2722,874	1	36715,899	1	15533-18256		8-7	
2722,380	4	36722,562	1	14122-16844		5-5	
2708,596	2	36909,442	1	12917-15625		6-5	
2701,660	4	37004,201					
2701,048	2	37012,585					
2700,643	1	37018,135					
2697,726	1	37058,162	1	9115-11812		6-6	
2689,858	1	37166,560					
2689,352	1	37173,553					
2677,368	1	37339,943					
2674,324	1	37382,444	1	14122-16796		5-6	
2671,505	12	37421,891	1	11001-13672		3-4	
2661,747	1	37559,080					
2657,540	1	37618,538					
2654,805	2	37657,293					

Tableau 2. (Suite)

Sigma	Int.	Lambda	Spectre	NIV1	NIV2	J_1	J_2
2645,365	2	37791,673	1	12736-15382		3-2	
2640,747	1	37857,761					
2636,715	1	37915,652					
2635,980	1	37926,224					
2634,575	2	37946,450	1	14122-16757		5-5	
2633,426	1	37963,007	1	8475-11108		5-5	
2631,740	3	37987,328					
2628,995	2	38026,991	1	11001-13630		3-3	
2628,660	1	38031,837					
2623,405	2	38108,020					
2620,500	3	38150,265	1	11001-13621		3-2	
2618,500	1	38179,404	1	12178-14797		5-5	
2614,486	2	38238,021					
2612,090	4	38273,095	1	12065-14677		5-5	
2611,398	3	38283,237					
2609,707	2	38308,043	1	15533-18143		8-7	
2608,889	1	38320,055					
2605,500	3	38369,898	1	12197-15522		6-5	
2604,108	2	38390,408					
2602,033	1	38421,023					
2592,144	1	38607,599					
2585,209	2	38671,059	1	13195-15780		6-6	
2574,995	1	38824,452					
2574,663	2	38829,458					
2572,123	4	38867,803					
2567,254	1	38941,519					
2566,642	1	38950,804					
2559,734	1	39055,921					
2554,828	2	39130,920	1	9814-12369		4-3	
2547,377	2	39245,376					
2541,158	1	39341,422					
2532,685	1	39473,038					
2505,811	1	39896,373					
2499,244	1	40001,205	1	12178-14677		5-5	
2490,640	4	40042,925	1	11486-13982		4-4	
2493,995	4	40085,393					
2493,272	1	40097,017					
2482,366	4	40273,179					
2476,342	1	40371,148					
2475,469	2	40385,386					
2469,142	1	40488,871	1	14327-16796		7-6	

Tableau 3

Sigma	Int.	Lambda	Spectre	NIV1	NIV2	J_1	J_2
4212,340	2	23846,528					
4207,880	1	23758,461					
4204,250	1	23778,974					
4200,780	1	23798,616					
4199,580	3	23805,417					
4196,860	1	23820,845					
4189,080	1	23865,199	1	15458-19647		8-7	
4186,470	1	23879,964					
4184,590	3	23890,693					
4181,110	16	23910,577	1	11457-15638		6-6	
4178,050	2	23928,089	1	11943-16121		3-4	
4177,150	2	23933,245					
4175,390	2	23943,333					
4175,100	2	23944,996					
4174,600	40	23947,864	1	11457-15631		6-7	
4172,730	5	23958,596					

Tableau 3. (Suite)

Sigma	Int.	Lambda	Spectre	NIV1	NIV2	J_1	J_2
4171,470	1	23965,833	1		7864-12035		5-4
4169,600	2	23976,581					
4166,350	1	23995,284					
4164,170	3	24007,846					
4163,240	1	24013,209					
4162,920	3	24015,055					
4162,390	1	24018,113					
4162,060	3	24020,017	1		11558-15720		4-5
4160,030	12	24031,739	1		12910-17070		6-6
4157,640	4	24045,553					
4156,820	2	24050,296	1		13402-17559		6-5
4155,710	1	24056,720					
4155,270	1	24059,268					
4154,550	1	24063,437					
4152,830	1	24073,404					
4152,350	1	24076,187					
4151,840	1	24079,144					
4149,090	1	24095,104					
4141,210	1	24140,953					
4137,930	1	24160,088					
4137,040	1	24165,286					
4135,340	7	24175,220	1		15353-19489		7-8
4134,290	1	24181,360	2		8379-12513		9/2-9/2
4133,210	1	24187,878					
4129,960	1	24206,713					
4128,990	1	24212,399					
4128,260	2	24216,680					
4126,110	2	24229,299					
4125,700	1	24231,707					
4121,990	1	24253,517					
4121,580	1	24255,930					
4120,420	1	24262,758					
4119,830	1	24266,233					
4117,760	3	24278,431					
4113,930	1	24301,034					
4111,980	1	24312,559					
4110,320	1	24322,377					
4107,990	1	24336,173					
4106,600	1	24344,410					
4104,400	1	24357,459					
4102,000	1	24371,710					
4100,540	1	24380,388					
4095,320	1	24411,463					
4094,190	2	24418,201					
4091,780	1	24432,583					
4088,740	1	24450,749					
4087,620	20	24457,448	1		11633-15720		5-5
4081,300	7	24495,321					
4079,650	1	24505,228					
4076,660	1	24523,201					
4075,150	2	24532,288					
4074,910	1	24533,733					
4074,170	3	24538,189	1		12826-16900		7-7
4073,120	1	24544,515					
4069,530	2	24566,167					
4066,810	3	24582,598					
4066,280	1	24585,802					
4065,200	1	24592,333					
4064,420	3	24597,053					
4063,690	2	24601,472					
4062,160	1	24610,738					
4060,130	1	24623,043					
4058,040	1	24635,724					

Tableau 3. (Suite)

Sigma	Int.	Lambda	Spectre	NIV1	NIV2	J_1	J_2
4056,760	1	24643,497					
4053,140	1	24665,507					
4051,000	1	24678,537					
4049,690	1	24686,520					
4048,390	1	24694,448					
4044,950	3	24715,449					
4044,650	1	24717,282					
4041,940	2	24733,854					
4039,380	1	24740,530					
4039,030	1	24751,674					
4038,570	1	24766,759					
4035,990	1	24770,318					
4035,010	1	24776,334					
4033,310	1	24786,777					
4032,100	1	24794,215					
4030,530	5	24803,873	1	15458-19489		8-8	
4029,360	2	24811,075					
4027,360	1	24823,397					
4026,050	1	24831,474					
4025,690	4	24833,694					
4023,740	1	24845,729					
4022,370	3	24854,192					
4019,250	20	24873,485	1	12910-16929		6-5	
4017,520	1	24884,196					
4017,110	1	24886,736					
4013,700	1	24907,879					
4013,430	1	24909,555					
4011,890	1	24919,117					
4009,880	1	24931,608					
4008,420	2	24940,688					
4006,180	20	24960,865	1	11633-15638		5-6	
4003,030	4	24974,271					
4000,480	8	24990,190	1	13361-17361		6-6	
3999,510	1	24996,251					
3997,610	6	25008,131					
3995,220	15	25023,091	1	14411-18406		4-5	
3991,990	12	25043,338					
3991,130	1	25048,734					
3990,480	1	25052,814					
3989,860	4	25056,708	1	12910-16900		6-7	
3987,220	1	25073,298					
3984,090	2	25092,996					
3980,310	3	25116,826					
3979,050	9	25124,780					
3971,890	2	25170,072	1	14411-18383		4-4	
3966,990	2	25201,162	1	13402-17369		6-5	
3965,080	1	25213,301					
3961,320	25	25237,233	1	11677-15638		7-6	
3959,340	2	25249,854	1	13402-17361		6-6	
3953,740	1	25285,617					
3951,180	2	25302,000					
3946,690	1	25330,785					
3940,190	1	25372,572					
3931,570	10	25428,202	1	12362-16294		4-5	
3928,030	2	25451,118					
3922,880	2	25484,531					
3921,670	1	25492,394					
3919,510	2	25506,442					
3915,610	1	25531,847					
3914,760	1	25537,391					
3909,340	3	25572,797					
3903,220	3	25612,893					
3902,370	8	25618,472	1	8133-12035		4-4	

Tableau 3. (Suite)

Sigma	Int.	Lambda	Spectre	NIV1	NIV2	J_1	J_2
3900,360	3	25631,674					
3888,180	1	25711,967	1	14411-18299		4-4	
3877,450	1	25783,119					
3877,010	3	25786,046					
3876,130	1	25791,900					
3859,790	4	25901,087					
3859,390	1	25910,485					
3843,170	4	26013,098					
3842,240	1	26019,394					
3839,030	1	26041,150					
3836,710	1	26056,897	2	9553-5716		11/2-9/2	
3836,150	1	26060,701	1	13632-17468		5-4	
3835,780	1	26063,215					
3833,570	1	26078,240					
3822,520	1	26153,626					
3821,280	2	26162,113					
3812,910	1	26219,543					
3799,620	1	26311,252					
3799,240	7	26313,883					
3795,440	1	26340,229					
3793,970	1	26350,434	1	13567-17361		7-6	
3793,970	1	26350,434	1	14501-18295		8-7	
3762,120	1	26573,517					
3762,010	1	26574,293					
3653,510	8	28133,524	1	13346-16900		7-7	
3641,140	1	28231,801					
3638,970	2	28249,112	1	13361-16900		6-7	
3628,790	1	28330,606					
3611,920	1	28466,697					
3611,470	1	28470,344					
3602,550	1	28542,851	1	13567-17070		7-6	
3601,860	9	28548,475	1	10208-13710		4-4	
3497,850	1	28581,203	1	13402-16900		6-7	
3495,120	1	28603,528					
3492,400	2	28625,805					
3489,730	1	28647,707					
3483,210	1	28701,331					
3436,080	1	29095,004	1	11403-14839		4-5	
3436,080	1	29095,004	1	14970-18406		5-5	
3424,320	1	29194,924					
3421,640	1	29217,791	2	2294-5716		11/2-9/2	
3416,540	1	29261,405					
3412,700	2	29294,331	1	14970-18383		5-4	
3409,210	1	29324,319	1	12884-16294		5-5	
3408,230	1	29332,751					
3403,000	1	29377,832	1	16244-19647		8-7	
3393,140	2	29463,200					
3391,490	2	29477,534					
3390,690	3	29484,489					
3388,720	2	29501,630					
3382,340	50	29557,278	1	10081-13463		5-5	
3382,340	50	29557,278	1	11457-14839		6-5	
3379,720	2	29580,191					
3376,850	1	29605,331					
3370,600	1	29660,227					
3370,240	2	29663,396					
3366,560	1	29695,821					
3362,330	2	29733,180					
3361,330	1	29742,026					
3359,230	1	29760,618					
3358,230	6	29769,480	1	12362-15720		4-5	
3356,540	3	29784,469	1	14970-11613		5-5	
3353,960	3	29807,381					

Tableau 3. (Suite)

Sigma	Int.	Lambda	Spetre	NIV1	NIV2	J_1	J_2
3351,200	5	29831,929					
3347,400	6	29865,795					
3342,670	1	29908,056					
3341,100	1	29922,110					
3332,420	3	30000,049	1	13567-16900		7-7	
3331,490	1	30008,424					
3325,850	22	30059,312					
3324,490	2	30071,609					
3321,610	2	30097,683					
3316,080	1	30147,875					
3310,070	3	30202,613					
3309,500	1	30207,815					
3306,190	1	30238,057					
3299,870	2	30295,970					
3297,720	2	30315,722	1	13632-16929		5-5	
3295,970	1	30331,818					
3283,880	2	30443,489					
3283,330	4	30448,588	1	14970-18253		5-6	
3280,290	3	30476,806					
3277,850	1	30499,493					
3275,920	2	30517,462					
3271,210	1	30561,402					
3254,900	40	30714,542	1	10208-13463		4-5	
3248,770	1	30772,497					
3245,920	3	30799,515					
3234,350	1	30909,692					
3233,300	1	30919,730					
3226,360	1	30986,240					
3225,560	1	30993,925					
3224,260	3	31006,421					
3221,920	2	31028,940					
3220,810	1	31039,634					
3218,070	1	31066,062					
3217,110	2	31075,333					
3196,910	1	31271,686					
3195,240	2	31288,030					
3194,070	2	31299,491					
3190,490	1	31334,612					
3187,800	8	31361,053					
3186,580	25	31373,060	1	11457-14643		6-6	
3181,710	2	31421,080					
3181,040	1	31427,698					
3169,130	1	31545,807					
3166,460	1	31572,407					
3157,080	30	31666,212	1	8878-12035		3-4	
3163,320	3	31703,970	1	10557-13710		4-4	
3152,250	5	31714,732					
3151,090	1	31726,407					
3144,410	7	31793,807	1	13361-16505		6-6	
3141,930	1	31818,903					
3138,970	9	31848,907					
3134,250	5	31896,870					
3129,660	1	31943,650					
3127,490	1	31965,814					
3125,380	1	31987,395					
3123,720	3	32004,394					
3121,220	1	32030,028					
3118,400	1	32058,993					
3117,010	2	32073,290					
3103,240	6	32215,609	1	13402-16505		6-6	
3093,170	2	32320,488					
3081,600	1	32441,837					
3069,580	4	32568,875					
3066,530	1	32601,268					
3060,570	1	32664,754					

Tableau 3. (Suite)

Sigma	Int.	Lambda	Spectre	NIV1	NIV2	J_1	J_2
3050,980	1	32703,114	1	14411-17468		4-4	
3047,390	1	32806,029					
3042,080	2	32863,293	2	10740-13783		11/2-11/2	
3041,160	4	32873,342	1	14543-11502		6-6	
3027,110	1	33025,812					
3025,080	4	33047,974					
3017,380	2	33132,309					
3013,930	2	33170,235					
3010,700	15	33205,821	1	11633-14643		5-6	
3004,260	2	33277,002					
2991,160	1	33422,853					
2989,570	1	33440,517					
2988,390	1	33453,721					
2985,600	1	33484,983					
2980,190	1	33545,769					
2979,800	1	33550,160					
2970,390	2	33656,444					
2968,060	1	33682,866					
2966,880	2	33696,262	1	11677-14643		7-6	
2965,460	1	33712,397					
2963,730	1	33732,076					
2958,290	2	33794,106	1	14411-17369		4-5	
2954,890	1	33832,991					
2952,890	1	33855,906					
2948,040	2	33911,604					
2942,020	2	33980,995	1	15353-18295		7-7	
2937,740	1	34030,502	1	14970-17908		5-5	
2934,910	2	34063,316	1	14970-12035		5-4	
2929,820	8	34122,494	1	14543-11613		4-5	
2928,470	1	34138,225					

l'observation difficile dans cette région, malgré la mise sous vide du spectromètre et l'utilisation d'une atmosphère d'azote sec entre la source et le spectromètre.

Les résultats sont rassemblés dans le Tableau 1 pour le Samarium (370 raies), le Tableau 2 pour le Néodyme (470 raies) et le Tableau 3 pour l'Uranium (300 raies). Dans la première colonne est indiqué le nombre d'ondes dans le vide en cm^{-1} ; dans la deuxième colonne l'intensité est donnée avec une échelle linéaire arbitraire; les raies notées 1 sont les plus faibles et ont un rapport signal sur bruit de quelques unités; dans la troisième colonne, on donne la longueur d'onde dans l'air exprimée en Å. Pour une raie classée on trouve successivement l'indication du spectre auquel elle appartient, sa classification et les nombres quantiques J des niveaux.

Pour les trois éléments étudiés, ce travail est une extension vers les grandes longueurs d'onde de l'observation des spectres infrarouges faite précédemment jusqu'à $2,5 \mu\text{m}$ à l'aide d'un SISAM, dans le cadre du programme de classification des spectres des terres rares et des actinides entrepris au Laboratoire.

Pour le Samarium et le Néodyme, cette étude prolonge le travail récemment publié dans cette revue [9], [13].

Dans le cas de l'Uranium, la classification des spectres d'arc et d'étincelle pour les longueurs d'onde inférieures à $2,5 \mu\text{m}$ est en cours de publication [14].

Remerciements—Je tiens à remercier Monsieur BLAISE, directeur de recherche au C.N.R.S., pour les conseils qu'il m'a donnés au cours de cette étude et l'aide qu'il m'a apportée dans la classification des raies.

Je remercie également Madame SCHWEIGHOFER et Monsieur WYART qui m'ont aimablement communiqué les résultats de leur recherche sur la classification des spectres du Samarium et du Néodyme.

[13] J. BLAISE, J. CHEVILLARD, J. VERGES et J. F. WYART, *Spectrochim. Acta* **25B**, 333 (1970).

[14] Los Alamos, Scientific Laboratory Report, to be published.

ANNEXE n° 2

Etude des spectres d'émission atomique du néon et du xénon entre 3,5 et 5,5 μm à l'aide d'un spectromètre à grilles

C. MORILLON

Laboratoire Aimé Cotton, C.N.R.S.II, 91-Orsay, France

(Received 5 June 1972)

Résumé—On a pu observer à l'aide d'un spectromètre à grilles de Girard les raies d'émission spontanée du néon et du xénon jusqu' à 5,5 μm . La source utilisée était un tube sans électrodes muni d'une fenêtre en saphir, et excité par un champ électrique haute fréquence. On a atteint une limite de résolution de 0,060 cm^{-1} .

Abstract—It has been possible to observe spontaneous emission lines of Neon and Xenon with a Girard grid spectrometer up to 5.5 μm . We obtained a limit of resolution of 0.060 cm^{-1} . The source used was an electrodeless discharge tube with a sapphire window.

INTRODUCTION

L'INTÉRÊT de la partie infrarouge des spectres d'émission atomique a été démontré dans de nombreux cas, aussi son étude a-t-elle été entreprise au laboratoire depuis plusieurs années. Entre 0,8 et 2,5 μm , plusieurs éléments du groupe des terres rares et du groupe des actinides ont été étudiés à l'aide d'un S.I.S.A.M. [1-4]. Cette étude a été poursuivie entre 2,3 et 4,1 μm à l'aide d'un spectromètre à grilles de Girard [5, 6].

L'observation des spectres d'émission spontanée au-delà de 4 μm présente des difficultés nouvelles. Dans cette région, la diminution importante de l'intensité des raies d'émission spontanée proportionnellement à la puissance 4^{ème} du nombre d'ondes rend l'observation des spectres particulièrement ardue. Ce phénomène physique est, de plus, renforcé par deux facteurs techniques relatifs, d'une part aux détecteurs, d'autre part à la transparence des fenêtres dans ce domaine spectral. En effet les détecteurs au sulfure de plomb utilisés dans le proche infrarouge ne sont plus sensibles au-delà de 4 μm et les détecteurs utilisables, quantiques ou thermiques, ont une détectivité très inférieure à celle de la cellule au sulfure de plomb. Par suite de son intensité, de sa stabilité et de sa durée de vie importante, une source du type tube sans électrodes excité en haute fréquence, convenait particulièrement bien à notre étude; toutefois, réalisée en verre de silice fondue, son emploi est limité à 4 μm par suite de la baisse en transmission de ce matériau même sous faible épaisseur. Il existe d'autres matériaux transparents au-delà de 4 μm mais ils ne présentent pas les qualités du verre de silice nécessaire pour la fabrication et le bon fonctionnement de ce type de source.

[1] J. VERGES, *Spectrochim. Acta* **24B**, 177 (1969).

[2] P. CAMUS, G. GUELACHVILI et J. VERGES, *Spectrochim. Acta* **24B**, 373 (1969).

[3] J. BLAISE, C. MORILLON, M. G. SCHWEIGHOFER et J. VERGES, *Spectrochim. Acta* **24B**, 405 (1969).

[4] J. BLAISE, J. CHEVILLARD, J. VERGES et J. F. WYART, *Spectrochim. Acta* **25B**, 333 (1970).

[5] A. GIRARD, *Appl. Opt.* **2**, 79 (1963).

[6] C. MORILLON, *Spectrochim. Acta* **25B**, 513 (1970).

Nous avons essayé de surmonter toutes ces difficultés et nous exposons ici nos premiers essais pour obtenir des spectres d'émission spontanée entre 4 et 5,5 μm ainsi que nos résultats.

METHODES EXPERIMENTALES

Spectromètre

L'observation des spectres au-delà de 4 μm a été faite à l'aide d'un spectromètre à grilles de Girard [5], spécialement adapté à la mesure absolue des longueurs d'onde et décrit dans un article précédent [6]. L'appareil est équipé de hublots, de lentilles et de grilles en fluorine, dont la transparence est bonne jusque vers 8 μm . Les miroirs constituant l'optique du spectromètre ont une couche réfléchissante en or. On sait que l'intérêt de cet appareil est d'avoir une luminosité environ 150 fois plus grande que celle d'un spectromètre classique à fentes, à résolution égale.

Les mesures absolues de longueurs d'onde ont été faites avec des grilles dont le pas le plus fin est de 0,2 mm, ce qui donne une limite de résolution variant de 0,100 à 0,200 cm^{-1} suivant l'incidence du faisceau sur le réseau.

Une étude plus fine de quelques raies a été entreprise à l'aide de grilles dont le pas le plus fin est de 0,05 mm. Le pouvoir de résolution théorique est alors de 60000; le pouvoir de résolution effectivement obtenu est de 48000. Il faut noter également que l'on perd un facteur non négligeable sur le rapport signal sur bruit avec ces grilles à pas fin. Cette perte en résolution et en signal est vraisemblablement due à l'influence des défauts de réglage et des aberrations introduites par le système optique, d'autant plus grande que la résolution est plus grande.

Le spectromètre est utilisé sous vide, ce qui rend possible l'observation des spectres malgré l'absorption atmosphérique par l'eau au-dessus de 5 μm , et par le gaz carbonique vers 4,25 μm .

Détecteurs

Le détecteur utilisé était une cellule photo-voltaïque à l'antimoniure d'indium refroidie à l'azote liquide (-193°C), et ayant une fenêtre en saphir. Ce détecteur est utilisable jusqu'à 5,5 μm ; sa détectivité est maximale vers 5,3 μm . C'est à notre connaissance le meilleur détecteur utilisable dans cette région. Pourtant sa détectivité spécifique $D^*(\lambda)$ est comprise entre $2 \cdot 10^{10}$ et $5 \cdot 10^{10}$, c'est-à-dire qu'elle est presque dix fois plus faible que celle de la cellule au sulfure de plomb dans le proche infrarouge.

L'optique de sortie du spectromètre, décrite dans un article précédent [6] forme sur la couche sensible du détecteur une image du réseau qui a environ 2 mm de largeur et 3 mm de longueur.

Source

Le problème des sources émettant des raies suffisamment intenses au-delà de 4 μm est essentiel. Jusqu'à 4 μm on utilise des tubes sans électrodes excités par un champ électrique haute fréquence; le matériau servant à la fabrication de ces tubes est le verre de silice très pur.

Le matériau servant à la fabrication de ces lampes sans électrodes doit avoir les qualités suivantes:

(1) Ce doit être un verre pouvant se souffler, pour réaliser des ampoules étanches au vide qui peuvent être soudées directement à un banc de pompage; aucun joint ou robinet comportant de la graisse à vide ne doit être utilisé car on obtient alors une contamination des tubes par la vapeur de cette graisse qui rend leur fonctionnement impossible.

(2) Il doit être suffisamment réfractaire pour être dégazé à des températures très supérieures aux températures de fonctionnement des sources.

(3) Il ne doit pas être attaqué chimiquement par le corps que l'on veut distiller dans l'ampoule et exciter ensuite.

(4) Ce doit être un isolant présentant une faible permittivité diélectrique.

(5) Il doit être transparent au-delà de $4 \mu\text{m}$.

Il serait tentant de fabriquer des tubes en silice avec une fenêtre d'un matériau transparent au-delà de $4 \mu\text{m}$ collée à une extrémité. Malheureusement le verre de silice fondue se caractérise par un coefficient de dilatation linéaire très faible, $0,5 \cdot 10^{-6}$, alors que tous les matériaux transparents au-delà de $4 \mu\text{m}$ ont des coefficients très grands ce qui rend ces assemblages impossibles.

De plus, les matériaux transparents au-delà de $4 \mu\text{m}$ sont, soit des "verres frittés" tels que Irtran, soit des cristaux tels que la fluorine, le fluorure de magnésium, etc. . . qui sont très sensibles aux chocs thermiques et résistent mal aux hautes températures.

Le saphir, ou corindon synthétique, (Al_2O_3), nous a paru être le matériau le plus approprié: il résiste assez bien aux chocs thermiques, il est très réfractaire; son coefficient de dilatation est relativement bas, de l'ordre de $5 \cdot 10^{-6}$; il est transparent jusqu'à $5,5 \mu\text{m}$ environ.

Plusieurs essais ont été faits pour fixer une fenêtre en saphir sur un tube en silice: collages par adhérence moléculaire, fixations avec un joint en or, Toutes ces tentatives ont échoué à cause de la trop grande différence entre les coefficients de dilatation de la silice et du saphir. Finalement nous avons obtenu, avec l'aide du Laboratoire d'Electronique et de Physique Appliquée, des soudures de fenêtres en saphir de $0,8 \text{ mm}$ d'épaisseur et de 8 mm de diamètre, sur des tubes d'un verre Schott dont le coefficient de dilatation est très voisin de celui du saphir. Ce verre est utilisable jusqu'à 600°C environ; il n'est pas composé de silice pure et le problème des réactions chimiques avec certains éléments est à craindre.

Ces tubes à fenêtres en saphir semblent résister assez bien aux chocs thermiques; nous en avons utilisé une dizaine jusqu'à ce jour, nous n'avons observé qu'une seule cassure. Ils n'ont été utilisés jusqu'à maintenant que pour étudier les gaz rares qui sont faciles à exciter, et ne nécessitent pas des températures de fonctionnement très élevées. L'ampoule est reliée à un banc de pompage permettant à volonté de la vider et de la remplir du gaz choisi. La lampe est excitée dans une cavité par un champ électrique haute fréquence rayonnée par une antenne.

RESULTATS

Néon

Les raies du néon et du xénon naturels ont été observées entre $3,8$ et $5,5 \mu\text{m}$. Leurs nombres d'ondes ont été mesurés suivant la méthode décrite dans un article

précédent [6], à l'aide du spectre cannelé d'un étalon de Fabry-Perot éclairé en lumière blanche. Les raies étalons utilisées sont des raies du néon et du xénon mesurées par RAO, HUMPHREYS, RANK [7] entre 1 et 2,5 μm . Les raies mesurées et les raies étalons sont dans des ordres de diffraction du réseau différents.

La précision des mesures varie entre 0,05 et 0,20 cm^{-1} suivant l'intensité des raies.

Pour ces deux gaz rares nous avons observé jusqu'à 4 μm les raies déjà mesurées par HUMPHREYS, PAUL, COWAN et ANDREW [8]. Au-delà de 4 μm , nous avons observé environ 20 raies du néon comprises entre 4,5 et 5,5 μm et qui ont été classées à quelques exceptions près. Les résultats sont rassemblés dans le Tableau 1.

Tableau 1. Spectre d'émission du Néon entre 4,5 et 5,5 μm (les nombres d'ondes sont mesurés dans le vide et exprimés en cm^{-1} ; les longueurs d'onde sont mesurées dans l'air et exprimées en \AA)

Nombre d'ondes	Int	Longueur d'onde	Spect.	Classification
2183,491	1	45785,750		
2155,056	1	46389,872		
2152,729	1	46440,018		
2151,675	1	46462,767		
2120,467	1	47146,583	1	$5d(\frac{3}{2})_2 - 5p(\frac{1}{2})_1$
2115,793	1	47250,734		
2102,500	1	47549,476		
2059,088	3	48551,967	1	$5d(\frac{3}{2})_2 - 5p(\frac{1}{2})_1$
2038,938	2	49031,787	1	$5d(\frac{1}{2})_1 - 5p(\frac{1}{2})_1$
2033,503	1	49182,835	1	$5d(\frac{1}{2})_0 - 5p(\frac{1}{2})_1$
1997,500	1	50048,948		
1967,900	1	50801,755	1	$5d(\frac{3}{2})_2 - 5p(\frac{1}{2})_1$
1954,426	3	51152,013	1	$5s(\frac{3}{2})_1 - 5p(\frac{1}{2})_0$
1942,630	2	51462,591	1	$5d(\frac{3}{2})_4 - 5p(\frac{1}{2})_3$
1935,081	2	51663,888	1	$5d(\frac{3}{2})_2 - 5p(\frac{1}{2})_2$
1933,898	2	51694,957	1	$5d'(\frac{3}{2})_2 - 5p'(\frac{3}{2})_1$
1933,512	2	51705,277	1	$5d'(\frac{3}{2})_2 - 5p'(\frac{3}{2})_1$
1930,735	2	51779,646	1	$5d'(\frac{3}{2})_2 - 5p'(\frac{3}{2})_1$
1930,350	4	51789,973	1	$5p'(\frac{1}{2})_0 - 5s'(\frac{1}{2})_1$
1930,350	4	51789,973	1	$5d'(\frac{3}{2})_2 - 5p'(\frac{3}{2})_1$
1911,039	6	52313,309	1	$5d(\frac{3}{2})_2 - 5p(\frac{1}{2})_1$
1886,716	1	52987,717	1	$5d(\frac{3}{2})_2 - 5p(\frac{1}{2})_1$
1878,281	2	53225,675	1	$5d(\frac{3}{2})_2 - 5p(\frac{1}{2})_2$
1877,146	1	53257,858	1	$3d(\frac{1}{2})_1 - 4p(\frac{1}{2})_0$
1859,922	1	53751,058	1	$5d(\frac{3}{2})_2 - 5p(\frac{1}{2})_2$
1850,215	2	54033,058	1	$3d'(\frac{3}{2})_1 - 4p'(\frac{1}{2})_0$
1820,465	2	54916,065		

Pour le xénon, le spectre entre 4 et 5,5 μm semble assez dense; nous avons pu détecter environ 200 raies, seulement 62 d'entre elles ont pu être classées. Les résultats sont rassemblés dans le Tableau II.

Dans les Tableaux 1 et 2 on trouve successivement pour une raie, le nombre d'ondes dans le vide exprimé en cm^{-1} , son intensité repérée à l'aide d'une échelle arbitraire linéaire (les raies notées 1 sont les plus faibles et présentent un rapport signal sur bruit de quelques unités), enfin la longueur d'onde dans l'air est donnée en Angstroms. Si la raie est classée, figurent successivement, le spectre auquel elle appartient, sa classification et les nombres quantiques J des niveaux.

[7] K. N. RAO, C. J. HUMPHREYS et D. H. RANK, *Wavelength Standards in the infrared*. Academic Press, London (1966).

[8] C. J. HUMPHREYS, E. PAUL, R. D. COWAN et K. L. ANDREW, *J. Opt. Soc. Am.* **57**, 855 (1967).

Tableau 2. Spectre d'émission du xénon entre 3,6 et 5,5 μm (les nombres d'ondes sont mesurés dans le vide et exprimés en cm^{-1} ; les longueurs d'onde sont mesurées dans l'air et exprimées en \AA)

Nombre d'ondes	Int	Longueur d'onde	Spect.	Classification
2738,340	100	36508,530	1	$7p(\frac{1}{2})_1 - 7s(\frac{3}{2})_2$
2730,400	1	36614,697	1	$8p(\frac{3}{2})_3 - 6d(\frac{3}{2})_3$
2717,480	250	36788,778	1	$6p(\frac{1}{2})_1 - 5d(\frac{1}{2})_1$
2713,050	17	36848,849	1	$6p(\frac{3}{2})_2 - 5d(\frac{3}{2})_3$
2686,810	1	37208,723	1	$8p(\frac{3}{2})_2 - 6d(\frac{3}{2})_3$
2683,500	2	37254,619	1	$7p(\frac{3}{2})_3 - 5d'(\frac{3}{2})_3$
2596,850	1	38497,707		
2585,358	4	38668,830	1	$4f(\frac{3}{2})_3 - 5g(\frac{3}{2})_{4,5}$
2584,504	4	38681,607	1	$4f(\frac{5}{2})_4 - 5g(\frac{5}{2})_{4,5}$
2584,177	18	38686,502	1	$6p'(\frac{3}{2})_3 - 5d'(\frac{3}{2})_3$
2581,475	17	38726,995	1	$4f(\frac{3}{2})_1 - 5g(\frac{3}{2})_{2,3}$
2580,727	20	38738,220	1	$7p(\frac{3}{2})_2 - 8s(\frac{3}{2})_1$
2572,027	30	38869,253	1	$4f(\frac{3}{2})_2 - 5g(\frac{3}{2})_{2,3}$
2571,260	2	38880,848		
2567,368	200	38939,790	1	$6p(\frac{1}{2})_3 - 5d(\frac{1}{2})_3$
2566,701	50	38949,909	1	$4f(\frac{3}{2})_5 - 5g(\frac{3}{2})_{5,6}$
2565,849	45	38962,842	1	$4f(\frac{5}{2})_4 - 5g(\frac{5}{2})_{5,6}$
2553,312	6	39154,153	1	$6p'(\frac{3}{2})_1 - 8s(\frac{3}{2})_1$
2546,877	1	39253,081		
2544,826	2	39284,717		
2544,562	1	39288,793		
2542,321	2	39323,425		
2532,685	40	39473,038	1	$4f(\frac{3}{2})_3 - 5g(\frac{3}{2})_{3,4}$
2529,722	30	39519,271	1	$4f(\frac{5}{2})_2 - 5g(\frac{5}{2})_{3,4}$
2523,016	2	39624,311	1	$8p(\frac{1}{2})_0 - 6d(\frac{1}{2})_1$
2514,449	4	39759,315	1	$4f(\frac{3}{2})_3 - 5g(\frac{3}{2})_{3,3}$
2511,516	1	38805,747		
2511,280	3	39809,488		
2505,850	1	39895,752		
2502,150	100	39954,747	1	$6p(\frac{1}{2})_1 - 5d(\frac{1}{2})_0$
2502,090	40	39955,705	1	$4f(\frac{3}{2})_3 - 5g(\frac{3}{2})_4$
2502,010	40	39956,982	1	$4f(\frac{5}{2})_4 - 5g(\frac{5}{2})_{4,5}$
2496,844	1	40039,654		
2495,580	10	40059,934	1	$4f(\frac{3}{2})_3 - 5g(\frac{3}{2})_{3,4}$
2495,660	10	40058,650	1	$4f(\frac{5}{2})_4 - 5g(\frac{5}{2})_{3,4}$
2487,072	12	40196,975	1	$7p(\frac{1}{2})_1 - 7s(\frac{3}{2})_1$
2466,139	2	40538,173	1	$7p(\frac{3}{2})_2 - 5d(\frac{3}{2})_2$
2453,658	1	40661,520		
2452,845	10	40757,883	1	$7p(\frac{5}{2})_2 - 8s(\frac{3}{2})_2$
2427,275	0	41187,245		
2425,412	3	41218,882	1	$6p'(\frac{3}{2})_1 - 8s(\frac{3}{2})_2$
2408,128	30	41514,725	1	$7p(\frac{3}{2})_1 - 5d'(\frac{3}{2})_2$
2397,225	1	41703,541		
2393,463	1	41769,089		
2390,553	20	41819,935		
2375,734	1	42080,793		
2372,807	1	42132,702		
2370,591	1	42172,087		
2367,865	30	42220,638		
2360,311	1	42355,762	1	$4f(\frac{3}{2})_2 - 6d(\frac{1}{2})_1$
2348,794	15	42563,448	1	$4f(\frac{3}{2})_1 - 6d(\frac{1}{2})_0$
2342,267	1	42682,056		
2335,308	30	42809,244	1	$7p(\frac{3}{2})_3 - 8s(\frac{3}{2})_3$
2325,043	1	42998,246		
2322,528	1	43044,808		
2302,860	1	43412,440		
2300,921	1	43449,024	1	$8p(\frac{3}{2})_1 - 6d(\frac{3}{2})_1$
2299,668	25	43472,698	1	$4f(\frac{3}{2})_2 - 6d(\frac{1}{2})_1$
2294,552	3	43569,625		
2290,006	6	43656,118	1	$4f(\frac{3}{2})_1 - 6d(\frac{1}{2})_1$

Table 2 (cont.)

Nombre d'ondes	Int	Longueur d'onde	Spect.	Classification
2287,390	2	43706,045		
2268,253	1	44074,789	1	$6p'(\frac{1}{2})_0 - 7d(\frac{1}{2})_1$
2255,861	1	44316,903		
2245,955	9	44512,367	1	$7p(\frac{3}{2})_2 - 8s(\frac{3}{2})_1$
2244,599	1	44539,267		
2235,517	3	44720,202	1	$4f(\frac{7}{2})_3 - 6d(\frac{3}{2})_2$
2232,908	2	44772,455		
2222,737	1	44977,329		
2215,724	1	45119,687		
2212,653	1	45182,309		
2209,881	1	45238,984		
2209,163	1	45253,687		
2206,362	1	45311,138		
2202,973	50	45380,843	1	$6p(\frac{5}{2})_2 - 5d(\frac{3}{2})_2$
2201,578	2	45409,598	1	$4f(\frac{5}{2})_2 - 6d(\frac{3}{2})_2$
2198,649	30	45470,092	1	$4f(\frac{5}{2})_3 - 6d(\frac{3}{2})_2$
2196,666	1	45511,140		
2193,353	1	45579,883		
2190,509	1	45639,060		
2190,015	1	45649,355		
2187,899	7	45693,504	1	$7p(\frac{3}{2})_1 - 8s(\frac{3}{2})_1$
2186,664	1	45719,312		
2183,270	1	45790,385		
2179,823	1	45862,794		
2179,222	1	45875,442		
2176,176	1	45939,654		
2173,314	1	46000,151		
2172,830	1	46010,398		
2169,687	1	46077,048		
2169,358	1	46084,036		
2168,788	1	46096,148	1	$6p'(\frac{1}{2})_1 - 5d'(\frac{3}{2})_2$
2166,376	1	46147,470		
2165,614	1	46163,708		
2164,069	2	46196,666		
2163,122	1	46216,890		
2162,034	1	46240,148		
2159,757	1	46288,899	1	$9p(\frac{3}{2})_1 - 11d(\frac{3}{2})_2$
2158,351	1	46319,052		
2156,390	1	46361,174		
2155,320	1	46384,190		
2154,336	1	46405,376		
2152,986	2	46434,474		
2152,243	1	46450,504		
2149,515	1	46509,456		
2149,097	1	46518,502		
2145,997	2	46585,700		
2142,630	2	46658,906		
2141,026	8	46693,862	1	$4f(\frac{3}{2})_2 - 6d(\frac{3}{2})_2$
2139,509	1	46726,970		
2138,950	1	46739,182	1	$7f(\frac{3}{2})_1 - 9s(\frac{3}{2})_1$
2136,259	1	46798,058		
2135,357	1	46817,826		
2132,951	1	46870,638		
2131,699	1	46898,166		
2131,340	2	46906,065	1	$4f(\frac{3}{2})_1 - 6d(\frac{3}{2})_2$
2129,588	1	46944,654		
2126,193	1	47019,614		
2125,255	1	47040,366		
2123,740	1	47073,923		
2122,781	2	47095,189		
2122,114	1	47109,991		
2119,727	1	47163,042		
2119,350	1	47171,431		
2119,047	1	47178,176		
2118,075	6	47199,826	1	$7p(\frac{3}{2})_2 - 8s(\frac{3}{2})_2$

Table 2 (cont.)

Nombre d'ondes	Int	Longueur d'onde	Spect.	Classification
2115,828	2	47249,953		
2112,689	1	47320,156		
2112,333	1	47328,131		
2111,577	1	47345,076		
2109,402	1	47393,893		
2108,743	1	47408,704		
2107,421	1	47438,444		
2106,183	1	47466,328		
2105,180	2	47488,943		
2103,287	1	47531,684		
2102,840	1	47541,788		
2101,422	2	47573,868		
2099,510	1	47617,193		
2099,112	1	47626,222		
2097,435	1	47664,301		
2096,118	1	47694,249		
2095,295	1	47712,982		
2094,887	1	47722,275		
2093,441	1	47755,238		
2092,697	1	47772,216		
2092,197	1	47783,633		
2090,204	3	47829,194	1	$7p(\frac{1}{2})_0 - 8s(\frac{3}{2})_1$
2089,337	2	47849,042		
2089,060	1	47855,386		
2085,841	2	47929,240		
2085,383	1	47939,766		
2082,742	1	48000,556		
2082,163	1	48013,903		
2081,284	1	48034,182		
2079,483	1	48075,783		
2078,672	1	48094,540		
2077,175	1	48129,201		
2076,193	1	48151,965		
2075,058	1	48178,303		
2072,934	2	48227,668		
2071,477	1	48261,590		
2071,140	1	48269,442		
2069,523	1	48307,157		
2068,854	2	48322,778	1	$8p(\frac{3}{2})_2 - 8d(\frac{7}{2})_3$
2067,213	1	48361,138		
2066,135	1	48386,370		
2065,413	1	48403,285		
2064,551	1	48423,494		
2063,232	1	48454,451		
2062,720	1	48466,478		
2062,340	1	48475,408		
2060,324	1	48522,841		
2059,222	3	48548,808		
2056,040	1	48623,943		
2055,758	1	48630,614		
2055,183	1	48644,219		
2052,802	1	48700,641		
2052,237	1	48714,049		
2051,736	1	48725,944		
2051,085	1	48741,410		
2049,602	1	48776,677		
2048,792	1	48795,960		
2046,971	1	48839,370		
2046,311	1	48855,122		
2045,006	1	48886,298		
2042,921	2	48936,191		
2041,667	1	48966,248		
2041,083	1	48980,259		
2039,648	1	49014,767		
2038,648	2	49038,762		

Table 2 (cont.)

Nombre d'ondes	Int	Longueur d'onde	Spect.	Classification
2037,130	1	40075,304		
2036,237	1	49096,826		
2032,919	1	49176,958		
2032,462	8	49188,016	1	$4f(\frac{7}{2})_4 - 6d(\frac{7}{2})_4$
2030,199	1	49242,844		
2029,447	1	49261,091		
2029,137	1	49268,617		
2027,452	13	49309,564	1	$6p'(\frac{3}{2})_2 - 6s'(\frac{1}{2})_1$
2025,886	1	49347,680		
2025,129	1	49366,126		
2021,000	1	49466,983		
2019,840	1	49495,393		
2018,901	1	49518,413		
2015,104	1	49611,719		
2013,300	1	49656,173		
2012,815	1	49668,138		
2011,110	1	49710,247		
2009,872	1	49740,866		
2009,098	1	49760,028		
2008,543	1	49773,778		
2007,168	1	49807,875		
2006,471	1	49825,178		
2004,298	1	49879,196		
2003,125	2	49908,405		
2002,929	1	49913,289		
1999,638	1	49995,436		
1999,130	2	50008,140		
1996,652	1	50070,205		
1995,125	1	50108,526		
1991,490	1	50199,968		
1991,040	1	50211,334		
1990,295	1	50230,128	1	$6p'(\frac{3}{2})_2 - 5d'(\frac{1}{2})_2$
1989,037	1	50261,897		
1986,945	1	50314,817		
1985,151	1	50360,287		
1983,606	1	50399,512		
1982,779	1	50420,533		
1981,225	1	50460,081		
1977,285	1	50560,629		
1974,415	1	50634,124		
1973,369	2	50660,963	1	$5f(\frac{7}{2})_3 - 5d'(\frac{3}{2})_2$
1970,182	1	50742,913		
1969,306	1	50765,485		
1967,029	1	50824,250		
1965,252	1	50869,947		
1963,128	1	50925,245		
1961,391	2	50970,344		
1960,662	1	50989,295		
1959,254	1	51025,938		
1955,402	1	51126,456		
1954,020	3	51162,615		
1949,001	40	51294,368	1	$4f(\frac{9}{2})_5 - 6d(\frac{7}{2})_4$
1949,948	1	51507,188		
1935,529	1	51651,396		
1933,439	1	51707,229		
1929,593	1	51810,291		
1927,324	1	51871,286		
1921,775	1	52021,061		
1919,202	6	52090,804	1	$4f(\frac{7}{2})_3 - 6d(\frac{7}{2})_3$
1919,202	6	52090,804	1	$4f(\frac{7}{2})_4 - 6d(\frac{7}{2})_3$
1918,819	1	52101,201	1	$5f(\frac{3}{2})_2 - 5d'(\frac{3}{2})_2$
1914,759	1	52211,675		
1911,499	1	52300,720		
1882,204	1	53114,739	1	$4f(\frac{9}{2})_3 - 6d(\frac{7}{2})_3$
1886,820	1	52984,797	1	$6p'(\frac{3}{2})_2 - 5d'(\frac{1}{2})_1$
1836,640	4	54432,428	1	$4f(\frac{9}{2})_4 - 6d(\frac{7}{2})_3$

Xénon

Pour le xénon, l'étude de quelques raies a été commencée vers $4 \mu\text{m}$, avec des grilles dont le pas le plus fin est de $0,05 \text{ mm}$, c'est-à-dire avec une limite de résolution de $0,06 \text{ cm}^{-1}$. Nous donnons ici un résultat qui nous paraît intéressant:

A 2502 cm^{-1} nous avons pu mettre en évidence la présence de 3 raies correspondant aux transitions (Fig. 1):

$$\text{A} \quad 6p(\frac{1}{2})_1 - 5d(\frac{1}{2})_0$$

$$\text{B et C} \quad 4f(\frac{7}{2})_{3,4} - 5g(\frac{9}{2})_{4,5}$$

Nous pensons avoir ainsi séparé le doublet $4f(\frac{7}{2})_{3,4} - 5g(\frac{9}{2})_{4,5}$. La distance mesurée entre les 2 composantes B et C est de $0,077 \pm 0,005 \text{ cm}^{-1}$. Si nous négligeons

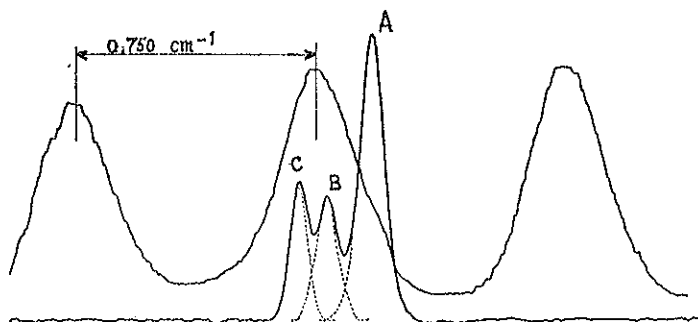


Fig. 1. Structure du XeI à 2502.1 cm^{-1} enregistrée à l'aide du spectromètre à grilles.

Composante A: nombre d'ondes dans le vide 2502.15 cm^{-1} $6p(\frac{1}{2})_1 - 5d(\frac{1}{2})_0$

Composante B: nombre d'ondes dans le vide 2502.09 cm^{-1} $4f(\frac{7}{2})_3 - 5g(\frac{9}{2})_4$

Composante C: nombre d'ondes dans le vide 2502.01 cm^{-1} $4f(\frac{7}{2})_4 - 5g(\frac{9}{2})_{4,5}$

La trace supérieure correspond au spectre cannelé issu du F.P. éclairé en lumière blanche, et sert à l'étalonnage du spectre de XeI.

la séparation des niveaux $5g$, ceci donne l'écart entre les niveaux $4f(\frac{7}{2})_3$ et $4f(\frac{7}{2})_4$ qui est de $0,083 \text{ cm}^{-1}$ d'après Humphreys.

Une confirmation semble être apportée par la décomposition de la raie à 2495 cm^{-1} , qui correspond à la transition (Fig. 2):

$$4f(\frac{7}{2})_{3,4} - 5g(\frac{9}{2})_{3,4}$$

L'écart mesuré entre les deux composantes est égal à: $0,085 \pm 0,005 \text{ cm}^{-1}$; ce qui, toujours en négligeant la séparation des niveaux $5g$ donne le même écart entre les niveaux $4f(\frac{7}{2})_3$ et $4f(\frac{7}{2})_4$, aux incertitudes de mesures près. Toutefois, ces mesures ayant été faites avec du xénon naturel, il ne nous est pas possible d'affirmer que cette interprétation des structures observées est correcte, puisque d'après LIBERMAN [9] la structure hyperfine de la raie: $5d(\frac{1}{2})_0 - 6p(\frac{1}{2})_1$, pour l'isotope 129, présente

[9] S. LIBERMAN, *C. r. Acad. Sci., Paris* 266, 236-239 (1968).

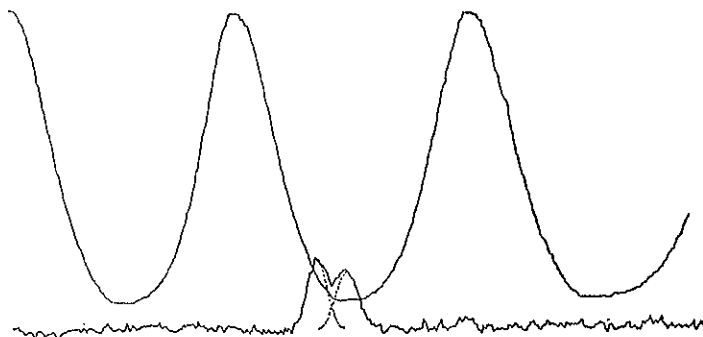


Fig. 2. Structure du XeI à $2\,495.6\text{ cm}^{-1}$ enregistrée à l'aide du spectromètre à grilles.

$4f(\frac{7}{2})_3 - 5g(\frac{7}{2})_{3,4}$ de nombre d'ondes $2\,495.58\text{ cm}^{-1}$

$4f(\frac{7}{2})_4 - 5g(\frac{7}{2})_{3,4}$ de nombre d'ondes $2\,495.66\text{ cm}^{-1}$.

La trace supérieure correspond au spectre cannelé issu du F.P. éclairé en lumière blanche, et sert à l'étalonnage du spectre de XeI.

un écart de $0,070\text{ cm}^{-1}$ entre les composantes extrêmes. Cette étude fine sera donc poursuivie avec l'isotope 136 du xénon et devra nous permettre prochainement de lever cette indétermination.

CONCLUSION

Les tubes à fenêtres en saphir ont été utilisés pour étudier le néon et le xénon qui sont faciles à exciter et ne nécessitent pas des sources ayant des températures de fonctionnement très élevées. Nous pensons les utiliser prochainement pour exciter d'autres éléments, soit à l'état pur, soit sous forme d'halogénures. La température maximale d'utilisation, située à 600°C environ, et la possibilité de réactions chimiques avec le verre, pourront limiter l'utilisation de ces sources.

Ces premiers essais nous ont permis d'observer les spectres atomiques en émission spontanée du xénon et du néon jusqu'à $5,5\ \mu\text{m}$. Il s'agit, à notre connaissance, des premières raies d'émission spontanée enregistrées à de telles longueurs d'onde pour des éléments autres que l'hydrogène.

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