

n° d'ordre :

THÈSE

DE DOCTORAT D'ÉTAT ÈS-SCIENCES PHYSIQUES

PRÉSENTÉE À L'UNIVERSITÉ DE PARIS-SUD

CENTRE D'ORSAY

PAR

Jean - François WYART

LABORATOIRE AIMÉ COTTON

C. N. R. S.

POUR OBTENIR

LE GRADE DE DOCTEUR ÈS-SCIENCES

CLASSIFICATION DES SPECTRES D'ARC ET D'ÉTINCELLE
DU DYSPROSIUM.

CONTRIBUTION A L'ÉTUDE DE CONFIGURATIONS ÉLECTRO-
NIQUES DANS D'AUTRES SPECTRES DES TERRES RARES.

SOUTENUE LE 27 Mars 1973 DEVANT LA COMMISSION D'EXAMEN

M. P. JACQUINOT

: Président

MM. J. BLAISE

J. L. COJAN

P. NOORMAN

} Examineurs

REMERCIEMENTS

Je voudrais témoigner ma profonde gratitude à Monsieur le Professeur Jacquinet et à Monsieur le Professeur Chabbal qui m'ont accueilli au Laboratoire Aimé Cotton où j'ai accompli ce travail dans les meilleures conditions.

Monsieur J. Blaise, Directeur de Recherche au C.N.R.S., a suivi toutes les étapes de cette étude après m'avoir initié aux méthodes de la classification. Pour son soutien constant et ses conseils, je veux lui exprimer toute ma reconnaissance.

Mes remerciements s'adressent aussi à MM. les Professeurs J.L. Cojan et Omont, mes parrains successifs au C.N.R.S. qui se sont intéressés à l'avancement de ce travail.

Je remercie particulièrement le Docteur M. Fred, d'Argonne National Laboratory qui a réalisé pour nous d'excellents spectrogrammes et MM. les Docteurs J.G. Conway et E.F. Worden qui m'ont transmis avant publication les résultats de leur analyse préliminaire des spectres du dysprosium.

Une partie de ce travail a été accomplie dans le cadre d'échanges bénéfiques avec le Laboratoire Zeeman de l'Université d'Amsterdam ; je remercie spécialement le Docteur P.E. Noorman, Vice-Président de l'Université d'Amsterdam, qui a bien voulu faire partie de mon jury.

Je n'oublierai pas l'agréable collaboration avec les Docteurs E. Meinders, Th. Van Kleef et R. Hoekstra.

J'associe à mes remerciements tous les chercheurs du Laboratoire qui ont contribué au progrès de mon travail, en particulier S. Feneuille pour ses suggestions dans l'interprétation des configurations électroniques, P. Camus pour la stimulante et fructueuse collaboration qui s'est établie dans le groupe de classification, J. Vergès, J. Chevillard et H. Delouis du C.I.R.C.E., qui ont si utilement étendu nos données dans le domaine infrarouge, enfin Y. Bordarier et A. Carlier qui ont mis au point, et adapté aux exigences de chacun, la chaîne de programmes "paramétriques".

Les responsables et les techniciens du Centre de Calcul UNIVAC de l'Université Paris-Sud grâce auxquels les calculs de configurations se sont effectués dans les meilleures conditions, ont droit aussi à ma reconnaissance.

Je remercierai enfin tous ceux qui ont participé avec rapidité et compétence à la réalisation de ce mémoire.

CLASSIFICATION DES SPECTRES D'ARC ET D'ETINCELLE du DYSPROSIUM

CONTRIBUTION A L'ETUDE DES CONFIGURATIONS ELECTRONIQUES

DANS D'AUTRES SPECTRES DES TERRES RARES

	<u>pages</u>
INTRODUCTION	1
CHAPITRE I : EFFET ZEEMAN	3
CHAPITRE II : INTERPRETATION DE CONFIGURATIONS dans les SPECTRES COMPLEXES	9
1. L'opérateur hamiltonien	9
2. Intégrales radiales	10
3. Formules des éléments de matrices angulaires	12
4. Calcul numérique des coefficients, constitution des configurations	17
5. Diagonalisation et moindres-carrés	19
6. Les effets de second ordre	20
7. Troncature des configurations et approximation du coeur réel	22
CHAPITRE III : CLASSIFICATION DES SPECTRES D'ARC et D'ETINCELLE DU DYSPROSIUM	25
1. Les études successives de Dy I et Dy II	25
2. Caractères généraux de Dy I et Dy II ; position des configurations électroniques	28

3. Le coeur $4f^{10}$	51
4. Le coeur $4f^9$	54
5. Un exemple de classification : Les configurations $4f^{10}6s6p$, $4f^{10}6s7s$ et leurs transitions	57
- Etude de la configuration $4f^{10}6s6p$	67
- Etude de la configuration $4f^{10}6s7s$	68
- Limite d'ionisation de Dy I	75
6. Déplacement isotopique des niveaux de Dy I	75
7. Interprétation des niveaux impairs de Dy I	84
- Nouveaux niveaux de $4f^95d6s^2$	84
- La configuration $4f^95d^26s$	85
- Etude des trois configurations impaires profondes de Dy I	86
8. Interprétation des niveaux pairs élevés de Dy I	100
- La configuration $4f^{10}5d6s$; perturbation des ni- veaux 17 514 et 17 513° par effet Stark	100
- La configuration $4f^96p6s^2$	101
- Etude paramétrique de $4f^{10}5d6s$ et $4f^96p6s^2$	102
- La configuration $4f^95d6s6p$	108
- La configuration $4f^{10}6s6d$	109
9. Interprétation des niveaux pairs de Dy II	110
- La configuration $4f^{10}6s$	113
- La configuration $4f^{10}5d$	115
- Niveaux pairs élevés de Dy II	116
10. Configurations impaires de Dy II	123

CHAPITRE IV : INTERPRETATION DE CONFIGURATIONS DANS QUELQUES	
LANTHANIDES	129
1. Etude des configurations $4f^4 6s$ et $4f^4 5d$ de Nd II	129
2. Interprétation de configurations fondées sur le coeur $4f^7$ dans les spectres de Gd I, Gd II, Eu I.	135
3. Classification préliminaire du spectre d'arc de l'holmium	162
4. Les configurations des actinides	170
- Etude de $5f^3 6d 7s$ dans U II	171
CONCLUSION : EVOLUTION DE PARAMETRES RADIAUX DANS LA SEQUENCE	
DES LANTHANIDES	177
REFERENCES	185
LISTE DES ARTICLES PRESENTES	190
LISTE DES TABLEAUX	192

INTRODUCTION

La classification des spectres optiques constitue une première étape, indispensable, de toute étude spectroscopique et conduit à interpréter la structure électronique externe des atomes. L'atome est un système que l'on peut décrire théoriquement en termes d'interactions électrostatiques et magnétiques; une théorie limitée aux effets prépondérants permet d'orienter la recherche des niveaux d'énergie ; la connaissance d'un grand nombre de niveaux donne à son tour la vérification des phénomènes de second ordre et fixe leur ordre de grandeur respectif.

La présente étude a eu deux objectifs :

- Classer les spectres de quelques éléments des lanthanides (Nd, Gd, Dy, Ho)
- Calculer à partir de ces résultats expérimentaux nouveaux les fonctions d'onde de certains lanthanides et actinides en couplage intermédiaire.

Nous rappelons les méthodes expérimentales et théoriques au moyen desquelles nos résultats ont été obtenus. La majeure partie de ce travail a été consacrée aux spectres du dysprosium neutre et une fois ionisé et nous donnons, au début du chapitre III un aperçu du processus de classification. L'étude paramétrique des principaux groupes de

configurations du dysprosium fait l'objet des paragraphes suivants.

Notre contribution aux classifications du néodyme, du gadolinium et de l'holmium a déjà été partiellement publiée et le chapitre IV est consacré à une description plus complète des résultats théoriques. Certains articles déjà parus auxquels nous faisons référence sont rassemblés dans les annexes I à VI à la fin de ce mémoire.

Enfin, la liste des 9500 raies de Dy I et Dy II dont on connaît soit la classification, soit la structure Zeeman, fait l'objet d'un rapport séparé.

CHAPITRE I

EFFET ZEEMAN

Les niveaux d'énergie d'un atome placé dans un champ magnétique constant et uniforme se décomposent sous l'effet d'une interaction du champ magnétique et des moments angulaires résultants \vec{L} et \vec{S} . Les énergies de ces sous-niveaux sont alors valeurs propres de l'hamiltonien

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V + \xi(r) \vec{L} \cdot \vec{S} + \frac{e\hbar}{2mc} \vec{B} \cdot (\vec{L} + 2\vec{S})$$

Dans le cas de l'effet Zeeman, le dernier terme est faible devant les précédents et peut être traité comme une perturbation sur la base des niveaux fins E_J , qui se décomposent en $2J + 1$ sous-niveaux E_M tels que $E_M - E_J = g M_J \mu_B B$. où $g = \frac{(\alpha J \parallel L + 2S \parallel \alpha J)}{(J \parallel J \parallel J)}$. Le facteur de Landé g est donc une grandeur caractéristique d'un niveau fin et sa valeur dépend des fonctions d'onde de l'atome, donc du couplage des différents moments angulaires.

Transitions Zeeman.

L'introduction de la perturbation Zeeman ne modifie pas les règles de sélection des transitions dipolaires électriques valables en champ magnétique nul.

$$\Delta J = 0, \pm 1, \text{ transition } J = 0 \rightarrow J = 0 \text{ interdite.}$$

L'intensité d'une transition est proportionnelle à

$$| \langle \alpha J M_J | -e \vec{r} | \alpha' J' M_J' \rangle |^2$$

Le théorème de Wigner-Eckart permet d'extraire de cet élément de matrice les termes dépendant de M_J , car \vec{r} est un tenseur de rang 1.

$$\langle \alpha J M_J | e \vec{r} | \alpha' J' M_J' \rangle = (-1)^{J-M_J} \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M_J & q & M_J' \end{pmatrix} \langle \alpha J || T^{(1)} || \alpha' J' \rangle$$

où $q = 0, \pm 1$. La condition de non-nullité sur le symbole 3-j :

$-M_J + q + M_J' = 0$ entraîne les règles de sélection

$\Delta M_J = 0$, si $q = 0$, vibrations polarisées rectilignement parallèles à \vec{B}

$\Delta M_J = +1$, si $q = -1$, vibrations circulaires gauches perpendiculaires à \vec{B}

$\Delta M_J = -1$, si $q = +1$, vibrations circulaires droites perpendiculaires à \vec{B}

Ce sont respectivement les composantes Π, σ_+, σ_- .

Pour une transition donnée entre niveaux fins, $\langle \alpha J || T^{(1)} || \alpha' J' \rangle$

est constant et les intensités des composantes Zeeman obtenues en explicitant le symbole 3-j sont les suivantes :

	$\Delta M_J = 0 (\Pi)$	$\Delta M_J = 1 (\sigma_+)$	$\Delta M_J = -1 (\sigma_-)$
$\Delta J = 0$	$2 A M_J^2$	$A(J-M_J)(J+M_J+1)$	$A(J+M_J)(J-M_J+1)$
$\Delta J = 1$	$2B[(J+1)^2 - M_J^2]$	$B(J+M_J+1)(J+M_J+2)$	$B(J-M_J+1)(J-M_J+2)$
$\Delta J = -1$	$2C(J^2 - M_J^2)$	$C(J-M_J)(J-M_J-1)$	$C(J+M_J)(J+M_J-1)$

où A, B et C sont constants pour une raie fine.

Il apparaît d'après ce qui précède que les figures Zeeman sont de quatre types, selon que $\Delta J = 0$ ou 1 et que J est entier ou demi-impair. El'Yashevich [1] a proposé des formules donnant simplement les facteurs de Landé dans chacun de ces cas et où n'interviennent que la distance f de 2 composantes σ d'intensité maximale, l'écart $e = \Delta g$ de deux composantes Zeeman et le nombre quantique J . Nous avons représenté les différents cas de structures Zeeman dans la figure I. Il faut noter que les structures non résolues permettent d'évaluer approximativement les facteurs de Landé même si l'on ignore la valeur de J .

Rien ne permet de distinguer les groupes de composantes $\sigma+$ et $\sigma-$ et les facteurs de Landé ne sont déterminés qu'au signe près. Cette indétermination ne devrait être levée en toute rigueur que par la classification ; cependant les facteurs de Landé négatifs sont exceptionnels et les valeurs que nous proposons dans les tables de raies mesurées sont calculées dans l'hypothèse de facteurs de Landé positifs.

Effet Zeeman perturbé.

Dans les spectres de lanthanides, la structure fine des termes est en général très largement supérieure à l'interaction magnétique extérieure (pour les champs usuels de 24 000 gauss) et l'on n'observe pas d'effet Paschen-Back ; on désigne cependant sous ce nom certaines perturbations dans les structures, dues à la proximité de deux niveaux de même parité : l'hamiltonien perturbateur peut en effet connecter des états $\langle \alpha J_1 |$ et $\langle \alpha J_2 |$ tels que $J_1 - J_2 = 0, \pm 1$. La déformation du diagramme des sous-niveaux entraîne une dissymétrie de la structure des raies et les facteurs de Landé perdent alors leur signification.

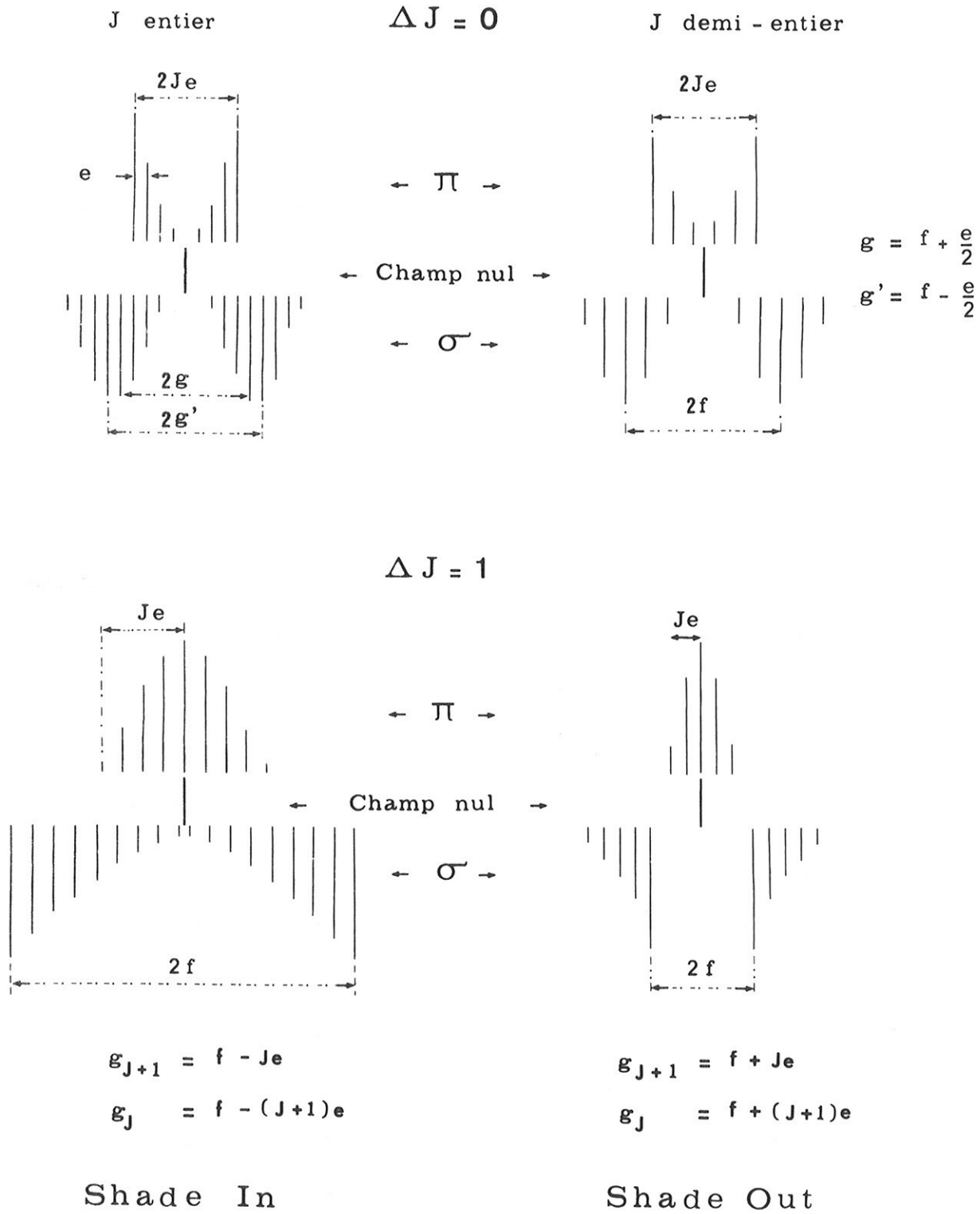


Fig.1 Les quatre types de structures Zeeman

La grande densité des spectres de lanthanides s'oppose à une étude complète des figures Zeeman. On observe le plus souvent un enchevêtrement de structures où les raies d'intensité faible ou moyenne disparaissent sous les structures des raies les plus intenses ; l'étude de l'effet Zeeman ne peut alors fournir que des renseignements fragmentaires.

Mesure des facteurs de Landé.

Dans le domaine de la plaque photographique, les différents paramètres des structures Zeeman ont été mesurés au moyen d'un oculaire micrométrique sur des spectrogrammes réalisés par M. Fred à Argonne National Laboratory (Spectrographe Paschen-Runge, équipé du réseau G5, le tube sans électrode étant placé dans un champ magnétique de 24 000 gauss). Les incertitudes sur f et e dépendent de l'intensité et du profil de la raie et de la région spectrale ; d'une façon générale, les mesures les plus précises sont celles de f pour les transitions $\Delta J = 1$ et de e (ou J_e) pour les transitions $\Delta J = 0$. C'est en mesurant plus de 4 000 structures Zeeman que nous avons pu déterminer les facteurs de Landé de 1 260 niveaux, avec une incertitude inférieure à 0,01.

CHAPITRE II

INTERPRETATION DE CONFIGURATIONS DANS LES SPECTRES COMPLEXES.

1. L'opérateur hamiltonien.

On cherche à décrire les états stationnaires d'un atome en résolvant l'équation de Schrödinger $H\psi = E\psi$. En négligeant certains effets d'ordre supérieur, l'hamiltonien se limite à

$$H = \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_i} \right) + \sum_{i>j=1}^N \frac{e^2}{r_{ij}} + \sum_{i=1}^N \xi(r_i) \vec{s}_i \cdot \vec{l}_i$$

Le terme Q rend la séparation des variables impossible et il est trop important pour être traité comme une perturbation. Slater²⁾ a eu recours à un artifice de calcul reposant sur une hypothèse physique acceptable : chaque électron se déplace dans un potentiel radial $\frac{U(r)}{e}$ choisi de façon que H_0 représente la meilleure approximation de H .

$$H = H_0 + H'_0 + H_1$$

$$H_0 = \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^2}{2m} + U(r_i) \right)$$

$$H'_0 = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{Ze^2}{r_i} - U(r_i) \right)$$

$$H_1 = Q + \Lambda$$

A l'ordre zéro de la théorie des perturbations, les états stationnaires sont ceux des configurations électroniques : l'énergie est la somme d'énergies monoélectroniques $E_0 = \sum_i E_{0i}$ et la fonction d'onde Ψ est une combinaison linéaire antisymétrique de fonctions monoélectroniques

$$\Psi(n, \ell, m\ell, ms) = \frac{R_{n\ell}(r)}{r} \cdot Y_{\ell, m\ell}(\theta, \varphi) \cdot \delta(\sigma, ms)$$

On montre simplement que l'effet de H'_0 est d'ajouter une constante à l'énergie des configurations, dont la haute dégénérescence est levée au premier ordre par H_1 , en diagonalisant la matrice qui lui est associée sur la base des états déterminantaux. Dans le formalisme des opérateurs tensoriels introduit par Racah³⁾, Q s'exprime sous la forme

$$Q = e^2 \sum_{\substack{k \\ r > k+1}} \frac{r < k}{k+1} C_i^{(k)} \cdot C_j^{(k)} \quad \text{où} \quad C_q^{(k)} = \left(\frac{4\pi}{2k+1}\right)^{1/2} Y_{kq}(\theta, \varphi)$$

et on peut faire apparaître dans Λ , déjà sous forme d'un produit scalaire de tenseurs de rang 1, un opérateur tensoriel double $w_{00}^{(11)}$.

L'intégration qui intervient dans le calcul des éléments de matrice de Q et Λ conduit à séparer leurs parties radiales et angulaires.

2. Intégrales radiales.

Les intégrales radiales de l'interaction électrostatique, ou intégrales de Slater, ont la forme générale :

$$R^k(ab, cd) = e^2 \int_0^\infty \int_0^\infty R_a^*(r_1) \cdot R_b^*(r_2) \cdot R_c(r_1) \cdot R_d(r_2) dr_1 \cdot dr_2$$

où $a \equiv n_a \ell_a$, $b \equiv n_b \ell_b$, ...

Les interactions électrostatiques internes d'une configuration font apparaître des intégrales directes $F^k(a, b) = R^k(ab, ab)$ et des intégrales d'échange $G^k(a, b) = R^k(ab, ba)$, souvent utilisées sous la forme F_k et G_k renormalisée par Condon et Shortley ⁴⁾ : $F_k = \frac{F^k}{D_k}$ $G_k = \frac{G^k}{D_k}$

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

$$\zeta_{nl} = \int_0^\infty R_{nl}^*(r) \xi(r) R_{nl}(r) dr$$

Les intégrales radiales peuvent être calculées a priori soit par la méthode Hartree-Fock ⁵⁾, application du principe variationnel, soit en attribuant au potentiel central $U(r_i)$ une forme analytique que l'on adaptera à l'atome étudié (potentiel paramétrique de Klapisch ⁶⁾). Cependant, la méthode la mieux adaptée aux problèmes de classification, pour décrire et prévoir les niveaux d'énergie des configurations complexes, consiste à traiter les intégrales radiales comme des paramètres ajustables aux résultats expérimentaux. Les différences - qui atteignent 50 % - entre les intégrales calculées a priori et les paramètres optimisés sont dues au fait que le modèle atomique étudié ne tient pas compte de nombreuses interactions et que le traitement se limite généralement au premier ordre de la théorie des perturbations. Des études théoriques ont montré que certains effets d'ordre supérieur ont même dépendance angulaire que certaines intégrales de Q et Λ ; dans ce cas, les paramètres optimisés sont une somme de contributions indissociables.

3. Formules des éléments de matrices angulaires.

Les méthodes développées par Racah et Judd ⁷⁾ pour calculer les éléments de matrice d'opérateurs tensoriels sur la base des états déterminantaux s'appliquent aux parties angulaires de Q et Λ . Un modèle de couplage étant choisi pour les états de base, le théorème de Wigner-Eckart permet de factoriser les éléments de matrice et de parvenir par découplages successifs des éléments de matrice réduits aux éléments les plus simples :

$$(\ell \| C^{(k)} \| \ell') = (-1)^\ell \{[\ell][\ell']\}^{1/2} \begin{pmatrix} \ell & k & \ell' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$(s\ell \| W^{(11)} \| s'\ell') = \delta(s, s') \cdot \delta(\ell, \ell') \cdot 3$$

La première de ces équations limite le nombre des intégrales de Slater à $|\ell - \ell'| < k < \ell + \ell'$ avec $\ell, k + \ell'$ pair.

Les étapes d'un tel calcul, s'il est effectué sous forme littérale, ont été décrites par Judd ⁷⁾.

On peut parvenir au même résultat par une méthode graphique. Fano, Prats et Goldschmidt ⁸⁾ ont exprimé les éléments de matrice d'interactions à deux particules entre les états de configurations électroniques, sous forme du produit de deux éléments de matrice réduits monoélectroniques par un coefficient de recouplage.

Pour un opérateur $S^{(k)} \cdot T^{(k)}$ agissant sur les électrons s et t

$$(\lambda_1 j_1, \dots, \lambda_s j_s, \dots, \lambda_t j_t, \dots; J M_J | S^{(k)} \cdot T^{(k)} | \lambda_1 j_1, \dots, \lambda'_s j'_s, \dots, \lambda'_t j'_t, \dots; J' M'_J) = \delta(M_J, M'_J) \cdot \delta(J, J') \cdot ([2j_s + 1][2j'_t + 1])^{-1/2}$$

$$(\lambda_s j_s \| S^{(k)} \| \lambda'_s j'_s) (\lambda_t j_t \| T^{(k)} \| \lambda'_t j'_t)$$

$$\times (j_1 \dots (j'_s k) j_s, \dots, j_t, \dots | j_1 \dots j'_s, \dots, (k, j_t) j'_t, \dots)$$

Ce coefficient de recouplage, symbole $N-j$, peut-être représenté par un graphe et ramené à un produit de symboles $n-j$ irréductibles au moyen de règles de coupure exposées par Jucys, Levinson et Vanagas⁹).

Enfin le programme SUPRAC écrit par Bordarier utilise une seconde méthode des graphes de Jucys et permet d'obtenir la forme littérale factorisée des éléments de matrices d'opérateurs tensoriels $w^{(xk)}(\ell\ell')$ ¹⁰).

La plupart des paramètres radiaux proviennent de la partie électrostatique de l'hamiltonien et l'on veut a priori annuler le plus grand nombre d'éléments non-diagonaux ; Comme la matrice de Q est diagonale par rapport à S et L , le couplage Russell-Saunders a été choisi pour les états de base de toutes les configurations que nous avons calculées. On peut ultérieurement changer de vecteurs de base au niveau de la diagonalisation au moyen d'un jeu de paramètres approprié et rechercher ainsi le meilleur modèle de couplage. Les configurations rencontrées dans les spectres I et II des lanthanides sont du type f^N , $f^N \ell^n$, $f^N \ell^n \ell'$, $f^N \ell \ell' \ell''$ et, sans expliciter N , ℓ , ℓ' ou ℓ'' on parvient à des formules littérales applicables à un grand nombre de configurations observées. On donne ci-après l'expression factorisée d'un élément de matrice général pour deux de ces configurations fréquemment calculées $f^N \ell$ et $(f^N \ell) \ell'$.

$$\begin{aligned}
& \langle f^n \alpha_1 S_1 s \rangle S(L_1 \ell) L J M_J | Q+\Lambda | (f^n \alpha_1 S_1 s) S'(L'_1 \ell) L' J M_J \rangle \\
& = E_0 + e_1 E^1 + e_2 E^2 + e_3 E^3 \\
& + \sum_{k \text{ pair}} 7n(2\ell+1) D_k \delta S \cdot \delta L \cdot \delta S_1 \cdot \begin{pmatrix} \ell & \ell & k \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 3 & k \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} (-1)^{L+L_1+L'_1} \left\{ \begin{matrix} L_1 & L'_1 & k \\ \ell & \ell & L \end{matrix} \right\} \\
& \times \left[[L_1][L'_1] \right]^{1/2} \sum_{\bar{S}_1 \bar{L}_1} (-1)^{\bar{L}_1} (\bar{S}_1 \bar{L}_1 | \{ S_1 L_1 \}) (\bar{S}_1 \bar{L}_1 | \{ S'_1 L'_1 \}) \left\{ \begin{matrix} L_1 & L'_1 & k \\ 3 & 3 & \bar{L}_1 \end{matrix} \right\} F_k(f, \ell) \\
& + \sum_k 7n(2\ell+1) D_k \cdot \delta S \cdot \delta L \cdot \begin{pmatrix} \ell & k & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 (-1)^{S_1+S'_1} \left[[L_1][L'_1][S_1][S'_1] \right]^{1/2} \\
& \sum_{\bar{S}_1 \bar{L}_1} (\bar{S}_1 \bar{L}_1 | \{ S_1 L_1 \}) (\bar{S}_1 \bar{L}_1 | \{ S'_1 L'_1 \}) \left\{ \begin{matrix} \bar{S}_1 & 1/2 & S_1 \\ S & 1/2 & S'_1 \end{matrix} \right\} \cdot \left\{ \begin{matrix} L & \ell & L_1 \\ L'_1 & 3 & \bar{L}_1 \end{matrix} \right\} G_k \\
& + 3n \sqrt{14} (-1)^{L+L'+J+\ell+1} \cdot \left[[S][S'] [L][L'] [S_1][S'_1] [L_1][L'_1] \right]^{1/2} \cdot \left\{ \begin{matrix} S & S' & 1 \\ L' & L & J \end{matrix} \right\} \\
& \cdot \left\{ \begin{matrix} S_1 & 1 & S'_1 \\ S' & 1/2 & S \end{matrix} \right\} \cdot \left\{ \begin{matrix} L_1 & 1 & L'_1 \\ L' & \ell & L \end{matrix} \right\} \sum_{\bar{S}_1 \bar{L}_1} (-1)^{\bar{S}_1+\bar{L}_1} (\bar{S}_1 \bar{L}_1 | \{ S_1 L_1 \}) (\bar{S}_1 \bar{L}_1 | \{ S'_1 L'_1 \}) \\
& \left\{ \begin{matrix} S_1 & 1 & S'_1 \\ 1/2 & \bar{S}_1 & 1/2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L_1 & 1 & L'_1 \\ 3 & \bar{L}_1 & 3 \end{matrix} \right\} \zeta_f + 3 \sqrt{\frac{\ell(\ell+1)(2\ell+1)}{6}} \delta \alpha_1 \delta S_1 \delta L_1 \\
& (-1)^{S+S'+S_1+L_1+J+\ell+1/2} \left[[S][S'] [L][L'] \right]^{1/2} \left\{ \begin{matrix} S & S' & 1 \\ L' & L & J \end{matrix} \right\} \cdot \left\{ \begin{matrix} S & 1 & S' \\ 1/2 & S_1 & 1/2 \end{matrix} \right\} \cdot \left\{ \begin{matrix} L & 1 & L' \\ \ell & L_1 & \ell \end{matrix} \right\} \zeta_\ell
\end{aligned}$$

Nous rappelons la définition des coefficients de parenté fractionnelle introduits d'abord par Racah ¹¹⁾ :

$$\Psi(\ell^n \alpha SL) = \sum_{\bar{\alpha} \bar{S} \bar{L}} \Psi(\ell^{n-1} (\bar{\alpha} \bar{S} \bar{L}) \ell SL) (\ell^{n-1} (\bar{\alpha} \bar{S} \bar{L}) \ell SL | \ell^n \alpha SL)$$

Ces coefficients sont notés $(\bar{S} \bar{L} | \{ SL \})$ dans nos formules et leurs valeurs pour les configurations f^N a été extraite des tables de Nielson et Koster ¹²⁾.

Les paramètres E_1, E_2, E_3 sont définis par Racah dans ¹³⁾ comme des combinaisons linéaires de $F^{(k)}(f, f)$ $k = 2, 4, 6$ et leurs coefficients sont liés à la classification des états de f^N selon les représentations irréductibles de groupes continus. Les valeurs de e_1, e_2, e_3 sont tabulées dans la référence ¹²⁾.

$$([(f^n S_1 \frac{1}{2}) S_{12} \frac{1}{2}] S [(f^n L_1 \ell) L_{12} \ell'] L J M_J |H|$$

$$[(f^n S_1 \frac{1}{2}) S'_{12} \frac{1}{2}] S' [(f^n L'_1 \ell) L'_{12} \ell'] L' J M_{J'}$$

$$= E_0 + e_1 E^1 + e_2 E^2 + e_3 E^3$$

$$+ \sum_{k \text{ pair}} 7n(2\ell+1) D_k \cdot \delta S \cdot \delta L \cdot \delta S_{12} \cdot \delta L_{12} \cdot \delta S_1 \left[[L_1][L'_1] \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\left\{ \begin{matrix} \ell & \ell & k \\ L_1 & L'_1 & L_{12} \end{matrix} \right\} \left(\begin{matrix} 3 & 3 & k \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} \ell & \ell & k \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right)$$

$$\times \sum_{\bar{S}_1 \bar{L}_1} (-1)^{L_1+L'_1+L_{12}+\bar{L}_1+\ell+1} (\bar{S}_1 \bar{L}_1 | \{ S_1 L_1 \}) (\bar{S}_1 \bar{L}_1 | \{ S'_1 L'_1 \}) \left\{ \begin{matrix} 3 & 3 & k \\ L_1 & L'_1 & \bar{L}_1 \end{matrix} \right\} F_k(f, \ell)$$

$$+ \sum_k 7n(2\ell+1) D_k \cdot \delta S \cdot \delta L \cdot \delta S_{12} \cdot \delta L_{12} (-1)^{S_1+S'_1}$$

$$\left[[S_1][S'_1][L_1][L'_1] \right]^{\frac{1}{2}} \left(\begin{matrix} 3 & k & \ell \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right)^2$$

$$\times \sum_{\bar{S}_1 \bar{L}_1} (\bar{S}_1 \bar{L}_1 | \{ S_1 L_1 \}) (\bar{S}_1 \bar{L}_1 | \{ S'_1 L'_1 \}) \left\{ \begin{matrix} S_{12} & \frac{1}{2} & S_1 \\ \bar{S}_1 & \frac{1}{2} & S'_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} k & \ell & 3 \\ \ell & L_{12} & L_1 \\ 3 & L'_1 & \bar{L}_1 \end{matrix} \right\} G_k(f, \ell)$$

$$+ \sum_k 7n(2\ell'+1) D_k \left(\begin{matrix} 3 & 3 & k \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right) \left(\begin{matrix} \ell' & \ell' & k \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right) \delta S \cdot \delta L \cdot \delta S_1 \cdot \delta S_{12} \cdot \left[[L_1][L'_1][L_{12}][L'_{12}] \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\times \left\{ \begin{matrix} L_{12} & L'_{12} & k \\ \ell' & \ell' & L \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L_1 & L'_1 & k \\ L'_{12} & L_{12} & \ell \end{matrix} \right\} \sum_{\bar{S}_1 \bar{L}_1} (\bar{S}_1 \bar{L}_1 | \{ S_1 L_1 \}) (\bar{S}_1 \bar{L}_1 | \{ S'_1 L'_1 \})$$

$$(-1)^{L+\ell+\ell'+L_1+1} \left\{ \begin{matrix} 3 & 3 & k \\ L_1 & L'_1 & \bar{L}_1 \end{matrix} \right\} F_k(f, \ell')$$

$$+ \sum_k 7n(2\ell'+1) D_k \left(\begin{matrix} 3 & k & \ell' \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right)^2 \delta S \cdot \delta L \left[[S_1][S_{12}][L_1][L_{12}][S'_1][S'_{12}][L'_1][L'_{12}] \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\sum_{\bar{S}_1 \bar{L}_1} (-1)^{L_{12}+L'_{12}+L_1+L'_1+S+\bar{S}_1+k+\ell'+\frac{1}{2}} \left\{ \begin{matrix} S_{12} & S_1 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \bar{S}_1 & S'_1 \\ S & \frac{1}{2} & S'_{12} \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L_{12} & L_1 & 3 & \ell' \\ \ell & \bar{L}_1 & k & L \\ L'_{12} & L'_1 & 3 & \ell' \end{matrix} \right\} G_k(f, \ell')$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_k (2\ell+1)(2\ell'+1) D_k \begin{pmatrix} \ell & \ell & k \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell' & \ell' & k \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \delta S \cdot \delta S_{12} \cdot \delta \alpha_1 \cdot \delta S_1 \cdot \delta L_1 \cdot \delta L \\
& \quad \quad \quad (-1)^{L_{12}+L'_{12}+L+L_1+\ell+\ell'} \\
& \quad \times \left[[L_{12}] [L'_{12}] \right]^{\frac{1}{2}} \left\{ \begin{matrix} k & \ell & \ell \\ L_1 & L_{12} & L'_{12} \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} k & \ell' & \ell' \\ L & L_{12} & L'_{12} \end{matrix} \right\} F_k(\ell\ell') \\
& + \sum_k (2\ell+1)(2\ell'+1) D_k \begin{pmatrix} \ell & k & \ell' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \delta S \cdot \delta L \cdot \delta S_1 \cdot \delta L_1 \\
& \quad \quad \quad (-1)^{S_{12}+S'_{12}} \left[[S_{12}] [S'_{12}] [L_{12}] [L'_{12}] \right]^{\frac{1}{2}} \\
& \quad \times \left\{ \begin{matrix} S & \frac{1}{2} & S_{12} \\ S_1 & \frac{1}{2} & S'_{12} \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L_{12} & L_1 & \ell \\ \ell' & \ell & k \\ L & L'_{12} & \ell' \end{matrix} \right\} G_k(\ell, \ell') \\
& + 3n \sqrt{14} (-1)^{J+S_{12}+S'_{12}+L_{12}+L'_{12}+L+L'+\ell+\ell'+\frac{1}{2}} \\
& \quad \left[[S] [S'] [L] [L'] [S_{12}] [S'_{12}] [L_{12}] [L'_{12}] [S_1] [S'_1] [L_1] [L'_1] \right]^{\frac{1}{2}} \\
& \quad \left\{ \begin{matrix} S & S' & 1 \\ L' & L & J \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S & 1 & S' \\ S'_{12} & \frac{1}{2} & S_{12} \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L & 1 & L' \\ L'_{12} & \ell' & L_{12} \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S_{12} & 1 & S'_{12} \\ S_1 & \frac{1}{2} & S_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L_{12} & 1 & L'_{12} \\ L_1 & \ell & L_1 \end{matrix} \right\} \\
& \quad \sum_{\bar{S}_1 \bar{L}_1} (-1)^{\bar{S}_1 + \bar{L}_1} (\bar{S}_1 \bar{L}_1 | | S_1 L_1) (\bar{S}_1 \bar{L}_1 | | S'_1 L'_1) \left\{ \begin{matrix} S_1 & \frac{1}{2} & S'_1 \\ \frac{1}{2} & \bar{S}_1 & \frac{1}{2} \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L_1 & 1 & L'_1 \\ \bar{L}_1 & \bar{L}_1 & \bar{L}_1 \end{matrix} \right\} \zeta_f \\
& + 3 \sqrt{\frac{\ell(\ell+1)(2\ell+1)}{6}} \delta S_1 \cdot \delta L_1 (-1)^{L+L'+S_1+L_1+\ell+\ell'+J} \\
& \quad \left[[S] [S'] [L] [L'] [S_{12}] [S'_{12}] [L_{12}] [L'_{12}] \right]^{\frac{1}{2}} \\
& \quad \left\{ \begin{matrix} S & S' & 1 \\ L' & L & J \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S_{12} & 1 & S'_{12} \\ \frac{1}{2} & S_1 & \frac{1}{2} \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L_{12} & 1 & L'_{12} \\ \ell & L_1 & \ell \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S & 1 & S' \\ S'_{12} & \frac{1}{2} & S_{12} \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L & 1 & L' \\ L'_{12} & \ell' & L_{12} \end{matrix} \right\} \zeta_\ell \\
& + 3 \sqrt{\frac{\ell'(2\ell'+1)(\ell+1)}{6}} \delta S_1 \cdot \delta L_1 \cdot \delta S_{12} \cdot \delta L_{12} (-1)^{S+S'+S_{12}+L_{12}+J+\ell'+\frac{1}{2}} \\
& \quad \left[[S] [S'] [L] [L'] \right]^{\frac{1}{2}} \left\{ \begin{matrix} S & S' & 1 \\ L' & L & J \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S & 1 & S' \\ \frac{1}{2} & S_{12} & \frac{1}{2} \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L & 1 & L' \\ \ell' & L_{12} & \ell' \end{matrix} \right\} \zeta_{\ell'}
\end{aligned}$$

4. Calcul numérique des coefficients, constitution des configurations.

L'élément de matrice général est une somme dont on calcule les termes successivement pour chaque paramètre au moyen du programme AGENAC écrit par Bordarier et Carlier ⁴). Cette première étape représente généralement la part la plus importante du temps de calcul total dans l'étude d'une configuration et l'on comprend tout l'intérêt qu'il y a à établir des formules littérales simples où l'on aura supprimé le plus grand nombre de sommes partielles. Certaines sont inévitables, comme $\sum_{S_1 L_1} (\bar{S}_1 \bar{L}_1 | \{S_1 L_1\}) (\bar{S}'_1 \bar{L}'_1 | \{S'_1 L'_1\}) \dots$, où sont impliquées des tables de coefficients de parenté fractionnelle d'autant plus longues que N est plus proche de 7 dans f^N ; le calcul de $G_k(f, d)$, $k = 1, 3, 5$ dans $f^4 d$ nécessite 3 h 30 sur un calculateur UNIVAC 1108, celui de la même interaction dans $f^2 d$ n'exède pas cinq minutes.

Une simplification évidente pour les configurations $f^{n\ell\ell'}$ consiste à calculer $Q(f, \ell)$ sur une base $f^{n\ell}$ et à répartir les valeurs obtenues sur la base $(f^{n\ell})\ell'$. Ce fait, joint à la présence d'un symbole 12-j dans le coefficient de $G_k(f, \ell')$ nous a conduit à adopter dans la suite de nos calculs le schéma $(f^{n\ell})\ell'$ où $\ell > \ell'$.

L'assemblage des matrices angulaires pour former les configurations s'effectue au moyen d'un second programme ASSAC, de même que l'assemblage des configurations de même parité avec introduction de leur interaction.

Les configurations, purement angulaires, sont stockées sur une bande magnétique "bibliothèque" et leur application aux calculs de couplage intermédiaire commence ultérieurement avec le choix de valeurs

initiales pour les paramètres radiaux. Pendant notre étude des spectres de lanthanides, les vingt configurations, sous-configurations ou groupes de sous-configurations suivants ont été constitués.

(les différents spectres interprétés dans ces calculs sont mentionnés à la suite) :

$f^3 ds$	$4f^3 5d 6s$	Nd II	$5f^3 6d 7s$	U II
$f^3 ({}^4I) d^2$	$4f^3 5d^2$	Nd II		
$f^4 s$	$4f^4 6s$			
$f^4 d$	$4f^4 5d$	Nd II	$5f^4 6d 7s^2$	Np I
$f^3 ({}^4I) d^2 s$	$4f^3 5d^2 6s$	Nd I		
$f^4 ({}^5I) ds$	$4f^4 5d 6s$	Nd I		
$f^7 ({}^8S+{}^6P)(d+s)^2$	$4f^7 (5d+6s)^2$	Gd II,	$4f^7 5d 6s$	Eu I
$f^7 ({}^8S+{}^6P)(sp+dp)$	$4f^7 (6s 6p+5d 6p)$	Gd II		
$f^7 ({}^8S+{}^6P) ds^2 +$ $f^7 ({}^8S) (d^2 s+d^3)$	$4f^7 (5d+6s)^3$	Gd I		
$f^7 ({}^8S) dss'$	$4f^7 5d 6s 7s$	Gd I		
$f^8 ({}^7F) p$	$4f^8 6p$	Gd II, Tb III		
$f^8 ({}^7F) ps$	$4f^8 6p 6s$	Gd I		
$f^8 ({}^7F+{}^5D_{1,2,3})(d+s)$	$4f^8 (5d+6s)$	Gd II, Tb III		
f^9	$4f^9$	Tb III		
$f^9 ({}^6H+{}^6F)(ds^2+d^2s) +$ $f^{10} ({}^5I) sp$	$4f^9 (5d 6s^2+5d^2 6s)$ $4f^{10} (6s 6p)$			Dy I
$f^9 ({}^6H+{}^6F)(dp+sp)$	$4f^9 (5d+6s) 6p$	Dy II		
$f^9 ({}^6H+{}^6F)(d+s)^2 +$ $f^{10} ({}^5I) p$	$4f^9 (5d+6s)^2$ $4f^{10} 6p$			Dy II Ho I

$$\begin{array}{ll}
 f^{10}_s & 4f^{10}_6s \\
 f^{10}(^5I)d \quad \} & 4f^{10}_5d \quad \} \text{ Dy II} \\
 & \text{Ho III, } 4f^{10}_5d6s^2 \quad \text{Ho I} \\
 f^9(^6H+^6F)ps^2 + f^{10}(^5I)ds & 4f^9_6p6s^2 + 4f^{10}_5d6s \quad \text{Dy I, } 4f^{10}_6d6s \quad \text{Dy I} \\
 f^{10}_{ss'} & 4f^{10}_6s7s \quad \text{Dy I}
 \end{array}$$

D'autres configurations, utilisées au cours de notre travail, avaient été calculées précédemment par Bordarier, ou par Racah et ses collaborateurs (f^3_d , f^4 , f^3).

5. Diagonalisation et moindres-carrés.

Nous n'insisterons pas sur les étapes suivantes, bien connues, du calcul paramétrique. Le programme DIAGAC calcule pour les matrices déterminées par le jeu initial de paramètres les valeurs propres E_c , les vecteurs propres associés, les facteurs de Landé g_c et éventuellement les dérivées premières $\frac{\partial E_{ci}}{\partial P_k}$ nécessaires pour accéder au programme d'optimisation. Si le jeu initial a été convenablement choisi, on peut faire correspondre à chaque niveau observé E_{oi} un niveau calculé E_{ci} , en comparant les spectres d'énergie et les facteurs de Landé g_{oi} et g_{ci} . Si le nombre de niveaux interprétés est suffisant, le programme GRAMAC calcule les quantités dP_k à ajouter aux paramètres initiaux pour minimiser $\sum_i (E_{oi} - E_{ci})^2$. Plusieurs applications successives de DIAGAC et GRAMAC sont en général nécessaires pour faire converger les paramètres. Ce que l'on nomme dans la suite "étude d'une configuration" consiste à optimiser les énergies, tout en recherchant, le cas échéant, de nouveaux niveaux. On considère qu'une étude paramétrique est terminée lorsque le processus de moindres-carrés ne modifie plus les paramètres et que les données expérimentales

s'avèrent insuffisantes pour déterminer de nouveaux niveaux d'énergie. C'est à ce stade que nous sommes parvenus dans Dy I et Dy II.

6. Les effets de second ordre.

Les énergies calculées selon la méthode paramétrique usuelle ($Q + \Lambda$ traité au premier ordre de perturbation) ne s'accordent que d'une façon limitée avec les énergies expérimentales et la déviation moyenne reste en général dans les spectres I et II supérieure à 100 cm^{-1} . La classification des spectres d'éléments plusieurs fois ionisés, qui s'effectue au moyen des seuls nombres d'ondes et de l'intensité des raies, doit faire appel à des théories plus élaborées pour réduire ces déviations. Pour rendre compte de certains effets -interaction spin-spin et spin-autre orbite - qui n'ont pas été considérés dans l'hamiltonien utilisé, on aurait recours à de nouveaux paramètres (intégrales de Marvin). Cependant, l'intérêt de ces interactions "réelles" dans les calculs que nous pouvons effectuer dans les lanthanides, est inférieur à celui des "interactions" effectives. Au deuxième ordre de perturbation, l'influence sur les états $|X\rangle$ d'une configuration située à E_0 des états $|Y\rangle$ d'une configuration située à $E_0 + \Delta E$ se traduit par une correction d'énergie $-\frac{1}{\Delta E} \sum_y (X | Q + \Lambda | Y) (Y | Q + \Lambda | X)$ que l'on peut considérer comme l'élément de matrice sur les états de X d'un opérateur effectif $\Omega = \sum_y - \frac{|Q + \Lambda | Y\rangle \langle Y | Q + \Lambda |}{\Delta E}$. Les théoriciens de la structure atomique se sont récemment attachés à trouver un traitement paramétrique pour l'opérateur Ω ¹⁵). Si l'on ne considère que la partie coulombienne de cet opérateur, l'interaction électrostatique de configurations lointaines avait été introduite par Trees dans d^N dès 1951 ¹⁶) ; pour f^N , ses éléments de matrice dépendent de trois

paramètres α , β , γ définis par Racah ^{13, 17)}

$$\langle \Psi | \text{Heff} | \Psi' \rangle = \alpha L(L+1) + 10 \beta G(R_7) + 12 \gamma G(G_2)$$

où $G(R_7)$ et $G(G_2)$ sont valeurs propres de l'opérateur de Casimir pour les groupes R_7 et G_2 . Les corrections $\alpha L(L+1) + \beta S(S+1)$, ou les corrections de Sack, introduites empiriquement dans les configurations mélangées $(l+l')^N$, et justifiées théoriquement par Feneuille ¹⁸⁾ rendent compte d'une partie de ces effets d'interactions lointaines. Il convient de rappeler que la théorie linéaire de Trees ne rend pas compte de tous ces effets : Rajnak et Wybourne ¹⁹⁾ puis Stein ²⁰⁾ ont montré que des opérateurs à trois particules étaient nécessaires pour décrire toutes les excitations monoélectroniques ; un traitement complet dans les configurations à plusieurs couches ouvertes introduirait un nombre de paramètres trop grand relativement aux données expérimentales et dans les calculs exposés plus loin, nous avons :

- 1) introduit une correction $\alpha L(L+1)$, et le paramètre α a généralement convergé vers une valeur positive bien définie ;
- 2) réservé un traitement plus complet (opérateurs à 2 particules agissant sur l'orbite des électrons) au cas le plus favorable des deux configurations $4f^4(6s+5d)$ de Nd II. Cette étude est analogue à celle de $f^2(d+s)$ dans Pr III, par Feneuille et Pelletier-Allard ²¹⁾.

Signalons enfin que des travaux récents ont montré l'intérêt des termes de second ordre croisés spin-orbite \times électrostatique pour mieux décrire la structure fine des multiplets dans les configurations d'électrons équivalents ²²⁾, mais nous n'avons pas eu l'occasion d'appliquer de telles corrections.

7. Troncature des configurations et approximation du coeur réel.

Le très grand nombre de niveaux de la plupart des configurations construites sur un coeur f^N rend impossible leur traitement global sur les calculateurs électroniques actuels ; d'autre part, les niveaux observés sont le plus souvent issus du terme fondamental d'une configuration $4f^N$.

On sera donc amené à extraire de la configuration totale une sous-configuration contenant ses termes fondamentaux et dont les éléments non-diagonaux avec la partie restante seront négligés. Deux éléments peuvent orienter le choix d'une troncature :

- Considérer la fonction d'onde des niveaux du terme fondamental obtenu en calculant f^N intégralement et introduire les termes qui interviennent dans leur composition.
- Considérer le schéma des niveaux d'énergie profonds de f^N et introduire les termes reconnus dans un certain domaine d'énergie à partir du fondamental.

Des essais effectués sur f^4d montrent qu'il n'y a pas de bonne troncature et que la déviation moyenne $|\overline{E_o - E_c}|$ qui décroît de 183 ($f^4(5I)d$) à 78 cm^{-1} (f^4d entier) varie à peu près linéairement avec le nombre de niveaux calculés. En limitant une configuration parente à son terme fondamental ^{2S+1}L , l'interaction spin-orbite des électrons $4f$ donne à ce terme une structure pure $L S$; or les multiplets fondamentaux observés ne respectent pas la règle des intervalles de Landé ($E_{J+I} - E_J$ proportionnel à J dans un terme $L-S$). Nous en donnons deux exemples dans $4f^{10}6s^2 5I$ de Dy I et dans $4f^{11}6s^2 4I$ de Ho I.

Dy I			Ho I		
E	J	$\frac{E_{J+1}-E_J}{J+1}$	E	J	$\frac{E_{J+1}-E_J}{J+1}$
0	8	517	0	15/2	722
4 134.23	7	418	5 419.70	13/2	490
7 050.61	6	360	8 605.16	11/2	380
9 211.58	5	342	10 695.75	9/2	
10 925.25	4				

On améliore l'accord sur les énergies en remplaçant le paramètre ζ_{4f} par autant de pseudo-paramètres E_{J_1} qu'il y a de niveaux du coeur f^N , chaque paramètre étant fixé dans le processus d'optimisation à l'énergie réelle du niveau. L'opérateur $\xi(r_{4f}) s.l$ est diagonal par rapport à J_1 en couplage $J_1 j_2$ dans l'exemple d'une configuration $f^N l$, et ses éléments de matrice sur la base LS sont :

$$\sum_{\substack{J_1 J_1' \\ j_2 j_2'}} ((s_1 s_2) S (L_1 l_2) L J | (s_1 L_1) J_1 (s_2 l_2) j_2 J) \times \\ ((s_1' L_1') J_1' (s_2' l_2') j_2' J | (s_1' s_2') S' (L_1' l_2') L' J) \\ \delta(j_2, j_2') \cdot \delta(J_1, J_1') \cdot E_{J_1}$$

$$= \sum_{J_1, J_2} E_{J_1} [J_1][j_2] \sqrt{[S][S'] [L][L']} \begin{Bmatrix} S_1' & L_1' & J_1' \\ \frac{1}{2} & l & j_2 \\ S' & L' & J \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} S_1 & \frac{1}{2} & S \\ L_1 & l & L \\ J_1 & j_2 & J \end{Bmatrix}$$

CHAPITRE III

CLASSIFICATION DES SPECTRES D'ARC D'ÉTINCELLE DU DYSPROSIUM.

1. Les études successives de Dy I et Dy II.

Ces dernières années, les spectres du dysprosium ont fait l'objet d'études successives de plus en plus fréquentes et étendues. En observant les premiers spectres de Dy II, Paulson ²³⁾ mettait en évidence dès 1914 un intervalle d'énergie de 828 cm^{-1} ; en 1942, W.F. Meggers ²⁴⁾ précisa cette valeur et l'interpréta comme intervalle fondamental $4f^{10}6s^6 I_{17/2} - 4I_{15/2}$ de Dy II. Ces deux niveaux constituaient avec deux autres 4755 et 4341 immédiatement supérieurs, trouvés par Vander Sluis ²⁵⁾, l'essentiel de nos connaissances sur cet élément. En effet, la séparation des spectres d'arc et d'étincelle et la répartition des raies d'émission en classes de température entreprise par King ²⁶⁾ n'avaient été publiées que partiellement. Un seul résultat important concernait alors le spectre de Dy I : La valeur du facteur de Landé du niveau fondamental 1.24166 assurait son interprétation $4f^{10}6s^2 5I_8$ ²⁷⁾.

En 1962, Conway et Worden, engagés dans la classification des actinides ont entrepris une étude extensive des spectres I et II du dysprosium, homologue du californium dans la série des lanthanides, en vue d'interpréter plus facilement le spectre de ce dernier élément.

Le spectre émis par un tube sans électrodes excité en haute fréquence a été photographié à l'aide du spectrographe Paschen-Runge d'Argonne National Laboratory équipé à cette époque avec le réseau G_2 entre 2430 et 11 400 Å et l'analyse de ces données nouvelles a abouti en 1970 à la publication d'un article et de deux rapports importants.

1- Les observations de King non publiées concernant les classes de température et les intensités sous différentes conditions d'excitation de 4 584 raies ont été complétées et adaptées à la nouvelle liste de longueurs d'onde ²⁸).

2- Sous le titre de "classification préliminaire des spectres de Dy I et Dy II" Conway et Worden ont donné la liste complète des 22 858 raies d'émission mesurées, attribuées pour 44 % à l'atome neutre et pour 41 % à l'ion Dy^+ et une analyse bien amorcée du spectre des énergies : Les termes fondamentaux de l'atome et de l'ion ainsi que 12 niveaux impairs de Dy I ont été interprétés avec l'appui de calculs théoriques ²⁹).

Pourtant, la grande somme de résultats expérimentaux réunis par les auteurs, la précision des nombres d'onde portaient à croire que l'analyse du spectre pourrait être améliorée, moyennant une extension des observations vers l'infrarouge, une étude plus systématique de l'effet Zeeman et de nouveaux calculs de configurations. C'est pourquoi, poursuivant depuis 1968 l'investigation des spectres d'éléments pairs des lanthanides, nous avons abordé en 1970 l'étude du dysprosium, après avoir reçu de Lawrence Radiation Laboratory un important matériel expérimental (plaques photographiques, listes de longueurs d'ondes sur bande magnétique).

Nous avons d'abord tenté d'observer dans l'infrarouge, par l'emploi d'un SISAM à haute résolution, une transition à $7565,6 \text{ cm}^{-1}$ qui aurait confirmé l'écart des deux niveaux pair et impair les plus profonds de Dy I. Une telle transition existe dans le spectre de l'erbium mais nous n'avons pu la mettre en évidence dans Dy I. Pendant que Fred obtenait à Argonne une meilleure série de spectrogrammes Zeeman grâce au réseau G_5 , nous avons étudié la région $10\ 000 - 15\ 000 \text{ cm}^{-1}$ où prédominent dans les lanthanides deux types de transitions qui n'avaient pas été reconnus dans le dysprosium $4f^n 6s 6p - 4f^n 6s 7s$ et $4f^n 5d - 4f^n 6p$.

L'identification de $f^{10} \text{ sp}$ a été suivie de son calcul en interaction avec $f^9 \text{ ds}^2$, rapporté en Juillet 1971³⁰⁾. L'extension des mesures de structures Zeeman dans l'ultra-violet nous a conduit à trouver les premiers niveaux impairs de Dy II qui ont été publiés avec l'interprétation préliminaire de la première configuration paire excitée $4f^{10} 5d$ (Annexe I). Une partie des résultats concernant $f^{10} \text{ d}$ avait été trouvée indépendamment par Spector³¹⁾ et était publiée au même moment. Vergès a ensuite enregistré, par spectrométrie de Fourier à haute résolution, le spectre d'émission infrarouge de $^{162} \text{ Dy}$ ($3900 - 12500 \text{ cm}^{-1}$) ; l'analyse déjà amorcée des configurations $f^9 \text{ d}^2 \text{ s}$, $f^9 \text{ dsp}$, $f^{10} \text{ ds}$ (Annexe II) n'aurait pu être poursuivie sans l'aide de ces nouvelles données.

Pendant ce temps, les travaux de Conway et Worden suscitaient de nouvelles études : Vander Sluis et Mc Nally³²⁾ ont déterminé les facteurs de Landé des dix niveaux profonds de $f^{10} \text{ s}$. Ross³³⁾, en mesurant les déplacements isotopiques de 165 transitions contribuait à identifier les niveaux déjà trouvés, sans en étendre le nombre, dans les calculs paramétriques séparés des deux configurations $4f^{10} 6s 6p$ et $4f^9 5d 6s^2$ par

Griffin, Ross et Cowan³⁴).

Au Laboratoire Aimé Cotton, Camus et Masmoudi, au moyen d'un dispositif expérimental permettant d'observer le spectre d'absorption de vapeurs métalliques dans l'ultraviolet, ont mesuré 1418 raies entre 4105 et 2478 Å, puis trouvé l'énergie de 81 niveaux nouveaux, élevés et mis en évidence une répartition non boltzmannienne des populations³⁵).

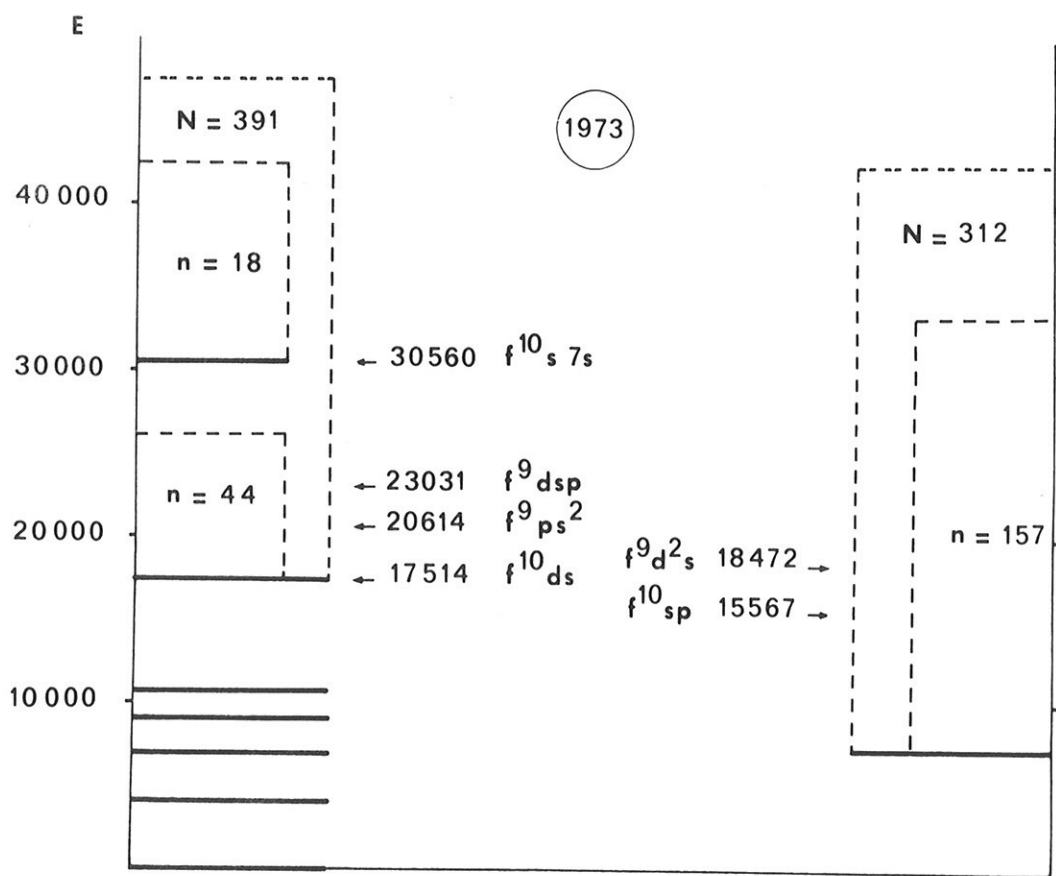
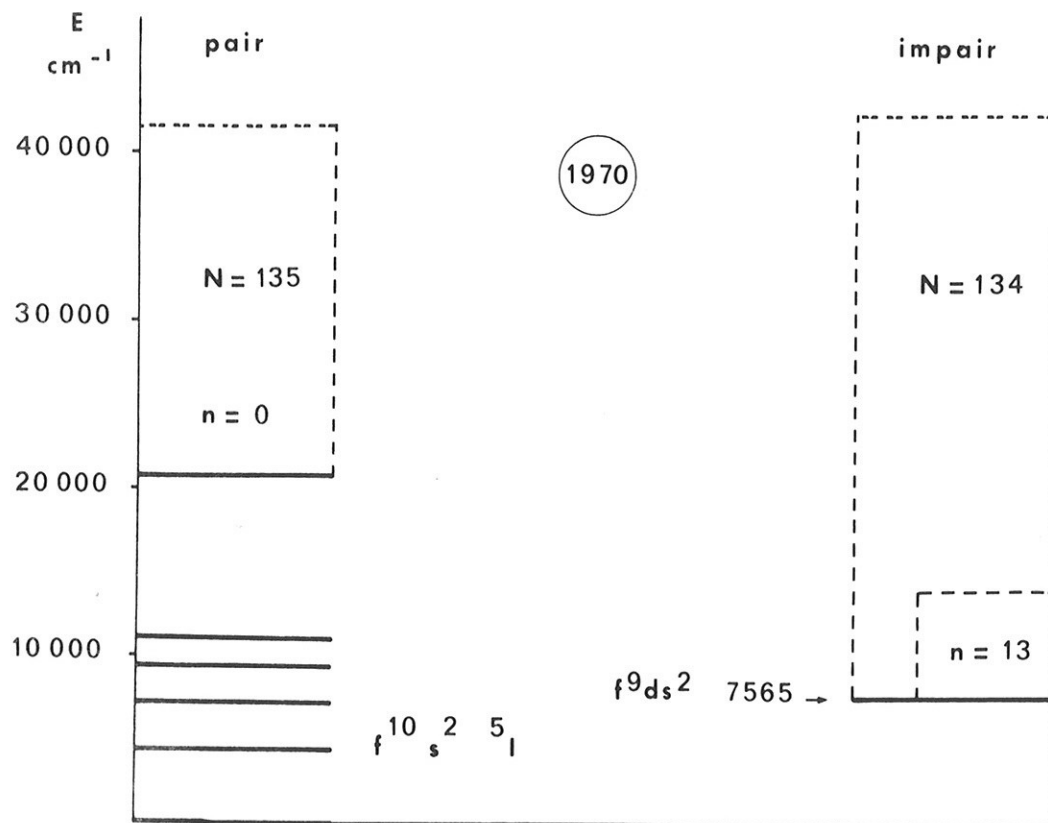
Dernièrement nous avons conclu l'étude des configurations impaires et des configurations paires élevées de Dy II car les données expérimentales dont nous disposons ne laissaient pas espérer d'étendre nos résultats dans l'immédiat (Annexe III).

Pour résumer ce paragraphe, les figures 2.I et 2.II représentent l'évolution de la classification entre 1970 et 1973 pour Dy I et pour Dy II. Enfin, avant d'analyser les niveaux d'énergie par configurations, nous en donnons la liste : Les colonnes successives des tableaux I (Dy I) et II (Dy II) contiennent le nom de la configuration, l'énergie, le nombre quantique J et le facteur de Landé g.

2. Caractères généraux de Dy I et Dy II ; position relative des configurations électroniques.

Les caractères généraux des spectres I et II des lanthanides dépendent principalement de trois facteurs :

- la position relative des configurations électroniques.
- la structure des niveaux profonds dans les configurations parentes f^N et f^{N-1} des ions deux et trois fois ionisés, sur lesquelles sont construites les configurations observées dans les spectres de l'atome et de l'ion +1.



N niveaux observés n niveaux interprétés

Fig. 2-I Etat de l'analyse de $D_y I$ (1970-1973).

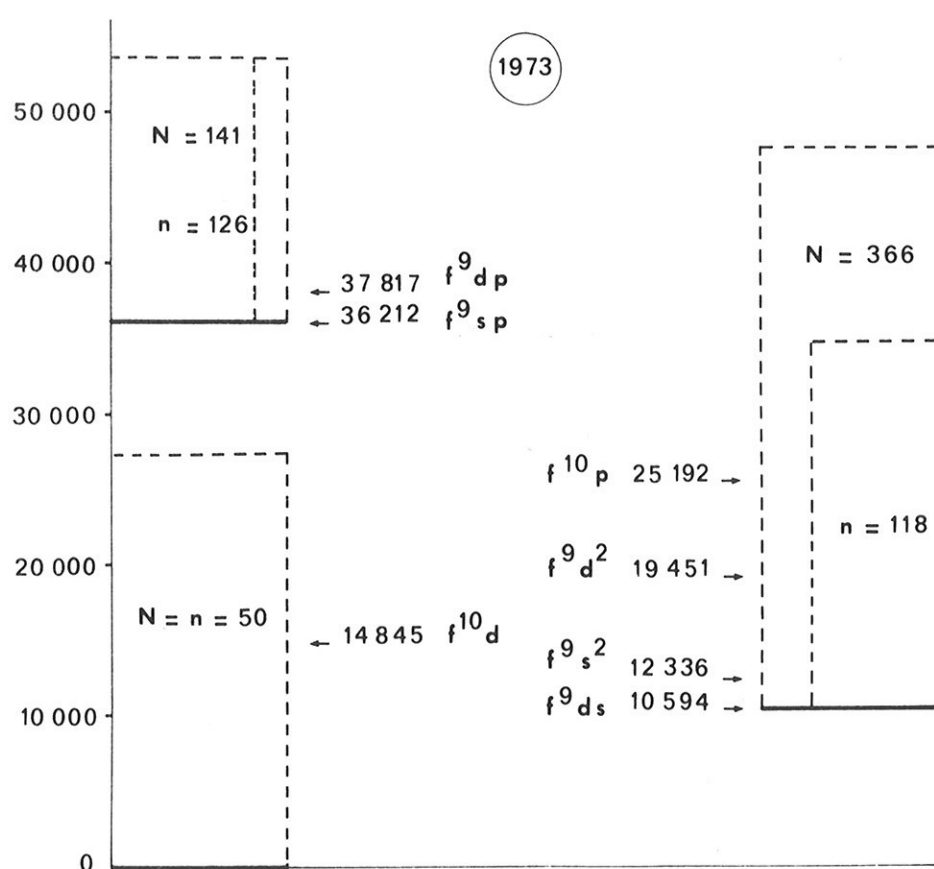
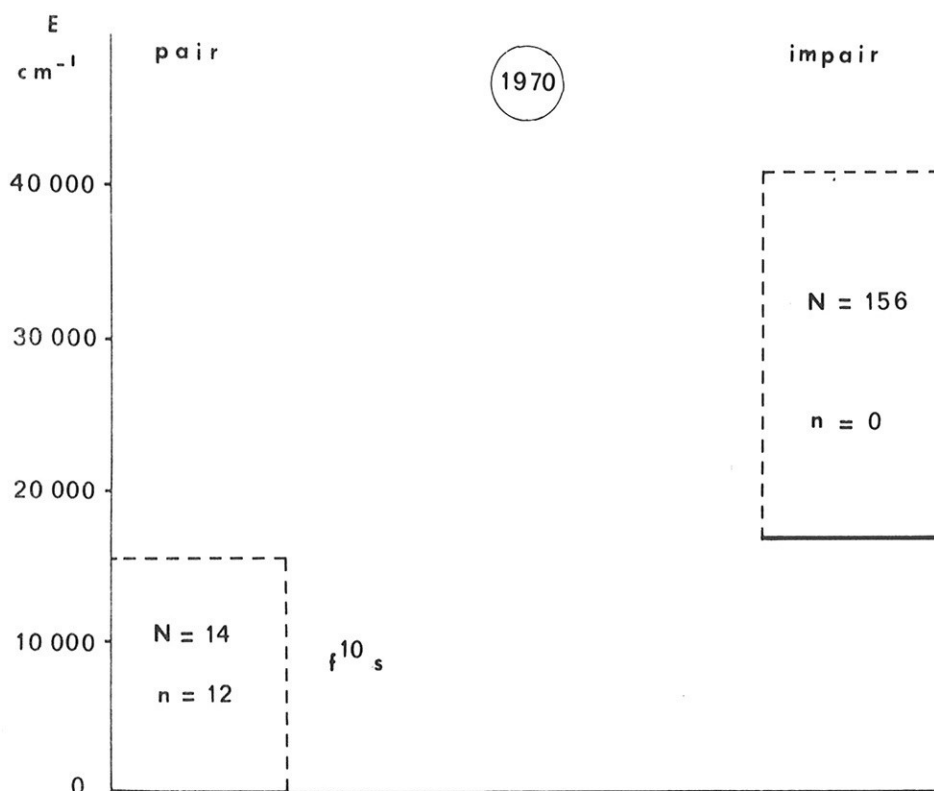


Fig. 2.II Etat de l'analyse de Dy II (1970-1973).

TABLEAU I - Niveaux d'énergie de Dy I

*	Conf	J	E (cm ⁻¹)	g	*	Conf	J	E (cm ⁻¹)	g
CW	F10S2	6	0000	1.242		F10DS	6	24302.020	1.200
CW	F10S2	7	4134.236	1.175		F9PS2	7	24430.266	1.265
CW	F10S2	6	7050.810	1.073		F10DS	7	24452.034	
CW	F10S2	5	9211.580	0.911	CW	F9DSP	6	24367.174	1.330
CW	F10S2	4	10925.250	0.818	CW	F9PS2	6	24899.058	1.350
	F10DS	9	17514.502	1.316	CW	F9DSP	8	25095.664	1.408
	F10DS	8	17613.358	1.330		F10DS	7	25502.822	1.165
	F10DS	7	18094.525	1.315		F10DS	6	25506.382	
	F10DS	10	18462.654	1.282		F10DS	5	25744.347	1.080
	F10DS	8	18903.212	1.215	CW	F9DSP	7	25879.147	1.350
	F10DS	7	18937.781	1.280			5	25993.569	1.185
	F10S2	8	19019.150	1.145			7	26200.049	
	F10DS	9	19240.820	1.217		F9DSP	9	26244.600	1.370
	F10DS	10	19797.960	1.210			5	26284.690	1.195
	F10DS	8	20193.601	1.165	CW		8	26349.493	1.340
	F10DS	9	20209.000	1.135		F9DSP	6	26337.814	1.475
CW	F9PS2	7	20614.316	1.320		F9DSP	7	26425.150	1.235
CW	F9PS2	8	20789.850	1.320		F10DS	7	26435.710	1.145
	F10DS	7	21074.200	1.245			5	26506.510	1.315
	F10DS	6	21159.786	1.245			6	26533.885	1.140
	F10DS	8	21603.037	1.255	CW	F9DSP	10	26732.290	1.36
	F10DS	7	21778.432	1.255		F9PS2	6	26785.447	1.235
	F10DS	9	22045.788	1.215	CW	F9PS2	7	26848.460	1.280
	F10DS	10	22487.135	1.197			9	26954.995	1.370
	F9DSP	8	23031.460	1.370	CW	F9PS2	8	27059.890	1.29
		9	23037.376	1.240					
CW	F9DSP	9	23218.590	1.370		F9PS2	6	27068.942	1.220
	F10DS	8	23280.459	1.176	CW		9	27390.970	1.35
	F10DS	6	23333.919	1.160	CW		8	27445.900	1.34
	F10DS	7	23360.663	1.222			7	27462.413	1.413
					CW		6	27474.640	1.35
	F10DS	8	23388.946	1.225		F10DS	4	27578.017	0.975
CW	F9PS2	8	23534.501	1.310		F9PS2	5	27680.125	1.317
CW		7	23591.267	1.260			8	27896.300	1.33
	F10DS	7	23655.359	1.174	CW		7	27959.980	1.36
	F9PS2	6	23683.866	1.300	CW		6	27987.900	1.320
CW	F9PS2	9	23780.260	1.340			4	28082.469	1.120
CW	F9DSP	7	23799.412	1.380	CW		9	28159.510	1.33
	F10DS	9	23841.905	1.165			4	28235.745	1.115
	F10DS	7	23972.343	1.245			5	28265.785	1.315
	F10S2	6	24062.876	1.217		F9PS2	5	28309.185	1.195

*	Conf	J	E (cm ⁻¹)	g	*	Conf	J	E (cm ⁻¹)	g
CW		6	28326.480	1.33	CW	F10SS	8	30979.530	1.26
CW		7	28358.700	1.35			6	30988.253	1.332
		5	28379.817	1.405			8	31061.181	1.306
		10	28433.406	1.330			5	31079.518	1.223
CW		8	28539.570	1.315	CW		7	31124.800	1.34
		5	28666.313	1.300			6	31180.008	1.26
		6	28849.057	1.365			8	31233.571	1.340
		6	28909.390	1.385	CW		9	31287.040	1.35
CW		8	28971.420	1.35			7	31362.623	1.260
		5	28987.015	1.317			7	31423.045	1.315
		6	29159.932	1.205			8	31469.005	1.420
		7	29169.984	1.313			10	31489.640	1.276
CW		8	29291.320	1.36		F10SS	7	31509.125	1.18
CW		9	29465.040	1.32			6	31529.683	1.42
		5	29496.326	1.180			5	31545.993	1.375
CW		7	29512.270	1.36	CW		7	31674.080	1.31
	F9PS2	7	29532.419	1.245			5	31742.144	1.393
		3	29626.200	0.820	CW		9	31775.650	1.270
CW		6	29682.160	1.36	CW		8	31820.280	1.204
CW		10	29706.720	1.32			10	31838.238	1.307
CW		9	29714.720	1.31	CW		7	32036.510	1.32
		11	29742.491	1.340	CW		9	32206.270	1.24
CW		8	29841.690	1.32	CW		7	32382.290	1.37
CW		7	29877.370	1.38			6	32392.588	1.325
		6	30015.440	1.287	CW		7	32411.250	1.32
		5	30033.055	1.335	CW		10	32428.076	1.350
		6	30102.591	1.29			8	32428.660	1.320
		10	30106.550	1.280			7	32470.807	1.320
		7	30163.332	1.355	CW	F10SS	8	32554.860	1.27
CW		7	30444.880	1.30	CW		8	32675.520	1.27
CW		9	30459.640	1.26			3	32712.540	1.260
CW		6	30475.950	1.340	CW		7	32722.870	1.33
		5	30512.730	1.29	CW		9	32763.210	1.29
CW	F10SS	9	30560.560	1.32	CW		8	32940.473	1.350
CW		8	30600.150	1.310			6	32945.300	1.330
CW		7	30621.870	1.27	CW		9	33086.260	1.29
		4	30662.792	1.250			7	33110.160	1.285
CW		9	30716.060	1.26			6	33210.132	1.325
CW		8	30739.790	1.32	CW		8	33246.130	1.240
		4	30896.567	1.480	CW		9	33252.280	1.31

*	Conf	J	E (cm ⁻¹)	g	*	Conf	J	E (cm ⁻¹)	g
		4	33358.790	1.070			5	35354.272	1.385
		5	33381.157	1.332			8	35377.510	1.28
CW		8	33406.060	1.31	CW		10	35385.780	1.27
CW		6	33474.300	1.37	CW	F10SS	6	35421.170	1.095
CW		7	33475.720	1.33			5	35523.350	1.165
		7	33552.390	1.280			5	35578.470	1.210
		6	33656.965	1.28			7	35695.767	1.340
		7	33746.820	1.270			7	35737.767	1.200
CW		8	33753.110	1.310	CM		6	35744.630	1.32
CW		7	33806.120	1.204	CW		9	35762.550	1.32
		6	33911.020	1.295			7	35866.600	1.240
		7	34027.703	1.260			8	35938.740	1.35
CM		7	34060.160	1.130	CW		9	35940.350	1.32
		7	34131.125	1.29	CW		6	35970.100	1.40
CW		9	34174.660	1.31	CW		6	36093.540	1.27
		6	34179.680	1.190			7	36119.460	1.25
CM		7	34196.553	1.325	CW		8	36308.080	1.27
		6	34295.692	1.36	CW		6	36365.086	
CM		7	34324.661	1.350	CM	F10S6D	8	36392.110	1.33
		6	34547.458	1.310	CW		7	36417.250	1.290
		5	34573.070	1.300			9	36487.200	1.31
		8	34676.950	1.24	CW		10	36490.070	1.25
CW		6	34679.750	1.488	CW		7	36491.053	
CW		9	34689.190	1.28	CM		7	36508.794	1.345
		5	34742.710	1.235	CM		8	36553.842	1.385
		7	34742.840	1.34			8	36599.440	1.290
CW		10	34776.036	1.278	CM		7	36608.280	1.180
		9	34829.300	1.27			6	36612.840	1.262
CW		5	34841.475	1.355			7	36667.775	
CW		7	34843.110	1.29		F10SS	9	36708.150	1.32
	F10SS	8	34922.080	1.27			9	36717.570	1.29
		6	34977.570	1.245	CW	F10S6D	8	36760.642	1.240
CW		7	35003.750	1.31		F10S6D	8	36807.390	1.34
CW		8	35053.560	1.32	CW		9	36822.270	1.25
	F10SS	7	35135.330	1.205	CW		7	36865.400	1.310
		3	35141.430	0.985			10	36905.440	1.250
		5	35184.560	1.305			7	36924.543	1.225
CW		9	35219.850	1.28	CM		8	36954.350	1.30
CM		7	35221.975	1.325	CW		9	36964.324	1.210
CW		8	35249.130	1.32		F10S6D	10	37007.585	1.225

*	Conf	J	E (cm ⁻¹)	g	*	Conf	J	E (cm ⁻¹)	g
		7	37015.220	1.270		F10SS	5	38093.850	1.085
	F10S6D	11	37039.000	1.275			5	38101.890	1.205
CW		6	37058.600	1.31		F10SS	7	38123.295	1.205
CW		9	37121.970	1.27	CM		8	38150.517	1.380
CW		8	37087.470	1.33	CM		5	38164.834	1.257
CW		6	37125.450	1.33			6	38214.810	1.215
		7	37135.330	1.205	CM		8	38254.970	1.290
		6	37163.156	1.29	CW		7	38264.280	1.345
		5	37182.190	1.260	CW		9	38285.360	1.25
CW		7	37212.060	1.30	CW		10	38329.910	1.30
		5	37231.265	1.255	CM		5	38334.202	
CW		7	37295.970	1.28	CW		8	38356.270	1.36
		11	37299.355	1.267	CM		7	38366.313	1.333
	F10S6D	6	37324.619	1.24			4	38431.810	1.265
		8	37339.886	1.25	CW		9	38444.350	1.28
CW		7	37366.090	1.325	CW		7	38452.460	1.238
CW		8	37398.460	1.25			7	38515.312	1.293
CM		5	37472.675	1.345			8	38516.860	1.222
		7	37501.575	1.243	CM		7	38524.524	1.345
CW		8	37527.150	1.24	CW		8	38551.450	1.25
CM		7	37551.190	1.300			5	38673.498	1.30
		5	37559.170	1.270			9	38674.907	1.285
	F10S6D	9	37591.830	1.212			6	38715.045	1.265
CW		7	37607.890	1.290	CW		7	38737.660	1.29
		5	37646.615	1.205	CM		6	38852.599	1.190
		6	37650.980	1.4	CM		7	38861.554	
CW		8	37676.890	1.32	CW		8	38870.010	1.25
		7	37694.252	1.265	CM		5	38890.921	
	F10S6D	10	37706.120	1.203	CM		7	38954.010	1.310
		9	37751.027	1.29	CM		5	38964.677	1.280
CW		7	37751.340		CW		8	38973.450	1.24
	F10S6D	8	37820.221	1.145	CW		9	39035.850	1.24
CW		8	37841.840	1.29			5	39048.179	1.385
		8	37856.421	1.247	CM		7	39078.140	1.280
		9	37933.633	1.377			4	39084.970	1.330
CW		7	37980.030	1.191	CW		8	39096.060	
CM		8	37992.778	1.187	CM		7	39097.740	1.210
		7	38054.608	1.333			9	39120.610	1.335
	F10SS	8	38070.030	1.11			10	39176.575	1.265
CM		8	38078.123	1.190			5	39201.130	1.095

*	Conf	J	E (cm ⁻¹)	g	*	Conf	J	E (cm ⁻¹)	g
		9	39332.818	1.285					
CM		7	39332.968	1.290	CW	8	40871.590	1.240	
CW		8	39376.930	1.33		4	40924.795	1.240	
		4	39378.710	0.980		5	40931.582	1.30	
		5	39411.020	1.272		4	40973.370	1.135	
						3	40983.605	1.195	
		4	39420.800	1.195	CW	9	41029.590	1.222	
		4	39430.940	1.135	CM	8	41037.230		
		9	39513.684	1.295	CM	8	41098.707	1.250	
		7	39516.883	1.288	CM	7	41053.077		
F10SS		6	39545.900			9	41135.130	1.316	
		10	39573.035	1.28	CW	8	41203.900	1.260	
CM		7	39681.940	1.325	CW	9	41210.300	1.25	
CW		9	39692.490	1.25	CM	9	41235.955	1.222	
		5	39748.260	1.250	CM	7	41371.370	1.230	
		10	39750.082	1.290	CM	8	41383.000		
		7	39777.622	1.253					
		5	39780.020	1.290		4	41458.215	1.225	
		6	39786.304	1.250	CW	F10SS	3	41492.410	0.435
		6	39849.812	1.33		7	41503.840	1.27	
		4	39853.975	1.390		F10SS	4	41859.440	0.805
						4	41957.185	1.225	
CW		9	39895.760	1.24	CM	8	41638.550		
CM		8	39909.550	1.280		4	42146.020	1.225	
CW		10	40005.820	1.23		3	42220.115	1.260	
	F10SS	4	40023.040	0.815		4	42236.047	1.215	
	F10SS	5	40213.210	0.968		F10SS	5	42490.500	1.000
		7	40245.780	1.28					
CW		3	40295.085	1.280	CM	4	42892.940	1.115	
CW		7	40396.050	1.310		8	42921.390		
		6	40410.190	1.310	CM	4	42940.958	1.230	
CM		8	40472.960	1.250		7	41984.710	1.210	
						5	43020.845	1.300	
CM		6	40491.530		CM	7	43222.105		
	F10SS	6	40520.485	1.185	CM	8	43728.573		
		3	40621.215	1.030	CM	8	44487.654		
		4	40625.905	1.260	CM	6	45703.642		
CM		8	40639.331	1.268	CM	7	46391.451		
		9	40683.590	1.29	CM	8	47354.040		
		3	40782.035	1.305					
		5	40796.415	1.295					
CW		8	40833.310	1.26					
		4	40835.605	1.335					

	Conf	J	E (cm ⁻¹)	g	*	Conf	J	E (cm ⁻¹)	g
CW	F9DS2	8	7565.600	1.362		F10SP	6	18711.929	1.172
CW	F9DS2	7	8519.200	1.336	CW	F9DS2	7	18857.040	1.335
CW	F9DS2	9	9990.950	1.320	CW	F9DS2	8	19092.303	1.330
VS	F9DS2	8	10088.800	1.360	CW	F9DS2	6	19182.660	1.035
VS	F9DS2	6	11673.490	1.392		F9D2S	6	19304.260	1.540
CW	F9DS2	8	12007.100	1.280		F9DS2	5	19480.866	1.350
	F9DS2	5	12298.558	1.240		F9D2S	9	19557.833	1.390
CW	F9DS2	7	12655.129	1.360	CW	F9DS2	8	19688.590	1.22
CW	F9DS2	10	12892.760	1.280		F9D2S	10	19797.965	1.367
CW	F9DS2	9	13495.918	1.230	CW	F9DS2	5	19813.980	1.27
	F9DS2	4	13952.000	1.082		F9DS2	6	19856.875	1.350
	F9DS2	5	14153.490	1.420	CW	F10SP	7	19907.513	1.230
CW	F9DS2	7	14367.800	1.270	CW	F10SP	8	20341.320	1.23
CW	F9DS2	8	14625.640	1.250		F9DS2	4	20430.110	1.285
	F9DS2	6	14970.698	1.245		F9DS2	4	20474.990	1.295
CW	F9DS2	7	15194.834	1.260	CW	F9DS2	7	20485.400	1.375
	F9DS2	8	15254.937	0.770	CW	F9DS2	6	20554.730	1.11
CW	F10SP	8	15567.375	1.310	CW	F10SP	7	20766.290	1.16
	F9DS2	6	15862.635	1.257	CW	F10SP	6	20817.610	1.13
CW	F10SP	9	15972.351	1.290		F9D2S	8	20884.867	1.360
	F9DS2	4	16069.985	1.615		F9D2S	5	20891.635	1.320
	F9DS2	8	16288.729	1.190	CW	F9DS2	5	20921.550	1.30
	F9DS2	4	16412.799	1.510	CW	F9D2S	7	20954.182	1.410
CW	F9DS2	6	16591.380	1.348		F9D2S	6	21392.396	1.455
	F9DS2	5	16684.733	1.082		F9D2S	9	21540.678	1.335
CW	F10SP	7	16693.866	1.220	CW	F9DS2	7	21675.280	1.22
	F9DS2	9	16717.787	1.245	CW	F9DS2	7	21783.420	1.15
CW	F10SP	8	16733.198	1.200		F9D2S	10	21788.929	1.340
	F9DS2	5	17502.889	1.450	CW	F10SP	9	21838.550	1.250
	F10SP	10	17513.330	1.30	CW	F10SP	8	21899.220	1.20
CW	F9DS2	7	17687.900	1.160	CW	F10SP	7	22061.290	1.18
CW	F10SP	9	17727.147	1.250	CW	F9DS2	4	22099.060	1.059
	F9DS2	5	17804.235	1.322		F10SP	6	22286.870	1.15
CW	F10SP	8	18021.892	1.230	CW	F9DS2	5	22294.880	1.02
CW	F9DS2	6	18172.870	1.34	CW	F10SP	5	22524.210	1.04
CW	F10SP	7	18339.797	1.210					
CW	F9DS2	7	18433.764	1.200	CW	F9DS2	12	22541.182	1.333
	F9D2S	8	18472.710	1.460		F9D2S	6	22633.230	1.29
CW	F9D2S	7	18528.554	1.467		F9D2S	7	22647.940	1.345
CW	F9DS2	6	18561.200	1.27		F9D2S	4	22696.821	1.487
						F9D2S	8	22767.832	1.345

*	Conf	J	E (cm ⁻¹)	g	*	Conf	J	E (cm ⁻¹)	g
CW	F9DS2	4	22938.030	1.065		F9D2S	4	25761.770	1.350
	F10SP	6	22956.840	1.060		F9D2S	10	25774.394	1.330
	F9D2S	9	23271.737	1.330	CW	F10SP	6	25825.830	1.00
	F9D2S	7	23340.121	1.390	CW	F10SP	6	25868.000	1.30
	F9D2S	6	23359.821	1.350	CW	F10SP	5	25912.630	0.980
CW	F9D2S	5	23440.460	1.36		F9D2S	9	25955.105	1.270
CW	F9DS2	6	23464.020	0.965		F9DS2	5	26135.210	1.220
CW	F10SP	7	23479.770	1.13		F9DS2	4	26440.410	1.046
	F9D2S	6	23529.008	1.410		F10SP	3	26607.160	0.575
CW	F10SP	5	23552.650	1.07		F10SP	4	26662.410	0.590
	F9D2S	11	23677.384	1.288					
CW	F9DS2	4	23686.810	0.767	CW		8	26868.070	1.24
CW	F10SP	6	23687.870	1.076			3	26886.010	1.02
CW	F10SP	9	23736.600	1.222		F10SP	4	26998.270	0.865
	F9DS2	3	23824.680	0.675	CW	F10SP	9	27014.020	1.23
						F10SP	5	27109.930	1.010
CW	F9D2S	8	23832.067	1.320					
CW	F10SP	8	23877.746	1.290		F9D2S	6	27190.740	1.263
	F9D2S	10	23953.303	1.305			6	27199.200	1.160
CW	F9DS2	6	24040.590	1.26		F9D2S	7	27316.490	1.325
CW	F9D2S	8	24204.189	1.300	CW		8	27319.080	1.22
						F10SP	3	27321.260	0.580
	F9D2S	9	24229.215	1.287					
	F9D2S	7	24353.582	1.330	CW	F10SP	7	27427.080	1.065
CW	F9DS2	5	24634.070	1.21	CW	F9D2S	7	27556.340	1.24
	F9DS2	3	24668.590	1.200		F9DS2	3	27601.330	0.840
CW	F10SP	7	24708.960	1.26			3	27643.570	1.170
						F9DS2	4	27659.020	1.170
	F10SP	4	24841.040	0.900					
	F9D2S	10	24858.744	1.260		F10SP	5	27685.870	0.770
	F9DS2	5	24881.850	0.720			4	27714.330	1.032
CW	F10SP	7	24906.860	1.14		F10SP	4	27751.460	0.810
	F10SP	6	24931.630	1.128	CW	F10SP	8	27817.990	1.21
					CW	F10SP	7	27834.930	1.22
	F10SP	5	24993.470	1.030					
CW	F10SP	8	24999.580	1.19	CW	F9D2S	8	27851.430	1.24
CW	F9D2S	8	25012.209	1.340	CW	F9D2S	7	27984.500	1.24
	F10SP	5	25082.020	1.064		F10SP	6	28119.940	1.198
	F9D2S	9	25084.798	1.277	CW		8	28177.140	1.27
					CW		6	28197.660	1.10
	F10SP	5	25127.515	1.040					
	F9DS2	4	25203.920	1.242		F10SP	2	28407.010	0.060
	F9D2S	7	25268.870	1.275	CW		8	28518.300	1.26
	F10SP	4	25687.200	.945		F10SP	3	28694.510	0.550
	F9D2S	8	25760.386	1.263	CW		8	28795.260	1.22
							7	28822.500	1.345

*	Conf	J	E (cm ⁻¹)	g	*	Conf	J	E (cm ⁻¹)	g
	F10SP	4	28923.050	0.785		CM	6	32607.883	1.227
	F10SP	5	29054.560	0.840			9	32711.900	1.203
CW		9	29119.110	1.20	CM	6	32790.658	1.175	
		7	29161.380	1.235	CW	6	32834.290	1.195	
	F10SP	6	29447.110	0.895		5	32889.190	1.138	
CW		7	29878.690	1.32	CM	7	32920.198	1.235	
CW		6	30426.590	1.227		9	32927.763	1.187	
CW		7	30528.360	1.22	CW	6	32970.870	1.177	
CW		8	30544.570	1.22	CW F10SP	5	33025.640	1.01	
CW		7	30566.070	1.39	CW	5	33139.240	0.89	
CW F10SP		7	30711.700	1.09	CM	8	33165.767	1.250	
CW F10SP		6	30778.960	1.17	CW	7	33311.520	1.296	
CW F9D2S		6	30840.730	1.269	CW F10SP	4	33324.060	0.89	
CW		5	30904.890	1.286	CM	6	33380.983	1.223	
CW		5	30946.730	1.267		5	33652.230	1.160	
CW		7	31132.300	1.289	CW	8	33721.520	1.25	
CW		5	31200.960	1.310	CW	5	33788.790	1.310	
CW		7	31229.290	1.207		5	33871.700	1.170	
CW		6	31341.390	1.145	CW	5	33947.130	1.307	
CW		6	31399.490	1.255		4	33952.330	1.305	
CW		5	31410.950	1.242		4	34038.460	1.305	
CW		7	31423.020	1.18		4	34137.430	1.185	
		7	31519.570	1.215	CM	7	34213.650		
CW		5	31522.730	1.268	CM	6	34359.560	1.260	
CW		8	31547.010		CW	4	34359.800	1.14	
CW		6	31555.970	1.260	CW	5	34400.670	1.123	
		7	31580.280	1.190	CW F10SP	5	34470.700	0.915	
CW		7	31698.320	1.31	CW	4	34486.890	1.213	
		5	31763.850	1.325		5	34488.420	1.195	
CW		7	31878.420	1.208		5	34662.110	1.160	
CW		9	31900.740	1.24	CM	7	34695.420	1.310	
CW		7	31946.720	1.25	CW	4	34720.680	0.761	
		7	32016.830	1.295	CM	8	34755.070	1.175	
CW		6	32082.000	1.284	CW	6	34770.300	1.195	
CW		6	32111.440	1.119		8	34755.075	1.174	
CW		6	32126.160	1.23	CM	6	34793.490		
CW		5	32263.160	1.26		8	34803.870	1.174	
CW		5	32359.020	1.223	CW	7	34921.865	1.193	
CW		6	32431.610	1.121	CM	6	34938.330	1.220	
CM		7	32564.968			8	34975.000	1.285	

*	Conf	J	E (cm ⁻¹)	g	*	Conf	J	E (cm ⁻¹)	g
		8	35029.503	1.290					
		10	35082.985						
CW		3	35107.230	1.033					
		7	35107.277	1.295					
CW		3	35136.670	1.06					
		9	35221.268	1.236					
		3	35231.230	0.958					
CW		4	35316.310	1.272					
		8	35450.166						
		8	35518.270	1.277					
		9	35580.845						
		8	35777.790	1.210					
		7	35802.730	1.230					
		8	35894.363	1.220					
CW		8	35899.941	1.230					
		10	35945.024	1.225					
		7	36248.015	1.300					
		9	36260.168	1.163					
		8	36288.480	1.250					
CM		7	36316.415	1.230					
		9	36341.530	1.282					
		8	36440.210						
		7	36441.990	1.174					
		6	36462.090	1.090					
CW		8	36534.035	1.235					
		7	36546.780						
		8	36618.340						
		10	36640.904	1.170					
		10	36868.728	1.178					
		8	36892.095	1.188					
		8	37041.020						
CM		7	37073.860	1.288					
		9	37090.465	1.208					
		8	37146.540	1.233					
CM		8	37354.998	1.120					
		8	37360.010	1.285					
		7	37366.926						
		7	37471.090						
CM		7	37587.584	1.230					
		8	37635.260						
		8	37646.280	1.09					
		8	37721.056	1.199					
		9	37836.500	1.185					
		8	37843.380	1.265					
		10	38019.120	1.152					
		9	38102.915	1.190					
		8	38202.480	1.313					
		10	38247.380	1.220					
		7	38251.550						
		10	38297.520	1.244					
		7	38342.479	1.323					
		8	38358.883	1.095					
		7	38362.649						
		7	38421.286	1.330					
		8	38438.870	1.270					
		9	38563.332	1.254					
		7	38779.770						
		8	38814.460						
		8	39135.325	1.194					
		10	39182.398	1.275					
		6	39188.230						
		7	39325.277						
		8	39398.100	1.228					
		9	39602.470	1.275					
		8	39714.195	1.184					
		9	39903.336	1.280					
		9	40030.485	1.192					
		8	40605.985	1.110					
		6	41577.180						
		7	41642.790						
		6	41656.465	1.210					
		6	42375.030	1.280					
		5	42479.830	1.070					
					*				
									Référence du niveau
									CW Niveau trouvé par Conway et Worden
									CM Niveau trouvé par Camus et Masmoudi

TABLEAU II - Niveaux d'énergie de Dy II

*	Conf	J	E (cm ⁻¹)	g	*	Conf	J	E (cm ⁻¹)	g
1	F10S	8.5	0.000	1.237					
1	F10S	7.5	828.310	1.202		F10D	6.5	23479.885	1.000
1	F10S	7.5	4341.100	1.226		F10D	4.5	23495.195	1.000
1	F10S	6.5	4755.660	1.128		F10D	7.5	23840.250	1.036
CW	F10S	5.5	7463.880	1.015		F10D	3.5	23976.765	0.837
						F10D	7.5	24685.630	1.100
CW	F10S	6.5	7485.090	1.133		F10D	8.5	25051.475	1.100
CW	F10S	4.5	9432.070	0.825		F10D	4.5	25214.392	1.010
CW	F10S	5.5	9870.990	0.996		F10D	3.5	25292.490	0.743
CW	F10S	3.5	10953.940	0.464		F10D	6.5	25746.578	0.888
CW	F10S	4.5	11801.010	0.755		F10D	7.5	27519.670	1.000
CW	F10S	5.5	13338.270	1.460		F9SP	7.5	36212.185	1.405
CW	F10S	4.5	14126.935	1.320		F9SP	8.5	36522.905	1.373
SW	F10D	8.5	14845.906	1.255		F9DP	7.5	37817.305	1.333
CW	F10D	7.5	14952.144	1.300		F9SP	6.5	37878.550	1.303
CW	F10D	6.5	15691.988	1.340		F9DP	8.5	38402.395	1.326
	F10S	2.5	15889.870	1.855		F9DP	7.5	38427.360	1.317
SW	F10S	4.5	15979.295	1.400		F9DP	6.5	38939.693	1.381
	F10D	9.5	16117.395	1.245		F9SP	6.5	39896.718	1.245
	F10S	3.5	16418.930	1.309		F9SP	6.5	39944.237	1.235
	F10S	1.5	16758.920	1.720		F9SP	9.5	40158.045	1.360
	F10D	10.5	17406.594	1.240		F9DP	5.5	40194.018	1.345
	F10D	8.5	17589.522	1.199		F9SP	8.5	40455.725	1.326
	F10S	2.5	17779.983	1.290		F9SP	7.5	40516.800	1.345
	F10D	9.5	17788.820	1.170		(F9SP)	7.5	40604.107	1.295
	F10S	3.5	17912.800	1.300			7.5	40626.420	1.093
	F10D	6.5	18219.716	1.240		F9DP	9.5	40807.200	1.332
SW	F10D	7.5	18234.950	1.240		F9SP	5.5	40841.630	1.326
	F10D	5.5	18866.509	1.260		F9SP	6.5	41004.067	1.255
	F10D	8.5	20700.595	1.160		F9SP	7.5	41111.110	1.315
	F10D	6.5	20748.425	1.170		F9DP	8.5	41583.900	1.330
	F10D	7.5	21076.074	1.130		F9SP	6.5	41878.479	1.314
	F10D	5.5	21177.839	1.150		F9DP	5.5	42083.588	1.325
	F10D	7.5	21338.350	1.180		F9SP	6.5	42137.311	1.330
	F10D	8.5	21627.535	1.125			5.5	42150.665	1.095
	F10D	9.5	21806.920	1.175		F9DP	4.5	42256.432	1.225
	F10D	4.5	21813.120	1.105		F9DP	6.5	42289.329	1.348
	F10D	6.5	22116.318	1.200		F9DP	9.5	42478.980	1.310
	F10S	7.5	23239.595	1.093		F9DP	7.5	42550.090	1.340
S	F10D	5.5	23309.800	1.105		F9DP	8.5	42741.690	1.320
	F10S	6.5	23375.405	0.994		F9SP	5.5	42813.080	1.203

Conf	J	E (cm ⁻¹)	g	*	Conf	J	E (cm ⁻¹)	g
F9DP	6.5	42883.008	1.367		F9DP	8.5	46256.770	1.275
F9SP	4.5	42911.590	1.215		F9SP	5.5	46498.622	1.275
F9DP	7.5	43002.985	1.330		F9DP	6.5	46490.305	1.229
F9DP	8.5	43066.190	1.343		F9DP	5.5	46547.749	1.338
F9SP	6.5	43422.060	1.307		F9DP	8.5	46694.137	1.274
F9SP	5.5	43689.991	1.401		F9SP	6.5	46779.065	1.297
F9SP	7.5	43794.349	1.298		F9SP	3.5	46798.320	1.110
F9DP	3.5	43838.100	1.040		F9DP	7.5	46853.715	1.285
F9DP	7.5	43891.335	1.315		F9DP	6.5	46943.024	1.235
F9SP	6.5	44049.220	1.312		F9DP	5.5	46976.066	1.24
F9SP	8.5	44074.411	1.315		F9DP	5.5	47023.091	1.325
F9DP	10.5	44156.978	1.317		F9SP	7.5	47091.912	1.350
F9DP	6.5	44189.520	1.310		F9DP	8.5	47208.153	1.240
F9SP	5.5	44331.358	1.242		F9DP	6.5	47357.741	1.220
F9DP	4.5	44352.007	1.17		F9SP	5.5	47401.400	1.215
F9DP	9.5	44501.975	1.320		F9DP	4.5	47462.432	1.320
F9DP	3.5	44529.450	1.005		F9DP	7.5	47597.730	1.262
F9DP	8.5	44545.245	1.285		F9DP	8.5	47718.750	1.278
F9DP	7.5	44653.180	1.318		F9DP	5.5	47833.920	1.155
F9DP	9.5	45701.637	1.290		F9DP	11.5	47960.827	1.305
F9SP	4.5	44737.515	1.385		F9DP	3.5	48022.124	1.248
F9DP	6.5	44812.000	1.390		F9DP	6.5	48035.885	1.310
F9SP	5.5	44903.871	1.315		F9DP	7.5	48052.158	1.295
F9SP	6.5	45123.110	1.323		F9DP	10.5	48059.913	1.280
F9DP	7.5	45132.740	1.090		F9DP	9.5	48069.100	1.273
F9DP	7.5	45139.880	1.245		F9DP	5.5	48240.945	1.285
F9DP	8.5	45240.025	1.330		F9DP	9.5	48346.295	1.234
F9DP	5.5	45241.745	1.340		F9DP	5.5	48469.081	1.285
F9DP	7.5	45317.045	1.280		F9SP	6.5	48487.135	1.460
F9DP	6.5	45356.534	1.448		F9DP	7.5	48489.047	1.350
F9SP	4.5	45427.490	1.255		F9SP	4.5	48684.980	1.195
F9DP	5.5	45545.684	1.360		F9DP	6.5	48831.175	1.270
F9DP	6.5	45773.905	1.290		F9DP	6.5	48844.846	1.260
F9DP	4.5	45799.997	1.280		F9SP	5.5	48863.450	1.320
F9DP	10.5	45934.945	1.305		F9DP	7.5	48950.088	1.222
F9DP	9.5	46066.645	1.240		F9DP	7.5	48988.853	1.270
F9DP	7.5	46082.829	1.303		F9DP	5.5	49058.033	1.330
F9SP	4.5	46091.317	1.278		F9DP	6.5	49132.945	1.230
F9SP	4.5	46161.853	1.305		F9DP	7.5	49233.164	1.230
F9DP	6.5	46220.916	1.310		F9DP	6.5	49340.477	1.253

*	Conf	J	E (cm ⁻¹)	g
		5.5	49462.328	1.290
	F9DP	8.5	49537.650	1.222
	F9DP	9.5	49544.703	1.278
	F9SP	6.5	49603.105	1.325
		5.5	49607.502	1.150
	F9DP	8.5	49675.741	1.190
	F9DP	6.5	49680.288	1.350
	F9DP	7.5	49813.643	1.273
	F9DP	6.5	49856.567	1.230
	F9DP	9.5	50017.728	1.278
		6.5	50051.480	1.260
		6.5	50101.904	1.115
	F9DP	7.5	50129.275	1.212
	F9DP	7.5	50206.502	1.210
		6.5	50408.821	1.180
	F9DP	8.5	50457.944	1.280
	F9DP	7.5	50521.445	1.244
		5.5	50768.520	1.355
	F9DP	7.5	50783.985	1.322
	F9DP	6.5	50858.430	1.30
	F9DP	6.5	51087.706	1.315
	F9DP	7.5	51124.238	1.230
		8.5	51406.042	1.280
	F9DP	10.5	51593.348	1.255
	F9DP	9.5	51640.223	1.250
	F9DP	8.5	51716.648	1.232
	F9DP	6.5	52008.953	1.220
	F9DP	7.5	52395.070	1.260
	F9DP	8.5	53002.555	1.260
	F9DP	10.5	53641.530	1.230
	F9DP	8.5	53738.081	1.270

* Référence du niveau :

1 Niveau connu avant 1960

CW Niveau trouvé par Conway et Word

SW Niveau trouvé indépendamment par
Spector et par Wyart

S Niveau trouvé par Spector

*	Conf	J	E (cm ⁻¹)	g	*	Conf	J	E (cm ⁻¹)	g
	F9DS	8.5	10594.190	1.400		F9D2	8.5	20884.415	1.350
	F9DS	7.5	11394.910	1.383	CW	F9DS	6.5	20896.365	1.320
	F9S2	7.5	12336.290	1.330		F9DS	9.5	20985.625	1.290
	F9DS	6.5	12674.695	1.350	CW	F9DS	6.5	21134.775	1.245
	F9DS	9.5	13408.620	1.364		F9DS	7.5	21272.070	1.210
	F9DS	7.5	13610.710	1.330		F9DS	6.5	21358.060	1.310
	F9DS	5.5	14347.207	1.302		F9D2	9.5	21464.975	1.316
	F9DS	6.5	14421.870	1.438		F9D2	10.5	22031.978	1.322
	F9DS	8.5	14895.060	1.315		F9DS	6.5	22083.310	1.402
	F9DS	6.5	15530.108	1.358		F9DS	6.5	22172.638	1.145
	F9S2	6.5	15822.150	1.275	CW	F9DS	7.5	22467.100	1.314
	F9DS	4.5	16015.400	1.193			4.5	22653.437	1.45
	F9DS	7.5	16260.400	1.365	CW	F9D2	7.5	22672.540	1.364
	F9DS	5.5	16601.973	1.408	CW	F9DS	7.5	22854.690	1.280
	F9DS	7.5	16875.900	1.328		F9D2	6.5	22871.198	1.387
	F9DS	10.5	16881.335	1.335	CW	F9DS	8.5	22908.055	1.240
	F9DS	5.5	17007.105	1.317		F9DS	8.5	22990.860	1.400
CW	F9DS	8.5	17036.550	1.295		F9DS	7.5	23202.720	1.188
	F9DS	6.5	17596.357	1.280	CW	F9DS	6.5	23303.060	1.310
	F9DS	9.5	17606.650	1.280			5.5	23561.580	1.368
	F9S2	5.5	18121.465	1.215	CW	F9DS	6.5	23575.150	1.330
	F9DS	5.5	18494.590	1.400		F9D2	9.5	23707.180	1.305
	F9DS	8.5	18549.160	1.228	CW	F9D2	8.5	23765.800	1.270
	F9DS	7.5	18678.438	1.272		F9DS	6.5	24104.440	1.173
	F9DS	4.5	18738.414	1.42	CW	F9DS	8.5	24316.090	1.230
	F9DS	4.5	18955.567	1.190		F9DS	6.5	24506.800	1.105
	F9DS	6.5	18978.230	1.331		F9D2	11.5	24786.370	1.303
	F9DS	5.5	19183.734	1.163		F9D2	7.5	24806.670	1.280
CW	F9DS	8.5	19251.810	1.280		F9D2	6.5	24818.315	1.303
CW	F9D2	7.5	19451.355	1.390		F9D2	6.5	24967.310	1.283
	F9DS	4.5	19467.230	1.660		F9DS	5.5	25036.760	1.335
	F9D2	6.5	19492.154	1.436	CW	(F10P)	7.5	25192.030	1.300
	F9DS	9.5	19571.745	1.267	CW	F9D2	8.5	25343.420	1.290
	F9S2	5.5	19927.637	1.445		F9DS	6.5	25468.579	1.155
	F9DS	6.5	19956.650	1.315			5.5	25648.900	1.020
CW	F9DS	7.5	20166.445	1.313		F9D2	10.5	25756.293	1.260
CW	F9DS	7.5	20467.705	1.204	CW	F9DS	6.5	25772.860	1.370
	F9D2	5.5	20517.387	1.463	CW	F10P	8.5	25818.430	1.270
	F9DS	8.5	20793.130	1.225	CW	F9DS	7.5	25833.380	1.220
	F9DS	5.5	20817.155	1.440			5.5	26047.860	1.150

*	Conf	J	E (cm ⁻¹)	g	*	Conf	J	E (cm ⁻¹)	g
	F9D2	9.5	26279.669	1.260					
CW		5.5	26407.420	1.110			8.5	30580.570	1.330
CW	F9D2	7.5	26634.200	1.290			6.5	30638.555	1.200
	F9D2	6.5	26853.720	1.320	CW		5.5	30718.220	1.300
CW	(F9DS)	6.5	27193.050	1.295	CW	F9D2	7.5	30747.020	1.320
							4.5	30831.150	1.350
	F9D2	9.5	27209.910	1.220	CW	F9D2	6.5	30973.570	1.140
CW	(F9DS)	7.5	27216.930	1.300	CW	F9D2	6.5	31183.100	1.160
CW	F9D2	8.5	27232.680	1.240	CW	F9D2	7.5	31306.470	1.210
CW	F9D2	7.5	27435.120	1.312			5.5	31313.360	1.375
CW		5.5	27462.390	1.18	CW		5.5	31529.110	0.987
		4.5	27476.880	1.180	CW	F9D2	9.5	31536.690	1.250
CW		6.5	27502.930	1.175			4.5	31667.430	1.135
CW		6.5	27792.480	1.150	CW		5.5	31701.660	1.080
CW	F9D2	7.5	27885.600	1.240	CW		6.5	31715.100	1.325
CW		5.5	27990.270	1.290	CW	F9D2	7.5	31826.350	1.330
	F9D2	9.5	28005.870	1.320			4.5	31866.890	1.275
CW	F9D2	6.5	28019.700	1.250	CW	F10P	8.5	31879.660	1.178
CW	F9D2	8.5	28252.340	1.230	CW	F9D2	6.5	31978.850	1.328
CW	F10P	9.5	28306.830	1.280	CW	F10P	6.5	32218.480	1.183
CW	F9D2	6.5	28456.120	1.250	CW		8.5	32281.840	1.200
CW	F9DS	6.5	28550.720	1.280	CW		5.5	32386.500	1.220
		3.5	28648.880	0.965	CW		6.5	32591.490	1.090
CW		6.5	28784.490	1.025	CW	F9D2	8.5	32613.400	1.190
CW	F10P	7.5	28885.370	1.261	CW		4.5	32679.280	1.145
		5.5	28908.290	1.235	CW	F10P	7.5	32709.970	1.200
CW	F9D2	8.5	29014.430	1.250	CW		5.5	32903.810	1.100
CW	F9D2	7.5	29109.090	1.220	CW	F10P	6.5	32914.900	1.220
CW	F10P	8.5	29336.060	1.270			4.5	32919.480	1.176
	F9D2	10.5	29376.940	1.260			5.5	33001.210	1.370
CW	F10P	7.5	29436.600	1.220			9.5	33035.570	1.232
CW	F9D2	9.5	29681.740	1.210	CW		3.5	33097.320	1.095
		5.5	29685.140	1.260	CW		5.5	33306.710	1.290
		8.5	29765.740	1.195	CW		6.5	33319.210	1.185
CW	F9D2	6.5	29769.300	1.250			7.5	33465.390	1.273
CW	F9D2	6.5	29877.520	1.406	CW		5.5	33507.293	1.125
CW	F9D2	7.5	30112.920	1.210		F9D2	8.5	33529.340	1.300
CW	F10P	6.5	30287.360	1.210			7.5	33576.310	1.245
CW	F10P	6.5	30361.800	1.190	CW		6.5	33616.810	1.260
CW	F9D2	7.5	30399.100	1.210	CW		5.5	33677.880	1.140
		5.5	30553.630	1.315	CW		4.5	33701.130	1.076

*	Conf	J	E (cm ⁻¹)	g	*	Conf	J	E (cm ⁻¹)	g
CW		6.5	33817.650	1.235	CW	6.5	36282.610	1.210	
		7.5	33950.194	1.130	CW	4.5	36340.060	1.155	
CW		6.5	34110.170	1.309	CW	5.5	36350.700	1.230	
CW		5.5	34216.480	1.137	CW	7.5	36377.840	1.347	
CW		6.5	34255.720	1.272	CW	6.5	36387.030	1.226	
		4.5	34298.380	1.140	CW	4.5	36466.340	1.075	
		9.5	34307.620	1.233	CW	3.5	36643.972	1.260	
CW		8.5	34396.870	1.283	CW	3.5	36699.500	1.110	
		7.5	34423.225	1.148	CW	7.5	36719.640	1.235	
CW		8.5	34519.090	1.220	CW	4.5	36805.430	1.225	
CW		5.5	34524.060	1.100		4.5	36859.320	1.375	
CW		5.5	34691.550	1.154	CW	6.5	36884.700	1.260	
		7.5	34692.390	1.165	CW	5.5	36970.680	1.195	
CW		4.5	34712.230	1.075	CW	3.5	37036.560	0.970	
		3.5	34730.200	1.184		6.5	37060.945	1.285	
		6.5	34759.150	1.280	CW	4.5	37066.560	1.195	
		4.5	34864.905	1.035	CW	5.5	37076.280	1.209	
CW		5.5	34884.430	1.272		6.5	37150.730	1.245	
		5.5	35000.630	1.295	CW	5.5	37187.310	1.397	
CW		7.5	35207.830	1.132	CW	7.5	37188.010	1.264	
		6.5	35230.580	1.140	CW	3.5	37199.970	1.088	
CW		8.5	35266.610	1.266	CW	5.5	37363.990	1.250	
CW		5.5	35268.410	1.195		6.5	37382.900	1.300	
CW		4.5	35294.740	0.976	CW	5.5	37517.380	1.235	
CW		7.5	35365.100	1.210	CW	4.5	37527.890	1.164	
CW		3.5	35387.840	0.795		7.5	37623.098	1.242	
CW		6.5	35434.550	1.140	CW	5.5	37637.950	1.124	
CW		8.5	35495.930	1.225	CW	6.5	37671.300	1.320	
		7.5	35565.890	1.170		1.5	37703.360	1.525	
		5.5	35657.830	1.460	CW	3.5	37764.840	1.054	
CW		5.5	35685.840	1.229	CW	5.5	37795.700	1.208	
		7.5	35707.070	1.245	CW	3.5	37839.460	0.760	
CW		4.5	35841.780	1.030	CW	4.5	37895.050	0.780	
CW		4.5	36001.250	0.980		6.5	37905.707	1.105	
CW		6.5	36003.950	1.028	CW	7.5	37942.190	1.250	
CW		5.5	36057.030	1.210	CW	4.5	37958.420	1.165	
		8.5	36058.905	1.158		5.5	38078.015	1.097	
		6.5	36173.950	1.140		6.5	38110.707	1.090	
CW		4.5	36260.740	0.950	CW	6.5	38130.170	1.228	
		5.5	36264.622	1.140		5.5	38156.000	1.177	

*	Conf	J	E (cm ⁻¹)	g	*	Conf	J	E (cm ⁻¹)	g
		2.5	38162.590	1.183					
		4.5	38214.890	1.220			5.5	39791.150	1.220
CW		3.5	38255.290	1.055			6.5	39814.975	1.075
		8.5	38266.590	1.152	CW		4.5	39838.110	1.233
		5.5	38290.170	1.145	CW		5.5	39854.900	1.190
							2.5	39957.420	1.125
CW		6.5	38297.440	1.200			5.5	39985.330	1.185
CW		3.5	38322.190	1.370	CW		3.5	40036.030	1.101
CW		4.5	38457.650	1.200			3.5	40060.350	1.185
CW		5.5	38495.040	1.131	CW		4.5	40091.480	0.970
		5.5	38559.405	1.260			2.5	40137.540	1.320
CW		3.5	38583.100	1.197			5.5	40146.370	1.075
		1.5	38599.780	1.765	CW		2.5	40209.830	0.832
		4.5	38604.253	1.265	CW		5.5	40223.840	1.075
CW		3.5	38635.840	1.094	CW		2.5	40264.920	1.150
		2.5	38723.210	1.450			4.5	40315.085	1.060
		4.5	38735.830	1.353			4.5	40343.720	1.195
CW		6.5	38758.890	1.120			1.5	40454.935	1.550
		1.5	38774.190	1.355			3.5	40477.770	1.090
CW		7.5	38804.020	1.252			1.5	40526.090	1.320
		3.5	38818.290	1.195			4.5	40541.000	1.210
		4.5	38972.580	1.215			5.5	40635.580	0.960
		6.5	39021.895	1.090			3.5	40694.780	1.315
		4.5	39050.675	1.150	CW		5.5	40945.420	1.137
CW		3.5	39081.240	1.080			4.5	40977.161	1.148
		5.5	39117.830	1.240			6.5	41070.615	1.115
		3.5	39209.260	1.220			2.5	41266.260	1.405
		5.5	39215.903	1.268			2.5	41274.200	1.405
		6.5	39231.250	1.195			5.5	41305.275	1.115
CW		6.5	39293.765	1.085			4.5	41317.470	1.120
		4.5	39301.450	1.153			3.5	41335.440	1.040
CW		3.5	39308.620	1.022			3.5	41455.390	1.100
		4.5	39336.520	1.170			6.5	41546.615	1.200
CW		2.5	39377.020	0.701			4.5	41472.390	1.095
CW		5.5	39416.220	1.049			4.5	41547.150	1.150
CW		3.5	39499.720	1.214			4.5	41594.262	1.148
		4.5	39517.390	1.410			2.5	41638.635	1.346
CW		5.5	39549.110	0.953			3.5	41689.338	1.382
CW		3.5	39607.300	1.090			3.5	41702.386	1.210
CW		4.5	39691.580	1.017			4.5	41747.556	0.990
		4.5	39735.100	1.425	CW		3.5	41808.880	1.010

*	Conf	J	E (cm ⁻¹)	g	*	Conf	J	E (cm ⁻¹)	g
		3.5	41912.703	1.180			2.5	45500.665	1.255
		2.5	42060.490	1.275			2.5	45521.686	1.080
		5.5	42067.670	1.145			3.5	45624.025	1.250
		4.5	42286.350	1.140			3.5	45967.450	1.345
		2.5	42322.320	1.390			1.5	46010.405	1.460
		6.5	42333.660	1.165			2.5	47564.565	1.440
		1.5	42451.740	1.585					
		3.5	42628.835	1.225					
		2.5	42662.828	1.460					
		2.5	42752.233	1.050					
		4.5	42796.249	1.050					
		3.5	42831.465	1.170					
		1.5	43048.380	1.165					
		3.5	43150.780	1.130					
		3.5	43165.660	1.350					
		2.5	43250.100	1.420					
		4.5	43534.343	1.245					
		2.5	43586.315	0.990					
		3.5	43668.475	1.145					
		4.5	43672.953	1.165					
		2.5	43828.983	1.025					
		1.5	43924.533	0.665					
		2.5	43939.403	1.220					
		5.5	44043.043	1.215					
		3.5	44119.995	1.185					
		1.5	44211.300	1.160					
		2.5	44449.166	1.065					
		3.5	44524.400	1.220					
		1.5	44532.860	1.420					
		3.5	44647.330	1.100					
		2.5	44865.633	1.30					
		4.5	45056.800	1.200					
		1.5	45066.733	0.970					
		3.5	45101.520	1.185					
		4.5	45138.514	1.210					
		2.5	45160.675	1.455					
		2.5	45210.538	1.180					
		3.5	45227.666	1.255					
		3.5	45331.709	1.060					
		3.5	45358.284	1.275					

- l'existence éventuelle d'un type de couplage privilégié. Ce dernier point dépend de l'ordre de grandeur des différentes interactions qui séparent les niveaux d'énergie et sera considéré dans les calculs des diverses configurations.

Au début de cette étude, seules les configurations $f^{10}s^2$ et f^9ds^2 étaient localisées et les spectres bien analysés les plus proches étaient ceux du gadolinium ($Z = 64$) et du thulium ($Z = 69$). Premier élément de la seconde demi-période, le gadolinium a un caractère particulier dû à la grande stabilité de $4f^7$ qui est ici le coeur $4f^{N-1}$. Cependant, en comparant les énergies des niveaux profonds pour les configurations ne différant entre elles que par le nombre d'électrons du coeur, comme l'avaient initialement proposé Shenstone pour les électrons d ³⁶⁾ et Racah pour les électrons f ³⁷⁾, on peut estimer empiriquement les positions des configurations inconnues avec une incertitude qui varie avec le type de configurations.

Brewer ³⁸⁾ a mis en évidence une analogie entre les propriétés thermochimiques des terres rares et les positions de leurs configurations ; les énergies qu'il propose se sont révélées correctes dans le dysprosium à 1400 cm^{-1} près. Spector ³⁹⁾ a identifié le premier niveau de $4f^9 6s^2 6p$ parmi les niveaux trouvés par Conway et Worden. Mais, pour les niveaux impairs de Dy I, quelques valeurs erronées ont égaré les interprétations : On a déjà signalé que le niveau $14\ 512$ proposé par Brewer comme fondamental de $f^{10} sp$ n'existe pas, cette configuration débutant à $15\ 567 \text{ cm}^{-1}$.

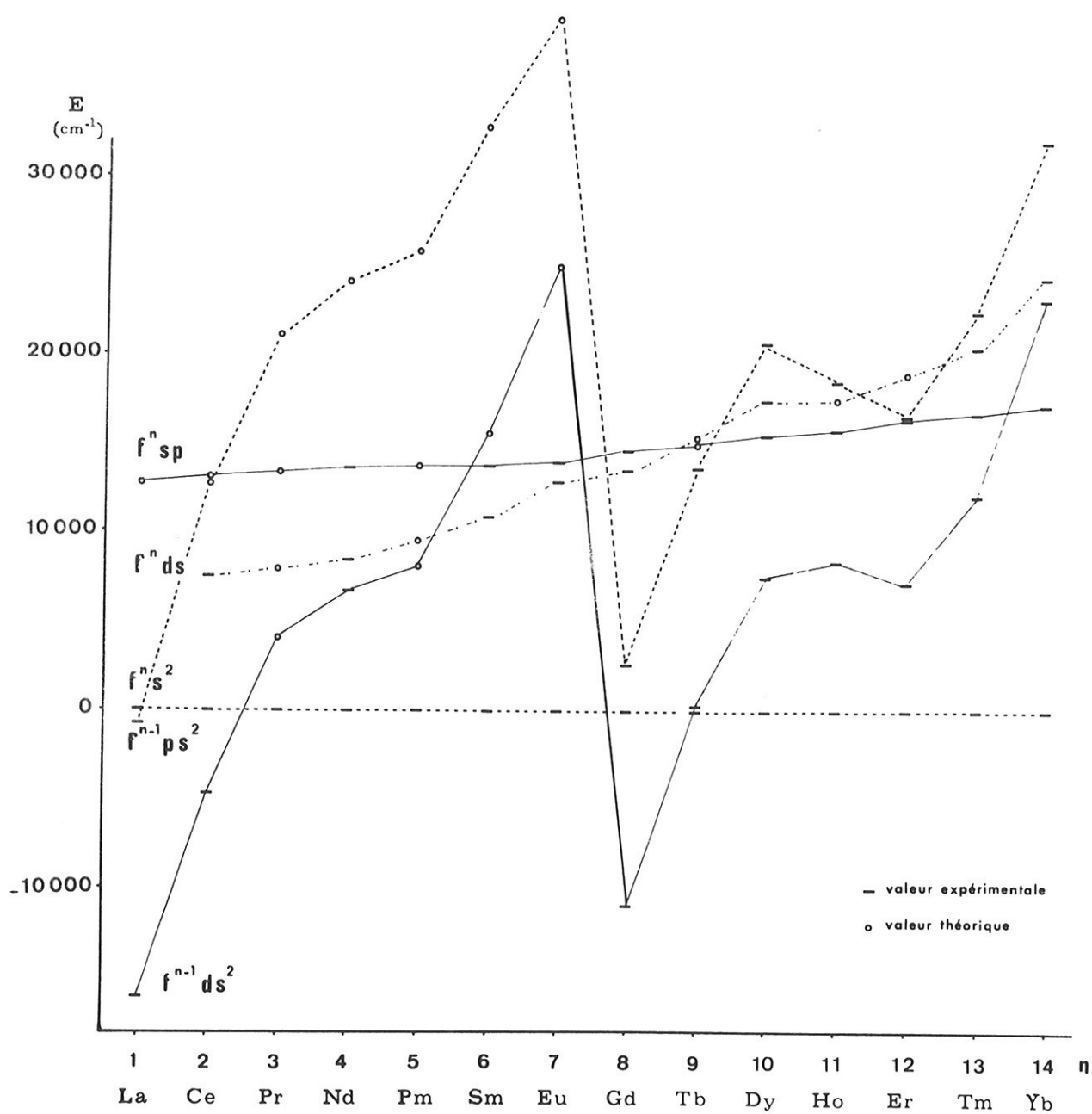


Fig. 3.I Ecart entre les niveaux profonds de cinq configurations des lanthanides neutres (par rapport à $4f^n 6s^2$).

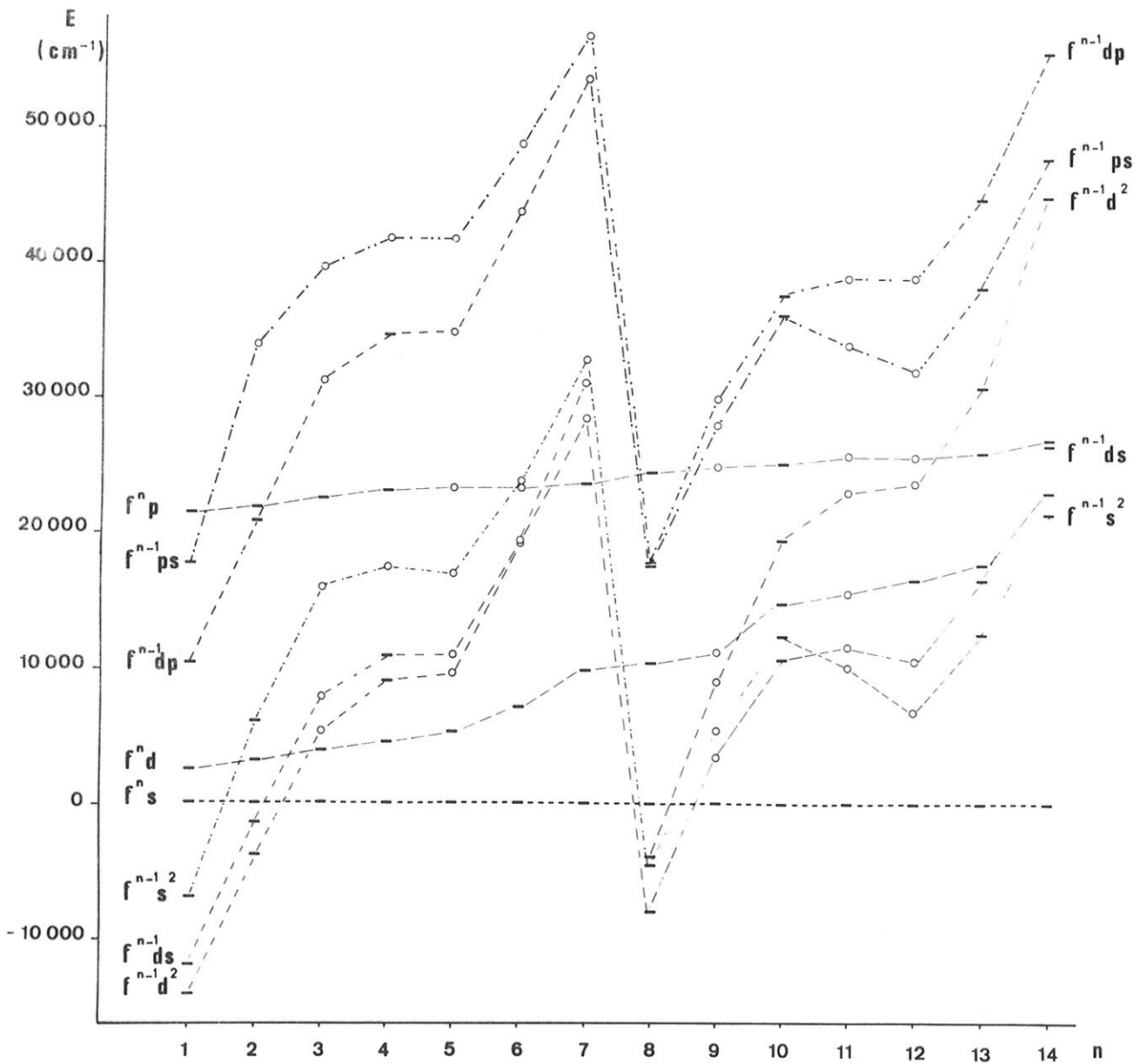


Fig. 3.II Ecart entre les niveaux profonds de huit configurations des lanthanides une fois ionisés (par rapport à $4f^n 6s$).

Les niveaux profonds de quelques configurations de Dy I et Dy II sont comparés dans les figures 3-I et 3-II aux configurations analogues des lanthanides.

3. Le coeur $4f^{10}$.

Le spectre de l'ion Dy^{2+} n'a pas encore été analysé et l'on ne dispose pas de résultats expérimentaux sur la configuration fondamentale $4f^{10}$ de Dy III. Cependant, la grande similitude des configurations $4f^N$ des spectres III et $4f^N 6s^2$ des spectres I n'a jamais été infirmée dans les lanthanides et, pour calculer les sous-configurations $4f^{10}({}^5I)_l$ ou $4f^{10}({}^5I)_{ll}$, dans l'approximation du "coeur réel", on a utilisé les énergies des cinq premiers niveaux de $4f^{10} 6s^2$. Les 107 niveaux de cette configuration ont été calculés à partir d'un jeu de paramètres de $4f^{10} 6s$ dans Dy II, qui est actuellement mieux connue. Sept niveaux ont été considérés pour optimiser les énergies calculées, mais les deux plus élevés sont perturbés par les configurations les plus proches :

3K_8 19019.15 ($g_{exp} = 1.145$, $g_c = 1.107$) n'est qu'à 116 cm^{-1} du niveau $4f^{10} 5d6s$ 18903.21₈ ($g_{exp} = 1.215$, $g_c = 1.269$) ;

3H_6 24062.88 ($g_{exp} = 1.217$, $g_c = 1.172$) est situé dans une région à forte densité de niveaux de $f^{10} ds$ et $f^9 ps^2$; la perturbation est due principalement à 24302.02₆ ($g_{exp} = 1.215$, $g_c = 1.202$) ce que confirment des déplacements isotopiques très voisins (voir tableau X). Le tableau III contient tous les niveaux de $4f^{10} 6s^2$, inférieurs à $40\,000 \text{ cm}^{-1}$, calculés avec le jeu de paramètres :

$$\begin{array}{llll}
 E_{av} = 17\,160 \text{ cm}^{-1} & E_1 = 5893.35 & E_2 = 25.48 & E_3 = 525.87 \\
 \alpha = 28. & \beta = 0 & \gamma = -73.7 & \zeta_{4f} = -1755.8
 \end{array}$$

TABLEAU III - NIVEAUX DE 4F10 6S2 DE DY I (0-40000 CM-1)

E0	EC	ΔE	GC	COMPOSANTE PRINCIPALE	
				L-S	%
J = 0					
	30850		0.000	3P2	88
	35426		0.000	5D	92
		
J = 1					
	18548		0.097	5F	83
	28460		1.051	3P2	55
	33711		1.142	5D	42
	36001		1.207	5D	54
		
J = 2					
	15246		1.854	5S	79
	17584		1.104	5F	72
	24017		0.871	5G	27
	25881		0.764	5G	50
	31034		0.806	3F2	29
	32350		1.375	3P2	45
	35053		1.370	5D	74
	38691		0.956	1D3	42
		
J = 3					
	17067		1.246	5F	92
	24073		0.935	5G	81
	28426		1.298	3D2	63
	30093		1.014	3G2	26
	33453		1.212	5D	55
	36194		1.102	3F2	34
		
J = 4					
10925.25	10914	11	0.619	5I	91
	15392		1.338	5F	93
	21812		1.131	5G	67
	25943		1.080	3F4	18
	29349		1.252	5D	36
	30949		1.032	5D	17
	33477		1.222	3F3	58
	35130		1.226	5D	30
	39313		0.889	3H2	63
		

EO	EC	ΔE	GC	COMPOSANTE PRINCIPALE	
				L-S	%
J = 5					
9211.58	9198	13	0.912	5I	93
	12900		1.364	5F	84
	20150		1.245	5G	56
	23568		1.166	5G	36
	31479		1.091	3H4	25
	33916		0.897	3I1	56
		
J = 6					
7050.61	7039	11	1.073	5I	96
	18586		1.315	5G	90
24062.88	24187	-124	1.172	3H4	44
	26057		0.872	3K2	74
	34292		1.028	3I1	64
	39600		1.084	H2	47
		
J = 7					
4134.23	4127	7	1.175	5I	97
	22811		1.012	3K2	65
	32887		0.936	3L	67
	33171		1.089	3I1	58
		
J = 8					
0	48	-48	1.243	5I	94
19019.15	18889	130	1.107	3K2	57
	29809		1.011	3L	70
	32000		0.979	1L2	54
	39473		0.940	3M	58
		
J = 9					
	25502		1.101	3L	90
	34226		1.021	3M	90
		
J = 10					
	30031		1.098	3M	98
		

Notons enfin que $4f^{10}6s^2$ s'étend sur $142\,400\text{ cm}^{-1}$ et que 41 niveaux sur 107 sont situés au-delà de la limite d'ionisation ($47\,800\text{ cm}^{-1}$). La pureté des niveaux dans le couplage de base L S est de 58 % (moyenne des carrés des plus fortes composantes pour les vecteurs propres normés à 1)

4. Le Coeur $4f^9$.

Le spectre de l'ion libre Dy^{2+} n'a pas encore été observé et les niveaux de sa configuration fondamentale $4f^9$ n'ont été déterminés que dans des matrices cristallines ou des ions complexes (40, 41). L'effet du champ cristallin rend imprécise la valeur de ces niveaux et, pour introduire les énergies des termes parents des configurations de Dy I et Dy II dans les calculs avec "coeur réel", il a semblé préférable de considérer les énergies théoriques des niveaux profonds de $4f^9$. L'étude des niveaux d'énergie de Tb III nous avait conduit à construire cette configuration que nous avons utilisée pour vérifier et préciser les résultats proposés précédemment. On a employé ici le jeu de paramètres obtenus en optimisant les énergies calculées au moyen de 16 niveaux de Dy^{3+} dans $LaCl_3$. Nos résultats sont en accord avec ceux de Crosswhite mais nous avons relevé dans la table VIII p. 4435 (référence 41) deux erreurs de transcription : les énergies calculées de ${}^6H_{9/2}$ et ${}^6F_{11/2}$ sont 7663 et 7637 cm^{-1} -et non l'inverse - et celle de ${}^6H_{7/2}$ est 9089 et non 9099 . On donne dans le tableau IV les énergies -jusqu'à $40\,000\text{ cm}^{-1}$ - des niveaux calculés de $4f^9$, mais l'extension totale de cette configuration est de $150\,200\text{ cm}^{-1}$. La pureté des 198 niveaux dans le couplage de base L S est de 46 %.

TABLEAU IV - NIVEAUX THEORIQUES DU COEUR
4F9 (0-40000 CM-1)

	EC	GC	COMPOSANTE PRINCIPALE	%
J = 1/2				
	13615	-0.599	6F	91
	31346	0.913	4D2	23
	36797	1.723	4P2	47
		
J = 3/2				
	13074	1.070	6F	90
	26797	1.608	4P	24
	30439	1.859	6P	56
	33383	0.533	4F3	60
	37248	0.637	4F2	68
	38504	1.430	4P2	25
		
J = 5/2				
	10111	0.310	6H	92
	12306	1.306	6F	93
	27003	1.717	6P	60
	29349	1.121	4F3	31
	31554	1.019	4D2	19
	34008	0.973	4F3	35
	35957	0.993	4G2	29
	38385	1.193	4P2	20
		
J = 7/2				
	9054	0.836	6H	93
	10910	1.383	6F	92
	25605	1.227	4F3	38
	28311	1.605	6P	76
	31307	1.057	4F3	18
	33405	1.309	4D3	23
	35404	1.002	4H1	20
	37002	0.826	4H1	30
		
J = 9/2				
	7629	1.074	6H	93
	8976	1.418	6F	88
	21021	1.289	4F3	46
	29441	0.755	4I3	74
	29849	1.157	4G4	23

EC	GC	COMPOSANTE PRINCIPALE	
			%
33812	1.095	4H1	22
35944	1.072	4G2	28
.....		
J = 11/2			
5769	1.208	6H	92
7602	1.438	6F	93
23255	1.259	4G4	46
27695	0.957	4I3	67
33550	1.124	4H1	50
34142	1.230	4G2	48
35746	0.811	4K1	73
.....		
J = 13/2			
3445	1.276	6H	96
25505	1.072	4I3	58
32688	1.174	4H1	42
32987	0.982	4K1	32
36311	0.888	4L	46
.....		
J = 15/2			
0	1.325	6H	94
21921	1.139	4I3	45
28540	0.955	4M	45
31062	1.028	4K1	46
36364	0.985	4L	58
38124	0.995	2L3	24
.....		
J = 17/2			
25592	1.105	4K1	41
30127	1.044	4M	62
34150	1.070	4L	67
.....		
J = 19/2			
26339	1.104	4M	52
31271	1.112	4L	51
.....		
J = 21/2			
25527	1.136	4M	93
.....		

5. Un exemple de classification : Les configurations $4f^{10}6s6p$, $4f^{10}6s7s$ et leurs transitions.

Il existe dans les spectres des lanthanides des régularités qui se sont dégagées peu à peu de l'étude des différents éléments et le comportement de certaines configurations électroniques, position relative des premiers niveaux et caractères des transitions, dépend assez peu de la structure de leur configuration parente f^N . Dans les spectres d'atomes neutres, les systèmes formés par les sous-configurations



où $S_1 L_1$ représente le terme fondamental de f^N , se reconnaissent grâce aux particularités suivantes :

A.- Les raies ultimes du spectre d'arc se classent dans le schéma $[S_1 L_1 J_1, (sp)^1 P_1 S_1 L] J \rightarrow [S_1 L_1 J_1, (s^2)^1 S_0] S_1 L_1 J_1$. Dans le cas de Dy I, on peut attendre que les raies les plus fortes se classent comme $[f^{10} 5I_8, (sp)^1 P_1] 9, 8, 7 \rightarrow f^{10} s^2 5I_8$, en l'absence de perturbations extérieures. La transition la plus intense du spectre à $4211 \overset{\circ}{\text{Å}}$ a une structure Zeeman de type "Shade Out" masquée par autoabsorption et les deux solutions ($g_8 = 1.24$, $g_9 = 1.22$) ou ($g_8 = 1.24$, $g_7 = 1.26$) sont également possibles. Nous avons choisi la première et plusieurs combinaisons avec des niveaux de $J = 10$ ont confirmé cette interprétation.

B.- L'évolution très régulière de la position relative à $f^N s^2$ des premiers niveaux de $f^N sp$ et $f^N 6s7s$ nous a conduit à rechercher $f^{10} sp$ et $f^{10} ss$ respectivement à partir de $15\ 000$ et $30\ 000\ \text{cm}^{-1}$.

C.- Les raies classées comme transitions $7s \rightarrow 6p$ ont, dans tous les spectres des lanthanides un aspect diffus. King a mesuré les intensités I_a , I_e , I_f de 1300 raies émises par le dysprosium entre 6000 et 9000 Å, dans trois types de sources : arc, étincelle et four. Or il existe une relation d'ordre entre I_a , I_e et I_f , qui est liée à la classification : Les raies telles que $I_f > I_a$ et $I_e = 0$, impliquent des niveaux profonds ; si $I_a \ll I_f$ et $I_e \neq 0$ les raies appartiennent à Dy II ; enfin, si $I_f < I_a$ et $I_e = 0$, les raies ont en général l'aspect diffus évoqué précédemment. Les transitions du système $f^{10}6s7s - f^{10}6s6p$ ont été reconnues à l'aide de ces deux critères.

D.- Il existe dans les configurations $f^N sp$ et $f^N ss'$, lorsque le terme fondamental de f^N possède une grande structure fine, en particulier pour $10 < N < 13$, une relation d'ordre assez nette entre les différentes interactions :

$$\Lambda(4f) > Q(6s, 6p) > \Lambda(6p) > Q(4f, 6p)$$

$$\Lambda(4f) > Q(6s, 7s) > Q(4f, ns)$$

et la meilleure approximation du couplage réel est alors représentée par le schéma $\langle (f^N \alpha_1 S_1 L_1) J_1, (6s n\ell) S_2 L_2 J_2 \rangle J$. (figures 4 et 5) On constate effectivement que les règles de sélection du couplage $J_1 - J_2$ sont bien respectées : $\Delta J_1 = 0$, $\Delta S_2 = 0$, dans les transitions entre $f^{10} sp$ et $f^{10} ss'$. Par contre, l'interaction $Q(4f, 6p)$ mélange suffisamment les termes de $f^{10} sp$ pour que la règle de sélection $\Delta S_2 = 0$ soit violée dans les transitions $f^{10}(sp)^3P \rightarrow f^{10}(s^2)^1S_0$.

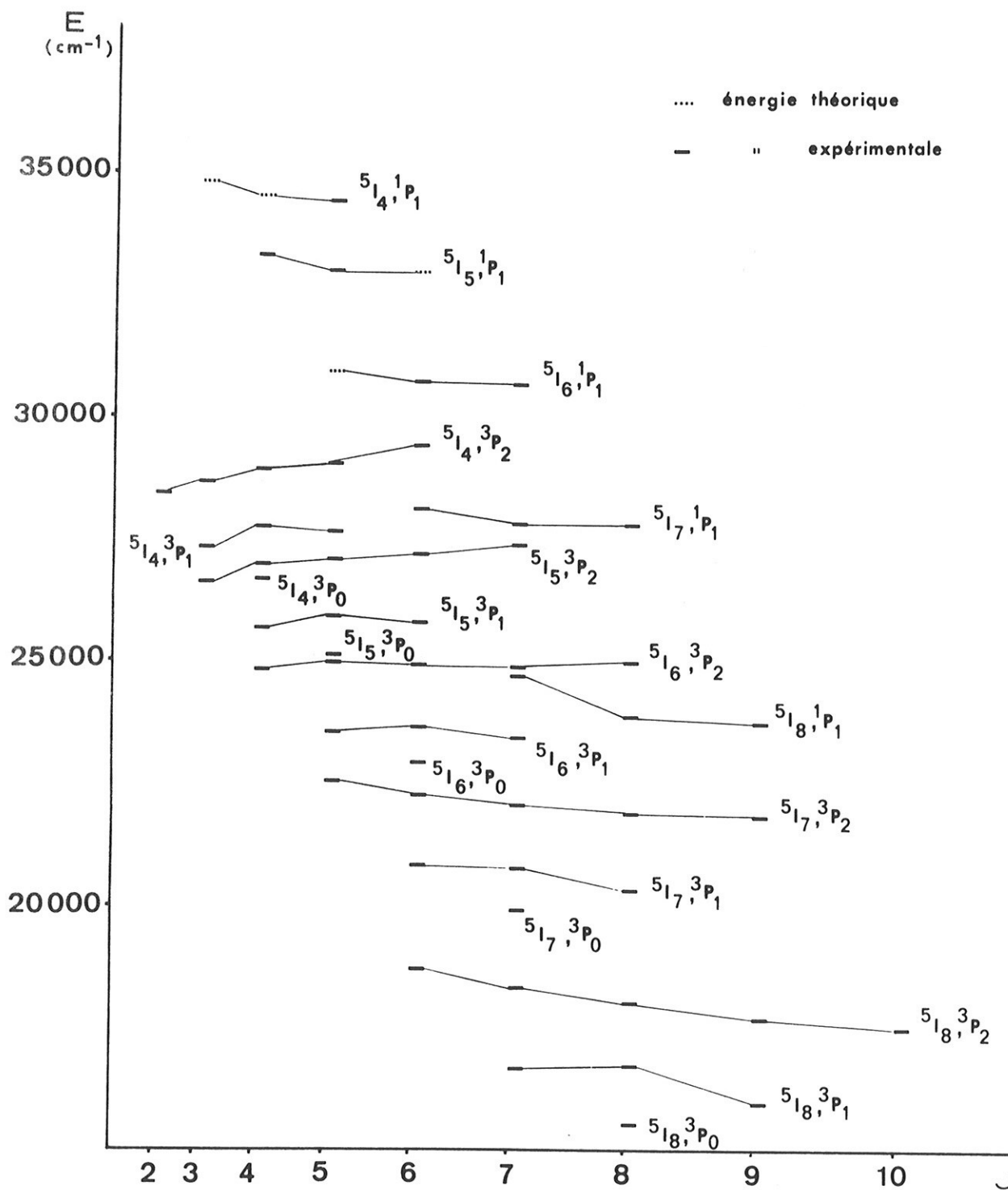


Fig. 4 : Sous-configuration $4f^{10}(5l)6s6p$. Les niveaux sont groupés en termes J_1, J_2 .

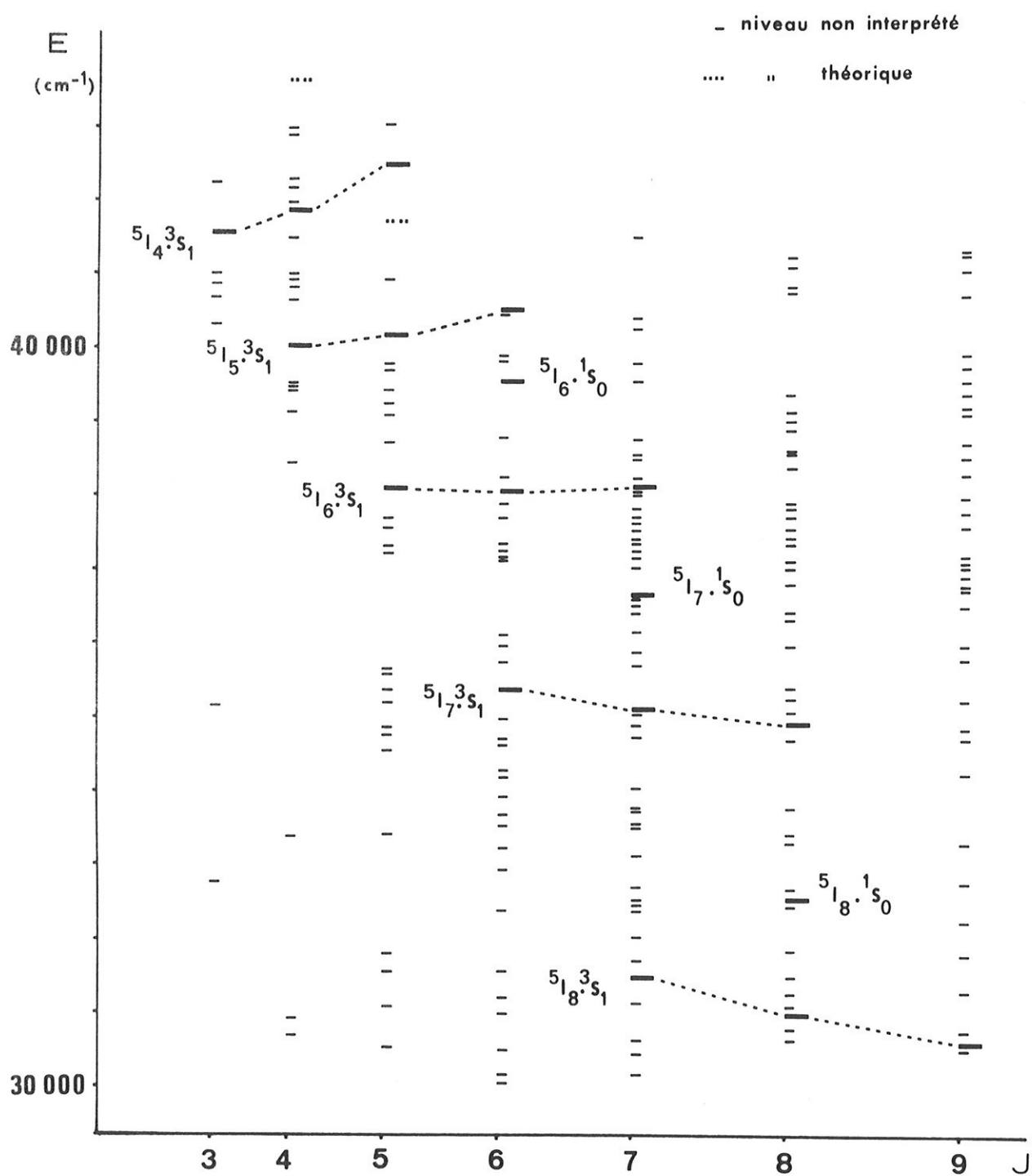


Fig. 5 : Sous-configuration $4f^{10}(^5I)6s7s$. Les niveaux sont groupés en termes $J_1.J_2$.

Pour mettre en évidence les régularités dans la position des raies et l'évolution des intensités lorsque J décroît et que l'énergie des niveaux augmente, toutes les transitions du système $4f^{10}(^5I)6s7s \rightarrow 4f^{10}(^5I)6s6p$ ont été groupées dans un tableau selon les valeurs de J_1 de J_2 et de J . On trouve dans les colonnes successives du tableau V le nom et l'énergie des deux niveaux, la classe et les intensités I_a et I_f de King, enfin le nombre d'onde.

Le tableau V B contient les 21 transitions qui présentent un caractère $(6s7s) ^1S_0 - (6s6p) ^1P_1$. L'interaction $Q(6s, 6p)$ qui sépare les termes construits sur 3P et 1P des configurations $f^N sp$ étant plus forte que $Q(6s, 7s)$, les transitions de singulet ont une fréquence inférieure aux transitions de triplet. Nous les avons trouvées entre 7800 et 9200 cm^{-1} , région où la structure Zeeman des raies n'a pas été observée. Le facteur de Landé des niveaux 36667.77 ($^5I_7, ^1S_0$) et 39545.900 ($^5I_6, ^1S_0$) dont les transitions respectent les règles de sélection du couplage $J_1 j_2$, n'a pas été mesuré. La comparaison des intensités (normées à 10 000 sur la plus forte raie infrarouge) montre qu'il existe d'importants mélanges de configurations dans les deux parités.

La décroissance rapide des intensités émises par les niveaux au-delà de 40 000 cm^{-1} , rend impossible la détermination de nouveaux niveaux de $4f^{10}6s7s$, dans l'état actuel de nos données expérimentales.

TABLEAU V

Système de transitions $4f^{10}(^5I)6s6p - 4f^{10}(^5I)6s7s$ A - transitions $(sp)^3P - (ss)^3S$

f^{10}_{sp} $(J_1, J_2)J$	f^{10}_{ss} $(J'_1, J'_2)J'$	Niveaux	Cl	Ia	If	σ (cm^{-1})
(8,2)10 - (8,1)9		17 513 - 30 560	I	?	400	13 047.22
(7,2)9 - (7,1)8		21 838 - 34 922	II	800	600	13 083.53
(6,2)8 - (6,1)7		24 999 - 38 123	III	100	15	13 123.71
(5,2)7 - (5,1)6		27 427 - 40 520	III	40	4	13 093.42
(4,2)6 - (4,1)5		29 447 - 42 490	-	-	-	13 043.42
(8,2)9 - (8,1)8		17 727 - 30 979	II	2 000	1 000	13 252.40
(7,2)8 - (7,1)7		21 899 - 35 135	III	300	100	13 236.13
(6,2)7 - (6,1)6		24 906 - 38 070	III	60	15	13 163.18
(5,2)6 - (5,1)5		27 199 - 40 213	IV	8	2	13 014.02
(4,2)5 - (4,1)4		29 054 - 41 859	VE	8	-	12 805.08
(8,2)8 - (8,1)7		18 021 - 31 509	II	400	300	13 487.25
(7,2)7 - (7,1)6		22 061 - 35 421	III	100	30	13 359.90
(6,2)6 - (6,1)5		24 931 - 38 093	IV	4	1	13 162.22
(5,2)5 - (5,1)4		27 109 - 40 023	V	2	-	12 913.15
(4,2)4 - (4,1)3		28 923 - 41 492	-	-	-	12 569.35
(8,1)9 - (8,1)9		15 972 - 30 560	II	1 500	400	14 588.20
(7,1)8 - (7,1)8		20 341 - 34 922	III	300	80	14 580.77
(6,1)7 - (6,1)7		23 479 - 38 123	III	30	6	14 643.53
(5,1)6 - (5,1)6		25 825 - 40 520	IV	6	1	14 694.64
(4,1)5 - (4,1)5		27 685 - 42 490	V	1	-	14 804.63

(8,0)8 - (8,1)9	15 567 - 30 560	II	1 200	800	14 993.18
(7,0)7 - (7,1)8	19 907 - 34 922	III	300	40	15 014.57
(6,0)6 - (6,1)7	22 956 - 38 123	IV	15	2	15 166.45
(5,0)5 - (5,1)6	25 127 - 40 520	-	-	-	15 392.93
(4,0)4 - (4,1)5	26 662 - 42 490	-	-	-	-
(8,0)8 - (8,1)7	15 567 - 31 509	III	20	3	15 941.75
(7,0)7 - (7,1)6	19 907 - 35 421	IV	10	2	15 513.67
(6,0)6 - (6,1)5	22 956 - 38 093	V	10	-	15 137.01
(5,0)5 - (5,1)4	25 127 - 40 023	IV	4	1	14 895.54
(4,0)4 - (4,1)3	26 662 - 41 492	V	4	-	14 830.02
(8,1)8 - (8,1)9	16 733 - 30 560	II	600	400	13 827.36
(7,1)7 - (7,1)8	20 766 - 34 922	III	80	40	14 155.80
(6,1)6 - (6,1)7	23 687 - 38 123	III	10	3	14 435.42
(5,1)5 - (5,1)6	25 912 - 40 520	III	8	2	14 607.85
(4,1)4 - (4,1)5	27 751 - 42 490	-	-	-	14 739.02
(8,1)9 - (8,1)8	15 972 - 30 979	III	300	150	15 007.18
(7,1)8 - (7,1)7	20 341 - 35 135	III	60	20	14 794.02
(6,1)7 - (6,1)6	23 479 - 38 070	III	20	4	14 590.27
(5,1)6 - (5,1)5	25 825 - 40 213	IV	6	1	14 387.37
(4,1)5 - (4,1)4	27 685 - 41 859	-	-	-	14 173.56
(8,2)8 - (8,1)9	18 021 - 30 560	III	80	50	12 538.67
(7,2)7 - (7,1)8	22 061 - 34 922	III	10	5	12 860.80
(6,2)6 - (6,1)7	24 931 - 38 123	III	5	1	13 191.67
(5,2)5 - (5,1)6	27 109 - 40 520	-	-	-	13 410.56
(4,2)4 - (4,1)5	28 923 - 42 490	V	2	-	13 567.42
(8,2)8 - (8,1)8	18 021 - 30 979	II	500	300	12 957.65
(7,2)7 - (7,1)7	22 061 - 35 135	III	80	40	13 074.05
(6,2)6 - (6,1)6	24 931 - 38 070	III	30	6	13 138.41
(5,2)5 - (5,1)5	27 109 - 40 213	III	15	2	13 103.28
(4,2)4 - (4,1)4	28 923 - 41 859	V	5	-	12 936.39

(8,0)8 - (8,1)8	15 567 - 30 979	III	800	50	15 412.15
(7,0)7 - (7,1)7	19 907 - 35 135	IV	150	10	15 227.82
(6,0)6 - (6,1)6	22 956 - 38 070	V	20	-	15 113.19
(5,0)5 - (5,1)5	25 127 - 40 213	V	2	-	15 085.68
(4,0)4 - (4,1)4	26 662 - 41 859	-	-	-	15 197.01
(8,2)9 - (8,1)9	17 727 - 30 560	II	500	300	12 833.41
(7,2)8 - (7,1)8	21 899 - 34 922	III	40	40	13 022.87
(6,2)7 - (6,1)7	24 906 - 38 123	III	10	2	13 216.43
(5,2)6 - (5,1)6	27 199 - 40 520	V	5	0	13 321.29
(4,2)5 - (4,1)5	29 054 - 42 490	V	3	-	13 436.14
(8,1)8 - (8,1)8	16 733 - 30 979	II	400	200	14 246.33
(7,1)7 - (7,1)7	20 766 - 35 135	III	10	6	14 369.05
(6,1)6 - (6,1)6	23 687 - 38 070	-	-	-	-
(5,1)5 - (5,1)5	25 912 - 40 213	-	-	-	14 300.58
(4,1)4 - (4,1)4	27 751 - 41 859	IV	2	1	14 107.96
(8,1)8 - (8,1)7	16 733 - 31 509	II	600	300	14 775.93
(7,1)7 - (7,1)6	20 766 - 35 421	III	200	40	14 654.89
(6,1)6 - (6,1)5	23 687 - 38 093	III	6	3	14 405.98
(5,1)5 - (5,1)4	25 912 - 40 023	IV	10	1	14 110.44
(4,1)4 - (4,1)3	27 751 - 41 492	V	1	-	13 740.96
(8,2)6 - (8,1)7	18 711 - 31 509	II	1 000	300	12 797.21
(7,2)5 - (7,1)6	22 294 - 35 421	III	50	15	13 126.27
(6,2)4 - (6,1)5	24 841 - 38 093		-	-	13 252.89
(5,2)3 - (5,1)4	26 607 - 40 023	III	3	2	13 415.88
(4,2)2 - (4,1)3	28 407 - 41 492	IV	4	1	13 085.40
(8,1)7 - (8,1)8	16 693 - 30 979	II	1 500	800	14 285.66
(7,1)6 - (7,1)7	20 817 - 35 135	III	150	60	14 317.70
(6,1)5 - (6,1)6	23 552 - 38 070	III	15	4	14 517.37
(5,1)4 - (5,1)5	25 687 - 40 213	IV	3	1	14 525.99
(4,1)3 - (4,1)4	27 321 - 41 859	-	-	-	14 538.21

(8,1)7 - (8,1)7	16 693 - 31 509	II	300	100	14 815.27
(7,1)6 - (7,1)6	20 817 - 35 421	III	40	20	14 603.55
(6,1)5 - (6,1)5	23 552 - 38 093	III	10	2	14 541.18
(5,1)4 - (5,1)4	25 687 - 40 023	IV	10	2	14 335.85
(4,1)3 - (4,1)3	27 321 - 41 492	V	3	-	14 171.15
{(8,2)7 - (8,1)8	{18 339 - 30 979	II	300	150	12 639.73
{(8,2)7 - (8,1)8	{18 433 - 30 979	III	125	80	12 545.76
(7,2)6 - (7,1)7	22 286 - 35 135	III	100	40	12 848.46
(6,2)5 - (6,1)6	24 993 - 38 070	III	15	3	13 076.57
(5,2)4 - (5,1)5	26 998 - 40 213	spII	-	-	13 214.92
(4,2)3 - (4,1)4	28 694 - 41 859	V E	4	-	13 164.93
{(8,2)7 - (8,1)7	{18 339 - 31 509	II	300	200	13 169.34
{(8,2)7 - (8,1)7	{18 433 - 31 509	II	150	150	13 075.36
(7,2)6 - (7,1)6	22 286 - 35 421	III	150	60	13 134.30
(6,2)5 - (6,1)5	24 993 - 38 093	III	25	4	13 100.37
(5,2)4 - (5,1)4	26 998 - 40 022	-	-	-	13 024.77
(4,2)3 - (4,1)3	28 694 - 41 492	-	-	-	12 797.91

B - transitions $(sp)^1P - (ss)^1S$

f^{10}_{sp}	f^{10}_{ss}	Niveaux	I	σ (cm^{-1})
$(J_1, J_2)_J$	$(J'_1, J'_2)_{J'}$			
(8,1)9	-(8,0)8	{ 23 736 - 32 554	1 753	8 818.249
-	-		1 177	8 938.924
(7,1)8	-(7,0)7	{ 27 817 - 36 608	146	8 790.296
-	-		200	8 849.784
-	-		79	8 756.867
-	-		150	8 816.344
(6,1)7	-(6,0)6	30 711 - 39 545	98	8 834.185
(5,1)6	-(5,0)5	-		
(4,1)5	-(4,0)4	-		
(8,1)8	-(8,0)8	{ 23 832 - 32 554	502	8 722.800
-	-		443	8 843.473
-	-		1 175	8 677.121
-	-		597	8 797.794
(7,1)7	-(7,0)7	{ 27 834 - 36 608	146	8 790.296
-	-		194	8 832.844
-	-		67	8 623.787
-	-		110	8 683.275
(6,1)6	-(6,0)6	{ 30 426 - 39 545	37	9 119.309
-	-		54	8 766.941
(5,1)5	-(5,0)5	-		
(4,1)4	-(4,0)4	-		
(8,1)7	-(8,0)8	{ 24 708 - 32 554	1 146	7 845.889
-	-		824	7 966.563
(7,1)6	-(7,0)7	{ 28 119 - 36 608	212	8 488.373
-	-		854	8 547.859
(6,1)5	-(6,0)6	- 39 545		
(5,1)4	-(5,0)5	-		
(4,1)3	-(4,0)4	-		

Etude de la configuration $4f^{10} 6s6p$.

Griffin, Ross, et Cowan ont proposé une interprétation de 31 niveaux impairs dont les déplacements isotopiques (160 - 164) par rapport au niveau fondamental varient entre 0 et -70.5 mK, au moyen d'un calcul de la sous-configuration $f^{10}(^5I + ^3K_{12} + ^3H_{1234}) sp^{34}$.

Les résultats obtenus sont apparemment corrects ($\langle \overline{\Delta E} \rangle = 103 \text{ cm}^{-1}$) bien que le paramètre $G_3(4f, 6s)$ n'ait pas pu varier librement. Toutefois, ce calcul s'est révélé déficient pour prévoir les énergies des niveaux manquants : J'ai trouvé $(^5I_8, ^3P_2)_6$ à plus de 500 cm^{-1} de la valeur calculée. Plusieurs facteurs sont à l'origine de ces déviations : Quelques niveaux introduits dans le processus d'optimisation ont été infirmés au cours de cette étude. D'autre part, les niveaux correspondant aux raies à faible déplacement isotopique sont fortement perturbés par $f^9 ds^2$ et $f^9 d^2 s$ et les paramètres internes de $f^{10} sp$, en rendant compte d'effets dus à l'interaction de configurations, convergent vers des valeurs incorrectes ; l'influence des termes élevés de $f^{10} sp$ sur la sous-configuration $f^{10}(^5I)6s6p$ semble moins importante que celle de $4f^9(^6H, ^6F) ds^2$ située dans le même domaine d'énergie.

Le nouveau calcul que nous avons effectué sur la base $f^{10}(^5I)sp$ a été conduit de la façon suivante, dans l'approximation du coeur réel ;

1) Introduction dans les optimisations de niveaux reconnus assez purs, au vu de leur déplacement isotopique et fixation simultanée des paramètres les moins bien définis.

2) Recherche des niveaux d'énergie manquants : Les moins perturbés sont trouvés à moins de 150 cm^{-1} de la valeur calculée.

3) Introduction dans la dernière optimisation des cinquante niveaux tels que $|E_o - E_c| < 120 \text{ cm}^{-1}$. Six niveaux exclus par cette condition figurent entre parenthèses dans la présentation des résultats. Il ne manque enfin que quatre niveaux pour compléter cette sous-configuration. Les paramètres de la dernière diagonalisation, suivis de l'écart-type dans les moindres-carrés suivants, sont donnés dans le tableau IV.

On trouve successivement, dans les colonnes du tableau V, l'énergie observée E_o , l'énergie calculée E_c , l'écart $\Delta E = E_o - E_c$, les facteurs de Landé observés et calculés, g_o et g_c , et la première composante de la fonction d'onde (carré de l'amplitude, vecteur normé à 100) en couplage $J_1 - J_2$.

Etude de la configuration $4f^{10}6s7s$.

Cette configuration a été calculée sans troncature dans le schéma de couplage $\langle (f^{10} (\alpha_1 S_1 L_1), (6s7s) S_2 L_2) S, L, J \rangle$. Un changement de base a été effectué pour obtenir la composition des vecteurs propres sur des états de base $J_1 - J_2$. Les dix-huit niveaux observés ont pratiquement la même dépendance angulaire vis-à-vis de E_2 et E_3 . De même, les deux paramètres d'échange $G_3(4f, 6s)$ et $G_3(4f, 7s)$ sont corrélés et dans la dernière optimisation E_2 , E_3 et $G_3(4f, 7s)$ ont été fixés. Les cinq autres paramètres sont bien définis (Tableau VI). Le bon accord entre les énergies calculées et observées (Tableau VII) ne s'étend pas aux fonctions d'onde : Aucun des niveaux de $4f^{10}6s7s$ ne se trouve à plus de 500 cm^{-1} d'autres niveaux de même J (figure 5) et les facteurs de Landé témoignent localement de mélanges importants, surtout pour les petites valeurs de J .

Tableau VI - Paramètres radiaux de la sous-configuration $4f^{10} ({}^5I) 6s6p$.

Paramètres	Valeur (en cm^{-1})	Ecart -type
E_0	21995.4	35
$F_2 (4f, 6p)$	41.0	4
$G_2 (4f, 6p)$	6.14	0.6
$G_4 (4f, 6p)$	7.40	1.1
$G_3 (4f, 6s)$	124.9	20
$G_1 (6s, 6p)$	3186.4	10
ζ_{6p}	1365.2	12
ζ_{4f}	coeur réel $4f^{10} 6s^2 {}^5I$	
N = 49 niveaux $\overline{\langle \Delta E \rangle} = 41 \text{ cm}^{-1}$		

Paramètres	Valeur (en cm^{-1})	Ecart -type
E_0	51675	51
E_1	5793	97
E_2	32.6	
E_3	584.7	
$G_3 (4f, 6s)$	192	7
$G_3 (4f, 7s)$	30.8	
$G_0 (6s, 7s)$	763	15
ζ_{4f}	1765.8	6
N = 18 niveaux $\overline{\langle \Delta E \rangle} = 40 \text{ cm}^{-1}$		

Tableau VIII - Paramètres radiaux de la configuration $4f^{10} 6s7s$.

TABLEAU VII - NIVEAUX DE 4F10 6S 6P

E0	EC	ΔE	G0	GC	COMPOSANTE PRINCIPALE J1, J2	%
J = 2						
28407.01	28406	1	0.060	0.000	4,3P2	100
.....						
J = 3						
26607.16	26626	-18	0.575	0.443	5,3P2	54
27321.26	27363	-41	0.580	0.520	4,3P1	50
28694.51	28668	26	0.550	0.539	4,3P2	85
	34831			0.498	4,1P1	99
.....						
J = 4						
24841.04	24872	-30	0.900	0.869	6,3P2	58
25687.20	25742	-54	0.945	0.812	5,3P1	48
26662.41	26668	-5	0.590	0.474	4,3P0	60
26998.27	27006	-7	0.865	0.855	5,3P2	81
27751.46	27702	49	0.810	0.728	4,3P1	49
28923.05	28907	16	0.785	0.763	4,3P2	81
33324.06 *	33119	205	0.890	0.873	5,1P1	98
	34568			0.626	4,1P1	98
.....						
J = 5						
22524.21	22451	73	1.040	1.079	7,3P2	82
23552.65	23586	-33	1.070	1.009	6,3P1	73
24993.47	24978	15	1.030	1.032	6,3P2	78
25127.51	25138	-10	1.045	0.843	5,3P0	80
25912.63	25875	37	0.980	0.972	5,3P1	71
27109.93	27108	1	1.010	0.985	5,3P2	84

EU	EC	ΔE	GO	GC	COMPOSANTE PRINCIPALE	
					J1, J2	%
27685.87	27648	37	0.770	0.748	4,3P1	88
29054.36	29102	-47	0.840	0.831	4,3P2	91
	30972			1.079	6,1P1	98
33025.64 *	32869	156	1.010	0.910	5,1P1	98
34470.70 *	34741	-270	0.915	0.679	4,1P1	98
		
J = 6						
18711.92	18743	-31	1.172	1.184	8,3P2	96
20817.61	20723	94	1.130	1.148	7,3P1	90
22286.87	22293	-6	1.150	1.155	7,3P2	92
22956.84	22988	-31	1.055	1.075	6,3P0	93
23687.87	23626	61	1.076	1.076	6,3P1	91
24931.62	24930	1	1.128	1.115	6,3P2	90
25825.83	25809	16	1.000	0.984	5,3P1	91
27199.20	27205	-5	1.160	1.024	5,3P2	91
28119.94	28076	43	1.198	1.201	7,1P1	98
29447.11	29444	3	0.895	0.882	4,3P2	96
30778.96	30708	70	1.170	1.074	6,1P1	98
	33014			0.916	5,1P1	98
		
J = 7						
16693.87	16695	-1	1.222	1.239	8,3P1	95
18339.80	18389	-49	1.210	1.218	8,3P2	96
19907.50	19939	-31	1.230	1.240	7,3P0	87
20766.29	20736	30	1.160	1.143	7,3P1	85
22061.29	22072	-10	1.180	1.188	7,3P2	93
23479.77	23470	9	1.130	1.133	6,3P1	94

EU	EC	ΔE	GO	GC	COMPOSANTE PRINCIPALE J1, J2	%
24708.96 *	23964	744	1.260	1.280	8,1P1	97
24906.86	24898	8	1.140	1.140	6,3P2	93
27427.08	27431	-3	1.080	1.056	5,3P2	96
27834.93	27784	50	1.210	1.177	7,1P1	98
30711.70 *	30846	-134	1.090	1.061	6,1P1	98
		
J = 8						
15567.36	15628	-60	1.318	1.330	8,3P0	78
16733.20	16678	55	1.200	1.210	8,3P1	71
18021.88	18043	-21	1.230	1.232	8,3P2	92
20341.32	20341	0	1.230	1.234	7,3P1	94
21899.22	21894	5	1.200	1.213	7,3P2	94
23877.75 *	23635	242	1.290	1.247	8,1P1	98
24999.58	24983	16	1.190	1.169	6,3P2	97
27817.99	27927	-109	1.210	1.157	7,1P1	98
		
J = 9						
15972.35	15984	-11	1.290	1.302	8,3P1	92
17727.15	17723	4	1.250	1.262	8,3P2	92
21838.55	21800	38	1.250	1.247	7,3P2	99
23736.60	23795	-58	1.222	1.223	8,1P1	98
		
J = 10						
17513.34	17432	81	1.300	1.300	8,3P2	100
		

TABLEAU IX - NIVEAUX DE 4F10 6S 7S (30560 - 42500 CM-1)

EU	EC	ΔE	G0	GC	COMPOSANTE PRINCIPALE J1, J2 %	
J = 3						
41492.41	41527	-34	0.435	0.275	4,3S1	99
.....						
J = 4						
40023.04	40041	-17	0.815	0.715	5,3S1	96
41859.44	41812	47	0.805	0.667	4,3S1	92
	43612			0.622	4,1S0	93
.....						
J = 5						
38093.85	38103	-9	1.085	0.936	6,3S1	96
40213.21	40193	20	0.968	0.948	5,3S1	92
	41704			0.901	5,1S0	80
42490.50	42482	8	1.000	0.889	4,3S1	81
.....						
J = 6						
35421.17	35397	24	1.095	1.066	7,3S1	97
38070.03	38083	-12	1.110	1.099	6,3S1	95
39545.90	39499	46		1.073	6,1S0	84
40520.48	40560	-39	1.185	1.079	5,3S1	83
.....						
J = 7						
31509.12	31463	46	1.180	1.150	8,3S1	99
35135.33	35143	-7	1.205	1.190	7,3S1	96
36667.77	36642	25		1.179	7,1S0	91
38123.29	38142	-18	1.205	1.195	6,3S1	91
.....						

EU	EC	ΔE	GO	GC	COMPOSANTE PRINCIPALE	
					J1, J2	%
J = 8						
30979.53	30930	49	1.260	1.253	8,351	92
32554.86	32624	-69	1.270	1.244	8,150	91
34922.08	34953	-30	1.270	1.274	7,351	97
J = 9						
		
30560.56	30586	-25	1.320	1.326	8,351	99
		

Limite d'ionisation de Dy I.

La configuration $4f^{10}6s8s$ a été recherchée, sans résultat, autour de $39\ 000\ \text{cm}^{-1}$; et dans ces conditions la méthode empirique de Reader et Sugar permet néanmoins d'obtenir une bonne approximation de la limite d'ionisation ⁴²) : On suppose, comme eux, que la variation du défaut quantique est $\Delta n_a = 1.031$ et que l'écart ΔT ($6s7s$, $6s8s$) des centres de gravité des sous-configurations $f^{10}(^5I_8)6s7s$ et $f^{10}(^5I_8)6s8s$ vaut $8\ 300\ \text{cm}^{-1}$. Mais on connaît maintenant l'énergie ($30\ 560\ \text{cm}^{-1}$) du niveau extrême $f^{10}(^5I_8)6s7s(^3S_1)^7I_9$, et les paramètres optimisés pour calculer le centre de gravité du groupe de niveaux $f^{10}(^5I_8)6s7s$. Du fait du comportement très régulier des configurations f^N6s7s , les valeurs interpolées par Reader et Sugar étaient déjà proches de ce que nous obtenons

$$\text{UCG}(6s7s) = 30\ 560 + 2(G_3 + G'_3) + \frac{1}{2} G_0 = 31\ 387\ \text{cm}^{-1}$$

(au lieu de $31\ 450$). La suite du calcul se trouve dans la référence 42 et, au moyen d'une correction de limite de $426\ \text{cm}^{-1}$, à retrancher du centre de gravité de $f^{10}(^5I)6s$, on obtient l'écart entre les niveaux fondamentaux des deux spectres : $47\ 806\ \text{cm}^{-1}$.

6. Déplacement isotopique des niveaux de Dy I.

La dispersion en fréquence des raies émises par les différents isotopes d'un même élément a deux causes distinctes :

- la différence de masse des noyaux, responsable de l'effet de masse ;
- la répartition différente des charges nucléaires, qui produit l'effet de volume.

Pour un élément lourd comme le dysprosium, la contribution des deux effets -effet normal et effet spécifique- qui participent au déplacement de masse est nettement inférieure à celle du déplacement de volume. Les expérimentateurs ont remarqué de longue date que, pour les éléments lourds, les niveaux d'une même configuration présentent des déplacements très voisins. En fait, dans les spectres complexes, les déplacements mesurés ne se regroupent pas autour de valeurs caractéristiques car les niveaux ne s'interprètent correctement que sur la base d'un ensemble de configurations. Une règle de partage, proposée par divers auteurs ^{43, 44}), rend compte de ces effets d'interaction : Si deux niveaux N_A et N_B appartenant aux configurations A et B dont les déplacements isotopiques sont T_A et T_B se perturbent mutuellement, leurs déplacements isotopiques δT_{N_A} et δT_{N_B} vérifient la relation

$$\delta T_{N_A} + \delta T_{N_B} \simeq T_A + T_B$$

ou, plus généralement, le déplacement isotopique d'un niveau admettant la fonction d'onde $\Psi = \alpha \Psi_A + \beta \Psi_B + \gamma \Psi_C + \dots$ (avec $\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 + \dots = 1$) peut s'écrire $\delta T = \alpha^2 T_A + \beta^2 T_B + \gamma^2 T_C + \dots$

Dans une étude théorique détaillée de l'effet isotopique, Bauche a montré que cette règle est vérifiée par une grande partie des effets de volume et de masse ⁴⁵). Sa validité a été constatée récemment dans les lanthanides sur le samarium ⁴⁶) et le cérium ⁴⁷). C'est donc pour son application à la classification que nous avons entrepris la mesure de déplacements isotopiques.

L'analyse du spectre d'émission de ^{162}Dy entre 4 000 et 12 500 cm^{-1} a montré que la plupart des raies infrarouges résultent de transitions entre des niveaux pairs élevés et des niveaux impairs profonds, certains des niveaux impliqués classant plus de 20 raies dans ce domaine. L'interprétation des niveaux impairs avait déjà commencé avec le calcul des configurations $f^9 d^2 + f^{10} sp$ et certains niveaux de $f^9 d^2 s$ avaient été reconnus, mais la situation apparaissait plus confuse parmi les niveaux pairs par manque de données sur leur effet isotopique. Pour y remédier, nous avons tenté d'évaluer les déplacements isotopiques des niveaux de l'atome par une méthode simple mettant à profit la haute précision des nombres d'ondes calculés dans l'infrarouge par spectrométrie de Fourier à haute résolution et le grand nombre de raies utilisables. C'est pourquoi J. Vergès a enregistré le spectre de l'isotope ^{164}Dy . La classification faisant apparaître que certains groupes de n_1 niveaux pairs A_i et n_2 niveaux impairs B_j classaient un nombre N de transitions nettement supérieures à $n_1 + n_2$, nous avons choisi de déterminer les déplacements des niveaux en résolvant par la méthode des moindres carrés les systèmes d'équations

$$\Delta(A_i) - \Delta(B_j) = \sigma_{164}^{A_i - B_j} - \sigma_{162}^{A_i - B_j}$$

entre $n_1 + n_2$ paramètres Δ , après avoir choisi un déplacement arbitraire pour un niveau de référence.

Nous n'avons introduit dans ces calculs que les niveaux classant au moins trois raies, présentant dans les deux enregistrements un profil non perturbé. Les déplacements de 158 niveaux ont été obtenus en résolvant

six systèmes d'équations se recouvrant partiellement, la liaison de ces différents systèmes a été assurée par ceux des niveaux communs ayant les déplacements les mieux définis. La précision apparente des paramètres Δ calculés et le bon accord entre les déplacements de raies calculées $\delta\sigma_c$ et observés $\delta\sigma_o$ ont dépassé nos espérances : Dans l'un des systèmes (124 transitions entre 34 niveaux), l'écart quadratique moyen $\sqrt{\frac{\sum(\delta\sigma_c - \delta\sigma_o)^2}{124 - 34}}$ est 0,87 mK, la déviation $|\delta\sigma_c - \delta\sigma_o|$ est inférieure à 1 mK pour 106 transitions.

On convient généralement de rapporter les déplacements isotopiques à celui du niveau fondamental. Les niveaux du terme $4f^4_6s^2_5I$ donnent peu de transitions dans l'infrarouge, de même que les deux niveaux impairs les plus profonds 7565 et 8519. Nous avons donc attribué la valeur X au déplacement du premier niveau impair suivant, $f^9_{ds^2}_7I_9$ à 9990.95 cm^{-1} . Le tableau X contient les niveaux pairs et impairs dont le déplacement total en mK ($1 \text{ mK} = 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$) a été calculé par cette méthode. Nous y avons introduit le niveau 4134, dont le déplacement isotopique a été obtenu a posteriori à partir de quatre raies infrarouges. L'histogramme de la figure 6 met en évidence la répartition des déplacements calculés autour de valeurs privilégiées pour les niveaux impairs. Les effets d'interaction de configuration affectent un plus grand nombre de niveaux pairs.

Défauts de la méthode et précision des résultats.

Les deux spectres qui ont servi à calculer les déplacements des raies sont issus de sources différentes et ont été enregistrés séparément. Deux causes d'erreurs apparaissent immédiatement ;

TABLEAU X

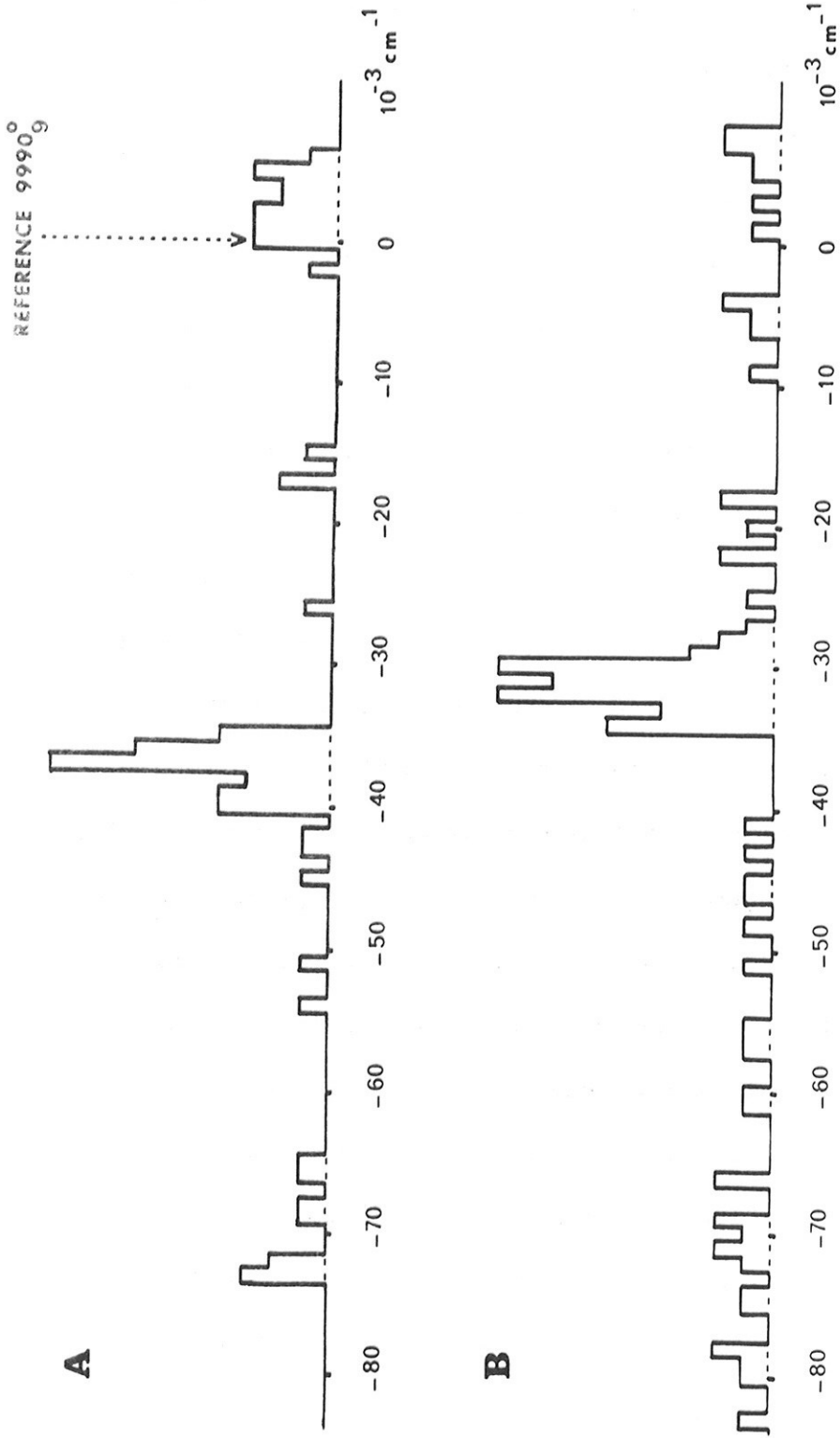
DEPLACEMENT ISOTOPIQUE DES NIVEAUX IMPAIRS DE DY I

NIVEAU	D.I. 162-164	NIVEAU	D.I. 162-164
9990.95	X + 0	20817.61	X -43
10088.80	X - 2	20884.67	X -38
11673.49	X + 0	20891.63	X -17
12007.10	X + 1	20921.55	X -15
12655.13	X + 0	20954.18	X -40
12892.76	X + 2	21392.40	X -39
13495.92	X + 3	21540.68	X -39
14367.80	X + 2	21788.93	X -37
14625.63	X + 1	22647.94	X -37
14970.69	X + 3	22696.82	X -36
15194.83	X + 0	22767.83	X -37
15567.37	X -72	23271.74	X -37
15862.62	X + 4	23340.12	X -42
15972.35	X -73	23359.82	X -37
16288.73	X + 5	23529.01	X -37
16693.87	X -69	23677.38	X -35
16717.79	X + 5	23736.60	X -65
16733.20	X -72	23832.07	X -51
17687.90	X + 1	23877.75	X -54
17727.15	X -73	23953.30	X -36
18021.89	X -73	24204.19	X -40
18172.87	X + 4	24229.21	X -36
18339.80	X -45	24353.58	X -35
18433.70	X -26	24856.74	X -35
18472.71	X -37	25012.21	X -40
18528.55	X -36	25084.80	X -37
18561.20	X + 2	25567.53	X -35
18711.93	X -66	25268.87	X -39
19092.30	X + 6	25670.00	X -38
19304.20	X -40	25700.39	X -37
19557.83	X -39	25774.39	X -36
19797.96	X -38	25920.88	X -37
19813.96	X + 5	25955.10	X -36
19907.51	X -68	26866.07	X -36
20554.73	X -17		

TABLEAU X (suite)

DEPLACEMENT ISOTOPIQUE DES NIVEAUX PATRS DE OY 1

NIVEAU	D.I. 162-164	NIVEAU	D.I. 162-164
4134.23	X -41	27068.94	X - 5
18903.21	X -69	27462.41	X -32
18937.78	X -79	27474.64	X -29
19019.15	X -45	27680.13	X + 8
20193.60	X -71	27896.80	X -33
20614.32	X - 4	27959.98	X -32
20789.85	X + 6	28158.51	X -30
21074.20	X -60	28265.78	X -27
21603.04	X -78	28309.18	X -43
21778.43	X -78	28326.48	X -28
22045.79	X -83	28358.70	X -32
22487.13	X -80	28379.82	X -18
23031.46	X -22	28433.41	X -32
23218.59	X -18	28539.57	X -32
23280.46	X -70	28666.31	X -20
23333.92	X -72	28909.39	X -25
23360.66	X -61	28971.42	X -34
23388.95	X -71	29465.04	X -33
23534.50	X - 5	29512.27	X -31
23591.27	X -30	29532.42	X + 5
23655.36	X -57	29706.72	X -31
23683.87	X + 1	29714.72	X -31
23780.26	X - 4	29742.49	X -30
23799.41	X -22	29841.69	X -31
23841.90	X -69	30136.65	X -30
23972.34	X -66	30163.33	X -32
24062.88	X -51	30444.88	X -31
24302.02	X -55	30459.64	X -32
24430.27	X + 7	30621.87	X -30
24452.03	X -66	30739.79	X -33
24867.17	X - 9	30988.25	X -30
24899.06	X - 6	31180.01	X -28
25095.66	X -33	31267.04	X -31
25502.82	X -75	31362.62	X -34
25506.38	X -74	31423.04	X -34
25879.15	X -34	31489.64	X -30
26244.00	X -34	31820.28	X -30
26387.81	X -30	31838.24	X -30
26435.71	X -56	32036.51	X -32
26533.88	X -48	32382.29	X -31
26752.29	X -34	32392.59	X -29
26785.45	X + 3	32675.52	X -46
26848.40	X + 8	33036.26	X -31
26954.99	X -29	33210.13	X -32
27059.89	X + 7	33252.28	X -31



Histogramme des déplacements isotopiques de niveaux de Dy I.

A : niveaux impairs **B** : niveaux pairs .

Fig. 6

- On ne peut contrôler efficacement les conditions de température et de pression dans les tubes à décharge et les effets de pression peuvent déplacer différemment les raies dans les deux milieux émetteurs.

- Le réglage de l'interféromètre a été modifié entre les deux expériences et la fonction d'appareil -ou l'étalonnage en fréquence- peuvent n'être pas identiques. On peut noter que si les nombres d'ondes sont entachés d'une erreur constante, cette erreur se reporte sur le déplacement de référence de l'une des parités ; si cette erreur -supposée maintenant progressive- est différente pour les deux spectres

$\sigma^{162} = \sigma_0^{162} (1 + \alpha_1)$, $\sigma^{164} = \sigma_0^{164} (1 + \alpha_2)$, le déplacement des raies sera affecté d'une erreur $1 + \alpha_2 - \alpha_1$ qui se transmettra au

déplacement calculé pour les niveaux dans l'échelle des énergies sans être décelée dans la résolution du système d'équations par moindres-carrés ; on calculera alors pour deux niveaux A et B possédant le même ΔT_A des déplacements apparents $X + \Delta T_A$ et $X + \Delta T_A + (\alpha_2 - \alpha_1) (E_B - E_A)$.

On pourrait mettre en évidence des erreurs de ce type en comparant les nombres d'ondes de raies de référence apparaissant dans les deux spectres - les raies de l'iode par exemple - mais celles-ci sont limitées à la raie interdite à 7602 K dans l'enregistrement de ^{164}Dy et nous n'avons pu contrôler la validité de nos résultats qu'en les comparant aux mesures effectuées par divers auteurs au moyen d'un étalon Fabry-Perot ^{48, 49, 50}). Les raies étudiées par ce moyen dans le domaine visible sont du type $(f^9_{ds^2} + f^{10}_{sp}) \rightarrow f^{10}_{s^2}$; on peut donc tenter de déterminer le déplacement isotopique $\Delta(^5\text{I}_8)$ du niveau fondamental à partir des niveaux impairs calculés dans cette étude et des raies mesurées précédemment.

Les résultats sont les suivants :

Niveau	$\delta\sigma$ mesuré (Réf.)	$\Delta(^5I_8)$	Niveau	$\delta\sigma$ mesuré (Réf.)	$\Delta(^5I_8)$
15194 X	$+37.6 \pm 0.3$ (48)	X-38	18021 X-73	-33.7 ± 0.6 (49)	X-39
15567 X-72	-30.9 ± 0.6 (48)	X-41	18857	$+39.2 \pm 1.1$ (48)	
15972 X-73	-34.2 ± 0.6 (48)	X-39	19092 X+6	$+39.2 \pm 1.2$ (48)	X-33
16693 X-69	-27.9 ± 1.1 (48)	X-41	19688	$+40.9 \pm 0.6$ (48)	
16733 X-72	-34.2 ± 0.9 (48)	X-38	23736 X-65	-30.3 ± 0.3 (40)	X-35
17687 X+1	$+37.5 \pm 0.6$ (49)	X-37	23832 X-51	-14.2 ± 0.2 (50)	X-37
17727 X-73	-33.4 ± 0.6 (49)	X-40	23877 X-54	-18.3 ± 0.2 (50)	X-36

On remarque que la valeur de $\Delta(^5I_8)$ la plus éloignée de la moyenne $X - 37.7$ correspond au $\delta\sigma$ où l'incertitude est maximum, et que les $\Delta(^5I_8)$ sont très cohérents si l'on ne retient que les quatre meilleures mesures (15194, 23736, 23832, 23877). Trois raies étudiées par Striganov impliquent à la fois $f_{ds}^9 2^7 I_9^0$ 9990 et trois niveaux pairs qui figurent dans le tableau X. Le déplacement de référence $\Delta(^7I_9^0) = X$ recalculé à partir de ces transitions vaut :

$$26752 \quad \Delta(^7I_9^0) = X - 34 + 39.6 = X + 5.6$$

$$28971 \quad - \quad = X - 34 + 40.0 = X + 6$$

$$29706 \quad - \quad = X - 31 + 37.6 = X + 6.6$$

Il nous paraît convenable au vu de ces différents éléments d'admettre une incertitude de 5 mK pour les valeurs que nous proposons, car les

erreurs systématiques n'ont pas été éliminées. Il serait souhaitable de reprendre cette étude en utilisant un mélange d'isotopes pour éviter des déplacements systématiques ; d'autre part, la largeur de la fonction d'appareil est limitée ici par des effets de pression et on pourrait obtenir un gain en finesse très appréciable en remplaçant les tubes à décharge par une cathode creuse refroidie.

Les niveaux que nous avons étudiés dans ce chapitre appartiennent aux sept configurations les plus basses de Dy I. En considérant les niveaux les moins perturbés par interaction de configurations, les déplacements moyens pour chacune d'elles sont les suivants (rapportés ici à $f^{10} s^2 5I_7$ en mK)

$$\begin{aligned} \Delta (f^{10} s^2) &= Y \\ \Delta (f^{10} ds) &< Y - 39 \\ \Delta (f^9 ps^2) &> Y + 49 \\ \Delta (f^9 dsp) &\sim Y + 9 \\ \Delta (f^9 ds^2) &\sim Y + 46 \\ \Delta (f^{10} sp) &\sim Y - 32 \\ \Delta (f^9 d^2 s) &\sim Y + 4 \end{aligned}$$

Ces résultats sont en bon accord avec les prévisions que l'on peut faire à partir des effets d'écran obtenus dans d'autres éléments lourds.

7- Niveaux d'énergie impairs de Dy I.

En observant systématiquement les structures Zeeman résolues des raies d'arc, et avec l'aide du calcul paramétrique a priori de $4f^9(6H + 6F) 5d 6s^2$, on a pu poursuivre en direction des petits J

la localisation des niveaux impairs profonds amorcée par Conway et Worden. Les raies impliquant le multiplet fondamental ${}^7\text{H}^{\circ}$ ont été reconnues car certains g fréquemment mesurés ($g_5 = 1.24$, $g_4 = 1.085$, $g_3 = 0,78$) s'accordant à 1 % près aux facteurs de Landé g_c calculés en couplage intermédiaire. A partir de niveaux pairs élevés et des nombres d'ondes des raies de Dy I, la plupart des niveaux impairs attendus en-deçà de $17\,500\text{ cm}^{-1}$ ont été localisés au moyen du programme de recherche automatique COMBAC⁵¹⁾ et confirmés par plusieurs structures Zeeman. Actuellement, les 55 niveaux connus de $f^9({}^6\text{H}, {}^6\text{F}) d^2$ se répartissent de la façon suivante en fonction du nombre quantique J .

J	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Niveaux théoriques	3	9	14	17	18	17	14	10	6	3	1
Niveaux observés	0	0	0	3	10	9	13	10	6	3	1

L'interprétation que Griffin, Ross et Cowan ont donné de 31 niveaux de cette configuration, sur une base comportant 13 termes de f^9 est satisfaisante³⁴⁾ bien qu'elle ne tienne pas compte des interactions avec les configurations voisines que nous étudions par la suite.

Configuration $4f^9 5d^2 6s$.

Sept niveaux de cette configuration avaient été identifiés empiriquement dans une première publication (Annexe I) ; pour confirmer leur interprétation et étendre leur nombre, l'étude de $4f^9({}^6\text{H}, {}^6\text{F}) 5d^2 6s$ a été entreprise sur un schéma de base LS : $\left[[f^9 S_1 L_1, d^2 S_2 L_2] S_{12} L, s \right] SL$ et les niveaux déterminés à l'aide de ce calcul se distinguent par des caractères communs :

- 1) leurs combinaisons sont rares avec le terme fondamental $f^{10} s^2 {}^5\text{I}$,

hormis le cas de perturbations très locales : 23832°_8 par exemple, est situé à 45 cm^{-1} de $[(f^{10})^5 I_8 (sp) ^1 P_1]_8$ et donne avec $f^{10} s^2 ^5 I_8$ l'une des raies ultimes du spectre.

2° Les premiers niveaux de $4f^9 5d^2 6p$ ont une énergie trop élevée ($\sim 40\,000 \text{ cm}^{-1}$) pour donner avec $4f^9 5d^2 6s$ des transitions intenses. C'est en analysant le spectre d'émission infrarouge que 26 niveaux de $f^9 d^2 s$ ont été localisés à l'aide du programme COMBAC et à partir des niveaux pairs situés entre $23\,000$ et $34\,000 \text{ cm}^{-1}$ ($f^9 dsp$) ; pour mesurer leurs facteurs de Landé, un nouveau spectre infrarouge a été enregistré par spectrométrie de Fourier, la source de lumière étant placée dans un champ magnétique uniforme de $7\,000$ gauss. Cent vingt structures Zeeman ont été mesurées entre $5\,500$ et $7\,500 \text{ cm}^{-1}$; la plupart ne sont pas résolues car elles impliquent deux niveaux tels que $|g_1 - g_2| < 0.10$.

Les facteurs de Landé des nouveaux niveaux de $f^9 d^2 s$ ont été obtenus avec une incertitude de $0,015$.

On ne connaît actuellement que trois niveaux pairs de $J = 11$ à $29\,742$, $37\,039$ et $37\,299 \text{ cm}^{-1}$. Le niveau $f^9 d^2 s \ ^9 L_{12}^{\circ}$ $22\,541.18$ est justifié par une seule raie très intense à 7201.31 cm^{-1} , qui présente la structure Zeeman attendue et le déplacement isotopique caractéristique des transitions pures $f^9 dsp - f^9 d^2 s$. Plusieurs règles de sélection s'opposent à une combinaison $22\,541 \ f^9 d^2 s \ ^9 L_{12}^{\circ} - 37\,039 \ f^{10} 6s6d \ ^7 L_{11}^{\circ}$ et elle n'est pas observée.

Calcul paramétrique des niveaux impairs profonds.

Si l'on admet que les paramètres du coeur $4f^9$ ne sont pas sensiblement modifiés par la présence des électrons $5d$ et $6s^2$ et que l'écart

entre les plus bas niveaux de $4f^9 ({}^6H) 5d6s^2$ et de $4f^9 ({}^4I_3, {}^4F_4) 5d6s^2$ reproduit celui de leurs termes parents, le calcul du coeur $4f^9$ place au-dessus de $28\ 000\text{ cm}^{-1}$ les premiers niveaux qui ne s'interpréteront pas sur la base des trois sous-configurations $4f^9 ({}^6F, {}^6H) 5d6s^2 + 4f^{10} ({}^5I) 6s6p + 4f^9 ({}^6F, {}^6H) 5d^26s$. C'est aussi dans la même hypothèse, l'énergie des premiers niveaux de $4f^{10} ({}^5F) 6s6p$. Comme ces trois configurations possèdent entre 7565 et $28\ 000\text{ cm}^{-1}$ plusieurs termes de même nom LS susceptibles d'interagir, nous les avons assemblées sur une base commune. Le calcul de $4f^{10} ({}^5I) 6s6p$ exposé plus haut a montré que, sur certains niveaux, les effets d'interaction peuvent atteindre 700 cm^{-1} . Pour réduire ces écarts, sept paramètres de Slater sont théoriquement nécessaires :

$R^{(2)}(fd, fs)$, $R^{(3)}(fd, sf)$, $R^2(d^2, ds)$, $R^{(1)}(d^2, fp)$, $R^3(d^2, fp)$
 $R^{(1)}(ds, fp)$, $R^3(ds, pf)$. Les trois paramètres $R^{(2)}(fd, fs)$,
 $R^3(fd, sf)$ et $R^{(3)}(d^2, fp)$ n'ont jamais convergé vers des valeurs

bien définies dans les spectres I des lanthanides ; après avoir constaté que leurs coefficients angulaires sont petits, on a négligé leur action en les annulant. L'interaction $Q(d^2, ds)$ met en jeu des termes de $f^9 d^2 ({}^1D) s$ qui n'ont pas été identifiés et le paramètre $R^{(2)}(d^2, ds)$ a été fixé à $-8\ 000\text{ cm}^{-1}$. La valeur initiale $1\ 644\text{ cm}^{-1}$, obtenue dans le calcul de $f^9 d^2 + f^{10} p$, a été donnée à $R^{(1)}(d^2, fp)$. Ce paramètre a largement varié dans les itérations et nous l'avons fixé à 454 cm^{-1} .

Par contre, deux études de $f^{n-1} ds^2 + f^n sp$ dans les spectres de SmI 5^1) et de Tm I 5^2) ont fourni de bonnes valeurs de départ pour $R^{(1)}(ds, fp)$ et $R^3(ds, pf)$. Le signe de tous ces paramètres est celui des intégrales

de Slater calculées par la méthode Hartree-Fock⁵²).

Ce traitement a amélioré nettement l'accord entre les énergies observées et calculées de f^{10}_{sp} et $f^9_{ds^2}$ et tous les niveaux connus de $J = 5$ à 12 jusqu'à $26\,500\text{ cm}^{-1}$ ont participé à l'optimisation. Cependant, le couplage intermédiaire et les mélanges de configurations définis par les paramètres optimisés est mis en défaut dans quelques cas par la comparaison des facteurs de Landé g_o et g_c et par le déplacement isotopique ; sur ce dernier point, l'accord n'est que qualitatif.

Le jeu de paramètres de la dernière diagonalisation est donné dans le tableau XI.

On trouve dans les colonnes successives du tableau XII pour chaque J et pour tous les niveaux théoriques jusqu'au plus haut niveau identifié, l'énergie calculée E_c , l'énergie expérimentale E_o , $\Delta E = E_o - E_c$, les facteurs de Landé g_o et g_c , la première composante de la fonction d'onde dans la notation suivante :

$$\begin{aligned} (f^9 (s_1 L_1) ds^2 S L | & : F9D L_1^{2S+1} L \\ (f^{10} ({}^5I) sp^{2S_2+1} P S L | & : SP (2S_{2+1})^{2S+1} L \\ ([f^9 (s_1 L_1) d^2 (s_2 L_2)] s_{12} L_{12} s S L | & : L_1 L_2 (2S_{12}+1)^{2S+1} L \end{aligned}$$

Les trois dernières colonnes contiennent les pourcentages d'appartenance de chaque niveau aux configurations $f^9_{ds^2}$, f^{10}_{sp} , $f^9_{d^2s}$.

Tableau XI -- Paramètres radiaux des configurations impaires de Dy I .

Paramètres	$f^9(6H + 6F)ds^2$	$f^{10}(5I)sp$	$f^9(6H + 6F)d^2s$
E_{av}	15428 77	21975 126	40110 95
$F_2(4f,5d)$	146 3		100.4 4
$F_4 -$	14.5 0.7		13.4 1
$G_1 -$	133.4 5		100.
$G_3 -$	12.8 1.8		11.
$G_5 -$	2.40 0.24		1.7
$F_2(4f,6p)$		39.2 10	
$G_2 -$		5.6 1	
$G_4 -$		6.7 1.6	
$G_3(4f,6s)$		140	150
$G_2(5d,6s)$			1585 40
$G_1(6p,6s)$		3173 35	
$S(6F-6H)$			5208 137
$F_2(5d,5d)$			375 8
$F_4(5d,5d)$			30
$A_L(L+1)$	9.8 1.7		
ζ_{4f}	coeur f^9 calculé	coeur $f^{10} s^2 5I$	1975 30
ζ_{5d}	771 33		889 30
ζ_{6p}		1369 37	
$R^{(1)}(ds,fp)$	-2590 623	152 niveaux (7565-30840 cm^{-1})	
$R^{(3)}(ds,pf)$	-1418 1124	24 paramètres libres	
$R^{(2)}(ds,d^2)$	-8000	$\overline{\langle \Delta E \rangle} = 120 cm^{-1}$	
$R^{(1)}(d^2,fp)$	435		

TABLEAU XII - Interprétation paramétrique des niveaux impairs de Dy I .

EU	EC	ΔE	G0	GC	COMPOSITION				
					PRINCIPALE COMPOSANTE	F9D52 %	F10SP %	F9D25 %	
MATRICE J = 0									
	20795			.000	F9D F 7F 54	99	0	0	
	25565			.000	F9D H 7F 53	99	0	0	
					
MATRICE J = 1									
	20086			1.052	F9D F 7F 37	99	0	1	
	21183			.038	F9D H 7G 69	99	0	1	
					
MATRICE J = 2									
	16386			.035	F9D H 7H 82	99	0	1	
	18972			1.406	F9D F 7F 34	99	0	1	
					
MATRICE J = 3									
15254.937	15358	-103	.770	.774	F9D H 7H 75	99	0	1	
	17407			1.556	F9D F 7F 25	99	0	1	
	18421			1.434	F9D F 7P 39	99	0	1	
	18734			.502	F9D H 7I 76	99	0	1	
	20200			1.307	F9D H 7G 55	99	0	1	
	21677			1.260	F9D F 7G 39	99	0	1	
	22279			1.407	F9D F 7D 26	99	0	1	
	22586			.996	F9D H 5G 41	99	0	1	
	22656			1.584	F9D F 5P 72	99	0	1	
	23373			1.095	F9D F 7H 39	99	0	1	

EU	EC	ΔE	G0	GC	COMPOSITION				
					PRINCIPALE COMPOSANTE	F9DS2 %	F10SP %	F9D2S %	
23824.680	23812	12	.675	.791	F9D H 5H 56	98	1	1	
	24359			.955	F9D H 5F 25	97	1	2	
	24462			1.458	HF 8 9G 39	2	0	98	
	25036			1.413	F9D F 7F 36	99	0	1	
	25653			1.426	F9D F 5D 60	99	0	1	
	26531			1.249	HF 8 9F 21	0	2	98	
26607.160	26630	-22	.575	.460	SP 3 7I 59	2	96	2	
	27001			.932	F9D F 5G 42	97	2	1	
27321.260	27351	-29	.580	.793	SP 3 5H 25	0	46	43	
	27348			.857	SP 3 5H 19	0	53	57	
27601.330	27781	-179	.840	.686	F9D F 5H 68	97	2	1	
	27962			1.295	HF 8 7G 28	1	0	99	
	28146			1.109	HF 8 9K 33	0	0	100	
28694.510	28662	32	.550	.552	SP 3 5H 52	2	97	0	
					

MATRICE J = 4

13952.000	14012	-60	1.082	1.082	F9D H 7H 66	99	0	1
16069.985	15849	220	1.615	1.611	F9D F 7P 47	99	0	1
16412.800	16367	45	1.510	1.513	F9D F 7P 35	99	0	1
	17902			.822	F9D H 7I 79	99	0	1
	18933			1.363	F9D H 7G 44	99	0	1
20430.110	20314	116	1.285	1.378	F9D H 7F 33	99	0	1
20474.990	20654	-179	1.295	1.272	F9D H 5G 31	99	0	1

EU	EC	ΔE	G0	G0	COMPOSITION				
					PRINCIPALE COMPOSANTE	F9DS2 %	F10SP %	F9D2S %	
	20935			1.294	F9D F 7G	26	99	0	1
	21269			.441	F9D H 7K	89	99	0	1
22099.060	22042	57	1.059	1.107	F9D H 5H	41	98	1	1
	22622			1.251	F9D F 7H	41	99	0	1
22696.821	22685	11	1.487	1.504	HF 8 9G	35	1	0	99
22938.030	22918	20	1.065	1.025	F9D H 5H	24	98	1	1
23686.810	23806	-119	.767	.672	F9D H 5I	70	97	2	1
	23993			1.469	F9D F 5D	82	99	0	1
	24467			1.410	F9D F 7F	32	99	0	1
24841.040	24881	-39	.900	.882	SP 3 7H	38	2	95	3
	25017			1.366	HF 8 9H	18	0	2	97
25203.920	25348	-144	1.242	1.186	F9D F 5G	40	97	1	1
25687.200	25718	-30	.945	.815	SP 3 5H	47	0	100	0
25761.770	25914	-152	1.350	1.400	HF 8 7F	28	1	0	99
	26073			1.380	FF 8 9D	17	0	0	100
26662.410	26629	33	.590	.551	SP 3 7K	64	13	86	0
26440.410	26666	-225	1.046	.972	F9D F 5H	53	83	16	1
	26849			1.377	HF 8 9K	24	0	0	100
26998.270	27015	-16	.865	.859	SP 3 7H	44	2	98	0
27659.020	27568	91	1.170	1.202	F9D F 5G	32	98	1	1
27751.460	27703	48	.810	.728	SP 3 3H	47	1	99	0
	28011			1.133	HF 8 9K	27	0	0	100
	28439			1.281	FF 8 9H	16	0	0	100
	28523			1.304	HF 8 7H	12	0	0	100
	28836			1.508	FF 8 9F	24	0	0	100
28923.050	28891	32	.785	.766	SP 3 3H	27	0	99	1

EO	EC	ΔE	GO	GC	COMPOSITION				
					PRINCIPALE COMPOSANTE	F9DS2 %	F10SP %	F9D2S %	
MATRICE J = 5									
12298.558	12343	-44	1.245	1.248	F9D H 7H 56	99	0	1	
14153.490	14233	-79	1.420	1.405	F9D H 7F 51	99	0	1	
16684.733	16765	-80	1.082	1.087	F9D H 7I 67	99	0	1	
17502.889	17642	-139	1.450	1.331	F9D F 7J 24	99	0	1	
17804.235	17883	-78	1.322	1.361	F9D H 5F 54	99	0	1	
	18582			1.468	F9D F 7O 38	99	0	1	
19480.660	19392	88	1.350	1.345	F9D F 7G 29	99	0	1	
19813.980	19718	95	1.270	1.239	F9D H 5H 33	98	1	1	
	20399			.803	F9D H 7K 81	99	0	1	
20891.635	20903	-11	1.320	1.528	HF 8 9G 31	0	0	100	
20921.550	20949	-27	1.300	1.174	F9D H 5H 35	98	1	1	
	21422			1.283	F9D F 7H 40	98	1	1	
22294.880	22329	-34	1.020	.989	F9D H 5I 39	58	41	1	
22524.210	22554	-29	1.040	1.038	F9D H 5I 23	40	59	0	
	23303			1.379	F9D F 7G 28	99	0	1	
23440.460	23369	71	1.360	1.425	HF 8 9F 17	1	0	99	
23552.650	23569	-16	1.070	1.010	SP 3 7I 32	1	99	0	
	23812			1.350	F9D F 5F 23	66	1	33	
	23902			1.405	HF 8 7F 21	32	0	68	
24634.070	24859	-224	1.210	1.269	F9D F 5F 42	96	3	1	
24993.470	24949	44	1.300	1.205	HF 8 9K 23	2	10	87	
25082.020	24970	112	1.000	.989	SP 3 7H 33	21	67	12	
24881.850	25021	-139	.720	.757	F9D H 5K 67	74	25	1	
25127.515	25125	2	1.040	.853	SP 3 7K 35	5	95	0	
25912.630	25867	45	.980	.994	SP 3 3H 39	7	92	0	

EU	EC	ΔE	GU	GC	COMPOSITION				
					PRINCIPALE COMPOSANTE	F9DS2 %	F10SP %	F9D2S %	
26135.210	26006	129	1.220	1.203	F9D F 5H 34	91	8	1	
	26218			1.453	FF 8 9D 16	0	0	100	
	26585			1.329	HF 8 9H 20	0	0	100	
27109.630	27103	6	1.010	1.031	SP 3 7I 21	0	90	9	
	27114			1.448	FF 8 9D 12	0	9	91	
	27576			1.270	HP 8 9I 14	0	0	100	
27685.870	27638	47	.770	.748	SP 3 5K 44	0	100	0	
	27706			1.427	HP 8 9G 33	0	0	100	
	28436			1.251	HF 8 7I 16	0	0	100	
29054.360	29085	-30	.840	.831	SP 3 3I 39	0	100	0	
					
MATRICE J = 6									
10088.800	10151	-62	1.360	1.380	F9D H 7H 33	99	0	1	
11673.490	11712	-38	1.392	1.387	F9D H 7F 47	99	0	1	
14970.700	15069	-98	1.235	1.274	F9D H 7I 39	99	0	1	
15862.635	15891	-28	1.257	1.251	F9D H 5G 43	99	0	1	
16591.380	16571	20	1.348	1.331	F9D H 7G 42	98	1	1	
18172.870	18217	-44	1.340	1.283	F9D H 5H 39	97	2	1	
18561.200	18652	-90	1.270	1.297	F9D F 7G 18	65	34	1	
18711.910	18774	-62	1.185	1.226	SP 3 3H 33	37	63	0	
19182.660	19271	-88	1.036	1.001	F9D H 7K 72	97	2	1	
19304.260	19349	-44	1.540	1.543	HF 8 9F 36	0	0	100	
19856.875	19842	14	1.350	1.346	F9D F 7H 40	99	0	1	
20554.730	20510	44	1.110	1.100	F9D H 5I 45	78	21	1	
20817.610	20787	30	1.130	1.145	SP 3 7I 21	20	80	0	

EO	EC	ΔE	GO	GC	COMPOSITION				
					PRINCIPALE COMPOSANTE	F9DS2 %	F10SP %	F9D2S %	
21392.396	21498	-105	1.480	1.484	HF 8 9D 29	0	0	100	
	21744			1.384	F9D F 7G 35	98	1	1	
22286.870	22296	-9	1.150	1.156	SP 3 7H 38	1	99	0	
22633.230	22547	86	1.290	1.301	F9D F 5G 50	96	3	1	
22956.840	22984	-27	1.055	1.074	SP 3 7K 24	3	97	0	
23359.821	23086	273	1.350	1.377	HF 8 7F 30	0	0	99	
23529.008	23433	96	1.410	1.377	HF 8 9D 20	0	0	99	
23464.020	23545	-80	.965	.977	F9D H 5K 52	64	35	1	
23687.870	23653	34	1.076	1.034	F9D H 5K 29	38	61	0	
24040.590	23902	138	1.260	1.265	F9D F 5H 44	94	5	1	
	24851			1.389	HF 8 9K 20	0	1	99	
24931.625	24931	0	1.128	1.119	SP 3 7I 31	0	99	1	
25670.453	25677	-6	1.330	1.371	HP 8 9G 38	0	0	100	
25825.830	25795	30	1.000	.983	SP 3 7K 31	0	100	0	
25920.884	26161	-240	1.330	1.364	HF 8 7F 17	0	0	100	
	26550			1.269	HP 8 9I 20	0	0	100	
27190.740	27104	86	1.263	1.512	FF 8 9F 33	0	0	100	
27199.200	27194	5	1.160	1.024	SP 3 5I 30	0	100	0	
	27709			1.289	HF 8 7K 15	0	0	100	
	28079			1.422	HF 8 9G 17	0	0	100	
28119.940	28359	-239	1.198	1.233	SP 1 5H 73	4	83	13	
	28389			1.419	HF 6 7F 38	1	12	87	
	28770			1.078	HF 8 9L 40	0	0	100	
	28925			1.204	HF 8 9L 23	0	0	100	
	29434			1.382	HF 6 5G 15	0	0	100	
29447.110	29437	10	.899	.882	SP 3 3K 62	0	100	0	

EO	EC	ΔE	GO	GC	COMPOSITION				
					PRINCIPALE COMPOSANTE	F9DS2 %	F10SP %	F9D2S %	
	29487			1.309	HF 6 5G	20	0	0	100
	30169			1.147	HF 8 7K	21	0	0	100
	30315			1.261	HF 8 9I	23	0	0	100
30778.960	30783	-4	1.170	1.074	SP 1 5I	82	1	99	0
30840.730	30891	-50	1.269	1.319	FF 8 7H	11	0	0	100
					

MATRICE J = 7

8519.200	8699	-179	1.336	1.349	F9D H 7H	60	99	0	1
12655.130	12500	155	1.360	1.368	F9D H 7G	64	99	0	1
14367.800	14333	34	1.270	1.260	F9D H 7I	50	98	1	1
15194.830	14864	330	1.260	1.279	F9D H 5H	78	96	3	1
16693.870	16704	-10	1.220	1.234	SP 3 5H	29	6	94	0
17687.910	17686	1	1.157	1.148	F9D H 7K	44	95	4	1
18339.800	18190	149	1.210	1.187	F9D H 5I	26	91	8	1
18433.760	18384	49	1.200	1.211	SP 3 3I	35	11	89	0
18857.060	18600	257	1.335	1.396	F9D F 7H	22	61	3	36
18528.554	18645	-116	1.467	1.447	HF 8 9G	25	33	2	64
19907.500	19941	-33	1.230	1.238	SP 3 7I	26	2	98	0
20485.400	20427	58	1.375	1.390	F9D F 7G	63	98	1	1
20766.290	20727	39	1.160	1.146	SP 3 5K	30	1	99	0
20954.182	21052	-97	1.410	1.418	HF 8 9F	30	0	0	99
21675.280	21515	160	1.220	1.297	F9D F 5H	62	91	8	1
21783.420	21782	1	1.152	1.076	F9D H 5K	70	98	1	1
22061.290	22073	-11	1.180	1.189	SP 3 7I	28	1	99	0
22647.940	22569	78	1.345	1.354	HF 8 9K	22	0	0	100

EO	EC	ΔE	GO	GC	COMPOSITION				
					PRINCIPALE COMPOSANTE	F9DS2 %	F10SP %	F9D2S %	
23340.121	23215	125	1.390	1.403	HF 8 7G	28	0	0	100
23479.770	23455	24	1.130	1.133	SP 3 7K	35	0	100	0
24353.582	24117	236	1.330	1.378	HP 8 9G	41	0	0	100
24708.960	24390	318	1.260	1.279	SP 1 5H	83	11	89	0
24906.860	24890	16	1.140	1.141	SP 3 7I	27	0	100	0
25268.870	25344	-75	1.275	1.295	HP 8 9I	19	0	0	100
25567.530	25614	-46	1.288	1.285	HF 8 7I	22	0	0	100
	26493			1.415	HF 8 9G	20	0	0	100
27316.490	27163	153	1.325	1.332	HP 8 7G	35	0	0	100
27427.080	27419	8	1.080	1.055	SP 3 5K	48	0	100	0
27556.340	27698	-141	1.240	1.291	HF 8 9L	28	0	0	100
27834.930	27859	-24	1.240	1.178	SP 1 5I	85	1	98	1
27984.500	27917	67	1.240	1.310	HF 8 9L	27	0	1	99
					

MATRICE J = 8

7565.600	7625	-59	1.362	1.362	F9D H 7H	81	99	0	1
12007.100	11914	93	1.280	1.282	F9D H 7I	50	99	0	1
14625.640	14613	12	1.250	1.258	F9D H 5I	67	97	2	1
15567.370	15620	-52	1.310	1.323	SP 3 7H	58	3	97	0
16288.742	16174	114	1.190	1.196	F9D H 7K	46	97	2	1
16733.200	16692	41	1.200	1.210	SP 3 3K	32	1	99	0
18021.880	18034	-12	1.230	1.233	SP 3 5I	39	0	100	0
18472.710	18677	-204	1.460	1.467	HF 8 9G	48	1	0	99
19092.310	19030	62	1.330	1.375	F9D F 7H	91	97	1	2
19688.590	19535	153	1.220	1.173	F9D H 5K	57	98	1	1

EU	EC	ΔE	G0	G0	COMPOSITION				
					PRINCIPALE COMPOSANTE	F9DS2 %	F10SP %	F9D2S %	
20341.320	20333	8	1.230	1.233	SP 3 7K	30	1	99	0
20884.867	20860	24	1.360	1.359	HF 8 9I	29	0	0	100
21899.220	21885	14	1.200	1.214	SP 3 7I	33	0	100	0
22767.825	22575	192	1.345	1.407	HP 8 9G	43	0	0	100
23832.067	23771	61	1.320	1.351	HF 8 9K	24	0	0	100
23877.745	23718	159	1.290	1.247	SP 1 5I	93	1	98	0
24204.188	24112	92	1.300	1.313	HF 8 7I	25	0	0	100
24999.580	24967	32	1.190	1.190	SP 3 5K	44	0	90	10
25012.209	24956	56	1.340	1.358	HP 8 9I	28	0	10	90
	26401			1.269	HF 8 7K	23	0	0	100
	26611			1.280	HF 8 9L	33	0	0	100
	27305			1.306	HP 8 9H	26	0	0	100
27817.990	27894	-76	1.210	1.157	SP 1 5K	94	0	100	0
27851.430	28034	-182	1.240	1.301	HP 8 7I	28	0	0	100
					

MATRICE J = 9

9990.950	9879	111	1.320	1.325	F9D H 7I	89	99	0	1
13495.920	13375	120	1.230	1.239	F9D H 5K	65	99	0	1
15972.350	15969	3	1.290	1.301	SP 3 7I	64	1	99	0
16717.786	16777	-59	1.240	1.247	F9D H 7K	64	98	1	1
17727.150	17711	16	1.250	1.263	SP 3 5K	51	0	100	0
19557.833	19666	-108	1.390	1.380	HF 8 9I	36	0	0	100
21540.678	21708	-167	1.335	1.353	HF 8 9H	39	0	3	97
21838.550	21783	55	1.250	1.249	SP 3 7K	62	0	97	3

EO	EC	ΔE	GO	GC	COMPOSITION				
					PRINCIPALE COMPOSANTE	F9DS2 %	F10SP %	F9D2S %	
23271.737	23378	-106	1.330	1.357	HP 8 9I	41	0	0	100
23736.600	23764	-27	1.220	1.223	SP 1 5K	97	0	99	0
24229.214	24177	52	1.285	1.300	HF 8 7K	33	0	0	100
25084.798	25259	-174	1.277	1.346	HP 8 9H	33	0	0	100
25955.105	25996	-40	1.270	1.320	HF 8 9L	34	0	0	100
					
MATRICE J = 10									
12892.770	13003	-110	1.290	1.300	F9D H 7K	99	99	0	1
17513.330	17407	106	1.300	1.300	SP 3 7K	99	0	100	0
19797.965	19751	46	1.367	1.367	HF 8 9K	40	0	0	100
21788.929	21857	-68	1.340	1.354	HF 8 9K	33	0	0	100
23953.303	24189	-235	1.310	1.325	HF 8 7K	29	0	0	100
24858.744	24963	-104	1.260	1.281	HF 8 9L	49	0	0	100
25774.394	25498	276	1.330	1.350	HF 8 9I	34	0	0	100
					
MATRICE J = 11									
20448.443	20302	146	1.354	1.356	HF 8 9K	87	0	0	100
23677.383	23679	-1	1.300	1.306	HF 8 9L	78	0	0	100
					
MATRICE J = 12									
22541.182	22404	137	1.330	1.333	HF 8 9L	99	0	0	100
					

8 - Niveaux pairs élevés de Dy I.

La plupart des nouveaux niveaux pairs situés entre 17 000 et 26 000 cm^{-1} ont été trouvés en analysant le spectre d'émission infrarouge. Trois configurations apparaissent dans ce domaine restreint où deux niveaux élevés de la configuration fondamentale $f^{10}s^2$ ont été mis en évidence. Les progrès accomplis dans l'identification des niveaux sont dus en partie à la mesure des structures Zeeman et des déplacements isotopiques dans l'infrarouge.

Configuration $4f^{10} 5d 6s$.

Les seuls niveaux impairs profonds pouvant se combiner avec $4f^{10} 5d6s$ appartiennent à $4f^{10} 6s6p$, mais le faible écart de ces deux configurations renvoie dans l'infrarouge lointain ($\lambda > 5 \mu\text{m}$) leurs transitions les plus intenses. Les niveaux qui ont pu cependant être attribués à $4f^{10} 5d6s$ se comportent schématiquement de trois façons différentes :

- a) Niveaux profonds ou isolés ($J \gg 10$) : Ces niveaux classent surtout des raies d'intensité moyenne entre 17 000 et 22 000 cm^{-1} . Ross a mesuré les déplacements isotopiques de quelques-unes de ces raies ($\sim 80 \text{ mK}$ pour le couple 160 - 164) et les niveaux impairs élevés impliqués dans ces transitions comportent certainement une forte composante $4f^{10} 5d6p$.
- b) Niveaux perturbés par $f^9 ps^2$: Ils se combinent aux niveaux impairs profonds de $f^9 d s^2$ et leurs facteurs de Landé ont été évalués dans le domaine de la plaque photographique.
- c) Niveaux élevés peu perturbés : Certains niveaux vers 25 000 cm^{-1} ne classent que des raies infrarouges et leur facteur de Landé reste quelquefois indéterminé.

Il apparaît donc que la recherche de niveaux de $4f^{10} 5d6s$ ne peut être conduite de façon systématique car leurs combinaisons dépendent de perturbations difficiles à évaluer; plusieurs de ses niveaux profonds restent à trouver.

On ne peut conclure la description de $4f^{10} 5d6s$ sans mentionner un cas de perturbation pas encore observé dans les lanthanides : Relativement bien isolés dans leurs parités respectives, les deux niveaux $f^{10} ds \ ^7I_9$ à $17\ 514.50\ \text{cm}^{-1}$ et $f^{10} sp \ ^7K_{10}$ à $17\ 513.335\ \text{cm}^{-1}$ donnent des transitions un peu diffuses dont les structures Zeeman sont dissymétriques. Seul l'effet Stark peut expliquer une telle perturbation entre niveaux de parités opposées car l'opérateur qui lui est associé connecte ici leurs états. L'exploitation expérimentale d'un tel phénomène permettrait d'atteindre directement l'intégrale dipolaire radiale I (5d, 6p) car les fonctions d'ondes de ces deux niveaux sont maintenant calculées. Cet effet exceptionnel apporte une réponse probable à la question suivante : Pourquoi la transition $17\ 513_{10}^0 - 30\ 560_9$, présente-t-elle une intensité tellement variable selon les sources utilisées au point de disparaître dans l'arc observé par King ?

Configuration $4f^9 6p 6s^2$.

Conway et Worden avaient trouvé sans les identifier les premiers niveaux de $4f^9 6p6s^2$. La description préliminaire que nous avons donné de cette configuration (Annexe I) a été confirmée par les mesures ultérieures de déplacement isotopique. Quelques niveaux plus élevés ont été déterminés par la suite.

Etude paramétrique.

Les deux sous-configurations $4f^{10} ({}^5I) 5d6s$ et $4f^9 ({}^6H+{}^6F)6p6s^2$ ont été calculées sur une base commune. Le schéma de couplage L-S progressif a été adopté pour réduire le temps de calcul des éléments de matrices. D'autres couplages ont été essayés au niveau de la diagonalisation, au moyen de jeux de paramètres appropriés. L'approximation du "coeur réel" a été considérée dans $f^{10} ds$. L'interaction des deux configurations est décrite par deux paramètres $R^{(2)}(fd, ps)$ et $R^{(3)}(fd, sp)$ dont les valeurs initiales ont été obtenues dans Tm I ⁵³).

Si l'on compare les énergies expérimentales et les énergies calculées, (Tableau XIV) les résultats sont qualitativement corrects et 13 paramètres ont convergé vers des valeurs significatives en variant librement (Tableau XIII). Cependant, le couplage intermédiaire qu'ils définissent est plusieurs fois en défaut ; les facteurs de Landé et les déplacements isotopiques sont en contradiction avec la composition de plusieurs niveaux.

Deux effets sont à l'origine de ces désaccords :

- La troncature des deux configurations augmente les déviations

$|E_o - E_c|$. On sait que pour des groupes de niveaux proches, une petite variation des paramètres peut entraîner une grande modification dans la composition des secteurs propres et lorsque les distances entre niveaux calculés $|E_{o1} - E_{o2}|$ sont à la fois petites et relativement différentes, cet effet peut conduire à des fonctions d'ondes erronées.

- Les deux sous-configurations calculées ne sont pas isolées et les premiers niveaux de $4f^9 5d6s6p$ apparaissent à $23\ 000\ \text{cm}^{-1}$. l'interaction de $f^9 ps^2$ et $f^9 dsp$ met en jeu deux intégrales $R^{(1)}(6s6p, 6p5d)$ et $R^{(3)}(6s6p, 5d6p)$

Tableau XIII - Paramètres des configurations $4f^{10}5d6s$ et $4f^96p6s^2$

$4f^{10}5d6s$		$4f^96p6s^2$	
E_{av}	22897 (185)	E_{av}	29041 (245)
$F_2(4f,5d)$	74.6 (13)	$T(^6F-^6H)$	5200
$F_4 -$	9.5 (4)	$F_2(4f,6p)$	70.8 (15)
$G_1 -$	55 (10)	$G_2 -$	9.2 (3)
$G_3 -$	8	$G_4 -$	7
$G_5 -$	1.3	ζ_{4f}	1992 (81)
$G_3(4f,6s)$	155	ζ_{6p}	2015 (115)
$G_2(5d,6s)$	1305 (101)		
ζ_{5d}	453 (77)		
$A_{L(L+1)}$	3 (3)		
Interaction	$R^{(2)}(4f5d,6p6s) = - 500$ $R^{(3)}(4f5d,6s6p) = - 1263 (194)$		

42 niveaux observés , 13 paramètres libres $\overline{\langle \Delta E \rangle} = 158 \text{ cm}^{-1}$

TABLEAU XIV - NIVEAUX DES CONFIGURATIONS 4F10 5D 6S ET 4F10 6P 6S2

EO	EC	ΔE	GO	GC	COMPOSANTE PRINCIPALE	%	F9PS2 %
J = 2							
	28434			0.438	(5,3)3	73	5
			
J = 3							
	26681			0.842	(6,4)3	60	3
	27861			0.558	(5,4)1	46	3
	28954			0.748	(4,4)3	22	13
			
J = 4							
	24490			1.101	(7,5)3	60	1
	26174			0.888	(6,5)3	50	2
	26956			1.104	(6,4)3	39	3
27578.02	27705	-126	0.975	0.934	(5,5)3	42	35
	28190			0.920	H11/2*3/2	19	37
	28593			0.931	(5,4)3	36	20
	28933			0.534	(4,5)3	88	5
			
J = 5							
	21474			1.232	(8,6)3	67	0
	23824			1.113	(7,6)3	42	2
	24344			1.210	(7,5)3	44	2
	25473			1.187	(7,5)1	29	2
25744.36	25920	-175	1.080	1.087	(6,6)3	37	37
	26391			1.121	(6,6)3	20	32

	26694			1.078	(6 5 3	34	12
	27617			0.820	(5 6 3	80	8
	27973			1.224	H11/2*1/2	32	76
	28072			1.166	(5,5)3	22	46
28379.82	28316	63	1.405	1.453	F11/2*3/2	50	91
	28859			1.231	(7,5)1	31	36
	28965			1.059	H9/2*1/2	49	62
			
J = 6							
	18947			1.321	(8,6)3	69	0
21159.79	21146	13	1.245	1.193	(8,7)3	58	1
	21941			1.336	(7,5)3	62	3
23333.92	23465	-131	1.160	1.202	H15/2*1/2	28	51
23683.87	23549	134	1.300	1.210	(7,7)3	19	29
24302.02	24192	110	1.200	1.202	(7,6)3	35	11
24867.17	25033	-165	1.330	1.302	H13/2*1/2	27	37
25506.38	25423	83	1.170	1.198	(6,6)3	19	17
	25532			1.307	H15/2*3/2	34	62
	25913			1.007	(6,7)3	70	14
	26361			1.176	H11/2*1/2	31	42
26785.44	26739	46	1.285	1.228	H13/2*3/2	51	74
27068.94	27189	-120	1.220	1.222	H13/2*3/2	29	52
	27822			0.803	(5,7)3	92	0
	28216			0.972	(5,6)3	63	2
	28513			1.196	H11/2*3/2	29	45
28849.06	28835	14	1.365	1.339	F11/2*1/2	69	83
	28932			1.098	(5,5)3	28	12
			

J = 7

18094.52	17987	107	1.375	1.400	(8,6)3	84	2
18937.78	18876	61	1.280	1.263	(8,7)3	47	1
20614.32	20680	-65	1.320	1.249	(8,8)3	38	28
21074.20	21025	49	1.245	1.295	H15/2*1/2	55	56
21778.43	21928	-149	1.255	1.289	(7,6)3	49	15
23360.66	23329	31	1.222	1.226	(7,7)3	26	33
23655.56	23534	121	1.174	1.140	(7,8)3	55	30
23591.27	23630	-38	1.260	1.310	H15/2*3/2	30	38
24430.27	24275	155	1.265	1.238	(7,7)3	30	38
	25094			1.245	(8,7)1	36	25
25502.82	25400	102	1.165	1.177	(6,6)3	34	8
	26075			0.971	(6,8)3	85	0
26435.71	26486	-50	1.145	1.126	(6,7)3	46	9
26848.47	26745	103	1.280	1.244	H13/2*3/2	69	77
	28168			1.175	(7,7)1	43	14
	28402			0.972	(5,7)3	66	0
	28988			1.032	(5,6)3	35	0
			

J = 8

17613.36	17810	-196	1.330	1.323	(8,7)3	61	3
18903.21	18851	52	1.215	1.269	(8,8)3	39	3
20193.60	20329	-135	1.165	1.186	(8,9)3	63	13
20789.85	20792	-2	1.320	1.281	H15/2*1/2	54	62
21603.04	21873	-269	1.255	1.281	(7,7)3	47	20
23534.50	23340	194	1.310	1.259	H15/2*3/2	56	60
23280.46	23437	-156	1.176	1.161	(7,9)3	37	22
	23939			1.124	(7,9)3	45	0
	24275			1.245	(8,8)1	43	19

	25640			1.143	(6,7)3	41	0
26759.81	26702	57		1.088	(6,8)3	64	1
27059.89	27032	27	1.290	1.275	H13/2*3/2	89	93
	27904			1.161	(7,8)1	49	3
			

J = 9

17514.50	17599	-84	1.316	1.319	(8,8)3	90	1
19240.82	18989	251	1.217	1.218	(8,9)3	69	0
20209.00	20406	-197	1.135	1.147	(8,10)3	77	0
22045.79	22057	-11	1.215	1.230	(8,9)1	49	1
23841.91	23772	69	1.165	1.189	(7,9)3	44	1
23780.26	23891	-110	1.340	1.309	H15/2*3/2	84	84
	24094			1.219	(7,8)3	36	13
	26263			1.141	(7,9)1	51	0
	28053			1.140	(6,8)3	49	0
			

J = 10

18462.65	18438	24	1.282	1.288	(8,9)3	90	0
19797.97	19633	164	1.210	1.217	(8,10)3	86	0
22487.14	22540	-52	1.197	1.211	(8,10)1	68	0
	24237			1.211	(7,9)3	68	0
			

J = 11

	19196			1.273	(8,10)3	100	0
			

de valeur très élevée ; et six intégrales sont nécessaires pour décrire l'interaction de f^{10}_{ds} avec f^9_{dsp} .

Le couplage L S de base n'étant satisfaisant ni pour f^{10}_{ds} , ni pour $f^9_{ps^2}$, les vecteurs propres de la dernière diagonalisation ont été calculés sur une base modifiée :

- pour $f^9_{ps^2}$ en couplage J-j
 - pour f^{10}_{ds} dans le schéma $\langle ([f^N S_1 L_1) J_1, (ds) L_2] K S_2) J \mid$ défini par Racah⁵⁴⁾ pour décrire les niveaux de f^{13}_{ds} dans Yb II. Ce couplage convient à des configurations dont les niveaux parents sont largement séparés (les doublets à grande structure fine des "coeurs" $4^{4\ell+1}$ en particulier), et dans la sous-configuration $4f^{10} ({}^5I) 5d6s$ il peut représenter une assez bonne approximation pour les niveaux les plus profonds. En moyenne, la pureté des 170 niveaux théoriques, compte-tenu de l'interaction de configurations est de 52 % dans ces nouveaux couplages, contre 44 % en couplage L-S.

Configuration $4f^9 5d 6s 6p$.

La plupart des niveaux pairs non interprétés dans le calcul précédent, au-delà de $23\ 000\ \text{cm}^{-1}$ présentent des caractères communs, par l'intensité de leurs transitions visibles avec $4f^9 5d6s^2$ et infrarouges avec $4f^9 5d^2 6s$, par leurs facteurs de Landé relativement élevés et par des déplacements isotopiques ${}^{162}\text{Dy} - {}^{164}\text{Dy}$ groupés entre $X - 22$ et $X - 34\ \text{mK}$, où X est le déplacement isotopique du niveau $9\ 990^\circ$. Le plus profond d'entre eux est $23\ 031, g_8 = 1.38$; si l'on suppose que les premiers termes de $4f^9 5d 6s 6p$ s'interprètent correctement en couplage $[(f^9 d S_1 L_1) J_1 (sp) {}^3P_{J_2}] J$, le premier niveau attendu $({}^7H_8, {}^3P_0)_8$

possède un facteur de Landé égal à celui du fondamental de $f^9 ds^2$ ($g_g = 1.36$). Nous admettons donc que la configuration $4f^9 5d6s6p$ commence à $23\ 031.46\ \text{cm}^{-1}$.

L'étude de $f^9 ({}^6H + {}^6F) dsp$ par la méthode paramétrique nous conduirait à traiter plusieurs matrices d'ordre supérieur à 200 et l'accord théorie-expérience serait limité par les mêmes effets que dans le calcul de $f^{10} ds + f^9 ps^2$. L'intérêt d'un tel calcul apparaît donc actuellement inférieur à son énorme dimension. Le traitement des trois configurations sur une base commune dépasse les possibilités des programmes utilisés ici.

Configuration $4f^{10} 6s 6d$.

Les configurations $4f^N 6s 6d$ ($N = 13$ et 14) ont été localisées dans Tm I et Yb I et, si on leur suppose une évolution régulière en fonction de Z , les 20 niveaux de la sous-configuration $f^{10} ({}^5I_8) 6s 6d$ doivent être situés entre $36\ 000$ et $38\ 000\ \text{cm}^{-1}$. En utilisant les mêmes matrices angulaires que pour $4f^{10} 5d 6s$ (base tronquée à $f^{10} 5I$ et approximation du coeur réel), et les paramètres radiaux obtenus par Camus⁵⁵) dans $4f^{13} 6s6d$ on a pu reconnaître dix niveaux se combinant surtout à $4f^{10} 6s6p$ (raies diffuses autour de $5\ 000\ \text{Å}$) et dont les facteurs de Landé sont en bon accord avec les valeurs calculées. On s'attend à ce que l'unique niveau de $J = 11$ de cette sous-configuration donne avec $f^{10} sp {}^7K_{10}$ une transition intense : La raie à $5\ 120\ \text{Å}$ qui possède, outre un aspect diffus, la structure Zeeman perturbée caractérisant les transitions du niveau $f^{10} sp {}^7K_{10}$ $17\ 513^\circ$, justifie seule le niveau $37\ 039.00\ \text{cm}^{-1}$ ($g = 1.275$). Les autres niveaux attribués à $4f^{10} 6s 6d$ sont les suivants :

J	E_0	g_0	g_c
8	39 392.11	1.340	1.353
9	36 717.56	1.29	1.314
8	36 760.64	1.240	1.250
10	36 905.43	1.255	1.287
9	36 964.32	1.210	1.231
10	37 007.58	1.225	1.212
8	37 339.89	1.250	1.232
9	37 591.83	1.212	1.207
10	37 706.12	1.203	1.206
8	37 820.22	1.145	1.153

Les résultats expérimentaux sont actuellement trop parcellaires pour dépasser le stade de ce calcul a priori.

9. Interprétation des niveaux pairs de Dy II.

Etude des configurations paires $4f^{10}6s$ et $4f^{10}5d$.

Nous avons vu précédemment que Conway et Worden ont porté à 12 le nombre de niveaux de $f^{10}s$ et trouvé deux niveaux $14\ 952_{15/2}$ et $15\ 691_{17/2}$ qui ne s'interprétaient pas dans leur premier calcul théorique de cette configuration.

En 1971, Spector³¹⁾ observait dans le proche infrarouge des transitions $f^{10}d - f^{10}p$ et groupait les deux niveaux déjà cités et quatre nouveaux niveaux dans un multiplet $f^{10}d\ ^6K$. Mais, sans l'appui de calculs théoriques ni de mesures de facteurs de Landé, cette interprétation devait se révéler en partie erronée. Au terme de notre étude, nous avons identifié 7 niveaux nouveaux de $f^{10}s$ et 26 niveaux de $f^{10}d$ au moyen de transitions avec des niveaux impairs élevés, ce qui nous a

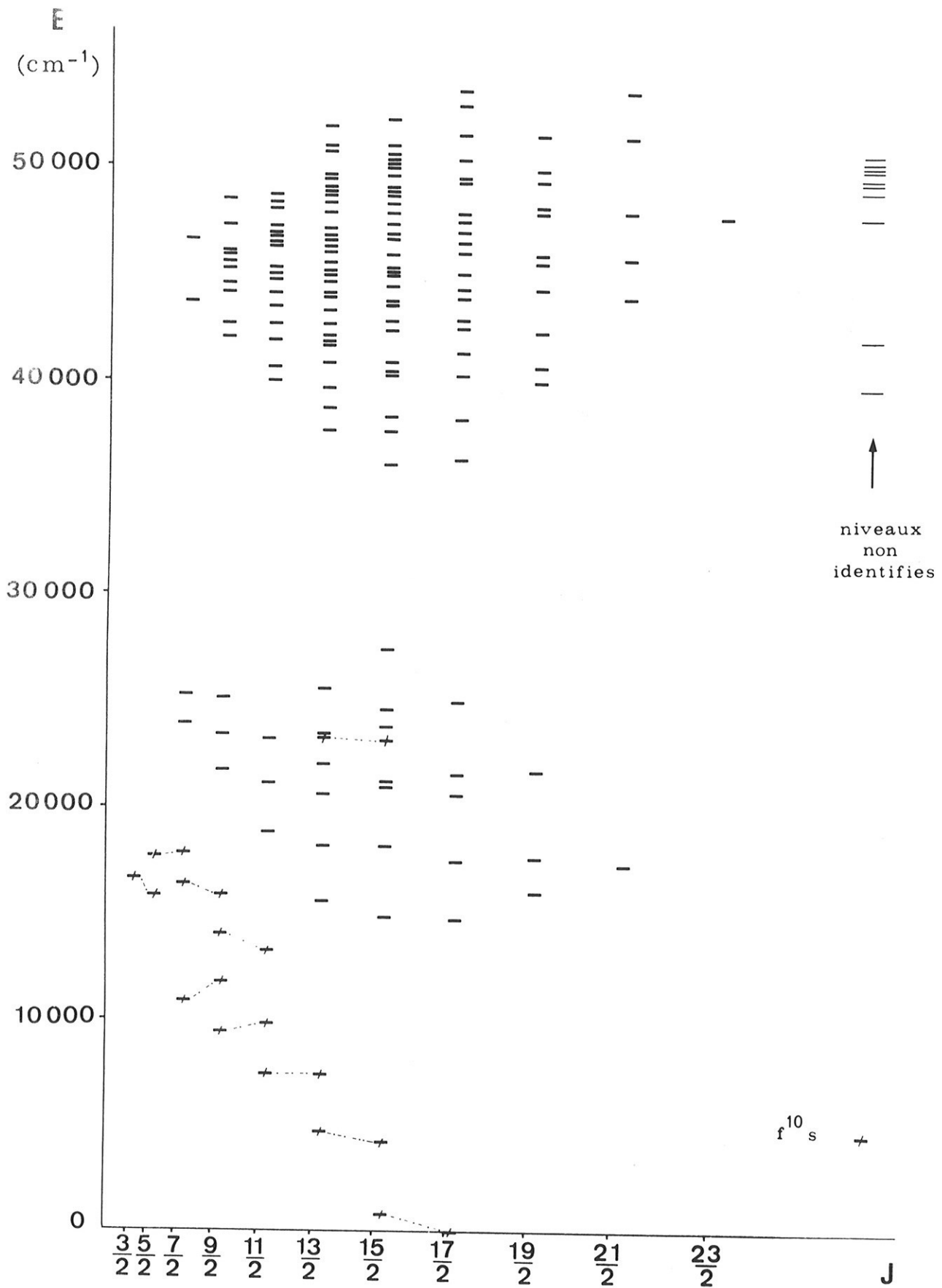


Fig. 7A - Niveaux pairs de Dy II .

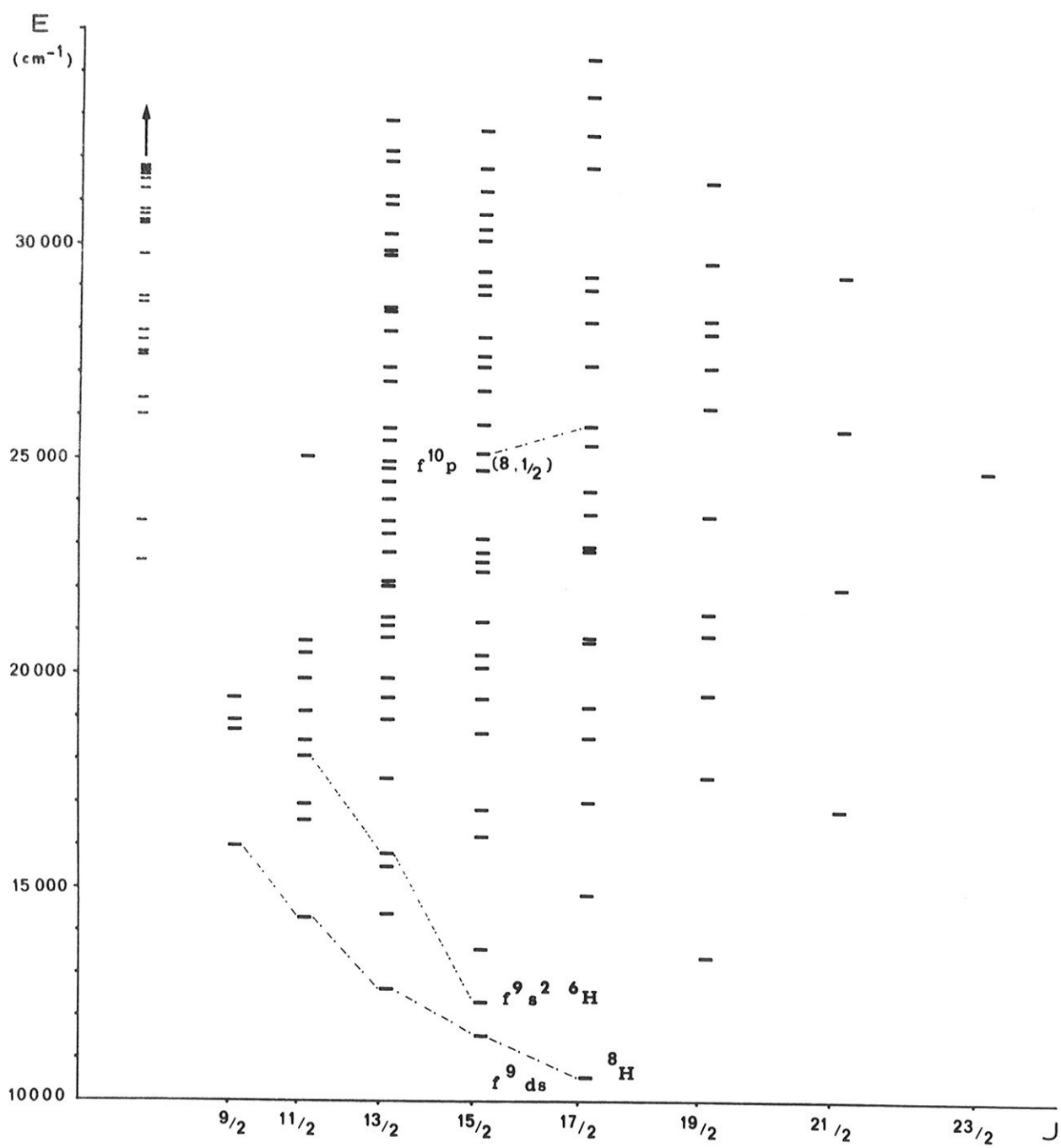


Fig. 7 B - Niveaux d'énergie Impairs de Dy II de $9/2$ à $23/2$.
(à gauche, les niveaux non interprétés)

permis d'interpréter 50 niveaux de ces deux configurations et de prévoir avec une marge d'incertitude réduite l'énergie des niveaux qui restent à découvrir.

Les coefficients angulaires des paramètres, qui figurent sous une forme littérale pour $f^N \ell$ dans le chapitre II ont été utilisés pour construire $f^{10}(d+s)$. Quelques propriétés remarquables de ces coefficients, qui n'apparaissent pas dans les formules ont été mises en évidence par Judd ⁵⁶) : Les paramètres d'échange $G_k(f, \ell)$ de l'interaction électrostatique ont la même dépendance angulaire pour tous les termes de spin maximum dans les configurations $f^N \ell$ de la seconde demi-période ; on ne peut donc déterminer à la fois $G_1(fd)$, $G_3(fd)$, $G_5(fd)$ qui si l'on connaît des termes de multiplicité moins élevée.

Configuration $4f^{10} 6s$.

La configuration $4f^{10} 6s$ présente avec $4f^4 6s$ de Nd II étudiée auparavant (annexe IV), de grandes analogies ; les configurations f^4 et f^{10} sont complémentaires et les écarts entre les termes les plus profonds 5I , 5F , 5S , possédant le spin maximum, ne dépendent que d'un paramètre E_3 qui augmente de 435 cm^{-1} (Nd II) à 526 cm^{-1} (Dy II). D'autre part, dans f^N , le couplage spin-orbite ne connecte pas les états de spin maximum, ce qui assure une certaine pureté aux termes profonds de ce type de configurations. Enfin, l'interaction électrostatique de l'électron $6s$ avec le coeur, est d'un ordre de grandeur plus faible que le couplage spin-orbite, ce qui assure aux niveaux une haute pureté dans le schéma

$$(f^n S_1 L_1 J_1, s \frac{1}{2}) J.$$

Pour ces raisons, nous avons rencontré dans le travail de classification sur $f^{10}s$, les mêmes difficultés que dans le néodyme : Les raies se classent dans des systèmes $f^{10}(S_1 L_1)_s - f^{10}(S_1 L_1)_p$ indépendants dont la position par rapport au niveau fondamental ne peut être déterminée qu'au moyen de quelques raies d'intercombinaison, faibles en intensité car interdites par les règles de sélection sur le couplage limite. C'est l'étude détaillée des structures Zeeman des raies qui a permis de reconnaître ces transitions dans les spectres de Nd II et de Dy II. Pour Dy II, l'écart de $869,05 \text{ cm}^{-1}$ a été rapidement mis en évidence entre des couples de raies présentant les facteurs de Landé $g_{5/2} = 1.855$ et $g_{3/2} = 1.700$, valeurs qui ont été rapprochées de celles obtenues dans un premier calcul de $f^{10}s$ en couplage intermédiaire pour les deux niveaux ${}^6S_{5/2}$ ($g = 1.90$) et ${}^4S_{3/2}$ ($g = 1.76$).

A partir de 15 niveaux impairs ($J = 5/2$) de ce système provisoire, nous avons déterminé deux niveaux pairs à $529,06$ et $2\,022,93 \text{ cm}^{-1}$ qui ont été identifiés aux $16\,418.93$ et $17\,912.80$ précédemment trouvés dans le système fondé sur $f^{10}s$ ${}^6I_{17/2}$. Enfin, deux niveaux situés à $23\,239 (15/2)$ et $23\,375 \text{ cm}^{-1} (13/2)$ sont issus du premier terme 3K de f^{10} . Il a été possible, à partir de ces données, d'effectuer une étude paramétrique assez complète de la configuration $4f^{10}6s$, et les niveaux parents de f^{10} sont assez éloignés du couplage LS pour avoir pu optimiser les paramètres E^1, E^2, E^3 et préciser la valeur de α et de γ . Les matrices angulaires de cette configuration ont été déduites de celles de f^4s déjà calculées en changeant le signe des éléments pour le couplage spin-orbite ; seule, l'interaction $Q(4f, 6s)$ a été recalculée.

Configuration $4f^{10} 5d$.

Les niveaux de $f^{10}d$ ont été trouvés au moyen de ceux des niveaux impairs élevés qui possèdent une composante $f^{10}p$ importante, mais nous n'avons pu étendre nos recherches aussi loin que dans Nd II. En effet, l'énergie rayonnée par les transitions $f^N_p \rightarrow f^N_d$ diminue lorsque N augmente car l'écart $f^N_d - f^N_s$ croît plus rapidement que l'écart $f^N_p - f^N_s$ (voir figure 3-II). A excitation égale, les niveaux élevés sont donc moins peuplés et l'intensité, qui varie comme σ^4 en émission spontanée, est plus faible car l'écart $f^N_d - f^N_p$ diminue avec N croissant. Il s'y ajoute le renversement de la structure fine des termes dans la seconde demi-période qui rend plus difficile la détermination des niveaux de petits J (on se rappelle la très rapide décroissance des intensités avec J dans le système $f^{10}_{ss'} - f^{10}_{sp}$, tableau V).

Le nombre plus faible de niveaux connus de $f^{10}d$ (32 au lieu de 50 dans Nd II f^4d) diminuait l'intérêt d'une étude théorique complète. Nous avons donc limité le coeur f^{10} à son terme fondamental 5I_1 , assez bien isolé des termes supérieurs et, pour réduire les écarts entre les énergies expérimentales et les énergies calculées, les pseudo-paramètres $E(^5I_J)$ de l'approximation du coeur réel ont été substitués à $\zeta 4f$. Les matrices angulaires des paramètres E_{av} , $F_{2,4}(f,d)$, ζ_d ont été extraits de f^4d , déjà étudiée (chapitre IV et annexe IV). Les coefficients de $G_{1,3,5}(f,d)$ ont été recalculés.

Bien que se recouvrant, les configurations $f^{10}s$ et $f^{10}d$ ne se perturbent pas car les termes de même nom LS sont assez éloignés, au moins pour les niveaux profonds que nous observons. Dans ces conditions, il n'a pas été possible de laisser varier les paramètres d'interaction

$R^{(2)}$ (fd, fs) et $R^{(3)}$ (fd, sf) maintenus fixés à des valeurs choisies en fonction des résultats de Nd II et des calculs a priori effectués dans Tm II ⁵⁵). La correction $\alpha L(L+1)$ a été introduite avec succès dans f^{10}_d . Parmi les trois autres paramètres effectifs rendant compte des interactions lointaines, et qui améliorent nettement les énergies calculées de f^4_d (voir chapitre IV), seul Y_4 converge, mais vers une valeur relativement élevée et sans diminution de l'écart quadratique moyen. L'insuffisance des résultats expérimentaux, et la troncature du coeur f^{10} masquent probablement ces effets de second ordre. On trouve dans les colonnes successives du tableau XVI les énergies observées et calculées E_o et E_c , $\Delta E = E_o - E_c$, les facteurs de Landé g_o et g_c et les deux premières composantes de la fonction d'onde (signe et carré des amplitudes, vecteur normé à 100). Les termes de f^{10}_s sont notés $^{2S+1}L_N * ^{2S+1}L$ où $^{2S+1}L_N$ représente le terme parent de f^{10} dans la notation de Nielson et Koster.

Les paramètres de la dernière diagonalisation et ceux de la dernière optimisation figurent dans le tableau XV ; on y a joint le jeu final obtenu en laissant varier α et γ de f^{10}_s et Y_4 de f^{10}_d .

Niveaux pairs élevés.

La description de 136 niveaux pairs élevés de Dy II au moyen du calcul de f^9_{sp} et de f^9_{dp} a été déjà publiée (Annexe III). Cependant, par souci de concision, les résultats du calcul théorique de ces deux configurations ont été présentés sous une forme condensée ; nous nous proposons de compléter ici le tableau I de cet article en donnant une liste de niveaux calculés auxquels ne correspondent pas actuellement de niveaux expérimentaux (Tableau XVII).

Tableau XV - Paramètres de $4f^{10}6s + 4f^{10} ({}^5I \text{ réel}) 5d$.

Paramètres	Diagonalisation	Moindres-carrés		avec Y_4	
$E_{av} f^{10} s$	19207	19207	(105)	19214	(291)
E^1	5970	5970	(59)	5971	(170)
E^2	25.5	25.5	(28)	25.3	(6)
E^3	526	526	(3)	528	(28)
$G_3(4f, 6s)$	213	213	(17)	213	(18)
ζ_{4f}	1765	1765	(15)	1765	(17)
α	14	14		17	(36)
γ	- 61	- 61		- 66	(90)
$E_{av} f^{10} d$	20203	20146	(157)	20278	(161)
$F_2(4f, 5d)$	131	131	(7)	144	(9)
$F_4 -$	6.6	7.7	(1.5)	8.2	(1.6)
$G_1 -$	131	126	(6)	135	(7)
$G_3 -$	18.1	17.6		25.0	$\frac{G_3}{G_5} = 0.2e$
$G_5 -$	2.0	1.93	(0.13)	2.75	(0.27)
ζ_{5d}	490	503	(35)	504	(39)
$A_{L(L+1)}$	17.5	17.3	(2)	18	(2)
Y_4	0	0		- 509	(167)
$R^{(2)} (fd, fs)$	300	300		300	
$R^{(3)} (fd, sf)$	1200	1200		1200.	
$\overline{\langle \Delta E \rangle}$	111	106		111	

TABLEAU XVI - NIVEAUX DE 4F10 6S + 4F10 (5I) 6D DE DY II (0-27520 CM-1).

E0	EC	ΔE	G0	GC	COMPOSANTES PRINCIPALES		
J = 1/2							
	19043			-.549	-84	6F	-12 3D1*4D
J = 3/2							
16758.920	16769	-10	1.720	1.759	-72	4S	-10 3P2*2P
	18403			1.149	-64	6F	-15 5S *4S
	19787			.569	71	4F	10 6F
	24844			.445	-45	6G	-14 3F4*4F
	26731			.717	-35	6G	-11 3D1*4D
J = 5/2							
15889.870	15877	12	1.870	1.900	-81	6S	-11 3P2*4P
17779.983	17795	-15	1.290	1.305	-78	6F	8 4F
	18766			1.106	76	4F	5 3D1*2D
	24577			.911	-70	6G	-9 3F4*4F
	25236			1.013	32	4G	-8 3P2*4P
	25883			.589	-53	D 6G	-47 D 6H
	26951			.970	-42	4G	-12 3D1*4D
	27248			.552	53	D 6H	-46 D 6G
J = 7/2							
10953.940	10980	-26	.464	.463	-92	6I	-4 3H4*4H
16418.925	16432	-13	1.309	1.313	-52	6F	41 4F
17912.800	17899	13	1.300	1.306	52	4F	41 6F
	22659			.916	-46	6G	23 4G
23976.765	23958	18	.837	.916	-44	D 6G	-42 D 6H

EO	EC	ΔE	GO	GC	COMPOSANTES PRINCIPALES			
----	----	----	----	----	-------------------------	--	--	--

J = 7/2

	24968			.960	-48	4G	-32	6G
25292.490	25261	31	.743	.703	61	D 6I	-35	D 6G
	26610			.790	53	D 6H	-25	D 6I
	26972			.948	13	3H4*4H	12	3G2*4G

J = 9/2

9432.070	9445	-12	.825	.826	82	6I	-11	4I
11801.010	11805	-3	.755	.756	-80	4I	-11	6I
14126.930	14120	6	1.320	1.320	62	4F	-22	6F
15979.270	15987	-7	1.400	1.398	70	6F	22	4F
	21146			1.202	34	6G	-26	4G
21813.120	21707	106	1.105	1.151	-51	D 6G	-36	D 6H
	22583			1.207	35	6G	32	4G
23495.195	23488	7	1.000	.978	52	D 6I	-31	D 6G
	24581			1.091	-25	4G	-11	3H4 4H
25214.392	25257	-42	1.010	.938	46	D 6H	-22	D 6K
	26352			.642	72	D 6K	-19	D 6I
	26833			1.175	25	D 4G	-13	3F4*4F
	26940			1.158	53	D 4G	10	D 4H

J = 11/2

7463.880	7460	3	1.015	1.016	-68	6I	28	4I
9870.990	9864	6	.996	.996	-67	4I	-26	6I
13338.270	13323	15	1.413	1.424	85	6F	-8	3G2 4G
18866.509	18789	77	1.260	1.282	-60	D 6G	-25	D 6H
	19681			1.275	-60	4G	28	6G
	20706			1.304	38	6G	21	4G

EO	EC	ΔE	G0	G0	GC	COMPOSANTES PRINCIPALES		
J = 11/2								
21177.839	21247	-69	1.150	1.136	-45	D 6I	22	D 6G
	22891			1.262	79	D 4G	8	D 6G
23309.800	23464	-154	1.105	1.075	38	D 6H	-25	D 6K
	24248			1.239	25	6G	-18	3G2*4G
	25078			.900	59	D 6K	-24	D 6I
	25321			1.103	-32	3H4*2H	21	3H3*2H
	26167			1.116	67	D 4H	14	D 4I
	26424			.799	71	3K2*4K	-17	3K1*4K
	27180			.634	91	D 6L	4	D 4K
J = 13/2								
4755.660	4737	18	1.134	1.129	-50	4I	48	6I
7485.090	7464	21	1.133	1.135	-49	6I	-47	4I
15691.988	15518	173	1.340	1.360	80	D 6G	17	D 6H
18219.716	18355	-135	1.240	1.239	-35	D 6H	-32	D 6I
	18895			1.370	91	6G	-5	3H4*4H
20748.425	21016	-267	1.170	1.164	34	D 6I	21	D 6K
22116.318	22119	-2	1.200	1.219	62	D 4H	22	D 6H
23375.405	23299	76	.994	.957	42	3K2*4K	-17	3K2*2K
23479.885	23411	68	1.000	1.039	48	D 6K	-20	D 6I
	24851			1.233	44	3H4*4H	-29	3H3*4H
	25474			1.043	43	D 4I	32	D 4K
25746.578	25794	-47	.888	.901	-69	D 6L	13	D 4I
	26802			.958	-50	3K2*2K	-23	3K2*4K
	27332			1.008	53	D 4K	-25	D 4I

J = 15/2

828.310	853	-24	1.202	1.201	-72	4I	22	6I
4341.100	4310	31	1.226	1.226	-75	6I	-23	4I
14952.144	15205	-252	1.300	1.301	69	D 6H	27	D 6I
18234.950	18081	153	1.240	1.232	-37	D 6I	27	D 6H
	19533			1.055	-35	3K2*2K	21	3K2*4K
21076.074	21030	46	1.130	1.135	47	D 6K	-18	D 4K
21338.350	21544	-205	1.180	1.192	67	D 4I	16	D 6I
23239.595	23316	-76	1.093	1.077	-41	3K2*4K	-23	3K2*2K
23840.250	23867	-26	1.036	1.023	-64	D 6L	-19	D 4K
24685.630	24561	124	1.100	1.098	-42	D 4K	-29	D 6K
27519.670	27666	-146	1.000	.980	-74	D 4L	-21	D 6L

J = 17/2

.000	17	-17	1.287	1.287	-94	6I	4	3K2*4K
14845.906	14896	-50	1.255	1.277	81	D 6I	15	D 6K
17589.522	17530	59	1.199	1.196	53	D 4K	-26	D 6K
	19169			1.160	57	3K2*4K	-18	3K1*4K
20700.595	20625	75	1.160	1.177	-43	D 4K	-34	D 6K
21627.535	21594	33	1.125	1.119	40	D 4L	-37	D 6L
25051.490	25122	-70	1.100	1.095	-55	D 4L	-40	D 6L
	25971			1.054	58	3L *2L	-31	3L *4L

J = 19/2

16117.396	15867	250	1.245	1.252	87	D 6K	10	D 6L
17788.820	17882	-93	1.170	1.174	67	D 4L	-22	D 6L
21806.920	21820	-13	1.175	1.178	-68	D 6L	-29	D 4L
	25578			1.148	-90	3L *4L	-8	3M *4M

EO	EC	ΔE	GO	GC	COMPOSANTES PRINCIPALES		
J = 21/2							
17406.594	17360	46	1.240	1.238	100	D 6L	0

Quatre niveaux d'énergie ont été trouvés récemment dans ce domaine :

40 626.42 $J = 15/2$ $g = 1.093$

44 529.45 $J = 7/2$ $g = 1.005$ identifié à $f^9_{sp} \text{ } ^8\text{H}$ 44 974 ($g = 1.028$)

45 132.74 $J = 15/2$ $g = 1.090$ qui perturbe par effet Paschen -

Back local le niveau 45 139.88 $15/2$ de f^9_{dp} .

Les deux niveaux 40 626 et 45 132 doivent être attribués aux termes élevés de $f^{10}(s+d)$, le second pourrait correspondre à $f^{10} ({}^1K_1)s {}^2K$ calculé à $44\,257 \text{ cm}^{-1}$ ($g_c = 1.078$).

Enfin, nous avons recherché systématiquement la configuration $4f^{10} 7s$ à partir des niveaux impairs présentant les plus fortes composantes $4f^{10} 6p$. Un niveau a été trouvé par ce moyen : 51 406.042 $g_{17/2} = 1.28$. Le facteur de Landé est celui que l'on attend pour le fondamental ${}^6I_{17/2}$ de $f^{10}s$ mais les raies classées ne présentent pas cet aspect diffus qui caractérise les transitions $7s \rightarrow 6p$. Les tentatives pour trouver le niveau $f^{10} 7s {}^4I_{15/2}$ immédiatement supérieur n'ont pas abouti, et le matériel expérimental dont nous disposons semble insuffisant pour déterminer par cette voie la limite d'ionisation de Dy II.

Configurations impaires de Dy II.

Une description sommaire des premiers niveaux impairs et l'analyse des configurations $4f^9 5d 6s$, $4f^9 6s^2$, $4f^9 5d^2$ et $4f^{10} 6p$ ont été publiées antérieurement (Annexe III). On se propose de donner ici quelques compléments sur le calcul des quatre configurations. Une présentation condensée avait exclu du tableau I de l'Annexe III, 727 niveaux (sur 840 calculés) qui ne correspondaient pas à des énergies observées.

TABLFAU XVII - Niveaux pairs théoriques non observés de Dy II
 ($4f^9 6s6p + 4f^9 5d6p$)

J	E_c	g_c	J	E_c	g_c
5.5	42481	1.316	4.5	48266	1.007
5.5	43494	1.267	1.5	48348	0.074
5.5	43864	1.362	2.5	48369	0.729
4.5	44928	1.310	4.5	48380	1.452
3.5	44974	1.028	5.5	48574	1.332
2.5	45646	0.678	5.5	48758	1.192
3.5	45938	1.602	8.5	48834	1.322
5.5	45958	1.372	4.5	48865	1.408
5.5	46139	1.177	5.5	49222	1.229
3.5	46328	1.145	1.5	49237	0.653
4.5	46410	1.438	5.5	49346	1.351
2.5	46634	0.541	5.5	49516	1.248
1.5	47055	-0.247	0.5	49707	-1.22
4.5	47130	1.276	5.5	49719	1.371
7.5	47410	1.364	1.5	50081	1.284
2.5	47506	0.604	6.5	50140	1.382
4.5	47530	1.524	5.5	50142	1.427
4.5	48016	1.215	6.5	50331	1.257
2.5	48098	0.586	6.5	50446	1.284
4.5	48114	1.366	1.5	50542	0.506

J	E_c	ξ_c	J	E_c	ξ_c
5.5	50690	1.417	6.5	51826	1.264
5.5	50753	1.412	0.5	51847	2.355
6.5	50761	1.115	7.5	51917	1.243
8.5	50824	1.240	8.5	52230	1.311
0.5	51230	0.618	9.5	52543	1.264
6.5	51641	1.256	8.5	52733	1.183
7.5	51822	1.294	

TABLEAU XVIII - Niveaux impairs théoriques non observés de Dy II

J	E_c	g_c	J	E_c	g_c
3.5	17477	1.043	2.5	23917	1.822
2.5	18758	0.683	5.5	24113	1.255
1.5	19740	-0.367	4.5	24173	1.348
3.5	20413	1.550	7.5	24258	1.412
4.5	20524	1.072	0.5	24306	3.201
4.5	20727	1.084	4.5	24408	1.300
3.5	20872	0.877	2.5	24477	1.436
4.5	21065	1.331	4.5	24512	1.351
3.5	21516	1.542	5.5	24764	1.306
5.5	21631	1.406	4.5	24768	0.768
4.5	21978	1.434	2.5	24977	1.571
2.5	22025	1.497	3.5	24983	1.382
5.5	22268	1.341	6.5	25067	1.240
2.5	22306	0.326	7.5	25725	1.320
3.5	22332	1.611	7.5	27175	1.132
4.5	22356	1.430	6.5	27341	1.352
3.5	22376	0.825	8.5	27955	1.254
5.5	22404	1.183	6.5	29177	1.392
2.5	22792	0.186	6.5	29622	0.992
4.5	22831	1.455	8.5	29826	1.341
5.5	23085	1.353	7.5	30155	1.225
5.5	23300	1.398	8.5	30805	1.284
5.5	23324	1.361	8.5	31442	1.224
3.5	23327	1.450	6.5	31704	1.164
1.5	23356	1.761	8.5	32172	1.346
5.5	23590	1.206	6.5	32381	1.304
5.5	23610	1.137	6.5	32625	1.181
4.5	23754	1.162			
3.5	23781	1.406			
2.5	23813	0.286			
3.5	23854	1.398			
4.5	23871	1.242			

Le tableau XVIII regroupe les niveaux non publiés susceptibles d'intéresser ultérieurement la classification. Les sous-configurations de Dy II construites sur le coeur $f^9 ({}^6\text{H}+{}^6\text{F})$ ont des matrices d'ordre maximum pour $J = 7/2$ et $9/2$; l'observation des structures Zeeman montre que les niveaux de $J = 7/2$ ou $9/2$ classent un petit nombre de raies peu intenses ; c'est pourquoi nous les avons limités à $25\,000\text{ cm}^{-1}$ pour $J < 11/2$ et à l'énergie du niveau interprété le plus élevé pour chaque J de $13/2$ à $21/2$.

Cinq niveaux trouvés récemment s'interprètent sur la base des configurations impaires profondes ; ce sont respectivement :

15/2	24 806.675	$g = 1.28$	($E_c = 24\,841,$	$g_c = 1.297$)
13/2	24 818.315	$g = 1.303$	(24 922,	1.303)
13/2	26 853.72	$g = 1.320$	(26 678,	1.292)
19/2	28 005.87	$g = 1.320$	(28 056,	1.306)
21/2	29 376.94	$g = 1.260$	(29 525,	1.247)

Le calcul en couplage intermédiaire accorde une composante $f^{10} p^6 K_{19/2}^o$ non négligeable (14 %) au niveau 28 005. En fait, l'intensité modérée de la transition 0-28 005 et la comparaison des facteurs de Landé mesurés et observés montrent que les fonctions d'onde des niveaux 28 005 et 28 306 doivent être presque pures relativement à l'interaction de configurations. Enfin, les deux niveaux de $J = 13/2$ 27 502.93, $g = 1.175$ et 27 792.48, $g = 1.150$ correspondent aux niveaux calculés 27 731 ($g_c = 1.177$) et 28 155 ($g_c = 1.173$).

CHAPITRE IV

INTERPRETATION DE CONFIGURATIONS DANS QUELQUES LANTHANIDES.

1. Etude des configurations $4f^4 6s$ et $4f^4 5d$ de Nd II.

Soixante dix-huit niveaux de $4f^4 5d$ et $4f^4 6s$ avaient été identifiés au cours d'une étude récente du spectre de Nd II (annexe 4), et une première interprétation paramétrique en avait été donnée en les calculant sur une base commune $f^4(d+s)$ au moyen de 18 paramètres issus de $Q + \Lambda$, dont deux paramètres effectifs $\alpha (4f^4 6s)$ et $A (f^4 d) \cong X_1$. Cependant, la grande amélioration apportée à $f^2(d+s)$ de Pr III ²¹) et à $f^{13}(d+s)$ de Tm II ⁵⁵) en introduisant tous les paramètres effectifs d'orbite (interactions à 2 particules) nous a incité à reprendre cette étude. Le cas du néodyme présente deux avantages : contrairement au cas de Pr III, on connaît les facteurs de Landé des niveaux, dont le calcul en couplage intermédiaire est un critère de qualité pour les fonctions d'onde ; et à nombre de paramètres presque égal à celui de Tm II, les données expérimentales sont beaucoup plus abondantes (78 niveaux au lieu de 13).

Cette nouvelle série de calculs a été divisée en trois itérations successives :

1) Introduction des paramètres effectifs β et γ dans les matrices de f^{10} s. Même en les maintenant fixés à des valeurs usuelles l'écart quadratique moyen sur les énergies n'a pas diminué et le paramètre α conserve une valeur 10 fois inférieure à celle admise dans la majorité des lanthanides. Ce fait semble particulier au néodyme : Carnall, Field et Rajnak avaient obtenu un résultat semblable dans l'étude de Nd IV $4f^3$ à partir d'un nombre plus élevé de niveaux ⁴¹⁾ ; γ et β ont été annulés dans les calculs suivants.

2) Introduction des paramètres effectifs dans f^4d : Les 50 niveaux connus sont issus du terme fondamental de f^4 et les paramètres $\bar{\alpha}$, β , γ qui n'améliorent pas l'accord théorie-expérience dans f^4 s, n'ont pas été considérés. Les quatre paramètres effectifs sur les termes de f^4d ont, dans la définition de ²¹⁾, les coefficients angulaires suivants :

$$\begin{aligned} & \langle (f^n S_1 L_1, d) S, L, J M_J | H_{\text{eff}} | (f^n S'_1 L'_1, d) S' L' J M_J \rangle = \\ & = \delta(S, S') \cdot \delta(L, L') \cdot \delta(L_1, L'_1) \cdot \delta(S_1, S'_1) L(L+1) A \\ & + \delta(L, L') \cdot \delta(S, S') \cdot \delta(S_1, S'_1) 4 n \sqrt{15} (-1)^{L+L_1+L'_1} \left[[L_1][L'_1] \right]^{\frac{1}{2}} \begin{Bmatrix} 2 & L_1 & L \\ L'_1 & 2 & 3 \end{Bmatrix} \\ & \times \sum_{\bar{S}_1 \bar{L}_1} (\bar{S}_1 \bar{L}_1 || S_1 L_1) (\bar{S}_1 \bar{L}_1 || S'_1 L'_1) (-1)^{\bar{L}_1} \begin{Bmatrix} L_1 & 3 & L'_1 \\ 3 & \bar{L}_1 & 3 \end{Bmatrix} X_3 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \delta(S, S') \cdot \delta(L, L') 72 n (-1)^{S_1 + S'_1} \left[[S_1][S'_1][L_1][L'_1] \right]^{\frac{1}{2}} \\
& \quad \times \sum_{\bar{S}_1, \bar{L}_1} (\bar{S}_1, \bar{L}_1 | \{S_1, L_1\}) (\bar{S}_1, \bar{L}_1 | \{S'_1, L'_1\}) \cdot \begin{Bmatrix} \frac{1}{2} S_1 & S \\ \frac{1}{2} S'_1 & \bar{S}_1 \end{Bmatrix} \cdot \begin{Bmatrix} L & L'_1 & 2 \\ L_1 & \bar{L}_1 & 3 \\ 2 & 3 & 2 \end{Bmatrix} Y_2 \\
& + \delta(S, S') \cdot \delta(L, L') 10 n (-1)^{S_1 + S'_1} \left[[S_1][S'_1][L_1][L'_1] \right]^{\frac{1}{2}} \\
& \quad \times \sum_{\bar{S}_1, \bar{L}_1} (\bar{S}_1, \bar{L}_1 | \{S_1, L_1\}) (\bar{S}_1, \bar{L}_1 | \{S'_1, L'_1\}) \begin{Bmatrix} \frac{1}{2} S_1 & S \\ \frac{1}{2} S'_1 & \bar{S}_1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L & L'_1 & 2 \\ L_1 & \bar{L}_1 & 3 \\ 2 & 3 & 4 \end{Bmatrix} Y_4
\end{aligned}$$

De nouvelles itérations effectuées en fixant seulement les paramètres du coeur f^4 ont fait converger les paramètres effectifs ; cependant, les niveaux de 4K , très perturbés par f^4s , doivent être exclus du processus d'optimisation.

3) Traitement des soixante dix-huit niveaux de f^4 (d+s) avec interaction de configuration : Le paramètre $R^{(2)}$ (fd, fs) n'a pas convergé et sa valeur a été fixée en fonction de résultats a priori ; par contre la valeur finale du paramètre $R^{(3)}$ (fd, sf) = 1 209 cm^{-1} s'accorde bien avec celle de l'intégrale de Slater calculée par la méthode Hartree-Fock 1 631 cm^{-1} dans Tm II 55).

Il est intéressant de comparer à partir du jeu final de paramètres l'importance des différents paramètres effectifs : On trouve dans les colonnes successives du tableau XIX, le jeu de paramètres de la dernière diagonalisation, le jeu MC_1 après moindres-carrés avec $R^{(2)}$ fixé à 300 :

Le paramètre X_3 est mal défini mais sa valeur ne fluctue pas ; le jeu MC_2 en annulant X_3 : l'écart quadratique moyen reste constant et les paramètres F_2 , G_5 , Y_2 et Y_4 sont sensiblement modifiés ; l'influence de X_3 n'est pas probante ce qui avait déjà été remarqué dans l'étude de Pr III ; le jeu MC_3 en annulant Y_4 : $\langle \overline{\Delta E} \rangle$ passe de 29 à 39 cm^{-1} et l'écart-type des paramètres augmente : Y_4 a un sens ; les jeux MC_4 et MC_5 fixent alternativement à 0 les paramètres Y_2 et X_1 qui sont les mieux définis. $\langle \overline{\Delta E} \rangle$ s'élève à 58 et 56 cm^{-1} . Enfin, en annulant tous les paramètres effectifs, l'écart-type est presque doublé : $\langle \overline{\Delta E} \rangle = 100 \text{ cm}^{-1}$.

Les optimisations réalisées ici minimisent $\Sigma (E_o - E_c)^2$ et la comparaison des facteurs de Landé expérimentaux et théoriques permet de vérifier a posteriori la validité des fonctions d'onde. On peut suivre dans le tableau XX la décroissance de $\langle \overline{\Delta g} \rangle = \sqrt{\frac{(g_o - g_c)^2}{N - p}}$ lorsque l'on élargit la base vectorielle de $f^4 ({}^5I)d$ à $f^4 d$ complet : Dans ce dernier cas, et en l'absence de paramètres effectifs, $\langle \overline{\Delta g} \rangle = 0.023$; l'introduction de X_1 réduit $\langle \overline{\Delta g} \rangle$ à 0.016 ; on constate encore une remarquable diminution de $\langle \overline{\Delta g} \rangle$ à 0.008 dans le traitement effectif complet (il convient de rappeler ici que nous avons mesuré les facteurs de Landé avec une incertitude de 0.005 à 0.01 selon les cas).

Le critère de qualité des facteurs de Landé montre que l'introduction de certains effets de second ordre améliore nettement les fonctions d'onde ; une conclusion semblable avait été tirée de l'étude des durées de vie dans le néon ⁵⁷) et des constantes de structure hyperfine dans le xénon ⁵⁸).

	DIAG.	MC 1	MC 2	MC 3	MC 4	MC 5	MC 6
E_{av}	23477.1	23477.1 65	23 477 65	23391 15	23231 25	23591 40	23441 65
$E_{av} f^4$	13031.4	13031.4	13 035 21	13043 28	13011 41	13037 24	13051 39
E^1	4441.4	4441.5 49	4459 45	4494 60	4284 81	4355 81	4443 16
E^2	24.0	24.0 2	24.9 2	26.5 3	16.3 4	19.1 4	24
E^3	439.6	439.6 2	439.5 3	438 4	439 6	434 1	435 2
F^2	139.2	139.2 5	144 2	136 2	145 3	136 3	150 5
F^4	15.5	15.5 0.3	15.4 0.3	15.0 0.4	12.3 0.4	15.7 0.6	12.4 0.6
G^1	223.8	223.8 3	225.5 2	211.5 2	206 3	208 3	188 4
G^3	27.0	27.0 0.5	27.0 0.5	27.0 0.6	22.4 0.5	28 1	23.1 0.8
G^5	2.93	2.93 0.3	3.22 0.1	2.27 0.1	2.3 0.1	2.6 0.1	2.6 0.2
$G^3 fs$	195.5	195.5 3	195.5 3	195 4	196 6	193 5	196 10
ζ_{4f}	780.3	780.3 2	780.1 2	778.5 3	777 4	777 4	784 7
ζ_{4f}	783.2	783.3 4	783.1 3	783 5	784 7	785 7	783 12
ζ	450.7	450.7 9	453.6 9	449 12	466 17	434 17	431 29
$A_{L^{(L+1)}}$	8.1	8.1 1	8.7 1	6.4 1	8.9 1	0	0
X^3	42.1	42.1 44	0	0	0	0	0
Y^2	-30.1	-30.1 7	-24 3	-32 4	0	-44 5	0
Y^4	-163.7	-163.7 113	-265 37	0	0	0	0
α	2.9	2.9 2	2.8 2	2 2	3 4	0	0
R^2	300	300	300	300	300	300	300
R^3	1208.9	1208 117	1193 115	1096 154	1302 226	1148 220	1181 378
$\langle \Delta E \rangle$		29	29	39	58	56	100
$\langle \Delta g \rangle$		0.008					

TABLEAU XIX . Paramètres radiaux de $4f^4(5d+6s)$ dans Nd II .

Paramètres	$f^4(5I)d$		$f^4(5I,F,S)d$		$f^4(13T)d$		f^4d entier					
E_{av}	21961	122	22175	41	22098	95	22126	97	23479	23095		
E^1							4548		4720	4720		
E^2							29		34	34		
E^3	436		436		436		436		437	437		
F_2 fd	128	8	116	7	112	8	109	5	145	6	140	4
F_4 fd	6.8	1.6	6	1.3	15.6	2	9.8	1	12.6	0.8	12.7	0.5
G_1 fd	175	6	171	6	200	10	206.5	6	187	4	202	3
G_3 fd	15.6	2	16	2	31	3	21.4	1	23.7	1	23.7	0.7
G_5 fd	1.3	0.3	1.3	0.2	0.4	0.5	1.7	0.2	2.6	0.2	2.05	0.1
ζ_{4f}	779	13	778	13	769	11	776	10	787	9	783	6
ζ_{5d}	450	48	429	50	456	41	461	39	401	39	458	23
α	5.1	2			2.3	2	23	2			9.9	1
Y_2					-114	20						
Y_4					34	174						
$\langle \Delta E \rangle$	183		179		140		134		130		83	
$\langle \Delta g \rangle$	0.043		0.046		0.043		0.035		0.023		0.016	

TABLEAU XX . Paramètres radiaux de $4f^4 5d$ ajustés sur différentes bases vectorielles .

Les soixante dix-huit niveaux d'énergie expérimentaux et calculés figurent dans le tableau XXI avec, pour les deux premières composantes de la base L S, le carré de l'amplitude précédé de son signe. La notation des termes de f^N est celle de Nielson et Koster. On donne néanmoins ci-dessous la fonction d'onde complète des deux premiers niveaux de f^{10}_s et f^{10}_d :

$$\begin{aligned}
 |f^4_s \ 0) &= 0.9888 |^6I) - 0.1086 |^3H_4, \ 4H) + 0.0755 |^3H_3, \ 4H) + 0.0640 |^3H_1, \ 4H) \\
 &\quad + 0.014 |f^4_d \ ^5I, \ ^6I) - 0.010 |f^4_d \ ^5G, \ ^6I) \\
 &\quad + 0.010 |^3G_2, \ ^4G) + 0.010 |^1G_4, \ ^2G) - 0.010 |^3H_2, \ ^4H) \\
 |f^4_d \ 4437) &= 0.9820 |f^4_d \ ^5I, \ ^6I) - 0.1118 |f^4_d \ ^3H_4, \ ^4K) + 0.0959 |f^4_d \ ^5I, \ ^4K) \\
 &\quad + 0.0656 |f^4_d \ ^3H_1, \ ^4K) - 0.0510 |f^4_d \ ^5I, \ ^6K) + 0.0010 |f^4_d \ ^3M, \ ^4K) \\
 &\quad + \dots
 \end{aligned}$$

La pureté de ces niveaux dans leurs configurations respectives est 99,97 %.

Enfin, le schéma des déviations $\delta E = E_o - E_c$ sur une échelle de Landé met en évidence quelques régularités (figure 8) : L'évolution de δE avec J pour les multiplets 6K et 6L est caractéristique des interactions spin-orbite, et une partie des erreurs résiduelles doit être attribuée aux effets de second ordre de ces interactions.

2. Interprétation de configurations fondées sur le coeur $4f^7$.

Lorsque nous avons entrepris l'interprétation des niveaux de Gd I et Gd II, le calcul de configurations du type $f^7 l' l''$ avait été déjà réalisé mais à partir de données expérimentales très incomplètes : Sans connaître les facteurs de Landé, Smith et Wybourne^{59, 60)} ont

TABLEAU XXI - NIVEAUX DE 4F4 (6S + 5D) DE ND II .

EO	EC	ΔE	GO	GC	COMPOSANTES PRINCIPALES			
J = 1/2								
10255.985	10261	-5	-.650	-.638	96	6F	3	4D1
J = 3/2								
8716.455	8732	-15	.010	.011	91	5I *6G	5	5F *6G
10439.137	10447	-7	1.050	1.046	-92	6F	-4	4F
11440.655	11417	23	.430	.441	92	4F	-3	6F
12747.515	12740	7	1.970	1.966	95	4S	-3	2P
J = 5/2								
8796.390	8787	9	.755	.750	58	5I *6G	30	5I *4G
9674.840	9639	35	.455	.473	-57	5I *6H	21	5I *6G
10786.665	10800	-13	1.300	1.291	-88	6F	-6	4F
10887.250	10887	0	.520	.515	43	5I *4G	-35	5I *6H
11748.735	11775	-26	1.975	1.967	94	6S	-4	4P2
12091.065	12074	17	1.055	1.055	-88	4F	6	6F
J = 7/2								
.000	19	-19	.445	.449	98	6I	-1	4H4
7524.740	7508	16	.480	.484	82	5I *6I	13	5I *4H
9198.400	9204	-5	.925	.915	-40	5I *6G	26	5I *4H
9908.650	9903	5	.862	.859	36	5I *4H	29	5I *6G
10666.780	10640	26	.845	.861	61	5I *6H	12	5I *4G
11377.485	11390	-12	1.390	1.382	-91	6F	-5	4F
12222.185	12212	10	.957	.957	57	5I *4G	-15	5I *6H
12878.950	12879	0	1.230	1.226	88	4F	-4	6F

EO	EC	ΔE	GO	GC	COMPOSANTES PRINCIPALES			
J = 9/2								
513.330	508	5	.805	.802	-70	6I	-28	4I
1650.210	1630	20	.760	.758	70	4I	-29	6I
6005.280	5992	13	.550	.555	-95	5I *6K	-2	5I *4I
8420.335	8403	17	.840	.840	90	5I *6I	6	5I *4H
9877.175	9879	-1	1.095	1.096	-34	5I *6G	33	5I *4H
10883.265	10883	0	1.140	1.127	43	5I *6G	23	5I *4H
11709.600	11700	9	1.050	1.058	-66	5I *6H	13	5I *4H
12087.105	12101	-13	1.430	1.418	-91	6F	-3	4F
13246.155	13237	9	.815	.818	66	5I *4I	-12	5I *4G
13703.425	13695	8	1.101	1.099	57	5I *4G	10	5I *4H
13971.500	13945	26	1.325	1.322	-91	4F	3	6F
J = 11/2								
1470.100	1465	5	1.025	1.023	-80	6I	-19	4I
3066.750	3046	20	.980	.978	-80	4I	19	6I
4437.570	4464	-26	.620	.621	95	5I *6L	-1	3H4*4K
6931.810	6923	8	.840	.843	96	5I *6K	-1	5I *4I
9357.925	9346	11	1.035	1.033	93	5I *6I	-1	5G *6I
10942.010	10940	2	1.230	1.227	39	5I *6G	-31	5I *4H
12021.350	12036	-14	1.157	1.185	40	5I *6G	19	5I *6H
12276.210	12328	-51	.870	.858	67	5I *4K	-14	5I *6H
12887.081	12903	-15	1.165	1.158	-50	5I *6H	25	5I *4H
13048.525	13039	9	1.450	1.444	-94	6F	-3	4G2
14049.810	14001	48	.767	.772	-76	4K2	21	4K1
14624.778	14625	0	1.008	1.008	66	5I *4I	-8	5I *4G
15148.000	15144	4	1.230	1.238	67	5I *4G	8	5I *4H

EO	EC	ΔE	GO	GC		COMPOSANTES PRINCIPALES		
$J = 13/2$								
2585.460	2587	-1	1.150	1.152	-87	6I	-12	4I
4512.500	4501	11	1.110	1.112	-87	4I	12	6I
5487.670	5502	-14	.850	.854	-97	5I *6L	1	3H4*4K
7950.090	7947	3	1.015	1.015	96	5I *6K	-1	5I *6I
10337.105	10334	3	1.150	1.151	92	5I *6I	-2	5I *4K
11580.875	11600	-19	.805	.806	-84	5I *4L	5	3K2*4L
12334.230	12334	0	1.325	1.320	-52	5I *6G	22	5I *4H
13298.888	13313	-14	1.285	1.282	46	5I *6H	30	5I *6G
13597.847	13637	-39	1.010	1.006	-68	5I *4K	11	5I *6H
14259.383	14291	-31	1.223	1.214	43	5I *4H	-24	5I *6H
14387.400	14408	-20	.953	.971	-51	4K2	-16	2K2
15417.300	15499	-81	.920	.922	-53	2K2	15	2K1
15923.260	15932	-8	1.115	1.118	-69	5I *4I	-12	5I *4H
$J = 15/2$								
3801.935	3815	-13	1.235	1.235	93	6I	5	4I
5985.560	5993	-7	1.200	1.198	-92	4I	5	6I
6637.420	6641	-3	1.005	1.005	-98	5I *6L	1	5I *6K
9042.750	9045	-2	1.130	1.126	96	5I *6K	-1	5I *4L
11373.490	11382	-8	1.230	1.228	90	5I *6I	-4	5I *4K
12906.575	12906	0	.970	.971	84	5I *4L	-5	3K2*4L
14481.957	14496	-14	1.333	1.324	-91	5I *6H	3	5I *4I
14957.611	14952	5	1.090	1.090	52	5I *4K	-20	4K2
15357.954	15307	50	1.073	1.081	40	4K2	25	5I *4K
16868.735	16935	-66	1.043	1.043	-52	2K2	12	2K1
17001.500	17015	-13	1.195	1.190	76	5I *4I	2	5I *4K

EO	EC	ΔE	GO	GC	COMPOSANTES PRINCIPALES			
J = 17/2								
5085.610	5113	-27	1.295	1.290	97	6I	3	4K2
7868.910	7865	3	1.110	1.108	-98	5I *6L	-1	3K2*4M
10194.800	10201	-6	1.200	1.202	-95	5I *6K	2	5I *4L
12459.995	12482	-22	1.280	1.281	88	5I *6I	-5	5I *4K
14301.794	14287	14	1.074	1.080	82	5I *4L	-5	3K2*4L
16295.726	16186	109	1.171	1.162	-45	4K2	20	5I *4K
16610.554	16584	26	1.170	1.171	57	5I *4K	16	4K2
J = 19/2								
9166.195	9155	11	1.180	1.181	98	5I *6L	1	3K2*4M
11392.100	11402	-9	1.250	1.255	93	5I *6K	-3	5I *4L
15749.198	15723	26	1.160	1.158	-80	5I *4L	-5	5I *6K
J = 21/2								
10516.775	10499	17	1.240	1.236	97	5I *6L	2	3K2*4M

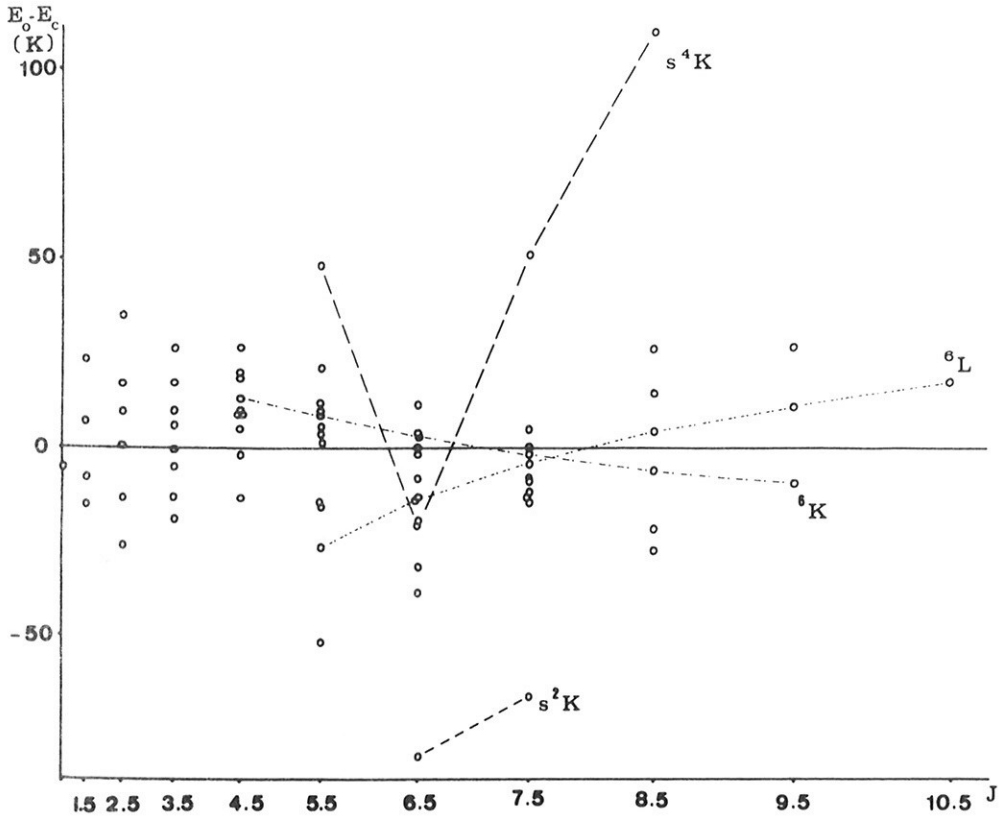


Fig. 8 Répartition selon J des déviations ($E_{\text{observé}} - E_{\text{calculé}}$) dans $f^4(d+s)$ de Nd II .

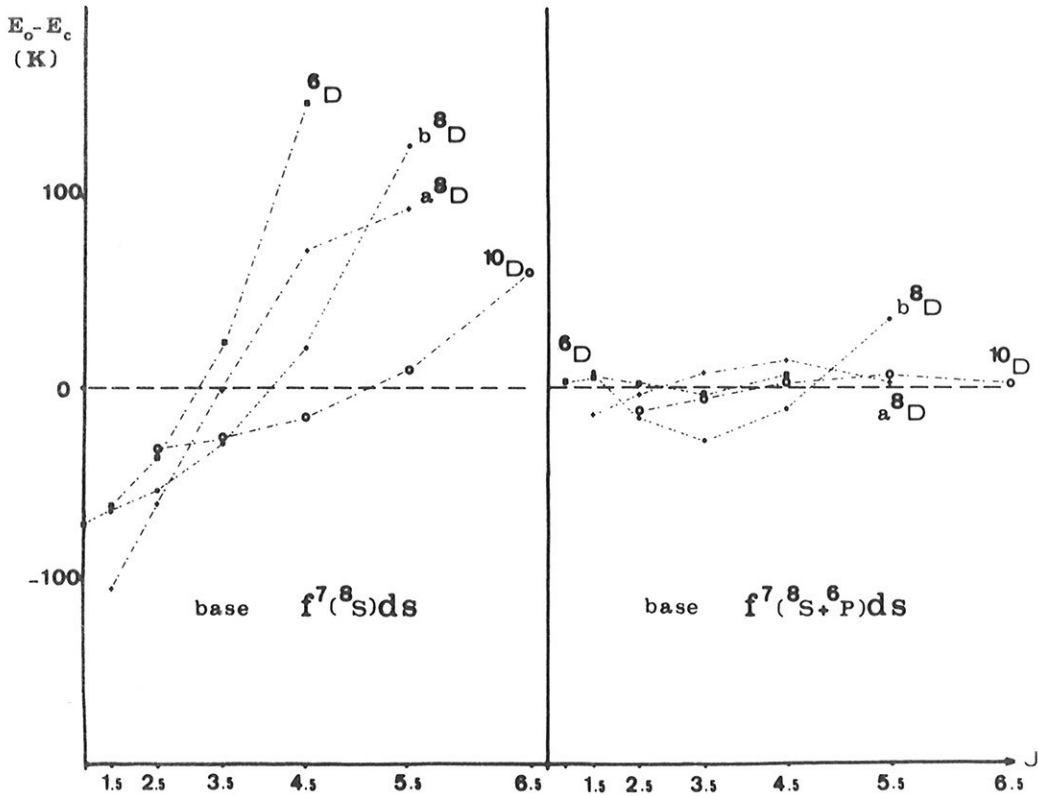


Fig. 9 - Répartition selon J des déviations ($E_{\text{observe}} - E_{\text{calcule}}$) dans f^7ds de Eu I étudié sur deux bases tronquées.

proposé une interprétation correcte des niveaux de Gd II et Eu I ; Goldschmidt et ses collaborateurs ⁶¹⁾ se sont intéressés aux niveaux de Gd II et Gd I. Deux raisons nous ont conduit à reprendre ces calculs : La première est liée aux besoins d'une classification nouvelle de Gd I et Gd II entreprise en 1968 ^{62, 63)} et l'étude des configurations $f^7(d+s)^3$ et f^7dss' de Gd I est absolument nouvelle ; la seconde, d'ordre théorique, a entraîné une amélioration des calculs de Smith et Wybourne : Les bases vectorielles utilisées jusqu'ici étaient limitées aux termes issus de $f^7 8S$, considéré comme pur en couplage LS.

En fait, l'étude de Conway et Wybourne ⁶⁴⁾ sur les fonctions d'ondes des termes profonds des lanthanides accorde au fondamental de Eu I la composition suivante :

$$\Psi = 0.9876 |^8S\rangle + 0.1557 |^6P\rangle + 0.0127 |^4D_{22}\rangle + 0.0124 |^4D_{20}\rangle + \dots$$

D'autre part, on peut reproduire exactement par un calcul simple ⁶⁵⁾ le facteur de Landé $g = 1.991$ du fondamental $8S_{7/2}$ de Eu III ($g_{LS} = 2.000$) en tenant compte seulement de la seconde composante $|^6P\rangle$.

Nous avons donc repris l'étude de quelques configurations construites sur un coeur f^7 dans une base vectorielle limitée à $8S + 6P$ pour améliorer l'accord sur les énergies au moyen des termes non diagonaux $\langle ^8S \dots J | H | ^6P \dots J \rangle$.

L'isolement des termes issus de $8S$ et l'importance restreinte de la partie $\langle ^8S \dots J | Q | ^6P \dots J \rangle$ des éléments non diagonaux font que les intégrales de Slater, optimisées dans les deux schémas de troncature sont sensiblement égales. Cette amélioration concerne surtout la structure fine des multiplets. Le calcul des configurations $f^7 (^8S)l$

(ou $f^7 ({}^8S)l_s$) conduit à rendre compte de la structure fine des multiplets au moyen d'un seul paramètre ζ_l et les pentes théoriques $\lambda = \frac{E_J - E_{J-1}}{J}$ des multiplets 9X et 7X , (ou ${}^{10,8}X$ et ${}^{8,6}X$) sont égales en valeur absolue et de signes opposés ; c'est l'introduction du paramètre ζ_{4f} qui permet de rendre compte des déviations expérimentales : La pente moyenne, positive, du multiplet 9D de $f^7 ds^2$ de Gd I est 2 fois plus élevée que celle, négative, du multiplet 7D .

Les termes élevés des configurations issues de f^7 sont encore inconnus et, en l'absence de niveaux expérimentaux construits sur $f^7 {}^6P$, on ne peut laisser varier ensemble les paramètres $T ({}^8S-{}^6P)$, distance des deux termes de f^7 et ζ_{4f} dont les effets sont corrélés. Nous avons choisi de fixer $T ({}^8S - {}^6P)$ à $30\,000\text{ cm}^{-1}$, valeur choisie en fonction des résultats expérimentaux obtenus dans Gd IV ; lorsque le paramètre ζ_{4f} varie librement, il converge vers une valeur nettement supérieure à celle que l'on peut déduire par interpolation entre les spectres voisins.

Nous donnons dans le calcul de $f^7 ds$ de Eu I, un exemple de l'excellent accord sur les énergies auquel on parvient en laissant varier ζ_{4f} (figure 9). Les différences entre les facteurs de Landé calculés avec $\zeta_{4f} = 1200\text{ cm}^{-1}$ et $\zeta_{4f} = 1800\text{ cm}^{-1}$ sont inférieures aux incertitudes expérimentales sur les facteurs de Landé du gadolinium et, en l'absence de critère de qualité sur les fonctions d'ondes, ζ_{4f} a été choisi par interpolation à partir de spectres voisins. L'accord sur les énergies est alors moins remarquable que dans Eu I, comme on le constate en comparant la figure 9 aux deux figures de l'annexe V qui concernent la même configuration observée dans Gd II.

Tableau XXII - Paramètres radiaux de $4f^7(8S+6P)5d6s$ dans Eu I .

E_0	21571	227
Distance $8S-6P$	28000	
$G_1(4f,5d)$	124.8	0.5
G_3 -	12.5	
G_5 -	1.3	
$G_3(4f,6s)$	157.5	1.4
$G_2(5d,6s)$	1202.5	10
ζ_{4f}	1844	136
ζ_{5d}	366.5	5
20 niveaux expérimentaux, $\langle \Delta E \rangle = 16\text{cm}^{-1}$		

TABLEAU XXIII - NIVEAUX DE 4F7 (8S+6P) 5D 6S DE EU I .

E0	EC	ΔE	GC	COMPOSANTE PRINCIPALE L-S *		
J = 1						
19599.	19596	3	3.289	S7	6D	94
	43008		3.996	P7	8F	100
	44980		-0.661	P7	6F	91
			
J = 3						
15138.	15153	-15	2.767	S9	8D	87
19544.	19538	6	1.993	S7	6D	80
19794.	19787	7	2.640	S7	8D	73
	43065		1.999	P7	8F	99
	44175		2.779	P7	8D	94
			
J = 5						
12924.	12935	-11	2.551	S9	10D	94
15249.	15253	-4	2.034	S9	8D	80
19462.	19460	2	1.748	S7	6D	70
19764.	19779	-15	1.950	S7	8D	63
	43164		1.720	P7	8F	96
	43908		2.190	P7	8P	61
	44973		2.147	P7	8D	61
			
J = 7						
13049.	13053	-4	2.079	S9	10D	94
15421.	15413	8	1.791	S9	8D	85

19364.	19367	-3	1.646	S7	6D	65
19712.	19739	-27	1.738	S7	8D	58
	43320		1.650	P7	8F	88
	43890		1.886	P7	8P	71
			

J = 9

13222.	13219	3	1.866	S9	10D	93
15680.	15666	14	1.683	S9	8D	85
19273.	19266	7	1.589	S7	6D	66
19631.	19642	-11	1.651	S7	8D	59
	43582		1.624	P7	8F	72
	44023		1.734	P7	8P	71
			

J = 11

13457.	13450	7	1.752	S9	10D	94
16080.	16076	4	1.628	S9	8D	87
19447.	19410	37	1.629	S7	8D	86
	44145		1.571	P7	8F	76
			

J = 13

13779.	13775	4	1.685	S9	10D	95
			

TABLEAU XXIV - NIVEAUX DE 4F7 (8S+6P) 5D 6S2 + 4F7 (8S) 5D2 6S
 + 4F7 (8S) 5D3 DE GD I .

E0	EC	AE	G0	GC	COMPOSANTE PRINCIPALE L-S	%	DS2 %	D2S %	D3 %
J= 0									
15972.27	16177	-204		0.000	8 7F	87	0	100	0
19361.80	19518	-156		0.000	9G	94	0	97	3
J= 1									
7653.93	7664	-10	2.985	2.990	D-7D	91	95	4	1
10222.23	10320	-97	3.470	3.484	8 9F	79	1	99	0
15758.65	15875	-116	3.330	3.439	6 9F	79	0	99	1
16012.88	16171	-158	1.630	1.559	8 7F	82	0	100	0
19062.22	19140	-77	2.965	2.977	7D	89	3	95	2
19375.58	19528	-152	1.495	1.507	9G	93	0	97	3
20306.94	20491	-184	0.030	-0.247	5F	49	0	99	1
21815.65	21873	-57	-0.360	-0.239	5F	49	0	99	1
	23597			1.502	6 7F	82	0	97	3
	25219			2.514	5P	97	0	100	0
28741.59	28980	-238	3.450	3.484	4F*9F	98	0	0	100
J= 2									
.00	18	-18	2.650	2.653	D-9D	95	98	1	1
6378.15	6217	161	2.980	2.995	11F	98	0	100	0
7562.46	7578	-15	2.000	2.000	D-7D	91	95	4	1
10359.91	10466	-106	2.160	2.159	8 9F	78	1	99	0
15744.83	15826	-81	2.085	2.146	6 9F	74	0	99	1
16078.05	16157	-78	1.580	1.544	8 7F	76	0	100	0
17332.22	17490	-157	2.640	2.642	9D	89	2	95	3

EO	EC	ΔE	GO	GC	COMPOSANTE PRINCIPALE		DS2 %	D2S %	D3 %			
					L-S	λ						
19014.07	19037	-22	2.000	2.013	7D	80	3	95	2			
19403.11	19546	-142	1.500	1.505	9G	93	0	97	3			
20303.80	20434	-130	0.935	0.939	5F	56	0	99	1			
20565.62	20835	-269	2.270	2.291	8 7P	79	0	98	2			
21745.65	21756	-10	0.900	0.916	7G	55	0	99	1			
22429.16	22297	132		2.993	4F*11F	98	0	0	100			
	23459			1.502	6 7F	81	0	97	3			
	24969			1.842	5P	96	0	100	0			
	25810			2.338	6 7P	78	0	86	14			
28725.15	29015	-289	2.160	2.158	4F*9F	96	0	0	100			
	31710			1.447	2G*9G	85	0	3	97			
	31975			1.525	D-7F	95	100	0	0			
	32184			2.310	D-7P	93	98	0	2			
	32671			0.732	2H*9H	88	0	0	100			
	33423			2.122	D-7D	76	6	2	34			
	33652			2.517	2D*9D	54	37	2	61			
	34596			1.501	4F*7F	92	0	0	100			
	37151			0.888	2G*7G	69	0	1	99			
	37404			1.540	D-5D	87	87	0	13			
	37529.79			37509	20	2.070	2.099	2F*9F	87	14	1	85
	J= 3											
	215.12			218	-2	2.075	2.072	D-9D	94	97	2	1
6550.40	6422	128	2.235	2.246	11F	98	0	100	0			
7426.71	7437	-10	1.750	1.752	D-7D	90	95	4	1			
10576.41	10693	-116	1.820	1.827	8 9F	77	0	100	0			
15173.64	15156	17	2.230	2.242	8 9P	83	0	96	4			

E0	EC	ΔE	G0	GC	COMPOSANTE PRINCIPALE		DS2 %	D2S %	D3 %
					L-S	%			
15758.28	15782	-23	1.810	1.833	6 9F	63	1	98	1
16165.99	16139	26	1.535	1.530	6 7F	71	0	100	0
17362.20	17457	-94	2.070	2.069	9J	73	1	95	4
18993.18	18953	40	1.730	1.760	7D	72	2	96	2
19446.55	19568	-122	1.500	1.563	9G	85	0	96	4
19574.02	19620	-45	2.220	2.176	6 9P	71	0	92	8
20299.87	20320	-20	1.250	1.244	5F	65	0	99	1
20759.67	20955	-195	1.860	1.875	8 7P	63	0	98	2
21647.94	21602	45	1.210	1.204	7G	66	0	99	1
22602.55	22498	104		2.246	4F*11F	93	0	0	100
	23247			1.502	6 7F	79	0	98	2
	24466			1.682	5P	93	0	100	0
	25544			1.920	6 7P	78	0	86	14
29041.72	29080	-38	1.808	1.827	4F*9F	94	0	0	100
	29475			1.993	7S	95	0	99	1
	31748			1.456	2G*9G	80	0	3	97
	32027			1.525	D 7F	91	100	0	0
	32498			1.901	D 7P	85	86	1	13
	32799			1.442	2H*9H	59	2	1	97
	32807			1.892	4P*9P	44	11	3	86
	33776			1.867	D-7D	63	43	1	56
	33989			1.977	2D*9D	36	58	1	41
	34515			1.521	4F*7F	86	0	0	100
	35262			2.228	2P*9P	70	0	10	90
	37059			1.222	2G*7G	62	1	1	98
	37210			1.499	D-5J	84	98	0	2
37548.38	37501	47	1.800	1.789	2F*9F	83	1	2	97

EU	EC	ΔE	GO	GC	COMPOSANTE PRINCIPALE	L-S	%	D52 %	D25 %	D3 %
J= 4										
532.97	516	16	1.840	1.840	D-9D	93	97	2	1	
6786.18	6700	86	1.930	1.946	11F	98	0	100	0	
7234.91	7223	11	1.660	1.652	D-7D	90	95	4	1	
10883.51	11009	-125	1.690	1.696	8 9F	75	1	99	0	
11685.59	11567	118	2.190	2.197	11P	98	0	100	0	
15519.18	15447	72	1.920	1.909	8 9P	71	1	96	3	
15833.80	15792	41	1.710	1.733	6 9F	59	0	98	2	
16296.62	16151	145	1.555	1.525	8 7F	68	1	99	0	
17439.76	17466	-26	1.830	1.837	9D	69	1	95	4	
19022.73	18984	38	1.630	1.642	7D	65	3	96	1	
19507.99	19603	-95	1.510	1.527	9G	86	1	96	3	
19718.72	19725	-6	1.925	1.910	6 9P	66	1	92	7	
20324.73	20137	187	1.360	1.377	5F	73	0	99	0	
21152.85	21277	-124	1.720	1.700	8 7P	66	0	98	2	
21544.68	21453	91	1.340	1.345	7G	72	0	98	2	
22835.40	22768	67		1.947	4F*11F	98	0	0	100	
	22956			1.503	6 7F	77	0	98	2	
	24988			1.769	6 7P	72	0	87	13	
27026.08	26990	36	2.180	2.195	4P*11F	97	0	1	99	
	28091			1.985	9S	91	0	98	2	
29174.58	29194	-19	1.675	1.694	4F*9F	91	0	0	100	
	31811			1.464	2G*9G	74	0	3	97	
	32422			1.511	D-7F	91	100	0	0	
	32948			1.297	2H*9H	78	0	1	99	

EU	EC	ΔE	G0	GC	COMPOSANTE PRINCIPALE L-S	%	D22 %	D25 %	D3 %
	33043			1.755	D-7P	75	61	1	38
32925.48	33222	-296	1.930	1.884	4P*9P	55	39	1	60
33734.10	33877	-142	1.930	1.839	4P*9P	32	5	2	93
	34322			1.652	D-7D	88	73	0	27
34554.98	34476	78	1.545	1.558	4F*7F	73	23	1	76
	35450			1.920	2P*9P	64	0	10	90
	36877			1.483	D-5D	76	42	1	57
	36936			1.361	2G*7G	49	57	1	42
37463.82	37500	-36	1.605	1.661	2F*9F	85	0	2	98
J= 5									
999.11	956	43	1.710	1.726	D-9D	92	97	2	1
6976.51	6892	84	1.610	1.604	D-7D	90	95	4	1
7103.34	7061	42	1.780	1.795	11F	98	0	100	1
11296.46	11423	-126	1.625	1.630	8 9F	74	0	100	0
12057.16	11954	103	1.960	1.963	11P	98	0	100	0
15720.71	15640	80	1.760	1.723	8 9P	51	0	97	3
15989.46	15881	108	1.650	1.668	6 9F	46	1	97	2
16534.51	16310	224	1.530	1.543	8 7F	62	0	99	1
17600.82	17586	14	1.715	1.720	9D	67	2	95	3
19085.76	19027	58	1.580	1.521	7D	40	1	98	1
19592.49	19652	-59	1.510	1.506	9G	90	0	97	3
19978.77	19940	38	1.760	1.735	6 9P	63	1	93	6
20588.29	20211	377	1.495	1.546	5F	39	1	96	3
21439.72	21316	123	1.365	1.375	7G	90	0	98	2
	22577			1.503	6 7F	76	1	97	2
23128.22	23106	22		1.797	4F*11F	98	0	0	100

EO	EC	AE	GO	GC	COMPOSANTE PRINCIPALE L-S	%	D52 %	D25 %	D3 %
27258.99	27261	-2	1.950	1.962	4P*11P	97	0	1	100
29439.33	29384	55	1.615	1.628	4F*9F	90	0	0	100
	31905			1.471	2G*9G	71	1	2	97
	33057			1.504	2H*9H	75	2	1	97
	33125			1.370	D-7F	92	95	0	4
33491.37	33469	22	1.780	1.786	4P*9P	78	0	2	98
33782.14	33806	-23	1.770	1.682	2D*9D	37	4	2	94
34720.19	34534	186	1.500	1.559	4F*7F	63	4	1	95
J= 6									
1719.07	1634	85	1.665	1.663	D-9D	95	97	2	1
7480.35	7499	-18	1.710	1.712	11F	98	0	100	0
11830.39	11946	-115	1.595	1.597	8 9F	70	0	100	0
12345.97	12271	74	1.825	1.822	11P	94	0	100	0
16228.82	16047	181	1.600	1.603	6 9F	57	0	98	2
17015.95	16715	300	1.520	1.504	8 7F	76	0	100	0
17906.73	17889	17	1.635	1.654	9D	75	2	96	2
19682.14	19701	-18	1.500	1.530	9G	92	0	97	3
21389.50	21239	150	1.425	1.409	7G	94	0	98	2
	22100			1.504	6 7F	73	0	98	2
23479.21	23508	-28		1.712	4F*11F	98	0	0	100
27715.35	27738	-22	1.815	1.832	4P*11P	99	0	0	100
29867.53	29681	186	1.585	1.590	4F*9F	90	0	0	100
J= 7									
7947.29	8028	-80	1.660	1.660	11F	98	0	100	0
12486.55	12589	-102	1.560	1.570	8 9F	70	100	0	0

EO	EC	ΔE	GO	GC	COMPOSANTE PRINCIPALE		D22 %	D25 %	D3 %
					L-S	%			
16758.94	16568	190	1.570	1.570	6 9F	68	0	98	2
19781.57	19730	51	1.515	1.502	9G	94	0	97	3
21514.97	21229	285	1.430	1.430	7G	97	0	98	2
23883.50	23969	-85		1.659	4F*11F	98	0	0	100
30367.36	30104	263	1.565	1.566	4F*9F	93	0	0	100
J= 8									
8498.43	8641	-142	1.620	1.624	11F	99	0	100	0
19850.15	19690	160	1.500	1.501	9G	96	0	97	3
24332.72	24479	-146		1.623	4F*11F	98	0	0	100

TABLEAU XXV - NIVEAUX DE 4F7 6S2 + 4F7 5D 6S + 4F7 5D2 DANS GD II .

EU	EC	ΔE	GO	GC	COMPOSANTE PRINCIPALE		F7S2	F7DS	F7D2
					L-S	%	%	%	%
J= 1/2									
10908.22	10926	-17	3.325	3.309	7D*6D	95	0	100	0
12662.19	12622	40	3.990	3.963	8F	94	0	1	99
17987.61	18107	-119	-1.13	-1.180	8G	77	0	0	100
20453.65	20501	-47	-0.730	-0.767	6F	75	0	0	100
J= 3/2									
2856.67	2881	-24	2.810	2.810	9D*8D	80	0	86	14
4027.16	4101	-73	3.160	3.142	10F	87	0	10	90
9451.70	9457	-5	2.800	2.788	7D*8D	74	0	79	21
10802.62	10832	-29	1.870	1.865	7D*6D	94	0	100	0
12703.45	12654	49	1.985	1.990	8F	93	0	1	99
18001.30	18116	-114	0.940	0.994	8G	75	0	1	99
18369.33	18421	-51	2.760	2.738	8D	66	0	24	76
20369.26	20405	-35	1.052	1.049	6F	74	0	0	100
24965.84	25104	-138	2.400	2.399	6P	91	0	1	99
J= 5/2									
.00	7	-7	2.555	2.558	9D*10D	96	0	100	0
3082.01	3097	-14	2.045	2.053	9D*8D	79	0	86	14
4212.76	4287	-74	2.210	2.200	10F	87	0	9	91
9328.86	9353	-24	2.055	2.053	7D*8D	74	0	79	21
10633.08	10666	-32	1.670	1.659	7D*6D	93	0	100	0
12776.07	12712	64	1.710	1.708	8F	92	0	1	99
17971.60	17985	-13	1.690	1.978	8P	33	0	12	88

EU	EC	ΔE	GU	GC	COMPOSANTE PRINCIPALE L-S	%	F7S2 %	F7DS %	F7D2 %
18095.70	18176	-80	1.720	1.449	8G	61	0	2	98
18955.05	18989	-33	2.175	2.149	8P	49	0	10	90
20227.87	20246	-18	1.330	1.313	6F	72	0	0	100
24791.51	24846	-54	1.890	1.883	6P	91	0	1	99

J= 7/2

261.04	264	-2	2.080	2.084	9D*10D	95	0	100	0
3427.27	3434	-6	1.870	1.808	9D*8D	76	4	83	13
3444.24	3445	0	1.920	1.986	**8S**	93	95	4	1
4483.85	4559	-75	1.895	1.887	10F	87	0	8	92
9142.90	9172	-29	1.810	1.814	7D*8D	73	0	78	22
10391.79	10400	-8	1.605	1.700	7D*6D	75	0	82	18
10599.74	10464	135	2.225	2.094	10P	77	0	20	80
12891.69	12806	85	1.615	1.614	8F	90	0	1	99
17869.88	17818	51	1.715	1.784	8P	35	0	13	87
18150.64	18221	-70	1.487	1.455	8G	62	0	1	99
19223.21	19224	0	1.860	1.831	8P	44	0	9	91
20047.34	20043	4	1.410	1.420	6F	67	0	1	99
24113.30	24174	-60	1.730	1.725	6P	85	0	1	99
29224.35	29123	101	2.015	1.975	8S	93	1	1	98

J= 9/2

633.27	631	2	1.870	1.869	9D*10D	94	0	100	0
3972.17	3952	20	1.700	1.690	9D*8D	78	0	87	13
4852.30	4929	-76	1.755	1.744	10F	88	0	8	92
8884.81	8902	-17	1.725	1.702	7D*8D	72	0	78	22
10091.57	10022	69	1.550	1.557	7D*6D	92	0	99	1

EO	EC	ΔE	GO	GC	COMPOSANTE PRINCIPALE		F752 %	F7DS %	F7D2 %
					L-S	%			
11066.86	10930	136	1.950	1.942	10P	92	0	4	96
13076.05	12955	121	1.570	1.571	8F	88	0	1	99
17817.12	17776	41	1.590	1.621	8D	32	0	12	88
16319.24	18361	-41	1.526	1.517	8G	53	0	3	97
19401.98	19357	44	1.650	1.612	8P	41	0	3	97
19946.78	19942	4	1.550	1.561	6F	42	0	5	95
J= 11/2									
1158.94	1153	5	1.740	1.754	9D*10D	94	0	100	0
4841.11	4790	51	1.635	1.635	9D*8D	79	0	83	17
5339.48	5418	-78	1.655	1.668	10F	86	0	9	91
8551.05	8513	38	1.635	1.640	7D*8D	74	0	79	21
11492.20	11379	113	1.790	1.801	10P	90	0	7	93
13377.98	13210	167	1.565	1.548	8F	87	0	1	99
17725.05	17691	34	1.530	1.522	6F	43	0	9	91
18641.36	18729	-87	1.485	1.479	8G	75	0	4	96
19750.11	19681	69	1.525	1.526	6F	49	0	7	93
J= 13/2									
1935.30	1917	18	1.700	1.688	9D*10D	97	0	100	0
5897.26	5981	-83	1.630	1.625	10F	95	0	0	100
13925.73	13716	209	1.545	1.535	8F	94	0	0	100
18676.97	18691	-14	1.450	1.454	8G	95	0	0	100
J= 15/2									
6605.15	6709	-103	1.600	1.596	10F	96	0	0	100
18753.03	18672	81	1.435	1.464	8G	96	0	0	100

TABLEAU XXVI - NIVEAUX DE 4F7(85+6P)(5D+6S)6P DE GD II

EU	EC	ΔE	G0	GC	COMPOSANTE PRINCIPALE		F7SP %
					L-S	%	
$U = 1/2$							
31977.39	32094	-116	3.965	3.958	9D-8F	82	0
38934.15	38826	108	3.53	3.569	7D-8F	44	0
40162.39	40132	30	-0.45	-0.514	7D-6F	93	0
41475.63	41581	-105	3.61	3.601	7D-6D	53	0
$U = 3/2$							
25960.07	26013	-52	3.095	3.102	9D 10F	80	0
29877.94	29820	57	2.845	2.843	9D-8D	79	0
32048.84	32163	-114	1.990	1.995	9D-8F	80	0
33181.60	33168	13	2.350	2.389	3P*6P	90	93
36995.78	37017	-21	2.745	2.750	7D-8D	87	2
38828.40	38751	77	1.835	1.843	7D-6D	40	0
40091.60	40071	20	1.190	1.172	7D-6F	84	0
41391.65	41488	-96	1.930	1.942	7D-6D	48	0
42964.58	42821	143	2.400	2.401	7D-6P	85	5
$U = 5/2$							
26211.91	26261	-49	2.175	2.172	9D-10F	77	0
27297.74	27343	-45	2.375	2.375	9D-10D	41	26
29197.89	29005	192	2.315	2.372	9D-10D	43	51
29965.75	29872	93	2.035	2.086	9D-8D	72	3
32150.14	32298	-147	1.815	1.793	9D-8F	65	7
32260.12	32179	81	2.170	2.220	9D-8P	33	38
32750.42	32761	-10	1.940	1.927	3P*6P	80	90
36845.37	36896	-50	2.040	2.038	7D-8D	80	2
38628.60	38591	37	1.665	1.633	7D-6D	37	1

E0	EC	ΔE	G0	GC	COMPOSANTE PRINCIPALE		F7SP %
					L-S	%	
39024.49	39154	-129	2.205	2.226	7D-8P	49	24
39971.22	39958	13	1.445	1.412	7D-6F	71	0
41260.19	41337	-76	1.700	1.703	7D-8F	44	0
42745.31	42662	83	1.850	1.889	7D-6P	84	5
49547.12	49529	18	2.285	2.271	1P*8P	51	53
J = 7/2							
25668.69	25737	-68	2.190	2.191	3P*10P	79	86
26595.22	26639	-43	1.865	1.865	9D-10F	73	1
27988.07	27926	62	1.960	1.966	9D-10D	36	31
29242.25	29259	-16	1.945	1.961	9D-10D	42	52
30008.89	29943	65	1.830	1.836	9D-8D	61	7
31908.12	32027	-118	1.865	1.842	3P*8P	40	88
32262.79	32209	53	1.745	1.878	9D-8P	28	34
32490.51	32513	-22	1.790	1.663	9D-8F	60	7
33211.48	33149	62	2.155	2.170	9D-10P	77	13
36711.18	36761	-49	1.795	1.793	7D-8D	73	2
38320.17	38338	-17	1.545	1.562	7D-6D	34	1
39170.19	39343	-172	1.835	1.873	7D-8P	44	19
39777.22	39767	10	1.500	1.498	7D-6F	52	1
41097.15	41145	-47	1.615	1.619	7D-8F	55	0
42628.17	42445	183	1.705	1.714	7D-6P	86	4
49332.23	49344	-11	1.945	1.926	1P*8P	53	55
J = 9/2							
26455.45	26476	-20	1.910	1.917	3P*10P	66	78
27162.22	27196	-33	1.735	1.730	9D-10F	67	3
29045.29	29000	45	1.830	1.818	9D-10D	51	12

EO	EC	ΔE	GO	GC	COMPOSANTE PRINCIPALE		F7SP %
					L-S	x	
30027.38	29948	79	1.780	1.772	9D-10D	32	6
30849.65	30821	28	1.785	1.779	3P*8P	68	79
32304.41	32164	140	1.750	1.775	9D-8P	35	30
32684.71	32749	-64	1.625	1.595	9D-8F	63	2
33596.03	33588	8	1.930	1.925	9D-10P	74	13
36647.24	36651	-3	1.675	1.669	7D-8D	64	1
38029.85	37991	38	1.430	1.545	7D-6D	35	1
39250.74	39292	-41	1.665	1.572	7D-6F	41	2
39537.16	39652	-114	1.610	1.681	7D-8P	33	12
40924.93	40949	-24	1.560	1.577	7D-8F	68	0
49053.74	49015	38	1.778	1.771	1P*8P	57	59
J = 11/2							
27864.53	27873	-8	1.690	1.679	9D-10F	45	12
28502.31	28393	109	1.750	1.769	3P*10P	50	52
30101.37	30112	-10	1.750	1.709	9D-8D	42	18
30366.82	30314	52	1.700	1.708	9D-10D	51	2
32946.20	33040	-93	1.550	1.572	9D-8F	63	1
34178.78	34314	-135	1.815	1.783	9D-10P	68	15
36461.16	36499	-37	1.580	1.565	7D-8D	48	0
38553.21	38459	94	1.480	1.530	7D-6F	54	0
40785.11	40797	-11	1.530	1.553	7D-8F	80	0
J = 13/2							
29353.34	29315	38	1.610	1.620	9D-10F	77	0
30996.85	31033	-36	1.650	1.673	9D-10D	80	0
33557.95	33641	-83	1.535	1.555	9D-8F	73	0
40773.21	40713	60	1.520	1.537	7D-8F	85	0
J = 15/2							
31145.65	30982	163	1.565	1.596	9D-10F	97	0

TABLEAU XXVII - NIVEAUX DE 4F7 (8S) 5D 6S 7S DE GD I .

EO	EC	AE	GO	GC	COMPOSANTE PRINCIPALE		
					L-S		%
J = 0							
	40667			0.000	7 6	5D	100
			
J = 1							
35254.58	35307	-52	2.985	2.986	9 8	7D	91
	40567			1.649	7 6	5D	90
	40672			2.869	7 6	7D	50
	41774			2.996	7 8	7D	53
			
J = 2							
32957.77	32933	24	2.656	2.662	9 10	9D	93
35435.99	35467	-31	1.995	2.068	9 8	7D	79
35606.14	35605	1	2.610	2.578	9 8	9D	74
	40367			1.575	7 6	5D	85
40452.28	40452	0	2.000	2.484	7 8	9D	71
	40563			2.126	7 6	7D	33
	41649			2.008	7 8	7D	51
			
J = 3							
31907.02	31920	-12	2.495	2.497	9 10	11D	99
33195.30	33177	18	2.075	2.078	9 10	9D	92
35716.79	35714	2	1.850	1.882	9 8	7D	50
35860.58	35855	5	1.990	1.929	9 8	9D	46
	40050			1.537	7 6	5D	85

EU	EC	ΔE	GO	GC	COMPOSANTE PRINCIPALE L-S		%
	40225			1.931	7 8	90	54
	40379			1.884	7 8	90	35
	41447			1.761	7 8	50	48
			
J = 4							
32178.45	32188	-11	2.128	2.095	9 10	110	98
33534.71	33532	2	1.855	1.845	9 10	90	91
36060.12	36051	9	1.740	1.803	9 8	90	65
36326.63	36281	45	1.670	1.676	9 8	70	66
	39557			1.522	7 6	50	86
39897.70	39898	0	1.730	1.722	7 6	70	41
40125.07	40114	11	1.720	1.774	7 8	90	50
	41147			1.664	7 8	70	44
			
J = 5							
32547.60	32552	-4	1.895	1.896	9 10	110	97
34044.33	34039	5	1.720	1.729	9 10	90	90
36541.26	36509	32	1.610	1.722	9 8	90	72
37204.75	37160	44	1.510	1.605	9 8	70	81
	39421			1.626	7 6	70	49
	39766			1.708	7 8	90	63
	40696			1.615	7 6	70	43
			
J = 6							
33061.55	33051	10	1.775	1.782	9 10	110	97

EO	EC	AE	GO	GC	COMPOSANTE PRINCIPALE L-S	%
34754.99	34813	-58	1.620	1.667	9 10 90	94
37150.79	37213	-62	1.650	1.668	9 8 90	66
39458.41	39458	0	1.660	1.669	7 8 90	69
		
J = 7						
33804.50	33775	29	1.720	1.714	9 10 110	100
		

Les cinq configurations, ou groupes de configurations, que nous présentons dans les tableaux suivants (Tableaux XXII à XXVII) ont été déjà analysés dans plusieurs publications où apparaissent les paramètres radiaux (Annexe V, ^{59, 60}). Il nous a semblé indispensable de compléter ces résultats par une comparaison des niveaux théoriques et expérimentaux avec, le cas échéant, les pourcentages d'appartenance de chaque niveau aux différentes configurations ; ces données seront utiles pour déterminer les lois de partage dans une éventuelle étude de déplacement isotopique.

3. Classification préliminaire du spectre d'arc de l'holmium.

En 1972 subsistaient encore deux lanthanides dont la plupart des niveaux profonds ($0 - 6\ 000\ \text{cm}^{-1}$) étaient inconnus, l'holmium et le praséodyme, qui offraient donc un champ de recherches bien adapté au nouveau montage expérimental d'absorption dans l'ultraviolet réalisé par P. Camus.

Nous avons abordé l'holmium ($z = 67$) où les classifications précédentes n'avaient pu faire ressortir aucun intervalle d'énergie, car l'analyse du spectre d'absorption peu dense devait mettre en évidence l'écart des deux seuls niveaux $f^{11}s^2\ 4I_{15/2 - 13/2}$ attendus entre 0 et $7\ 000\ \text{cm}^{-1}$. D'autres raisons ont motivé ce choix ; Notre bonne connaissance des spectres du dysprosium ($Z = 66$) et du thulium ($Z = 69$) et l'existence d'une classification préliminaire dans l'erbium ($Z = 68$). De plus, les configurations $f^{10}(5I)d$ et $f^{10}(5I)p$, constituées pour étudier Dy II, permettaient de calculer rapidement des niveaux profonds de $4f^{10}5d6s^2$ et $4f^{10}6p6s^2$. Enfin, le spectre d'émission de l'holmium

avait été enregistré par P. Connes et ses collaborateurs pour expérimenter un nouvel interféromètre par transformation de Fourier à haute résolution.

Un travail en collaboration dans notre groupe de classification a abouti à proposer l'analyse préliminaire des niveaux d'énergie de Ho I (Annexe VI). J'ai personnellement effectué :

- 1) La mesure des 343 raies d'absorption observées entre 2 480 et 3 310 Å sur les spectres photographiés par Camus, au moyen d'un comparateur semi-automatique mis à notre disposition par le laboratoire de Photo-Physique Moléculaire d'Orsay.
- 2) La détermination, par application du programme COMBAC à ces 343 nombres d'ondes, de l'intervalle ${}^4\text{I}_{13/2} - 15/2 = 5\,419.70\text{ cm}^{-1}$ trouvé simultanément par Blaise dans l'infrarouge.
- 3) La recherche automatique de niveaux impairs élevés et pairs profonds à partir de la liste de raies infrarouges élaborée par Blaise (centres de gravité des transitions et largeur W des structures hyperfines).
- 4) Le calcul des configurations $4f^{10} ({}^5\text{I}) 6s^2 6p$ et $4f^{10} ({}^5\text{I}) 5d6s^2$.

J'ai repris cette étude dernièrement pour contrôler, sur les premiers spectrogrammes Zeeman réalisés par Fred et Camus à Argonne, la validité de nos résultats préliminaires : L'interprétation des niveaux de $f^{10} ds^2$, étayée par un calcul paramétrique, a été confirmée, à l'exception du niveau 18 651°, et dix nouveaux niveaux (suivis d'astérisques dans le tableau XXIX) ont été trouvés à faible distance de leur position théorique. L'accord est aussi satisfaisant entre les facteurs de Landé calculés et mesurés sur des raies à faible structure hyperfine ($f^{11} s^2 - f^{10} ds^2$).
L'extension de la classification vers les niveaux pairs élevés de

Tableau XXVIII

Paramètres de la sous-configuration $4f^{10} ({}^5I) 5d6s^2$

Paramètres radiaux en cm^{-1}		Coeur réel $\text{H}_0 \text{ IV } f^{10} {}^5I$	
E_{av}	13757 (250)	$E ({}^5I_8)$	107.7
$F_2(4f,5d)$	134 (15)	$E ({}^5I_7)$	5154.8
$F_4 -$	8.43 (3)	$E ({}^5I_6)$	8656.9
$G_1(4f,5d)$	101.3 (13)	$E ({}^5I_5)$	11218.90
$G_3 -$	18.7 (5)	$E ({}^5I_4)$	13284.10
$G_5 -$	2.30		
ζ_{5d}	796 (55)		
$A_{L(L+1)}$	13.6 (3)		

25 niveaux expérimentaux, $\langle \Delta E \rangle = \sqrt{\frac{\sum (\Delta E)^2}{N-p}} = 138 \text{ cm}^{-1}$

$J = 9/2, 11/2, 13/2$ a permis de compléter le multiplet impair fondamental $f^{11}s^2 4I^0$. Le niveau $4I_{11/2}$ proposé dans notre première publication a été infirmé et les deux niveaux $4I_{11/2}^0$ $8\ 605,16\ \text{cm}^{-1}$ et $4I_{9/2}^0$ $10\ 695,75\ \text{cm}^{-1}$ ont été trouvés à partir des niveaux pairs possédant les plus fortes composantes $f^{10}ds^2 4K, 4I, 4H$.

Ces nouvelles observations nous ont conduit à modifier le J de plusieurs niveaux de $f^{11}sp$ qui s'interprètent maintenant comme :

15 855.14	$(4I_{15/2}, 3P_0)$	15/2
16 709.68	$(4I_{15/2}, 3P_1)$	17/2
16 882.29	-	15/2
17 059.30	-	13/2
(17 883.57)	$(4I_{15/2}, 3P_2)$	19/2
18 337.13	-	17/2
18 651.56	-	15/2
18 858.23	-	13/2

L'étude paramétrique de $f^{11}sp$ contribuera à étendre ces premiers résultats.

Les cinquante niveaux théoriques de la sous-configuration $4f^{10} (5I) 5d6s^2$ figurent avec les niveaux observés correspondants dans le tableau XXIX où l'on trouvera, dans les dernières colonnes, la première composante de la fonction d'onde en couplage L-S, et en couplage J-j (carré de l'amplitude, vecteur normé à 100). Les nouveaux niveaux n'ont pas participé au processus d'optimisation et les paramètres ajustés figurent dans le tableau XXVIII.

TABLEAU XXIX -NIVEAUX DE 4F10 5D 6S2 DE HO I CALCULES
SUR UNE BASE F10(5I)D .

E0	EC	ΔE	GC	L-S	COMPOSANTE PRINCIPALE		%
					%	J1, J2	
J = 3/2							
	24082		0.000	6G	100	4, 5/2	100
			
J = 5/2							
	21892		0.584	6G	52	5, 5/2	67
	23635		0.559	6H	51	4, 5/2	80
	27042		0.571	4G	97	4, 3/2	57
			
J = 7/2							
	19498		0.902	6H	43	6, 5/2	48
	21085		0.700	6I	62	4, 3/2	41
	22815		0.808	6H	51	4, 5/2	55
	24584		0.940	4G	82	5, 3/2	43
	26453		0.714	4H	81	4, 3/2	42
			
J = 9/2							
	16724		1.145	6G	50	6, 3/2	53
	18891		0.968	6I	53	5, 3/2	47
	21014		0.946	6H	36	5, 5/2	39
21373.17 *	21396	-22	1.0114	4G	61	7, 5/2	37
	22246		0.683	6K	62	4, 3/2	55
24355.65 *	23997	358	0.975	4H	66	5, 5/2	37
26039.99 *	26252	-212	0.755	4I	84	4, 5/2	59
			

EO	EC	ΔE	GC	L-S	COMPOSANTE PRINCIPALE		%
					b	J1, J2	
$J = 11/2$							
13082.93	13049	33	1.278	6G	57	7,3/2	51
15792.13	15964	-172	1.155	6I	34	6,3/2	33
16937.44	16772	165	1.237	4G	50	7,5/2	31
	18792		1.068	6H	29	6,5/2	34
20493.40 *	20498	-4	0.976	6K	39	5,3/2	43
	20934		1.059	4H	24	6,5/2	39
	22774		0.643	6L	86	4,3/2	92
23379.31 *	23576	-196	0.954	4I	63	5,5/2	55
25261.55 *	25498	-236	0.804	4K	71	4,5/2	85
			
$J = 13/2$							
9147.08	9017	130	1.356	6G	77	8,3/2	95
12344.53	12524	-179	1.237	6I	29	8,5/2	55
15081.11	15195	-113	1.186	4H	62	7,3/2	50
16735.91	16610	125	1.192	6H	45	7,5/2	64
18564.92 *	18590	-25	1.051	6K	44	6,3/2	52
20241.32	20272	-30	1.102	4I	53	6,5/2	60
21045.00 *	21017	28	0.876	6L	74	5,3/2	92
22978.19 *	23048	-69	0.983	4K	57	5,5/2	82
25930.66 *	26141	-210	0.812	4L	86	4,5/2	94
			
$J = 15/2$							
8427.11	8724	-296	1.293	6H	63	8,3/2	89
12339.02	12191	148	1.232	6H	32	8,5/2	68
15136.03	15103	33	1.168	4I	60	7,3/2	72

E0	EC	ΔE	GC	L-S	COMPOSANTE PRINCIPALE		*
					*	J1, J2	
16154.20	16121	33	1.168	6I	40	7,5/2	82
18756.12	18687	69	1.028	6L	59	6,3/2	94
20074.85	20045	29	1.091	6K	37	6,5/2	86
23445.28	23685	-239	0.981	4L	71	5,5/2	93
			
J = 17/2							
8378.91	8433	-54	1.268	6I	74	8,3/2	75
11530.57	11490	40	1.201	4K	55	8,5/2	70
15130.28	15051	79	1.155	4K	33	7,3/2	77
16438.00	16437	1	1.142	6K	38	7,5/2	74
	20704		1.096	4L	52	6,5/2	94
			
J = 19/2							
9741.50	9581	160	1.240	6K	74	8,3/2	60
11689.72	11712	-22	1.185	4L	63	8,5/2	58
	16787		1.179	6L	70	7,5/2	98
			
J = 21/2							
	11392		1.238	6L	100	8,5/2	100
			

Enfin, nous avons tenté d'améliorer les résultats théoriques de Conway et Wybourne ⁶⁴⁾ sur la configuration fondamentale $4f^{11} 6s^2$: Les déviations croissantes entre $E_o(J)$ et $E_c(J)$ lorsque J décroît montrent que leur évaluation de la structure fine pouvait être améliorée. En supposant pour les paramètres du coeur $4f^N$ une variation régulière comme Carnall, Field et Rajnak en ont observé dans l'étude extensive des configurations $4f^{N-1}$ des spectres IV ⁴¹⁾, le jeu initial suivant a été adopté pour $4f^{11} 6s^2$ par comparaison avec les résultats de Tb III ($4f^9$) et Dy II ($4f^{10} 6s$) :

$E_1 = 6\ 350$, $E_2 = 27$, $E_3 = 555$, $\zeta_{4f} = 1\ 972\ \text{cm}^{-1}$ avec $\alpha = 20$ et $\gamma = -65\ \text{cm}^{-1}$. En corrigeant légèrement les valeurs de E_1 ($6\ 240\ \text{cm}^{-1}$) et de ζ ($1\ 994\ \text{cm}^{-1}$) on peut rendre compte très précisément des énergies observées :

E_o	Conway Wybourne		Présente étude	
	E_c	g_c	E_c	g_c
0	0	1.1972	0	1.196
5419.7	5428.06	1.0784	5418.29	1.106
8605.16	8722.08	0.9810	8605.44	0.985
10695.74	10979.62	0.8009	10692.75	0.862

Un ajustement obtenu sur un aussi petit nombre de données expérimentales peut être illusoire et il est nécessaire de vérifier sur les facteurs de Landé la validité du couplage intermédiaire. Rares sont les raies de l'holmium dont la structure hyperfine soit assez petite pour ne pas perturber la figure Zeeman ; nous avons cependant mesuré, à partir

des niveaux 18 756 et 23 445 et de la valeur $g(^4I_{15/2}) = 1.196$ trouvée par résonance en jet atomique pour le fondamental, $g(^4I_{13/2}) = 1.111 \pm 0.005$, valeur en bon accord avec nos calculs ; d'autre part, les structures Zeeman des deux transitions $24\ 355_{9/2} - 8\ 605_{11/2}$ et $24\ 355_{9/2} - 10\ 695_{9/2}$ admettent respectivement des intervalles entre composantes $\Delta g = 0.152 \pm 0.01$ et $\Delta g = 0.270 \pm 0.005$, d'où nous déduisons $g(^4I_{11/2}) - g(^4I_{9/2}) = 0.118 \pm 0.015$; la valeur calculée est 0.123. L'extension prochaine des mesures d'effet Zeeman devrait préciser les facteurs de Landé et permettre une amélioration des fonctions d'onde. Nous admettons provisoirement pour celles-ci :

$$\begin{aligned}
 |0) &= 0.9868 |^4I) - 0.1609 |^2K) - 0.0141 |^2L) \\
 |5419) &= -0.9959 |^4I) + 0.0843 |^2K) - 0.0300 |^2I) \\
 |8605) &= 0.9249 |^4I) + 0.3480 |^2H_{21}) + 0.1030 |^4G) - 0.0969 |^2H_{11}) \\
 &\quad + 0.0583 |^2I) \\
 |10695) &= -0.7807 |^4I) - 0.3984 |^2H_{21}) + 0.3226 |^4F) + 0.2410 |^2G_{20}) \\
 &\quad - 0.1936 |^2G_{21}) + 0.1792 |^4G)
 \end{aligned}$$

4. Les configurations des actinides.

Les configurations que nous avons constituées sous forme de matrices angulaires sur bandes magnétiques "bibliothèque" pour interpréter les configurations des lanthanides ont été utilisées pour étudier quelques configurations analogues des actinides dans la limite des résultats expérimentaux disponibles ; cependant, dans ce changement d'orbitales, la grandeur relative des différentes interactions est profondément modifiée et, pour un même type de configurations, on vérifie toujours :

$$Q(5f, 5f) < Q(4f, 4f)$$

$$Q(5f, 6d) \geq Q(4f, 5d)$$

$$\zeta_{5f} \sim 2 \zeta_{4f}$$

$$\zeta_{6d} \sim 2 \zeta_{5d}$$

Il en résulte que le couplage des configurations $5f^N$ - et a fortiori des $(5f + 6d + 7s)^N$ - s'éloigne davantage du couplage LS que dans le cas des lanthanides. Les niveaux issus du terme fondamental de $5f^N$ ne sont plus séparés du reste de la configuration (excepté probablement pour $5f^7$) et les effets de la troncature ont une importance accrue. Ainsi, il est certain que l'extension de la base de calcul de $f^7 (^8S)$ à $f^7 (^8S + ^6P)$ améliorera, plus nettement encore que dans Eu et Gd, l'accord théorie-expérience dans l'américium (fondamental $5f^7 7s^2$) et le curium (fondamental $5f^7 6d 7s^2$).

Des essais d'interprétation, effectués dans le plutonium n'ont pas abouti (configuration $5f^6 6d$ sur une base tronquée $f^6 (^7F + ^5D_{123})$ d), et l'écart quadratique moyen restant supérieur à 250 cm^{-1} , ces résultats n'apportent aucune aide au classificateur.

Mais lorsque les dimensions des configurations autorisent un traitement sans troncature, on peut optimiser les énergies et faire converger les paramètres vers des valeurs significatives. L'étude la plus complète dans cette voie a été effectuée sur les niveaux profonds de UI⁶⁶). Deux autres spectres nous étaient facilement accessibles : U II et Np I.

Uranium.

La configuration fondamentale du spectre de U II, $5f^3 7s^2$ reconnu par Schuurmans en 1946⁶⁷), est immédiatement suivie de la première

configuration excitée $5f^3 6d 7s$; Ben Osman et Guelachvili ont porté à 23 le nombre de niveaux connus de cette configuration qui en comporte 759^{68, 69}) ; Blaise ultérieurement a trouvé quelques niveaux nouveaux et localisé la première configuration paire $5f^4 7s$ ⁷⁰). Les 23 niveaux expérimentaux se sont révélés suffisants pour amorcer une interprétation paramétrique. Etant éloignés du couplage LS, leur dépendance vis-à-vis des paramètres électrostatiques est différente pour chacun d'entre eux et seuls les paramètres E^1 , E^2 et G_5 ($5f$, $6d$) ont été fixés au cours des optimisations. On constate, dans le tableau XXXI que les niveaux calculés et observés sont en bon accord jusqu'à $8\ 000\ \text{cm}^{-1}$. Les larges déviations pour les niveaux élevés sont dues à l'influence de $5f^3 6d^2$ dont l'interaction avec $f^3 ds$, est très importante (présence d'un terme, $Q(d^2, ds)$ dans l'hamiltonien). Les niveaux figurant dans le tableau XXX suivis d'une astérisque n'ont pas participé à l'optimisation. La première composante des fonctions d'onde est donnée en couplage

$$\left((f^3) S_1 L_1, (ds) S_2 L_2 \right) S L.$$

Les valeurs finales des paramètres sont comparées dans le tableau XXX avec celles, mieux définies, de $5f^3 6d 7s^2$ dans U I. On constate entre ces deux types de configurations les mêmes relations que dans les lanthanides

$f^{n-1} ds^2$		$f^{n-1} ds$
$Q(fd)$	<	$Q(fd)$
ζ_f	\neq	ζ_f
ζ_d	<	ζ_d

Tableau XXX - Valeur des paramètres radiaux de U II $5f^3 6d 7s$

Paramètres	U II $5f^3 6d 7s$		U I $5f^3 6d 7s^2$ *	
E_{av}	24406	(519)	20530	(127)
E_1	3267		3267	(66)
E_2	18		18	(0.9)
E_3	263	(27)	248.7	(3)
$F_2(5f, 6d)$	185	(25)	137	(4)
F_4 -	15	(9)	12.5	(1.1)
G_1 -	290	(28)	214	(4)
G_3 -	36.6	(7)	30.2	(1.2)
G_5 -	3		2.05	(0.45)
$G_3(5f, 7s)$	448	(62)		
$G_2(6d, 7s)$	1007	(173)		
ζ_{5f}	1751	(39)	1767	(10)
ζ_{6d}	1362	(85)	1158	(31)
$A_{L(L+1)}$	15	(14)	0	
23 niveaux expérimentaux			52 niveaux expérimentaux	
$\overline{\langle \Delta E \rangle} = 124 \text{ cm}^{-1}$			$\overline{\langle \Delta E \rangle} = 101 \text{ cm}^{-1}$	

* Référence 61.

TABLEAU XXXI - NIVEAUX DE 5F3 6D 7S DANS U II (289-11000 CM-1)

E0	EC	ΔE	G0	G0	COMPOSANTE PRINCIPALE	%
J = 1/2						
	6676			2.437	4F,3D 4P	14
.....						
J = 3/2						
	7968			0.091	4I,3D 6G	62
	9659			0.357	4F,3D 6G	51
	9856			1.638	4F,3D 6D	31
.....						
J = 5/2						
4706.27	4587	119	0.480	0.470	4I,3D 6H	32
8430.16 *	8089	341	0.720	0.762	4I,3D 6G	40
10285.04	10108	177	0.425	0.556	4F,3D 6H	30
	10160			0.744	4I,1D 4G	30
	10462			1.145	4F,3D 6G	19
	10671			1.011	4F,3D 6G	15
.....						
J = 7/2						
5401.50	5339	62	0.690	0.875	4I,3D 6H	17
5667.32	5616	51	0.736	0.557	4I,3D 6I	65
7547.35	7486	61	0.790	0.831	4I,3D 6H	18
9075.70	9168	-92	0.865	0.874	4F,3D 6H	17
10444.40 *	9724	720	0.865	0.856	4I,3D 6G	16
	10553			1.285	4S,3D 6D	13
.....						
J = 9/2						
914.76	935	-20	0.600	0.602	4I,3D 6K	73
6445.03	6547	-101	0.840	0.837	4I,3D 6I	44

E0	EC	ΔE	G0	GC	COMPOSANTE PRINCIPALE	%
7166.61	7093	73	0.914	0.943	4I,3D 4H	19
8379.66	8454	-74	0.840	0.860	4I,1D 4I	21
9241.94	9305	-63	1.015	1.079	4F,3D 4H	16
	10217			0.816	4I,1D 4I	34
		
J = 11/2						
289.04	371	-31	0.655	0.655	4I,3D 6L	77
2294.69	2224	70	0.880	0.865	4I,3D 6K	44
5790.63	5743	47	0.840	0.847	4I,3D 6K	42
7598.33	7520	78	0.980	0.980	4I,3D 4I	19
8510.85	8584	-73	0.830	0.877	4I,1D 4K	21
9553.16	9661	-107	1.060	1.053	4I,3D 6I	56
		
J = 13/2						
1749.12	1809	-59	0.860	0.869	4I,3D 6L	46
5526.73	5466	60	1.020	0.978	4I,3D 6S	53
6283.42 *	5527	766	0.790	0.888	4I,3D 6L	31
8755.61	8557	198	1.040	1.058	4I,3D 4I	10
9626.09	9561	65	0.950	0.958	4I,1D 4K	33
		
J = 15/2						
5259.64	5280	-20	1.015	1.008	4I,3D 6L	66
8521.91	8438	83	1.040	1.111	4I,3D 6K	72
	9987			0.985	4I,1D 4L	32
		
J = 17/2						
	8858			1.105	4I,3D 6L	82
		

CONCLUSION

EVOLUTION DE PARAMETRES RADIAUX DANS LA SEQUENCE DES LANTHANIDES.

Les diverses études que nous avons effectuées sur plusieurs éléments contribuent à mieux connaître le comportement général des lanthanides. Nous avons bénéficié au début de nos recherches des résultats du samarium, de l'euporium, du thulium et de l'ytterbium ; actuellement, les spectres du praséodyme, du prométhium, du terbium et de l'holmium, où l'analyse est entravée par des effets hyperfins devraient bénéficier à leur tour de la bonne connaissance des spectres d'éléments de Z pair.

Pour identifier les niveaux d'énergie d'un nouveau spectre, le calcul des configurations en présence doit être effectué à partir d'un jeu initial de paramètres qu'il convient de choisir le plus proche possible du jeu définitif. On a encore recours aux intégrales radiales calculées par des méthodes a priori pour introduire certaines interactions de configurations. Pour les interactions internes d'une configuration on dispose maintenant d'un assez grand nombre de résultats pour connaître l'évolution avec Z des paramètres radiaux, et le travail que nous avons exposé ici doit permettre de donner aux paramètres initiaux une valeur plus précise.

Dans le même but, Goldschmidt ⁷¹⁾ a fait en 1968 la somme de nos connaissances sur certains types d'interactions et a montré dans quelques cas simples comment les paramètres internes peuvent absorber les effets d'une interaction de configurations. Nous nous proposons d'étendre ces résultats

après avoir formulé une réserve : Pour comparer avec le maximum de rigueur les paramètres radiaux, on devrait traiter toutes les configurations d'une même type avec le même hamiltonien. Or, on ne peut pas étudier les configurations du milieu de la séquence sans négliger leurs termes élevés dont l'influence sur les paramètres est difficile à évaluer. De plus, certains paramètres ne sont bien définis que lorsque l'on dispose d'un assez grand nombre de niveaux d'énergie. C'est pourquoi nous n'examinerons ici que les paramètres d'interaction spin-orbite et trois paramètres de Slater $F_2(4f, 5d)$, $G_1(4f, 5d)$, $G_1(6s, 6p)$. Les valeurs reportées sur les graphiques suivants, proviennent des calculs effectués dans cette étude et des références ⁵², 53; 55; 71 à 77).

ζ_{4f} .

Les valeurs de ce paramètre obtenues dans les configurations $4f^N 6s^2$ et $4f^N$ sont sensiblement égales, la couche $6s^2$ ayant pour effet de diminuer ζ_{4f} de quelques cm^{-1} : Dans l'holmium, $\zeta_{4f}(4f^{11} 6s^2) = 1\,995 \text{ cm}^{-1}$, et $\zeta_{4f}(4f^{11}) = 2\,000 \text{ cm}^{-1}$. C'est pourquoi nous avons fait figurer dans le même schéma des valeurs issues de ces deux types de spectres. La croissance de ζ_{4f} dans les deux demi-séquences est remarquablement régulière. Deux valeurs manquent sur notre courbe : Dans les spectres I, II et III de l'euporium et du gadolinium, ζ_{4f} n'a pas été ajusté sur des configurations $4f^N 6s^2$, $4f^N 6s$ ou $4f^N$ complètes ; et le paramètre "ad hoc" obtenu dans l'étude de Eu I est insuffisamment défini (figure 12).

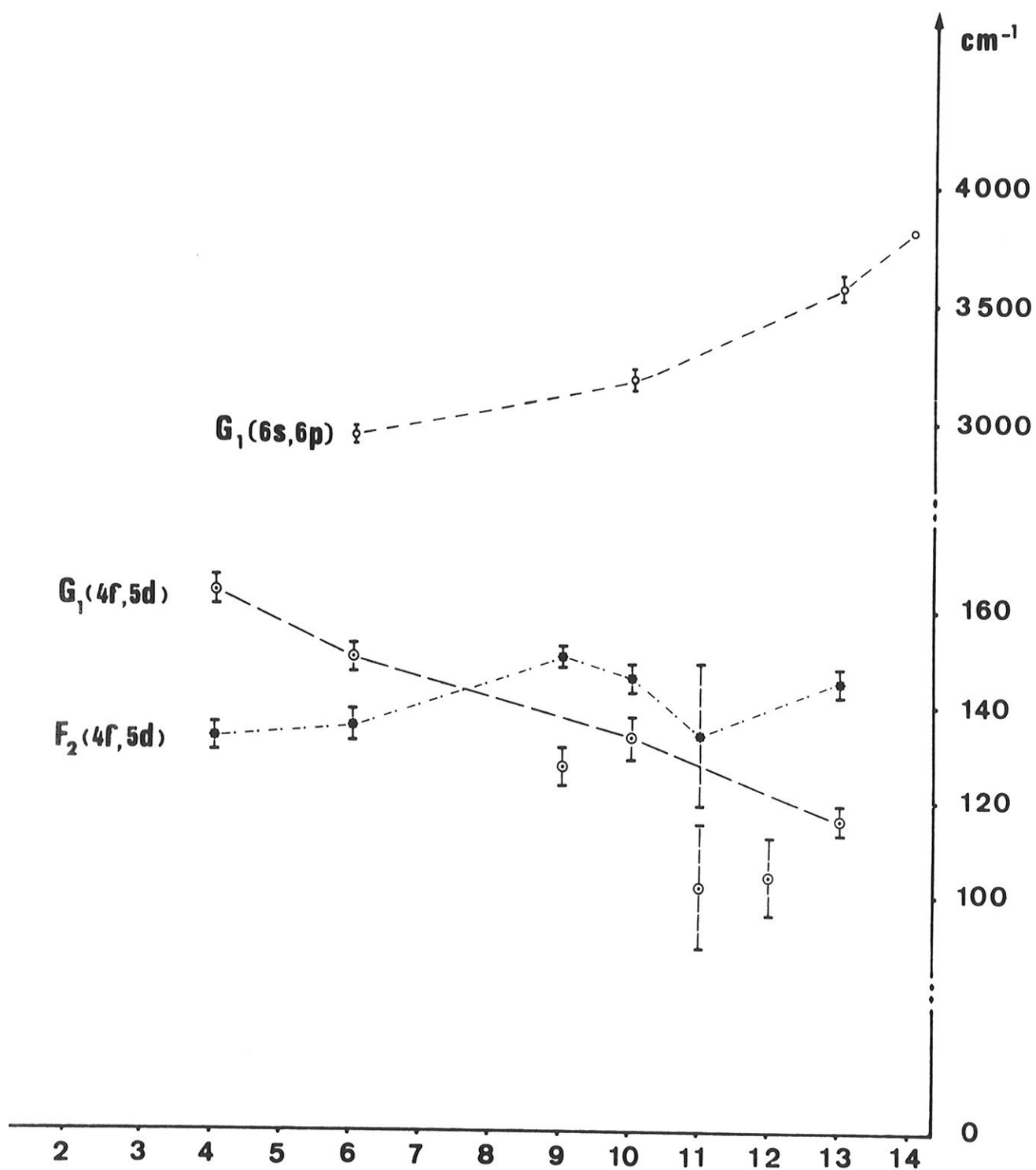


Fig. 10 - Paramètres de Slater dans $f^n sp$ et $f^{n-1} ds^2$.

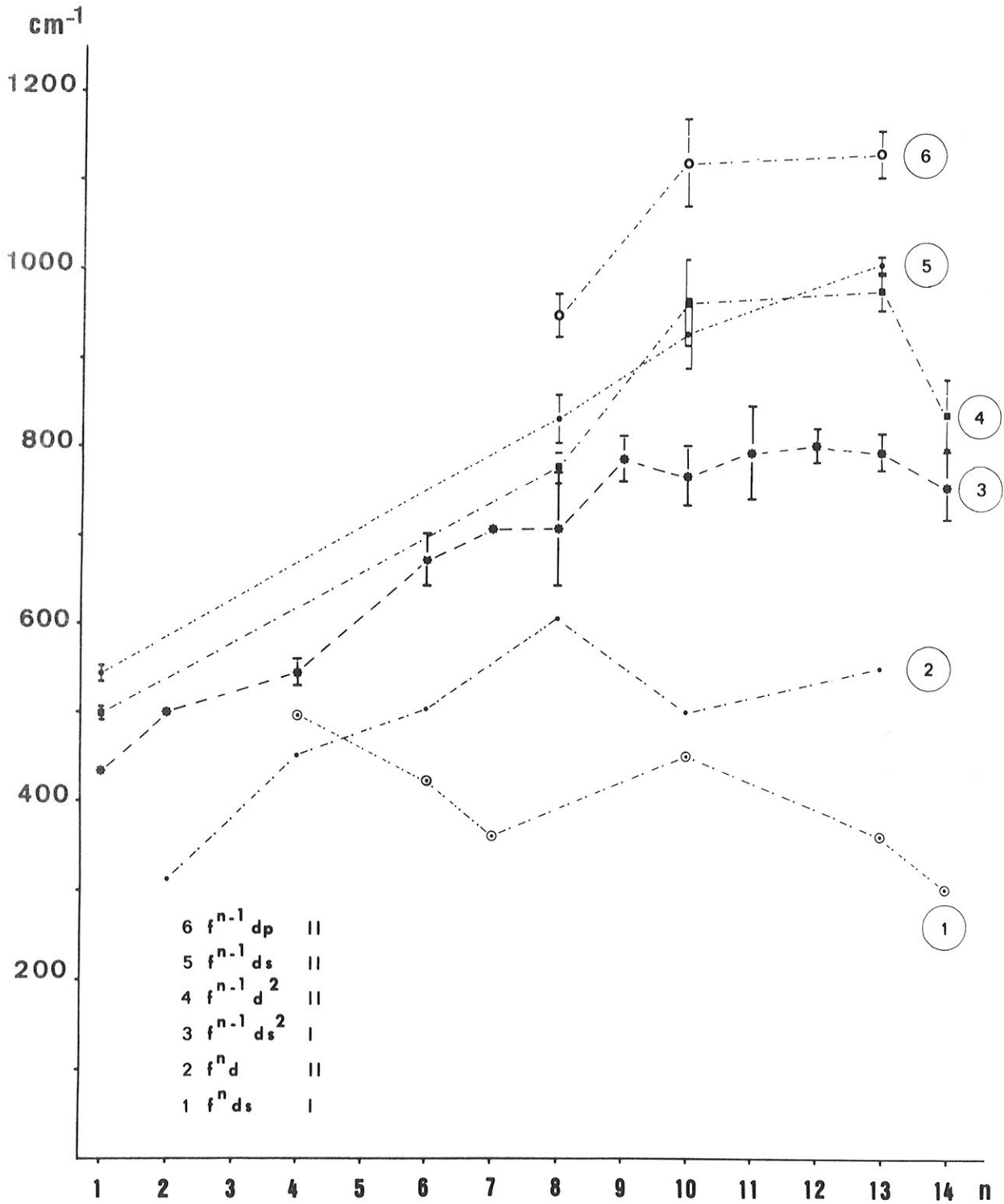


Fig 11 - Paramètre de spin-orbite ζ_{5d} dans les spectres I et II .

ζ_{5d} .

Alors que les paramètres du coeur f^N sont peu sensibles à la présence d'électrons externes, les paramètres qui impliquent ces électrons évoluent très différemment avec Z selon le type de configuration où ils interviennent. ζ_{5d} a été obtenu dans les configurations $f^N ds$, $f^{N-1} ds^2$ des spectres I et $f^N d$, $f^{N-1} ds$, $f^{N-1} d^2$, $f^{N-1} dp$ des spectres II. On remarque sur le schéma (figure 11) un effet dû probablement à la troncature : Pour $f^8 ds^2$ de Tb I et $f^8 d$ de Gd II étudiés sur une même base tronquée $f^8 ({}^7F) d$, ζ_{5d} est nettement supérieur à la valeur attendue.

ζ_{6p} .

Les valeurs de ζ_{6p} (figure 12) proviennent de quatre types de configurations : $f^N sp$ du spectre I, $f^{N-1} dp$ et $f^{N-1} sp$ du spectre II, $f^{N-1} p$ du spectre III. ζ_{6p} croît le plus régulièrement dans ce dernier cas : les configurations des spectres III sont moins nombreuses et plus espacées, donc moins perturbées par les interactions électrostatiques.

$F_2 (4f, 5d)$, $G_1 (4f, 5d)$, $G_1 (6s, 6p)$

Ces deux paramètres, les mieux définis de l'interaction $Q (4f, 5d)$, ont été extraits du calcul de $f^{N-1} ds^2$ (figure 10). Les valeurs pour $N = 6, 10, 13$ ont été obtenues en tenant compte de l'interaction avec $4f^N 6s6p$. Pour $N = 4$ et 13 les configurations ont été étudiées entières, pour $N = 6$ et 10 , on a vu que la troncature du coeur f^5 ou f^9 aux termes 6H et 6F conduit à des résultats corrects. Si l'on ne considère que ces quatre valeurs, la décroissance de G_1 est remarquablement linéaire avec N . Les valeurs pour $N = 9, 11, 12$ ont été ajustées à partir d'un nombre moins

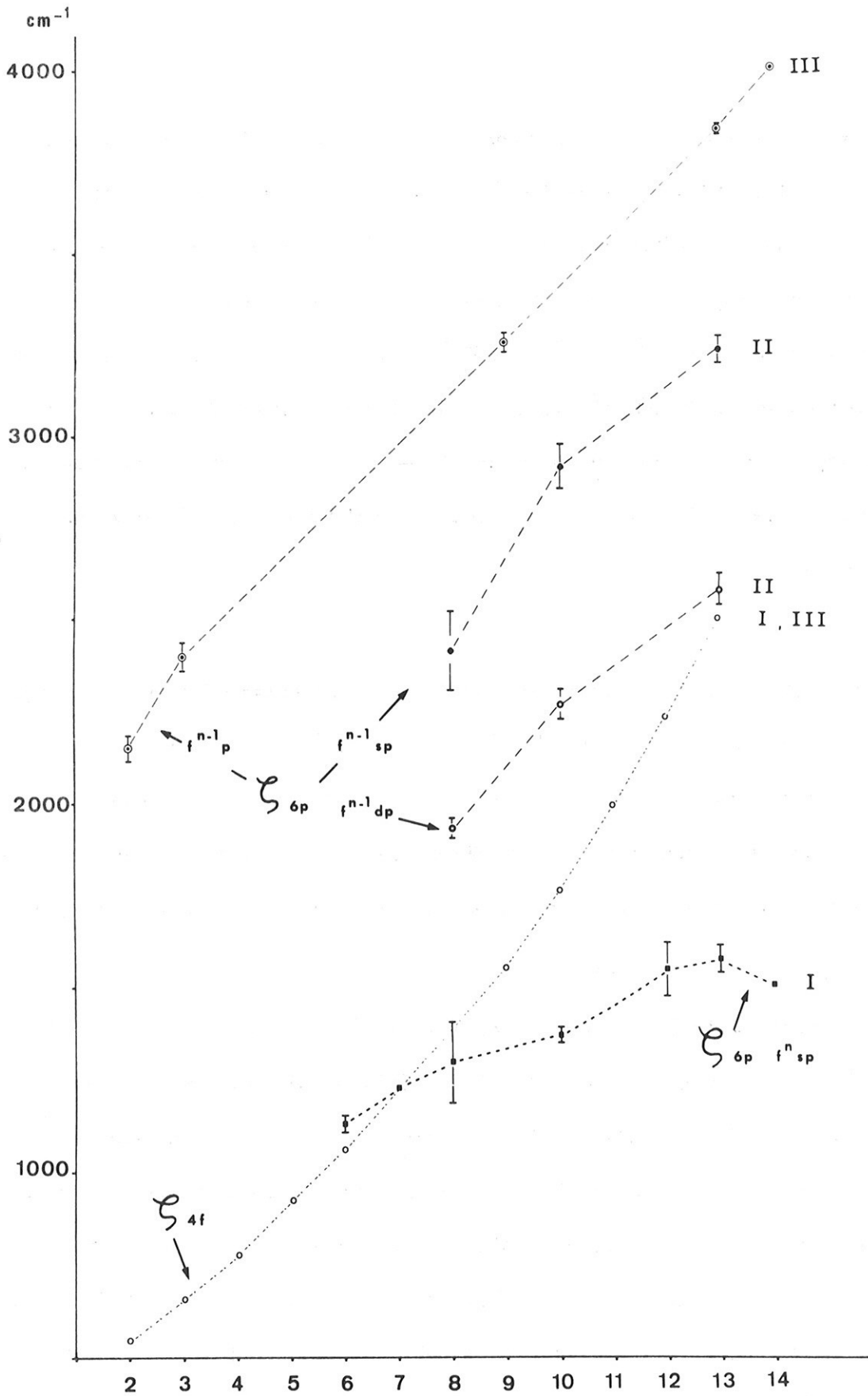


Fig 12 Paramètres de spin-orbite dans les spectres I: $f^n sp, f^n s^2$
 II: $f^{n-1} sp$ et $f^{n-1} dp$, III: $f^{n-1} p, f^n$.

élevé de niveaux.

Le paramètre F_2 fluctue irrégulièrement entre 133 et 150 cm^{-1} . L'évolution du paramètre G_1 (6s, 6p) est très régulière du samarium à l'ytterbium.

Enfin, nous pouvons conclure ce travail en formulant le voeu que l'ensemble des résultats expérimentaux que nous avons constitué contribue, au-delà de la classification, à faire progresser la théorie des spectres atomiques et que les calculs semi-empiriques que nous venons d'exposer constituent seulement le premier degré d'une interprétation plus élaborée.

REFERENCES

- 1) M.A. El'Yashevich, Spectre des terres rares (en russe), Ed. d'Etat, Moscou (1958).
- 2) J.C. Slater, Phys. Rev. 34, 1293 (1929).
- 3) G. Racah, Phys. Rev. 62, 438 (1942).
- 4) E.U. Condon et G.H. Shortley, Theory of Atomic Spectra , Cambridge University Press (1935).
- 5) D.H. Hartree, The Calculation of Atomic Structure (J. Wiley, 1957).
- 6) M. Klapisch, Thèse de Doctorat d'Etat, Orsay, 1969.
- 7) B. R. Judd, Operator Techniques in Atomic Spectroscopy, Mc. Graw Hill Book (1963)
- 8) U. Fano, F. Prats, Z.B. Goldschmidt, Phys. Rev. 129, 2643, (1963).
- 9) A.P. Yutsis, I.B. Levinson, V.V. Vanagas, Mathematical apparatus of the theory of Angular Momentum (traduit du Russe) - Israël programm for scientific translations, Jerusalem (1962).
- 10) Y. Bordarier, Thèse de Doctorat d'Etat, Orsay, 1970.
- 11) G. Racah, Phys. Rev., 63, 367, 1943.
- 12) C.W. Nielson et G.F. Koster, Spectroscopic coefficients for the p^n , d^n and f^n configurations, the M.I.T. Press, Cambridge, 1963.
- 13) G. Racah, Phys. Rev. 76, 1352, 1949.
- 14) Y. Bordarier, A. Carlier, Chaîne de quatre programmes adaptés à la méthode paramétrique, écrits au Laboratoire Aimé Cotton.
- 15) B.R. Judd, Second Quantization and Atomic Spectroscopy, The Johns Hopkins Press, Baltimore 1967.

- 16) R.E. Trees, Phys. Rev. 83, 756, 1951.
- 17) G. Racah, Phys. Rev. 85, 381, 1952.
- 18) S. Feneuille, J. Phys., 28, 497, 1967.
- 19) K. Rajnak et B.G. Wybourne, Phys. Rev., 132, 280, 1963.
- 20) J. Stein, Résultats rapportés par G. Racah au Collège de France, Paris, 1964.
- 21) S. Feneuille et N. Pelletier-Allard, Physica 40, 347, 1968.
- 22) Z.B. Goldschmidt, J. Phys. C4, 163, 1970.
- 23) E. Paulson, Astrophys. J. 40, 298, 1914.
- 24) W.F. Meggers, Rev. Mod. Phys. 14, 96, 1942.
- 25) Cité par C.E. Moore dans Transactions of the Triple Commission for Spectroscopy, J. Opt. Soc. Amer. 52, 478, 1962.
- 26) A.S. King, Astrophys. J. 72, 221, 1930.
A.S. King et C.E. Moore, Astrophys. J. 98, 33, 1943.
- 27) K.F. Smith et I.J. Spalding, Proc. Roy. Soc. London, A 265, 133, 1961.
- 28) A.S. King, J.G. Conway, E.F. Worden et C.E. Moore, J. Res. Nat. Bur. Stand., 74 A, 355, 1970.
- 29) J. Conway et E. Worden, J. Opt. Soc. Amer., 61, 704, 1971 ;
Rapport U.C.R.L. 19944, Lawrence Radiation Laboratory, 1970.
- 30) J.F. Wyart, Communication à la troisième Conférence de E.G.A.S., Reading, Juillet 1971.
- 31) N. Spector, J. Opt. Soc. Amer., 61, 672, 1971.
- 32) K.L. Van des Sluis et J.R. Mc Nally Jr. J. Opt. Soc. Amer. 60, 1209, 1970.
- 33) J.S. Ross, J. Opt. Soc. Amer. 62, 548, 1972.

- 34) D.C. Griffin, J.S. Ross, R.D. Cowan, J. Opt. Soc. Amer. 62, 571, 1972.
- 35) P. Camus et K. Masmoudi, article à paraître.
- 36) M.A. Catalan, F. Rohrllich, A.G. Shenstone, Proc. Roy. Soc. A, 221
421, 1954.
- 37) G. Racah, Lunds Univ. Arsskr. 5021, p. 31, 1954.
- 38) L. Brewer, J. Opt. Soc. Amer. 61, 1101, 1971 ; 61, 1666, 1971.
- 39) N. Spector, J. Opt. Soc. Amer. 61, 1350, 1971.
- 40) H.M. Crosswhite et G.H. Dieke, J. Chem. Phys. 35, 1535, 1961.
- 41) W.T. Carnall, P.R. Fields, K. Rajnak, J. Chem. Phys. 49, 4423, 1968.
- 42) J. Reader et J. Sugar, J. Opt. Soc. Amer., 56, 1189, 1966.
- 43) E.G. Jones, Proc. Roy. Soc. A 45, 501, 1933.
- 44) P. Brix et K.H. Lindenberger, Z. Phys. 141, 1, 1955.
- 45) J. Bauche, Physica 44, 291, 1969.
- 46) M.G. Schweighofer, Thèse de 3ème cycle, Orsay (1970).
- 47) R.J. Champeau, Physica, 62, 225, 1972.
- 48) A.R. Striganov, A.F. Golovin, M.P. Gerasimova, Opt. Spektrosk 14, 7, 1963.
- 49) J. Dekker, Thèse, Amsterdam, 1971.
- 50) J. Dekker, R. Hoekstra, Physica, 33, 228, 1967.
- 51) CØMBAC, Programme de recherche de différences conçu par G. Racah,
adapté au Fortran V par J.L. Tech et modifié par P. Camus pour le
calculateur Univac 1108 du Centre Universitaire d'ORSAY.
- 52) A. Carlier, J. Blaise, M.G. Schweighofer, J. Phys. 29, 729, 1968.
- 53) P. Camus, J. Phys. 31, 985, 1970.
- 54) G. Racah, Proc. of the Rydberg Centennial Conference on Atomic
Spectroscopy, Lund, 1955.

- 55) P. Camus, Thèse de Doctorat, Orsay, 1971.
- 56) B.R. Judd, Phys. Rev. 125, 613, 1962.
- 57) S. Feneuille, M. Klapisch, E. Koenig, S. Liberman, Physica 48, 571, 1970.
- 58) S. Liberman, J. Phys., 30, 53, 1969.
- 59) G. Smith et B.G. Wybourne, J. Opt. Soc. Amer. 55, 121, 1965.
- 60) G. Smith et B.G. Wybourne, J. Opt. Soc. Amer. 55, 1278, 1965.
- 61) Z.B. Goldschmidt, Thesis, Jérusalem (1968).
- 62) Th. A.M. Van Kleef, J. Blaise, J.F. Wyart, J. Phys. 32, 609, 1971.
- 63) J. Blaise, Th. A.M. Van Kleef, J.F. Wyart, J. Phys. 32, 617, 1971.
- 64) J.G. Conway et B.G. Wybourne, Phys. Rev., 130, 2325, 1963.
- 65) B.R. Judd, Cours non publié, Paris 1963.
- 66) F. Guyon, Thèse de 3ème cycle, Orsay 1972.
- 67) Ph. Schuurmans, Physica, 11, 419, 1946.
- 68) G. Guelachvili, Thèse de 3ème cycle, Paris 1965.
- 69) Z. Ben Osman, Thèse de 3ème cycle, Paris 1966.
- 70) J. Blaise, J. Phys., 30 C-1, 74, 1969.
- 71) Z.B. Goldschmidt, Méthods of interpretation of rare-earth spectra dans "Spectroscopic and group theoretical methods in Physics", F. Bloch et al., Eds. J. Wiley and Sons Inc. New-York, 1968.
- 72) J. Blaise, J.F. Wyart, R. Hoekstra, P.J.G. Kruiver, J. Opt. Soc. Amer., 61, 1335, 1971.
- 73) J. Reader et S.P. Davis, J. Res. Nat. Bur. of Stand, 71 A, 587, 1967.
- 74) Cl. Bauche-Arnoult, Article à paraître.
- 75) E. Meinders, Th. A.M. Van Kleef, J.F. Wyart, Physica, 61, 443, 1972.

- 76) G. Racah, Z.B. Goldschmidt, S. Toaff, J. Opt. Soc. Amer. 56,
407, 1966.
- 77) S. Nir, J. Opt. Soc. Amer., 60, 354, 1970.

ARTICLES PRESENTES

- Annexe I Contribution à la classification du spectre de Dy I.
Description des configurations $4f^9 5d^2 6s$, $4f^{10} 5d 6s$,
 $4f^9 6p 6s^2$ et $4f^9 5d 6s 6 p$.
Comptes Rendus de l'Académie des Sciences de Paris, tome 273,
Série B, pages 763 - 765, 1971.
- Annexe II Détermination des configurations $4f^{10} 5d$, $4f^9 5d 6s$ et
 $4f^9 6s^2$ dans le spectre de Dy II.
Comptes-Rendus de l'Académie des Sciences de Paris, tome 272,
Série B, pages 933 - 936, 1971.
- Annexe III Interprétation du spectre de Dy II :
I. Etude des configurations impaires ;
II. Etude des configurations $4f^9 6s 6p$ et $4f^9 5d 6p$.
Physica, tome 61, pages 182 - 199, 1972.
- Annexe IV Etude des configurations paires $4f^4 6s$ et $4f^4 5d$ de Nd II.
Journal de Physique, tome 31, pages 559 - 564, 1970.
- Annexe V Etude paramétrique des configurations impaires profondes des
spectres I et II du gadolinium.
Comptes Rendus de l'Académie des Sciences de Paris, tome 271
Série B, pages 849 - 852, 1971.

Annexe VI Classification préliminaire du spectre d'arc de l'Holmium.

Comptes Rendus de l'Académie des Sciences de Paris, tome 274,
Série B, pages 1302 - 1304, 1972.

Détermination des configurations $4f^{10} 5d 6s^2$ et $4f^{10} 6p 6s^2$
dans le spectre d'arc de l'holmium.

Comptes Rendus de l'Académie des Sciences de Paris, tome 275,
Série B, pages 81 - 83, 1972.

[avec J. Blaise, P. Camus, G. Guelachvili et J. Vergès].

TABLEAUX

		<u>pages</u>
Tableau I	Niveaux d'énergie de Dy I	31
Tableau II	Niveaux d'énergie de Dy II	40
Tableau III	Niveaux d'énergie de $4f^{10} 6s^2$ dans Dy I (0 - 40 000 cm^{-1})	51
Tableau IV	Niveaux d'énergie de $4f^9$ (calculés pour Dy IV)	55
Tableau V	Système de transitions $4f^{10} ({}^5I) 6s 6p$ - $4f^{10} ({}^5I) 6s 7s$	62
Tableau VI	Paramètres radiaux de la sous-configuration $4f^{10} ({}^5I) 6s 6p$	69
Tableau VII	Niveaux d'énergie de $4f^{10} 6s 6p$ calculés sur une base $f^{10} ({}^5I) sp$	70
Tableau VIII	Paramètres radiaux de la configuration $4f^{10} ({}^5I) 6s 7s$	69
Tableau IX	Niveaux d'énergie de $4f^{10} 6s 7s$ calculés sur une base complète (30 560 - 43 000 cm^{-1})	73
Tableau X	Déplacement isotopique des niveaux de Dy I	79
Tableau XI	Paramètres radiaux des configurations impaires de Dy I	89
Tableau XII	Niveaux d'énergie impairs de Dy I calculés sur une base $f^9 ({}^6H+{}^6H)ds^2 + f^{10} ({}^5I)sp + f^9 ({}^6H+{}^6F)d^2s$	90
Tableau XIII	Paramètres radiaux des configurations $4f^{10} 5d6s$ et $4f^9 6p 6s^2$	103

Tableau XIV	Niveaux d'énergie de $4f^{10} 5d 6s$ et $4f^9 6p 6s^2$ calculés sur une base $[f^{10} ({}^5I) d]_s + f^9 ({}^6H+{}^6F)_p$	104
Tableau XV	Paramètres radiaux de $4f^{10} 6s$ et $4f^{10} ({}^5I) 6d$	117
Tableau XVI	Niveaux d'énergie de $4f^{10} 6s$ et $4f^{10} 5d$	118
Tableau XVII	Niveaux pairs élevés non observés de $4f^9 (5d+6s) 6p$ dans Dy II	125
Tableau XVIII	Niveaux impairs calculés, mais non observés de Dy II	126
Tableau XIX	Paramètres radiaux de $4f^4 (6s+5d)$ de Nd II	133
Tableau XX	Etude de $4f^4 5d$ sur différentes bases tronquées	134
Tableau XXI	Niveaux d'énergie de $4f^4 (6s+5d)$ de Nd II	136
Tableau XXII	Paramètres radiaux de $4f^7 ({}^8S+{}^6P) 5d6s$ de Eu I	143
Tableau XXIII	Niveaux d'énergie de $4f^7 5d6s$ dans Eu I calculés sur une base $f^7 ({}^8S+{}^6P) ds$ ($E < 45\ 000\ \text{cm}^{-1}$)	144
Tableau XXIV	Niveaux d'énergie de $4f^7 5d6s^2$, $4f^7 5d^2 6s$ dans Gd I calculés sur une base $f^7 ({}^8S+{}^6P) d + (f^7 d^2)_s +$ $f^7 d^3$	146
Tableau XXV	Niveaux d'énergie de $4f^7 6s^2$, $4f^7 5d 6s$, $4f^7 5d^2$ de Gd II, calculés sur une base $f^7 ({}^8S+{}^6P)(d+s)^2$	153
Tableau XXVI	Niveaux d'énergie de $4f^7 6s 6p$ et $4f^7 5d6p$ de Gd II, calculés sur une base $f^7 ({}^8S+{}^6P) (sp+dp)$	156
Tableau XXVII	Niveaux d'énergie de $4f^7 5d 6s 7s$ de Gd I, calculés sur une base $[(f^7 ({}^8S)d)_s]_s'$	159
Tableau XXVIII	Paramètres radiaux de $4f^{10} ({}^5I) 5d6s^2$ de Ho I	164
Tableau XXIX	Niveaux d'énergie de $4f^{10} ({}^5I) 5d6s^2$ de Ho I	166

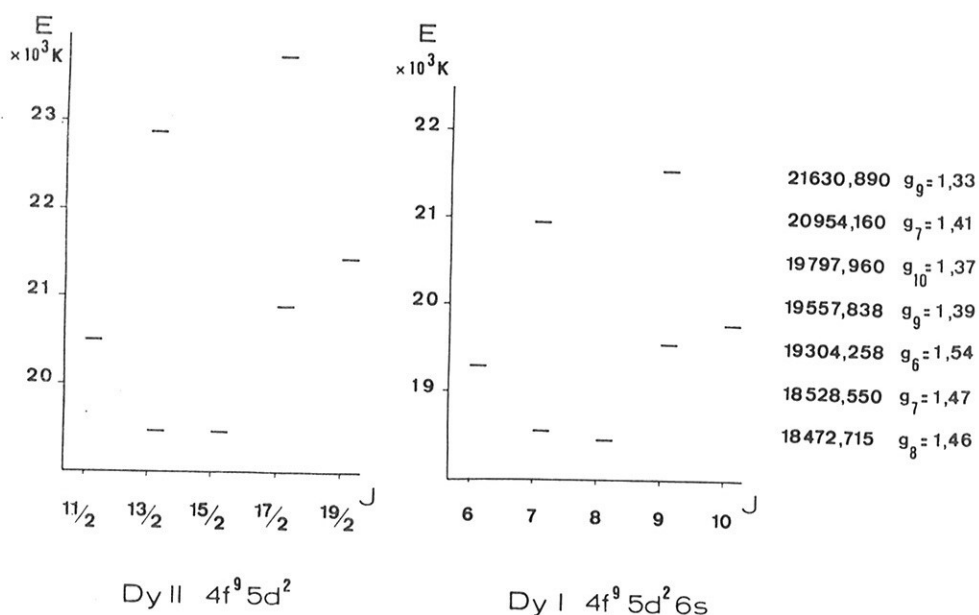
Tableau XXX	Paramètres radiaux de $5f^3 6d 7s$ de U II	173
Tableau XXXI	Niveaux d'énergie de $5f^3 6d 7s$ de U II calculés sur une base complète ($289 -11\ 000\ \text{cm}^{-1}$)	174

ANNEXE n° I

SPECTROSCOPIE ATOMIQUE. — Contribution à la classification du spectre de Dy I : description des configurations $4f^9 5d^2 6s$, $4f^{10} 5d 6s$, $4f^9 6p 6s^2$ et $4f^9 5d 6s 6p$. Note (*) de M. JEAN-FRANÇOIS WYART, présentée par M. Pierre Jacquinot.

La nouvelle analyse du spectre de Dy I a conduit à la découverte de nouvelles configurations : $4f^9 5d^2 6s$, $4f^{10} 5d 6s$, $4f^9 5d 6s 6p$ et à l'extension des configurations précédemment connues. L'interprétation est fondée sur le calcul paramétrique de plusieurs configurations.

La classification du spectre de Dy I selon des méthodes expérimentales et théoriques déjà décrites dans une Note précédente (1) a permis de trouver des niveaux d'énergie nouveaux appartenant aux sept configurations $4f^{10} 5d 6s$, $4f^9 6p 6s^2$, $4f^9 5d 6s 6p$, $4f^{10} 6s 7s$, $4f^9 5d 6s^2$, $4f^{10} 6s 6p$, $4f^9 5d^2 6s$.



L'étude détaillée des configurations $f^9 ds^2$ et $f^{10} sp$ déjà entreprise antérieurement (2) fait l'objet d'une autre Note et nous analysons ici certaines de ces configurations récemment découvertes.

A. CONFIGURATION $4f^9 5d^2 6s$. — On a attribué à $f^9 d^2 s$ sept niveaux qui ne pouvaient pas être interprétés sur la base $f^9 ds^2 + f^{10} sp$. Grâce à l'analogie étroite entre $f^9 d^2 s$ de Dy I et la configuration parente $f^9 d^2$ déjà reconnue dans Dy II, on peut affirmer que ces sept niveaux sont parmi les plus profonds de cette configuration. Les valeurs des facteurs de Landé sont élevées dans les deux cas et l'on remarque sur la figure la disposition

TABLEAU

Niveaux pairs de Dy I entre 17 000 et 27 000 cm^{-1}

E (cm^{-1}) ¹	J	g_{exp}	g_{calc}	Désignation
17 613,315.....	8	1,330	1,316	$f^{10} ds \ ^7H$
18 094,505.....	7	1,375	1,367	$f^{10} ds \ ^7G$
20 193,610.....	8	1,165	1,188	$f^{10} ds \ ^3K$
20 614,340.....	7	1,320 (*)	1,367	$f^9 ps^2 (^6H_{15/2}, p_{1/2})$
20 789,860.....	8	1,320 (*)	1,323	$f^9 ps^2 (^6H_{15/2}, p_{1/2})$
21 074,210.....	7	1,245	1,269	$f^{10} ds \ ^7I$
23 031,460.....	8	1,370	-	$f^9 dsp$
23 218,590.....	9	1,370 (*)	-	$f^9 dsp$
23 280,460.....	8	1,176	1,119	$f^{10} ds \ ^7K$
23 360,655.....	7	1,222 (**)	1,210	$f^{10} ds \ ^7H$
23 534,500.....	8	1,310 (*)	1,311	$f^9 ps^2 (^6H_{15/2}, p_{3/2})$
23 591,270.....	7	1,260 (*)	1,268	$f^9 ps^2 (^6H_{15/2}, p_{3/2})$
23 655,340.....	7	1,174	1,107	$f^{10} ds \ ^7K$
23 683,875.....	6	1,300	1,283	$f^9 ps^2 (^6H_{13/2}, p_{1/2}) + (^6H_{15/2}, p_{3/2})$
23 780,270.....	9	1,340 (*)	1,333	$f^9 ps^2 (^6H_{15/2}, p_{3/2})$
23 799,420.....	7	1,380 (*)	-	$f^9 dsp$
23 841,910.....	9	1,165	1,168	$f^{10} ds \ ^7L$
24 062,875.....	6	1,217	1,181	$f^{10} ds \ ^7G$
24 430,280.....	7	1,265	1,268	$f^9 ps^2 (^6H_{13/2}, p_{1/2})$
24 867,170.....	6	1,330 (*)	-	$f^9 dsp$
24 899,070.....	6	1,350 (*)	1,371	$f^9 ps^2 (^6H_{15/2}, p_{3/2}) + (^6H_{13/2}, p_{1/2})$
25 095,670.....	8	1,390 (*)	-	$f^9 dsp$
25 744,347.....	5	1,080	1,064	$f^{10} ds \ ^3G$
25 879,150.....	7	1,350 (*)	-	$f^9 dsp$
25 993,569.....	5	1,185	1,185	$f^9 ps^2$
26 284,690.....	5	1,195	-	$f^9 dsp$
26 349,480.....	8	1,340 (*)	-	$f^9 dsp$
26 387,820.....	6	1,475	-	$f^9 dsp$
26 425,150.....	7	1,235	1,250	$f^{10} ds \ ^5H$
26 435,710.....	7	1,145	1,152	$f^{10} ds \ ^5H + \ ^7K$
26 506,510.....	5	1,315	-	$f^9 dsp$
26 752,290.....	10	1,360 (*)	-	$f^9 dsp$
26 785,447.....	6	1,285	1,303	$f^9 ps^2 (^6H_{13/2}, p_{3/2})$
26 848,460.....	7	1,280 (*)	1,269	$f^9 ps^2 (^6H_{13/2}, p_{3/2})$
26 954,995.....	9	1,360	-	$f^9 dsp$

(*) Niveaux figurant sans interprétation dans la référence (3).

(**) Niveau figurant dans la référence (4) avec une interprétation et un J erronés.

similaire des niveaux d'énergie. Les deux niveaux de $J = 7$ étaient connus au début de cette étude (3).

Cette interprétation nous a conduit à éliminer quelques niveaux proposés précédemment parmi lesquels $14\ 512,26\ g_0 = 1,28$; la transition qui le justifiait est maintenant classée comme $8\ 519_7 - 23\ 031_8$, ce dernier niveau étant le plus profond de la configuration $4\ f^9\ 5\ d\ 6\ s\ 6\ p$.

B. LES CONFIGURATIONS PAIRES ENTRE 17 000 ET 27 000 K. — Les nouveaux niveaux trouvés dans ce domaine peuvent appartenir à l'une des quatre configurations $f^{10} s^2$, $f^{10} ds$, $f^9 ps^2$ et $f^9 dsp$ et classent de nombreuses raies en se combinant soit avec des niveaux impairs élevés ($E > 35\,000 \text{ cm}^{-1}$), soit avec les niveaux profonds de $f^9 ds^2$. Au moyen du calcul paramétrique de $f^{10} s^2$, $f^9 ps^2$ et $f^{10} ds$, nous avons identifié des niveaux de ces deux dernières configurations; les niveaux restants ont été attribués à $f^9 dsp$, les valeurs des facteurs de Landé mesurés excluant toute appartenance à $f^{10} s^2$. Notre identification du terme (${}^6\text{H}_{15/2}$, ${}^2\text{P}_{1/2}$) de $f^9 ps^2$ est en accord avec celle de Spector ⁽¹⁾; mais nos résultats expérimentaux et théoriques font apparaître que les trois niveaux de $J = 6, 7, 9$ attribués par Spector au terme $f^9 ps^2$ (${}^6\text{H}_{15/2}$, ${}^2\text{P}_{3/2}$) sont erronés ou mal interprétés. La valeur de ζ_{6p} qu'il en déduit est anormalement basse pour un paramètre variant aussi régulièrement le long de la série des terres rares, ce que met d'ailleurs en évidence la figure 2 de son article.

On a rassemblé dans un tableau l'énergie E et le facteur de Landé g_{exp} des niveaux pairs actuellement connus entre 17 000 et 27 000 cm^{-1} ainsi que, le cas échéant, les résultats théoriques correspondants : le facteur de Landé g_{calc} calculé en couplage intermédiaire et le nom de la plus grande composante en couplage de base $J - j$ pour f^9 (${}^6\text{H} + {}^6\text{F}$) ps^2 et en couplage de base LS pour (f^{10} ${}^3\text{I}$) $d s$.

Nous n'avons pas encore ajusté les paramètres de ces configurations séparément car les facteurs de Landé expérimentaux et calculés en couplage intermédiaire indiquent que l'interaction de configuration affecte la plupart des niveaux. P. Camus a montré au moyen de calculs Hartree-Fock ou paramétriques que certains paramètres d'interaction ont une valeur élevée entre des configurations analogues de Tm I ⁽²⁾ et nous poursuivons ce travail par l'étude sur une base commune des trois configurations $f^{10} ds$, $f^9 ps^2$, $f^9 dsp$.

En se fondant sur les résultats de Brewer ⁽³⁾, il semble désormais certain que toutes les configurations électroniques attendues entre 0 et 30 000 cm^{-1} ont été reconnues dans le spectre Dy I.

(*) Séance du 18 octobre 1971.

(1) J. F. WYART, *Comptes rendus*, 272, série B, 1971, p. 933.

(2) J. F. WYART, Communication à la troisième Conférence de E. G. A. S., Reading, juillet 1971.

(3) J. G. CONWAY et E. F. WORDEN, *J. Opt. Soc. Amer.*, 61, 1971, p. 704.

(4) N. SPECTOR, *J. Opt. Soc. Amer.*, 61, 1971, p. 1350.

(5) P. CAMUS, *Thèse de Doctorat*, Orsay, 1971.

(6) L. BREWER, *J. Opt. Soc. Amer.*, 61, 1971, p. 1101.

ANNEXE n° II

TABLEAU.

Nouveaux niveaux pairs et impairs de Dy II.

Configu- ration.	Niveau (cm ⁻¹).	J.	g.	Niveau calculé.	g _{calc.}	Composition.	
4 f ¹⁰ 5d.....	14 845,91	17/2	1,255	14 835	1,275	80 % ⁶ I	
	14 952,14	15/2	1,300	15 212	1,296	65 % ⁶ H	
	15 691,99	13/2	1,340	15 499	1,359	79 % ⁶ G	
	16 117,40	19/2	1,245	15 903	1,249	84 % ⁶ K	
	17 406,59	21/2	1,240	17 407	1,238	100 % ⁶ L	
	17 589,52	17/2	1,200	17 593	1,197	52 % ⁴ K	
	17 788,82	19/2	1,170	17 887	1,177	65 % ⁴ L	
	18 219,72	13/2	1,240	18 359	1,234	35 % ⁶ I	
	18 234,95	15/2	1,240	18 090	1,235	32 % ⁶ I	
	18 866,51	11/2	1,260	18 826	1,280	61 % ⁶ G	
	20 700,59	17/2	1,160	20 621	1,169	42 % ⁴ K	
	20 748,43	13/2	1,170	20 966	1,171	32 % ⁴ H	
	21 076,07	15/2	1,130	20 968	1,142	47 % ⁶ K	
	21 177,84	11/2	1,150	21 236	1,127	47 % ⁶ I	
	21 338,35	15/2	1,180	21 367	1,190	44 % ⁴ I	
	21 806,92	19/2	1,175	21 889	1,178	68 % ⁶ L	
	f ⁹ (sp + dp).....	38 402,40	17/2	1,326	—	—	—
		38 427,36	15/2	1,317	—	—	—
40 516,80		15/2	1,345	—	—	—	
40 807,20		19/2	1,332	—	—	—	
41 583,90		17/2	1,33	—	—	—	
42 478,98		19/2	1,31	—	—	—	
42 550,09		15/2	1,34	—	—	—	
42 741,69		17/2	1,32	—	—	—	
43 002,985		15/2	1,33	—	—	—	
43 066,19		17/2	1,343	—	—	—	
44 501,975		19/2	1,32	—	—	—	
44 545,245		17/2	1,285	—	—	—	
44 653,17	15/2	1,318	—	—	—		
45 139,88	15/2	1,245	—	—	—		
45 240,025	17/2	1,33	—	—	—		
46 256,77	17/2	1,275	—	—	—		
f ⁹ ds.....	10 594,19	17/2	1,400	10 449	1,403	82 % ⁸ H ^o	
	11 394,91	15/2	1,383	11 346	1,383	65 % ⁸ H ^o	
f ⁹ s ²	12 336,29	15/2	1,33	—	—	⁶ H ^o	
f ⁹ ds.....	12 674,695	13/2	1,35	12 603	1,367	51 % ⁸ H ^o	
	13 408,62	19/2	1,364	13 391	1,362	92 % ⁸ I ^o	
	13 610,71	15/2	1,330	13 914	1,336	62 % ⁶ H ^o	
	14 895,06	17/2	1,315	14 865	1,321	55 % ⁸ I ^o	
	16 875,90	15/2	1,328	16 875	1,336	30 % ⁸ G ^o	
	18 549,162	17/2	1,228	18 623	1,231	30 % ⁸ K ^o	

fondamental du spectre II 4f¹⁰ 6s ⁶I_{17/2}. La connexion du nouveau système au système principal fondé sur f¹⁰ s a été ainsi assurée par la raie à 7 345,132 Å dont la structure Zeeman, non résolue, peut être interprétée comme g_{17/2} = 1,291, g_{15/2} = 1,333 (5). Plusieurs transitions de moindre intensité ont ensuite confirmé cette connexion.

Le tableau contient les nouveaux niveaux impairs et leur interprétation théorique (les niveaux 16 875 et 18 549, trouvés au moyen de transitions avec $f^{10}s$ se combinent aussi avec les niveaux pairs élevés), ainsi que les nouveaux niveaux pairs attribués à $f^9(sp + dp)$. Nous avons enfin représenté sur un diagramme d'énergie (*fig.*) les positions des configurations paires et impaires de Dy II et l'énergie de leur plus bas niveau. Il est dès maintenant certain que le niveau $25192,03_{15/2}$, déjà cité par Corliss et Meggers ^(*) est le plus profond de la configuration $4f^{10}6p$.

Ces résultats doivent être considérés comme un étape provisoire dans la classification de Dy II. Nous attendons de nos recherches actuelles une extension du nombre des niveaux impairs profonds et, grâce à la connaissance prochaine du spectre infrarouge, la localisation de la configuration $4f^95d^2$ au moyen de transitions $4f^95d^2 \rightarrow 4f^{10}5d$.

(*) Séance du 5 avril 1971.

(¹) J. G. CONWAY et E. F. WORDEN, Rapport UCRL-19944, Lawrence Radiation Laboratory, University of California.

(²) Écrits par Y. Bordarier, A. Carlier et P. Dagoury.

(³) P. CAMUS, *Thèse de Doctorat*, Orsay, 1971.

(⁴) J. F. WYART, *Comptes rendus*, 271, série B, 1970, p. 849.

(⁵) C. H. CORLISS et E. L. R. CORLISS, cité par W. F. MEGGERS, *J. Opt. Soc. Amer.*, 36, 1946, p. 431.

(Laboratoire Aimé Cotton,
C. N. R. S. II,
Campus Universitaire,
91-Orsay,
Essonne.)

TABLEAU.

Nouveaux niveaux pairs et impairs de Dy II.

Configu- ration.	Niveau (cm ⁻¹).	J.	g.	Niveau calculé.	g _{calc.}	Composition.	
4 f ¹⁰ 5d.....	14 845,91	17/2	1,255	14 835	1,275	80 % ⁶ I	
	14 952,14	15/2	1,300	15 212	1,296	65 % ⁶ H	
	15 691,99	13/2	1,340	15 499	1,359	79 % ⁶ G	
	16 117,40	19/2	1,245	15 903	1,249	84 % ⁶ K	
	17 406,59	21/2	1,240	17 407	1,238	100 % ⁶ L	
	17 589,52	17/2	1,200	17 593	1,197	52 % ⁴ K	
	17 788,82	19/2	1,170	17 887	1,177	65 % ⁴ L	
	18 219,72	13/2	1,240	18 359	1,234	35 % ⁶ I	
	18 234,95	15/2	1,240	18 090	1,235	32 % ⁶ I	
	18 866,51	11/2	1,260	18 826	1,280	61 % ⁶ G	
	20 700,59	17/2	1,160	20 621	1,169	42 % ⁴ K	
	20 748,43	13/2	1,170	20 966	1,171	32 % ⁴ H	
	21 076,07	15/2	1,130	20 968	1,142	47 % ⁶ K	
	21 177,84	11/2	1,150	21 236	1,127	47 % ⁶ I	
	21 338,35	15/2	1,180	21 367	1,190	44 % ⁴ I	
	21 806,92	19/2	1,175	21 889	1,178	68 % ⁶ L	
	f ⁹ (sp + dp).....	38 402,40	17/2	1,326	—	—	—
		38 427,36	15/2	1,317	—	—	—
		40 516,80	15/2	1,345	—	—	—
		40 807,20	19/2	1,332	—	—	—
41 583,90		17/2	1,33	—	—	—	
42 478,98		19/2	1,31	—	—	—	
42 550,09		15/2	1,34	—	—	—	
42 741,69		17/2	1,32	—	—	—	
43 002,985		15/2	1,33	—	—	—	
43 066,19		17/2	1,343	—	—	—	
44 501,975		19/2	1,32	—	—	—	
44 545,245		17/2	1,285	—	—	—	
44 653,17		15/2	1,318	—	—	—	
45 139,88		15/2	1,245	—	—	—	
45 240,025	17/2	1,33	—	—	—		
46 256,77	17/2	1,275	—	—	—		
f ⁹ ds.....	10 594,19	17/2	1,400	10 449	1,403	82 % ⁸ H ^o	
	11 394,91	15/2	1,383	11 346	1,383	65 % ⁸ H ^o	
f ⁹ s ²	12 336,29	15/2	1,33	—	—	⁶ H ^o	
f ⁹ ds.....	12 674,695	13/2	1,35	12 603	1,367	51 % ⁸ H ^o	
	13 408,62	19/2	1,364	13 391	1,362	92 % ⁸ I ^o	
	13 610,71	15/2	1,330	13 914	1,336	62 % ⁶ H ^o	
	14 895,06	17/2	1,315	14 865	1,321	55 % ⁸ I ^o	
	16 875,90	15/2	1,328	16 875	1,336	30 % ⁸ G ^o	
	18 549,162	17/2	1,228	18 623	1,231	30 % ⁸ K ^o	

fondamental du spectre II 4f¹⁰ 6s ⁶I_{17/2}. La connexion du nouveau système au système principal fondé sur f¹⁰ s a été ainsi assurée par la raie à 7 345,132 Å dont la structure Zeeman, non résolue, peut être interprétée comme g_{17/2} = 1,291, g_{13/2} = 1,333 (5). Plusieurs transitions de moindre intensité ont ensuite confirmé cette connexion.

Le tableau contient les nouveaux niveaux impairs et leur interprétation théorique (les niveaux 16 875 et 18 549, trouvés au moyen de transitions avec $f^{10}s$ se combinent aussi avec les niveaux pairs élevés), ainsi que les nouveaux niveaux pairs attribués à $f^9(sp + dp)$. Nous avons enfin représenté sur un diagramme d'énergie (*fig.*) les positions des configurations paires et impaires de Dy II et l'énergie de leur plus bas niveau. Il est dès maintenant certain que le niveau 25192,03_{15/2}, déjà cité par Corliss et Meggers ⁽⁵⁾ est le plus profond de la configuration $4f^{10}6p$.

Ces résultats doivent être considérés comme un étape provisoire dans la classification de Dy II. Nous attendons de nos recherches actuelles une extension du nombre des niveaux impairs profonds et, grâce à la connaissance prochaine du spectre infrarouge, la localisation de la configuration $4f^95d^2$ au moyen de transitions $4f^95d^2 \rightarrow 4f^{10}5d$.

(*) Séance du 5 avril 1971.

(1) J. G. CONWAY et E. F. WORDEN, Rapport UCRL-19944, Lawrence Radiation Laboratory, University of California.

(2) Écrits par Y. Bordarier, A. Carlier et P. Dagoury.

(3) P. CAMUS, *Thèse de Doctorat*, Orsay, 1971.

(4) J. F. WYART, *Comptes rendus*, 271, série B, 1970, p. 849.

(5) C. H. CORLISS et E. L. R. CORLISS, cité par W. F. MEGGERS, *J. Opt. Soc. Amer.*, 36, 1946, p. 431.

(Laboratoire Aimé Cotton,
C. N. R. S. II,
Campus Universitaire,
91-Orsay,
Essonne.)

ANNEXE n° III

INTERPRETATION DU SPECTRE DE Dy II

I. ETUDE DES CONFIGURATIONS IMPAIRES

J.F. WYART

Laboratoire Aimé Cotton, CNRS II, Orsay, Essonne, France

Reçu le 27 Décembre 1971

Synopsis

The extended classification of the Dy II spectrum has led to the discovery of 63 new odd levels which belong to the configurations $4f^9 6s^2$, $4f^9 5d 6s$, $4f^9 5d^2$, $4f^{10} 6p$. The parametric calculation of the four configurations taken together has allowed the interpretation of 113 observed levels with an rms error of 161 K (0.7% of the energy range). Experimental and theoretical results are compared. The values of the radial parameters have been fitted by the least-squares method.

1. *Introduction.* Une analyse récente du spectre de Dy II a conduit Conway et Worden à déterminer quatorze niveaux d'énergie pairs profonds au moyen de transitions avec plus de 200 niveaux impairs élevés¹). Cependant, au début de notre étude, rien n'était connu du vaste système de transitions $4f^9 6s 6p + 4f^9 5d 6p \rightarrow 4f^9 6s^2 + 4f^9 5d 6s + 4f^9 5d^2$ dont les niveaux impairs les plus bas étaient attendus vers 10000 cm^{-1} ²). Des résultats expérimentaux nouveaux étant nécessaires pour trouver ces niveaux, nous avons systématiquement mesuré la structure Zeeman des raies non classées dans l'ultraviolet sur des spectrogrammes réalisés par Fred à Argonne (Spectrographe Paschen–Runge équipé du réseau G5, Mars 1971); la source utilisée était un tube à décharge sans électrodes excité en haute fréquence. Ces observations nous ont permis de calculer le facteur de Landé de tous les nouveaux niveaux d'énergie trouvés au moyen du programme de recherche automatique Combac de Tech et Camus, appliqué aux nombres d'ondes de $^{162}\text{Dy II}$ mesurés par Conway et Worden. L'identification des 9 premiers niveaux de $f^9 s^2$ et $f^9 d s$ à l'aide de calculs paramétriques préliminaires et la connexion du nouveau système de transitions avec le système fondé sur le fondamental $4f^{10} 6s$ ont été décrites précédemment³). Depuis lors, la configuration $4f^9 5d^2$ a été localisée, ce qui a rendu possible une étude des quatre configurations impaires les plus profondes $4f^9 5d 6s$, $4f^9 6s^2$, $4f^9 5d^2$ et $4f^{10} 6p$ tenant compte de leur interaction; par les mêmes méthodes, 126 niveaux pairs de $f^9 s p$ et $f^9 d p$ ont été interprétés entre 36000 et 54000 cm^{-1} .

2. *Traitement paramétrique des configurations.* Les configurations que nous avons étudiées selon la méthode paramétrique comportent un trop grand nombre de niveaux d'énergie pour être calculées dans leur ensemble. Le choix que nous avons fait de tronquer le cœur $4f^9$ aux deux premiers termes 6H et 6F est fondé sur les résultats obtenus dans la classification du spectre de Dy IV par Crosswhite et Dieke⁴): 6H et 6F sont assez éloignés du troisième terme 4F qui commence à 20963 K au-dessus de ${}^6H_{15/2}$. Par contre, différentes sous-configurations construites dans chaque parité sur 6H et 6F apparaissent dans les mêmes domaines d'énergie et leur interprétation ne devient satisfaisante qu'en tenant compte de leur interaction; l'étude paramétrique de configurations analogues dans la série des lanthanides a montré en effet que certaines intégrales radiales comme $R^{(2)}(5d5d, 5d6s)$, $R^{(1)}(5d6p, 6p6s)$ et $R^{(2)}(5d6p, 6s6p)$ ont des valeurs élevées. Le hamiltonien se limite à l'interaction coulombienne et au couplage spin-orbite; toutefois, l'opérateur effectif $\alpha\bar{L}^2$ qui rend compte en partie des effets linéaires d'interactions lointaines, a été introduit et le paramètre α a convergé généralement vers une valeur significative. Le calcul des éléments de matrice angulaires et l'ajustement des paramètres radiaux par moindres carrés après diagonalisation ont été effectués au moyen de la chaîne de programmes mise au point par Bordarier et Carlier sur le calculateur Univac 1108 du centre d'Orsay. Le temps de calcul automatique des coefficients angulaires des paramètres augmentant très rapidement avec la complexité des formules traitées, nous avons utilisé le couplage de base LS qui conduit aux formules les plus simples pour les paramètres d'interaction électrostatique et bien que le couplage réel en soit notablement éloigné. Dans le cas de configurations construites sur le cœur $4f^9$, la séparation des niveaux du cœur n'est pas assez grande par rapport aux effets d'interactions coulombiennes $4f-5d$ ou $5d-6p$ pour que le couplage J_1J_2 représente une bonne approximation du couplage réel. Ce couplage limite permettrait de décrire correctement les niveaux les plus bas de configurations telles que $4f^96p6s$ ou $4f^{10}6p$ supposées isolées; mais ceux-ci perdent leur identité en se mélangeant aux configurations voisines.

3. *Les niveaux d'énergie impairs entre 10000 et 30000 K.* Comme le niveau impair le plus profond $f^9ds {}^6H_{17/2}$ se situe à 10594 K, on attend vers 30000 K les premiers niveaux exclus de notre base vectorielle par la troncature de f^9 . Pour interpréter le spectre d'énergie entre 10000 et 30000 K, il est nécessaire d'inclure dans la base les vecteurs de la sous-configuration $4f^{10}({}^5I)6p$ qui apparaît vers 25000 K.

Tous les niveaux d'énergie utilisés pour ajuster les paramètres figurent dans le tableau I. On donne par valeurs de J et d'énergie croissantes: E_o et E_c énergies observées et calculées, leur écart $\Delta E = E_o - E_c$, les facteurs de Landé observés et calculés g_o et g_c (l'incertitude sur les g_o est évaluée à 0,01) le pourcentage de chacune des configurations intervenant dans la composition du niveau, enfin le

TABLEAU I

Niveaux impairs de Dy II interprétés entre 10000 et 35000 K											
E_0	E_c	ΔE	g_0	g_c	f^{9s^2} (%)	f^{9ds} (%)	f^{9d^2} (%)	f^{10p} (%)	Première composante et pourcentage		
$J = 9/2$											
16015,40	15968	47	1,193	1,211	0	100	0	0	H ₇	⁸ H	61
18738,41	18633	105	1,420	1,552	0	100	0	0	H ₇	⁸ F	27
18955,57	19031	-76	1,215	1,167	0	97	3	0	F ₇	⁶ H	44
19467,23	19252	216	1,660	1,618	0	100	0	0	F ₇	⁸ P	58
$J = 11/2$											
14347,21	14335	12	1,302	1,305	0	100	0	0	H ₇	⁸ H	55
16601,97	16712	-111	1,408	1,462	0	99	1	0	H ₇	⁸ F	36
17007,10	16942	65	1,317	1,288	0	96	4	0	H ₇	⁶ H	39
18121,46	18270	-148	1,215	1,205	90	1	9	0		⁶ H	90
18494,59	18500	-6	1,400	1,395	1	93	6	0	H ₇	⁶ F	31
19183,73	19367	-184	1,163	1,174	0	99	1	0	H ₇	⁸ I	59
19927,64	19724	203	1,445	1,455	84	4	11	0		⁶ F	84
20517,39	20676	-159	1,463	1,491	4	7	89	0	H * F	⁸ F	33
20817,16	20850	-33	1,440	1,419	0	98	2	0	H ₇	⁸ G	40
25036,76	25125	-88	1,335	1,378	0	99	1	0	F ₇	⁸ H	36
$J = 13/2$											
12674,69	12800	-125	1,350	1,357	0	100	0	0	H ₇	⁸ H	56
14421,87	14573	-151	1,438	1,448	0	99	1	0	H ₇	⁸ F	51
15530,11	15531	-1	1,358	1,334	26	69	5	0		⁶ H	26
15822,15	15635	188	1,275	1,299	64	30	6	0		⁶ H	64
17596,36	17587	9	1,280	1,289	0	99	1	0	H ₇	⁸ I	41
18978,23	18928	50	1,331	1,343	0	99	1	0	H ₇	⁸ G	22
19492,15	19597	-105	1,436	1,419	0	31	69	0	H * F	⁸ G	26
19956,65	19933	23	1,310	1,353	0	71	29	0	H ₇	⁶ G	19
20896,37	20739	158	1,330	1,243	0	92	5	0	H ₅	⁴ H	66
21134,77	21173	-39	1,245	1,260	0	97	3	0	H ₇	⁶ I	19
21358,06	21571	-213	1,310	1,360	0	86	13	1	H ₅	⁶ G	53
22172,64	22069	103	1,145	1,177	0	99	1	0	H ₇	⁸ K	44
22083,31	22242	-158	1,402	1,339	0	99	1	0	F ₇	⁸ G	29
22871,20	22856	15	1,387	1,360	0	15	85	0	H * F	⁸ F	29
23303,06	23311	-8	1,310	1,334	0	84	13	3	H ₅	⁶ H	31
23575,15	23725	-150	1,330	1,343	0	90	8	2	F ₇	⁸ H	20
24104,44	23932	172	1,173	1,170	0	86	11	3	H ₅	⁴ I	28
24506,80	24794	-287	1,105	1,154	0	87	12	1	H ₇	⁶ K	25
24967,31	24922	45	1,283	1,303	0	16	84	0	H * F	⁸ I	16
25468,58	25754	-286	1,155	1,140	0	91	4	5	H ₅	⁶ I	31
25772,86	25873	-101	1,370	1,418	0	99	1	0	F ₇	⁸ G	29
27193,05	26882	311	1,295	1,326	0	49	48	3	F ₅	⁴ H	15
28019,70	28053	-33	1,250	1,285	0	37	62	1	H * F	⁶ G	21

TABLEAU I (suite)

E_o	E_c	ΔE	g_o	g_c	f^9s^2 (%)	f^9ds (%)	f^9d^2 (%)	f^{10p} (%)	Première composante et pourcentage			
28456,12	28316	140	1,250	1,246	0	32	61	7	F ₇	⁶ H	16	
28550,72	28718	-167	1,280	1,295	0	62	16	22	F ₅	⁶ H	17	
29769,30	29866	-97	1,250	1,283	0	20	66	14	H * F	⁶ G	16	
29877,52	29965	-88	1,406	1,422	0	1	98	1	H * F	⁸ F	32	
30287,36	30207	80	1,210	1,218	0	13	40	47	⁵ I	⁶ H	18	
30361,80	30356	6	1,190	1,225	0	25	13	62	⁵ I	⁴ H	53	
30973,97	30919	55	1,140	1,137	0	3	96	1	H * F	⁸ L	35	
31183,10	31306	-123	1,160	1,199	0	5	83	12	H * G	⁶ I	18	
31978,85	31803	175	1,232	1,286	0	3	94	3	H * P	⁶ G	30	
32218,48	32031	187	1,160	1,086	0	3	22	75	⁵ I	⁶ K	40	
32914,90	33069	-155	1,220	1,202	0	3	39	58	⁵ I	⁴ I	37	
$J = 15/2$												
11394,91	11565	-170	1,383	1,383	0	100	0	0	H ₇	⁸ H	67	
12336,29	12523	-187	1,333	1,333	90	1	9	0		⁶ H	90	
13610,71	13798	-187	1,330	1,334	0	97	3	0	H ₇	⁶ H	65	
16260,40	16101	159	1,365	1,369	0	100	0	0	H ₇	⁸ G	43	
16875,90	16810	66	1,328	1,337	0	100	0	0	H ₇	⁸ G	30	
18678,44	18758	-79	1,272	1,257	0	97	2	1	H ₅	⁴ I	27	
19451,35	19459	-8	1,390	1,379	1	35	62	2	H ₅	⁶ H	31	
20166,45	20086	81	1,313	1,356	0	55	40	5	H ₅	⁶ H	43	
20467,71	20271	196	1,204	1,199	0	92	7	1	H ₇	⁸ K	26	
21272,07	21073	199	1,210	1,205	0	93	6	1	H ₇	⁶ I	28	
22467,10	22188	279	1,314	1,405	0	98	1	1	F ₇	⁸ H	44	
22672,54	22438	234	1,364	1,271	0	44	54	2	H ₅	⁶ I	21	
22854,69	22739	116	1,280	1,261	0	51	47	2	H ₅	⁶ I	26	
23202,72	23158	45	1,188	1,176	0	94	4	2	H ₅	⁴ K	29	
25192,03	25280	-88	1,300	1,302	0	41	29	30	⁵ I	⁶ H	22	
25833,38	25801	32	1,220	1,235	0	72	27	1	F ₇	⁶ H	22	
26634,20	26471	163	1,290	1,316	0	8	90	2	H * P	⁸ G	21	
27216,93	27102	115	1,300	1,293	0	47	40	13	F ₅	⁶ H	34	
27435,12	27378	57	1,312	1,339	0	5	90	5	H * P	⁸ I	16	
27885,60	27763	123	1,240	1,265	0	12	65	23	H * F	⁶ I	21	
28885,37	28908	-23	1,261	1,183	0	3	30	67	⁵ I	⁶ K	25	
29109,09	29256	-147	1,220	1,243	0	4	80	16	H * F	⁸ L	16	
29436,60	29621	-185	1,220	1,234	0	4	41	55	⁵ I	⁴ I	42	
30112,92	29996	116	1,210	1,208	0	4	81	15	H * G	⁶ I	30	
30399,10	30232	167	1,210	1,232	0	2	79	19	H * F	⁶ H	23	
30747,02	31015	-268	1,320	1,293	0	1	96	3	F * F	⁸ H	13	
31306,47	31573	-267	1,210	1,211	0	2	94	4	H * F	⁴ I	30	
31826,35	31920	-94	1,330	1,340	0	6	92	2	H * D	⁶ H	23	
32709,97	32698	12	1,200	1,224	0	2	24	74	⁵ I	⁶ I	48	

TABLEAU I (suite)

E_o	E_c	ΔE	g_o	g_c	f^{9s^2} (%)	f^{9ds} (%)	f^{9d^2} (%)	f^{10p} (%)	Première composante et pourcentage	
$J = 17/2$										
10594,19	10684	-90	1,400	1,403	0	100	0	0	H ₇	⁸ H 83
14895,06	14923	-28	1,315	1,323	0	100	0	0	H ₇	⁸ I 58
17036,55	16940	97	1,295	1,293	0	94	6	0	H ₇	⁶ I 62
18549,16	18688	-139	1,220	1,232	0	99	0	1	H ₇	⁸ K 31
19251,81	19391	-139	1,280	1,288	0	85	13	2	H ₅	⁶ I 65
20793,13	20656	137	1,225	1,226	0	96	4	0	H ₅	⁴ K 40
20884,42	20863	21	1,350	1,340	0	9	91	0	H * F	⁸ I 33
22908,05	22734	174	1,240	1,241	0	100	0	0	H ₇	⁶ K 31
22990,86	22639	352	1,400	1,409	0	56	43	1	F ₇	⁸ H 91
23765,80	23657	109	1,270	1,288	0	24	76	0	H * F	⁸ H 28
24316,09	24313	3	1,230	1,214	0	97	2	1	H ₅	⁶ K 45
25343,42	25364	-21	1,290	1,271	0	2	69	29	H * P	⁸ I 17
25818,43	25736	82	1,270	1,241	0	1	34	65	⁵ I	⁴ K 37
27232,69	27183	49	1,240	1,249	0	0	97	3	H * F	⁶ I 36
28252,34	28359	-106	1,230	1,255	0	3	75	22	H * G	⁶ I 15
29014,43	28978	36	1,250	1,254	0	0	94	6	H * F	⁸ K 15
29336,06	29446	-110	1,270	1,269	0	3	31	66	⁵ I	⁶ I 52
31879,66	31856	23	1,178	1,194	0	2	42	56	⁵ I	⁶ K 46
32613,41	32445	168	1,190	1,168	0	0	87	13	H * F	⁴ L 24
33529,34	33422	108	1,300	1,280	0	1	98	1	H * G	⁶ I 18
34396,87	34211	186	1,283	1,216	0	5	91	4	H * G	⁶ K 24
$J = 19/2$										
13408,62	13500	-91	1,364	1,363	0	100	0	0	H ₇	⁸ I 93
17606,65	17750	-144	1,280	1,288	0	100	0	0	H ₇	⁸ K 54
19571,75	19657	-85	1,267	1,271	0	65	35	0	H ₇	⁶ K 54
20985,62	20930	56	1,290	1,284	0	88	12	0	H ₇	⁸ K 35
21464,98	21416	49	1,316	1,321	0	24	76	0	H * F	⁸ I 36
23707,18	23773	-66	1,300	1,307	0	0	100	0	H * F	⁸ K 29
26279,67	26261	19	1,260	1,272	0	5	95	0	H * P	⁸ I 19
27209,91	26978	232	1,220	1,236	0	0	99	1	H * F	⁸ L 37
28306,83	28219	87	1,260	1,279	0	0	24	76	⁵ I	⁶ K 76
29681,75	29665	17	1,210	1,209	0	98	2	0	H * F	⁴ L 42
31536,69	31259	277	1,250	1,256	0	6	90	4	H * G	⁶ K 38
$J = 21/2$										
16881,33	17134	-253	1,335	1,333	0	100	0	0	H ₇	⁸ K 100
22031,98	22249	-218	1,322	1,324	0	0	100	0	H * F	⁸ K 87
25756,29	25689	67	1,260	1,264	0	0	100	0	H * F	⁸ L 57
$J = 23/2$										
24786,37	24886	-100	1,303	1,304	0	0	100	0	H * F	⁸ L 99

nom de la plus grande composante et le carré de son amplitude (vecteur normé à 100). Les vecteurs de base sont notés comme suit:

$$f^9s^2 \quad 2S+1L_1$$

$$f^9ds \quad \{[f^9S_1L_1, d] S_{12}L_{12}, s\} \text{ SLJ: } L_1 (2S_{12} + 1) 2S+1L$$

$$f^9d^2 \quad [f^9S_1L_1, d^2S_2L_2] \text{ SLJ: } L_1 * L_2 2S+1L$$

$$f^{10}p \quad [f^{10} \ ^5I, p] \text{ SLJ: } \ ^5I 2S+1L.$$

On ne trouvera pas dans le tableau I les niveaux prévus par le calcul auxquels ne correspond encore aucune valeur expérimentale, mais on peut se reporter à un diagramme d'énergie où figurent en traits pleins les niveaux ayant servi à ajuster les paramètres et, en traits pointillés pour chaque valeur de J , le plus bas niveau calculé et encore non observé (fig. 1).

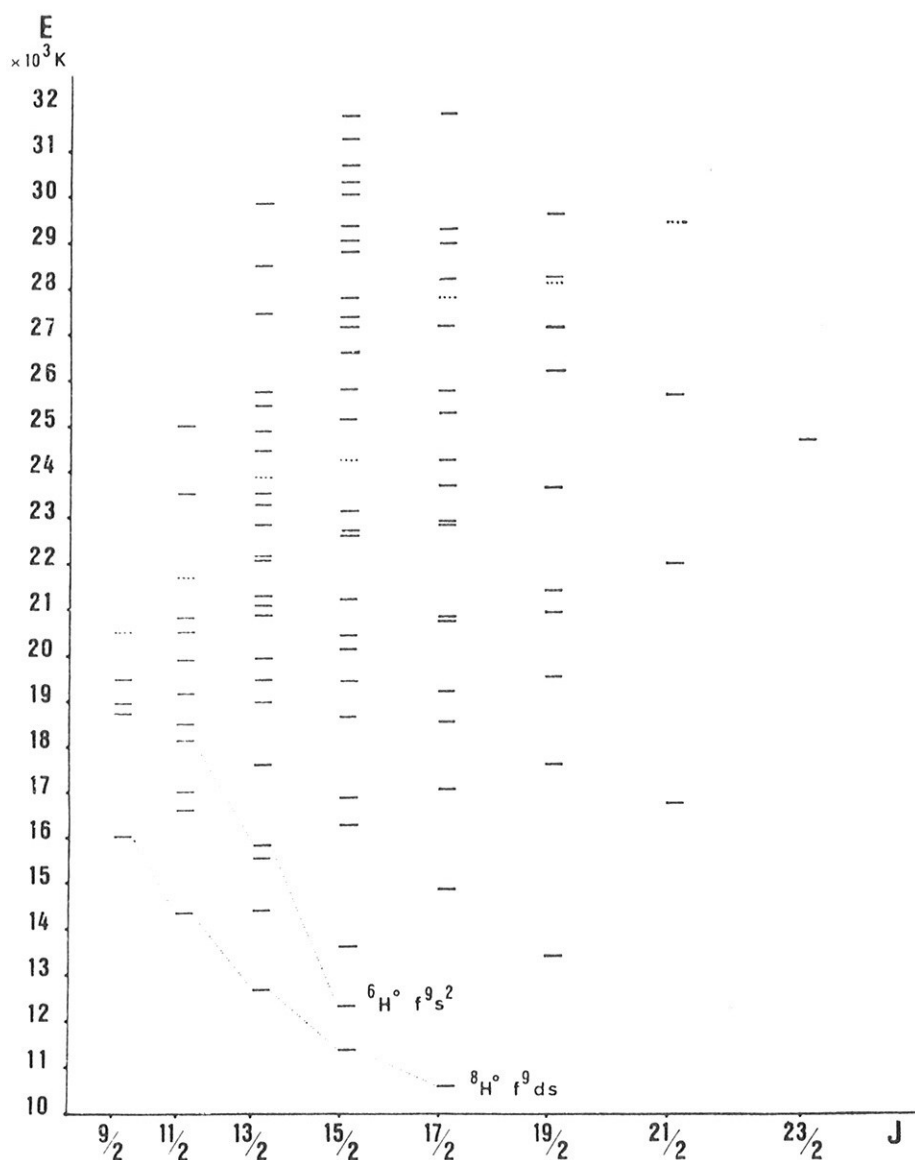


Fig. 1. Diagramme des niveaux $f^9(d+s)^2$ et $f^{10}p$ de Dy II (pointillé: pour chaque J premiers niveaux prévus théoriquement, mais pas trouvés).

La comparaison de g_o et g_c montre que le couplage intermédiaire défini par notre jeu de paramètres est proche du couplage réel mais on observe dans des cas isolés quelques écarts $g_o - g_c$ importants; on sait en effet que la composition vectorielle des niveaux et la valeur de g_c sont beaucoup plus sensibles que E_c à un faible changement des paramètres. Plusieurs niveaux situés au-dessus de 30000 K, dont l'énergie et le g étaient en bon accord avec les valeurs théoriques ont été identifiés *a posteriori* et sont donnés dans le tableau I. Ceux qui présentent les plus forts pourcentages de $f^{10}p$ classent les raies les plus intenses en se combinant avec $f^{10}s$, assurant ainsi la validité de nos résultats. Les paramètres ajustés sont rassemblés dans le tableau II. Six paramètres sont nécessaires pour décrire rigoureusement l'interaction de $f^{10}p$ avec $f^9(d + s)^2$. Possédant peu de niveaux de $f^{10}p$ dans le domaine d'énergie étudié, nous n'en avons retenu que trois: $R^{(3)}(ds, pf)$ et $R^{(1)}(ds, fp)$ auxquels nous avons donné pour valeurs initiales celles obtenues par Camus dans Tm II(5), et $R^{(1)}(d^2, fp)$ qui avait convergé dans

TABLEAU II

Paramètres radiaux en K des quatre configurations impaires profondes de Dy II ^a				
	4f ⁹ 6s ²	4f ⁹ 5d6s	4f ⁹ 5d ²	4f ¹⁰ 6p
E_{av}		28995 (285)		
Distance à f ⁹ ds	-8630 (146)	-	4466 (481)	15552 (350)
E_3f^9	578	578	578	550
F_2d^2			541 (23)	
F_4d^2			37,7	
F_2fd		174,7 (4)	159 (7)	
F_4fd		18,5 (1)	15,6 (1,7)	
G_1fd		158,9 (11)	129,4 (7,5)	
G_3fd		12,1 (6)	12	
G_5fd		3,6 (0,6)	3,5	
G_3fs		259 (23)		
G_2ds		2103 (271)		
F_2fp				50
G_2fp				5
G_4fp				4
$\zeta 4f$	2045 (88)	1958 (32)	2144 (71)	1750
$\zeta 5d$		931 (46)	964 (49)	
$\zeta 6p$				2150 (142)
α		6,6 (3)		
$R^{(2)}(fd, fs)$	600		$R^{(2)}(s^2, d^2)$	10000
$R^{(3)}(fd, sf)$	1752		$R^{(2)}(ds, d^2)$	-14057 (1458)
$R^{(1)}(ds, fp)$	-3974 (727)		$R^{(1)}(d^2, fp)$	1644 (454)
$R^{(3)}(ds, pf)$	-1200			

^a $N = 113$ niveaux observés, $p = 25$ paramètres libres, $\langle \overline{\Delta E} \rangle = [\sum \Delta E_i^2 / (N - p)]^{\frac{1}{2}} = 161$ K.

l'étude de $(d + s)^2 + fp$ dans Ce III par Goldschmidt⁶). Les paramètres qui ont varié librement sont suivis de leur écart-type. Il semble que de nouveaux niveaux d'énergie pourront être trouvés dans un avenir proche; ils ne devraient pas provoquer de changement sensible de nos paramètres radiaux qui ont été ajustés avec un nombre suffisamment élevé de niveaux.

4. *Les niveaux non identifiés.* Neuf niveaux, d'énergie inférieure à 30000 K, qui n'ont pas été introduits dans le processus d'itération sont donnés dans le tableau III. Ils apparaissent dans des régions où la densité de niveaux calculés est très élevée, mais ni leur facteur de Landé g_o , ni les transitions qu'ils produisent, n'ont permis leur identification avec des niveaux prévus par le calcul. Le niveau $28784,49g_{13/2} = 1,025$ peut correspondre à un niveau calculé de f^9ds (99%): 29622 K, $g_o = 0,992$, car la proximité de niveaux de f^9 (4F , 4G , 4I) ds non inclus dans notre base suffit à justifier l'écart important entre leurs énergies.

TABLEAU III

Niveaux d'énergie impairs non interprétés dans le domaine 10594–30000 K		
J	E_o (K)	g_o
9/2	22653,435	1,450
11/2	23561,58	1,368
11/2	26047,86	1,15
11/2	26407,42	1,11
13/2	27502,93	1,175
13/2	27792,48	1,15
9/2	27476,88	1,18
11/2	27990,27	1,29
13/2	28784,49	1,025

Entre 30000 et 45000 K, plus de 140 niveaux observés n'ont pas encore été interprétés. Ils devraient appartenir à f^9 (4F , 4G , 4I , 4M) $(d + s)^2$ et à f^{10} (5F , 5S)p. Les termes quadruplet de f^9 sont très mélangés et un calcul paramétrique impliquant une troncature rigoureuse du cœur conduirait à des résultats erronés. Sans troncature l'ordinateur et les programmes dont nous disposons ne permettent pas de traiter les matrices d'ordre très élevé (> 500) qui apparaîtraient dans un tel problème.

REFERENCES

- 1) Conway, J. et Worden, E., J. Opt. Soc. Amer. **61** (1971) 704, et Rapport U.C.R.L. 19944.
- 2) Brewer, L., J. Opt. Soc. Amer. **61** (1971) 1666.
- 3) Wyart, J.F., CR Acad. Sci. **272B** (1971) 933.
- 4) Crosswhite, H.M. et Dieke, G.H., J. chem. Phys. **35** (1961) 1535.
- 5) Camus, P., Thèse de Doctorat (Orsay, 1971).
- 6) Goldschmidt, Z.B., Configuration Interaction in Rare Earths Spectra, dans Spectroscopic and Group Theoretical Methods in Physics, F. Bloch *et al.* eds., J. Wiley and S. Inc. (New York, 1968).

INTERPRETATION DU SPECTRE DE Dy II

II. ETUDE DES CONFIGURATIONS $4f^9 6s 6p$ ET $4f^9 5d 6p$

J.F. WYART

Laboratoire Aimé Cotton, CNRS II, Orsay, Essonne, France

Reçu le 27 Décembre 1971

Synopsis

By means of transitions to $4f^9 (5d + 6s)^2$, 136 high even levels of Dy II have been found. The parametric calculation of $4f^9 6s 6p$ and $4f^9 5d 6p$ taken together has led to identify 126 of these levels. The energy levels, their theoretical interpretation and the fitted values of the radial parameters are given. The relative positions of some configurations are compared in the spark spectra of lanthanides.

1. *Introduction.* Nous avons décrit dans l'article précédent la méthode théorique et le matériel expérimental qui nous ont permis d'identifier des niveaux d'énergie de Dy II. Alors que les termes profonds des quatre premières configurations impaires apparaissent dans un intervalle de 15000 K, les niveaux pairs actuellement connus sont répartis dans deux domaines d'énergie:

a) Trente-sept niveaux de $4f^{10} 6s$ et $4f^{10} 5d$ ont été confirmés ou découverts entre 0 ($f^{10} s^6 I_{17/2}$, $g = 1,287$) et 25292,49 ($f^{10} d$, $g_{7/2} = 0,743$); des résultats préliminaires concernant cette région ont déjà été publiés.

b) Cent trente-six niveaux qui s'interprètent pour la plupart dans le schéma $f^9 (d + s) p$ ont été identifiés entre 36212 et 53738 K. Expérimentalement, ces niveaux sont trouvés par des voies différentes: les premiers au moyen de transitions avec des niveaux impairs élevés, les seconds dans un système de transitions $f^9 (d + s) p \rightarrow f^9 (d + s)^2$. Théoriquement, leur étude paramétrique conduit à des résultats satisfaisants, même si l'on néglige l'interaction de $f^{10} (d + s)$ avec $f^9 (d + s) p$.

Les configurations $f^{10} s$ et $f^{10} d$ sont en cours d'analyse et leur description sera faite ultérieurement; les résultats proposés ici ne concernent que les niveaux élevés.

2. *Les niveaux d'énergie pairs entre 36000 et 54000 K.* Les niveaux déterminés dans cette région peuvent appartenir à l'une des quatre configurations $f^{10} s$, $f^{10} d$, $f^9 sp$, $f^9 dp$. En fait, $f^9 sp$ et $f^9 dp$ qui apparaissent dans le même domaine

TABLEAU I

Niveaux pairs observés de Dy II entre 36000 et 54000 K et niveaux calculés correspondants

E_o	E_c	ΔE	g_o	g_c	f^{9dp} (%)	Première composante et pourcentage	
$J = 7/2$							
43 838,10	43 986	-147	1,040	1,057	88	H ⁷ H	⁸ H 33
46 798,32	46 620	178	1,110	1,147	21	H ⁷ H	⁶ G 14
$J = 9/2$							
42 256,43	42 138	118	1,225	1,239	86	H ⁷ H	⁸ H 27
42 911,59	42 999	-87	1,215	1,213	28	H * ³ P	⁸ H 33
44 352,01	44 433	-81	1,170	1,240	89	H ⁷ H	⁸ I 22
44 737,52	44 776	-38	1,385	1,308	46	H ⁷ H	⁸ G 11
45 427,49	45 339	88	1,255	1,356	28	H * ³ P	⁸ D 13
45 800,00	45 680	120	1,282	1,268	60	H ⁷ H	⁶ G 28
46 091,32	46 121	-29	1,278	1,277	20	H * ³ P	⁶ G 19
46 161,85	46 260	-98	1,305	1,170	45	H * ³ P	⁴ G 13
47 462,43	47 395	67	1,320	1,302	90	H ⁷ H	⁸ G 13
48 684,98	48 700	-15	1,195	1,195	45	H * ³ P	⁶ G 15
$J = 11/2$							
40 194,02	40 151	43	1,345	1,331	72	H ⁷ H	⁸ H 18
40 841,63	40 757	85	1,326	1,326	39	H * ³ P	⁸ H 20
42 083,59	42 069	15	1,325	1,413	94	H ⁷ F	⁸ D 24
42 813,08	42 884	-71	1,208	1,274	41	H * ³ P	⁴ G 13
43 689,99	43 669	21	1,401	1,512	12	F * ³ P	⁸ D 45
44 331,36	44 286	46	1,242	1,239	47	H * ³ P	⁶ I 16
44 903,87	44 843	61	1,315	1,299	27	H * ³ P	⁴ H 15
45 241,75	45 316	-74	1,340	1,364	86	H ⁷ F	⁸ D 11
45 545,68	45 581	-35	1,360	1,361	86	H ⁷ F	⁶ F 24
46 498,62	46 511	-13	1,275	1,278	42	H * ³ P	⁴ H 14
46 647,75	46 623	24	1,338	1,334	64	H ⁷ F	⁸ D 10
46 976,07	47 076	-100	1,240	1,257	96	H ⁷ H	⁸ H 12
47 023,09	47 320	-297	1,325	1,279	62	H ⁷ H	⁸ G 6
47 401,40	47 556	-155	1,215	1,370	39	F * ³ P	⁸ G 18
48 240,94	48 183	58	1,285	1,192	88	H ⁷ I	⁸ K 23
48 469,08	48 489	-20	1,285	1,283	91	H ⁷ I	⁶ H 13
48 863,45	48 924	-60	1,320	1,338	56	F * ³ P	⁶ F 18
$J = 13/2$							
37 878,55	37 944	-66	1,303	1,333	16	H * ³ P	⁶ H 20
38 939,69	39 028	-88	1,381	1,376	89	H ⁷ H	⁸ G 22
39 896,72	39 757	140	1,245	1,341	24	H * ³ P	⁸ H 20
41 004,07	40 847	157	1,255	1,264	42	H * ³ P	⁶ I 15
41 878,48	41 834	44	1,314	1,332	45	H * ³ P	⁴ H 16
42 137,31	42 132	5	1,330	1,311	25	H * ³ P	⁶ G 32

TABLEAU I (suite)

E_0	E_c	ΔE	g_0	g_c	$f^0 dp$ (%)	Première composante et pourcentage
42289,33	42225	64	1,348	1,387	96	H ⁷ H ⁶ G 30
42883,01	42903	-20	1,367	1,386	85	H ⁷ F ⁸ F 19
43422,06	43451	-29	1,307	1,283	18	H * ³ P ⁸ I 19
44049,22	44004	45	1,312	1,310	26	H * ³ P ⁶ H 12
44189,52	44090	99	1,310	1,323	66	H ⁷ H ⁶ H 20
44812,00	44718	94	1,390	1,394	71	H ⁷ H ⁸ G 14
45123,11	45099	24	1,323	1,427	45	F * ³ P ⁸ F 19
45356,53	45358	-1	1,448	1,322	77	H ⁷ H ⁸ H 13
45773,90	45763	10	1,290	1,332	86	H ⁷ F ⁸ F 23
46220,92	46183	38	1,310	1,306	73	H ⁷ I ⁸ I 16
46490,31	46612	-122	1,229	1,255	83	H ⁷ I ⁶ H 23
46779,06	46764	15	1,297	1,293	43	H * ³ P ⁸ I 14
46943,02	46979	-36	1,235	1,237	88	H ⁷ H ⁸ I 27
47357,74	47438	-80	1,220	1,233	81	H ⁷ H ⁶ I 17
48035,88	48158	-123	1,310	1,349	84	H ⁷ H ⁶ I 8
48487,13	48403	84	1,460	1,443	26	F * ³ P ⁶ G 33
48831,17	48606	225	1,270	1,286	88	H ⁷ I ⁶ I 10
49132,94	48999	134	1,230	1,353	96	F ⁷ F ⁸ G 12
49340,48	49481	-140	1,253	1,268	88	H ⁷ K ⁸ K 9
49603,11	49734	-131	1,320	1,189	38	H * ³ P ⁶ I 29
49680,29	49808	-127	1,350	1,314	73	H ⁵ H ⁶ G 18
49856,57	50014	-158	1,230	1,263	89	H ⁷ K ⁶ I 9
50858,43	50816	42	1,300	1,289	92	H ⁵ G ⁴ H 19
51087,71	51006	82	1,315	1,310	91	H ⁷ G ⁸ G 18
52008,95	51996	13	1,220	1,209	95	H ⁷ K ⁸ K 9
$J = 15/2$						
36212,19	36387	-175	1,405	1,412	9	H * ³ P ⁸ G 45
37817,31	37829	-11	1,333	1,351	53	H ⁷ H ⁸ G 20
38427,36	38517	-90	1,317	1,318	73	H ⁷ H ⁸ H 19
40516,80	40312	205	1,345	1,355	30	H * ³ P ⁸ I 17
40604,11	40452	152	1,295	1,317	49	H * ³ P ⁴ I 24
41111,11	41192	-80	1,315	1,346	17	H * ³ P ⁶ H 40
42550,09	42615	-65	1,340	1,344	79	H ⁷ H ⁶ H 26
43002,98	43082	-79	1,330	1,331	96	H ⁷ H ⁸ H 20
43794,35	43615	179	1,298	1,298	34	H * ³ P ⁸ I 20
43891,33	43897	-5	1,315	1,314	92	H ⁷ G ⁶ H 21
44653,18	44483	170	1,318	1,320	79	H ⁷ H ⁶ H 12
45139,88	45191	-51	1,245	1,299	91	H ⁷ H ⁸ I 26
45317,04	45324	-6	1,280	1,278	84	H ⁷ I ⁶ I 29
46082,83	45895	188	1,303	1,304	95	H ⁷ G ⁸ G 13
46853,71	46946	-92	1,285	1,367	89	H ⁷ F ⁸ G 21
47091,91	47106	-15	1,350	1,258	20	H * ³ P ⁶ I 41
47597,73	47466	131	1,262	1,335	53	F * ³ P ⁸ G 33

TABLEAU I (suite)

E_o	E_c	ΔE	g_o	g_c	$f^{\circ}dp$ (%)	Première composante et pourcentage	
48052,16	48098	-46	1,295	1,294	94	H ⁷ I	⁸ H 14
48489,05	48442	47	1,350	1,359	91	H ⁷ G	⁸ G 17
48950,09	48905	45	1,222	1,220	98	H ⁵ I	⁶ H 12
48988,85	48876	113	1,270	1,293	95	H ⁷ G	⁸ G 19
49233,16	49211	22	1,230	1,225	94	H ⁷ K	⁶ K 15
49813,64	49717	97	1,273	1,275	93	H ⁷ K	⁶ K 9
50129,27	50062	67	1,212	1,216	93	H ⁵ H	⁴ I 18
50206,50	50228	-22	1,210	1,256	95	H ⁷ G	⁸ H 14
50521,44	50460	61	1,244	1,238	97	H ⁵ H	⁴ I 17
50783,98	50908	-124	1,322	1,284	92	H ⁷ G	⁸ H 12
51124,24	51156	-32	1,230	1,245	98	H ⁵ I	⁴ I 35
52395,07	52430	-35	1,260	1,278	96	H ⁷ K	⁸ I 15
$J = 17/2$							
36522,90	36598	-75	1,373	1,383	18	H * ³ P	⁸ H 59
38402,40	38426	-23	1,326	1,337	89	H ⁷ H	⁸ H 23
40455,73	40569	-113	1,326	1,335	23	H * ³ P	⁶ I 39
41583,90	41658	-74	1,330	1,330	89	H ⁷ H	⁶ I 25
42741,69	42720	22	1,320	1,320	87	H ⁷ H	⁸ H 12
43066,19	42997	69	1,343	1,339	94	H ⁷ H	⁸ I 35
44074,41	43852	222	1,315	1,317	47	H * ³ P	⁸ I 25
44545,25	44517	29	1,285	1,293	66	H * ³ P	⁸ I 24
45240,02	45314	-74	1,330	1,327	76	H ⁷ I	⁸ H 31
46256,77	46316	-59	1,275	1,281	92	H ⁷ I	⁶ I 22
46694,14	46661	34	1,274	1,278	99	H ⁷ I	⁸ I 20
47208,15	47182	26	1,240	1,240	98	H ⁷ K	⁶ K 14
47718,75	47663	56	1,278	1,275	92	H ⁷ G	⁸ H 19
48022,12	47888	134	1,248	1,270	96	H ⁷ G	⁸ H 17
49537,65	49506	32	1,222	1,220	99	H ⁵ I	⁶ I 27
49675,74	49797	-121	1,195	1,237	98	H ⁵ I	⁴ K 18
50457,94	50455	3	1,280	1,282	97	H ⁷ K	⁸ I 20
51716,65	51763	-47	1,232	1,227	99	H ⁵ I	⁴ K 18
53002,56	52964	38	1,260	1,285	99	H ⁵ H	⁶ I 71
53738,08	53683	56	1,270	1,301	97	F ⁷ H	⁸ H 13
$J = 19/2$							
40158,04	40233	-75	1,360	1,358	31	H * ³ P	⁸ I 69
40807,20	40735	72	1,332	1,342	92	H ⁷ H	⁸ I 44
42478,98	42521	-42	1,310	1,318	88	H ⁷ H	⁸ I 35
44501,98	44668	-166	1,320	1,317	99	H ⁷ I	⁸ I 43
45701,64	45676	26	1,290	1,293	98	H ⁷ I	⁸ K 36
46066,65	46158	-92	1,240	1,260	98	H ⁷ K	⁸ K 25
48069,10	48014	55	1,273	1,279	98	H ⁷ I	⁶ K 34
48346,29	48372	-26	1,230	1,234	99	H ⁵ K	⁴ L 26

TABLEAU I (suite)

E_o	E_c	ΔE	g_o	g_c	$f^9 dp$ (%)	Première composante et pourcentage		
49 544,70	49 537	7	1,278	1,274	98	H ⁵ K	⁶ K	20
50 017,73	50 030	-12	1,278	1,303	98	H ⁷ K	⁸ I	39
51 640,22	51 388	252	1,250	1,242	100	H ⁷ K	⁸ K	25
$J = 21/2$								
44 156,98	44 114	43	1,317	1,321	100	H ⁷ I	⁸ K	73
45 934,94	45 982	-47	1,300	1,313	100	H ⁷ K	⁸ K	53
48 059,91	48 121	-61	1,280	1,281	100	H ⁷ K	⁸ K	34
51 593,35	51 580	14	1,255	1,253	100	H ⁷ K	⁸ L	46
53 641,33	53 738	-97	1,230	1,242	100	H ⁵ K	⁶ L	69
$J = 23/2$								
47 960,83	48 058	-98	1,305	1,304	100	H ⁷ K	⁸ L	100

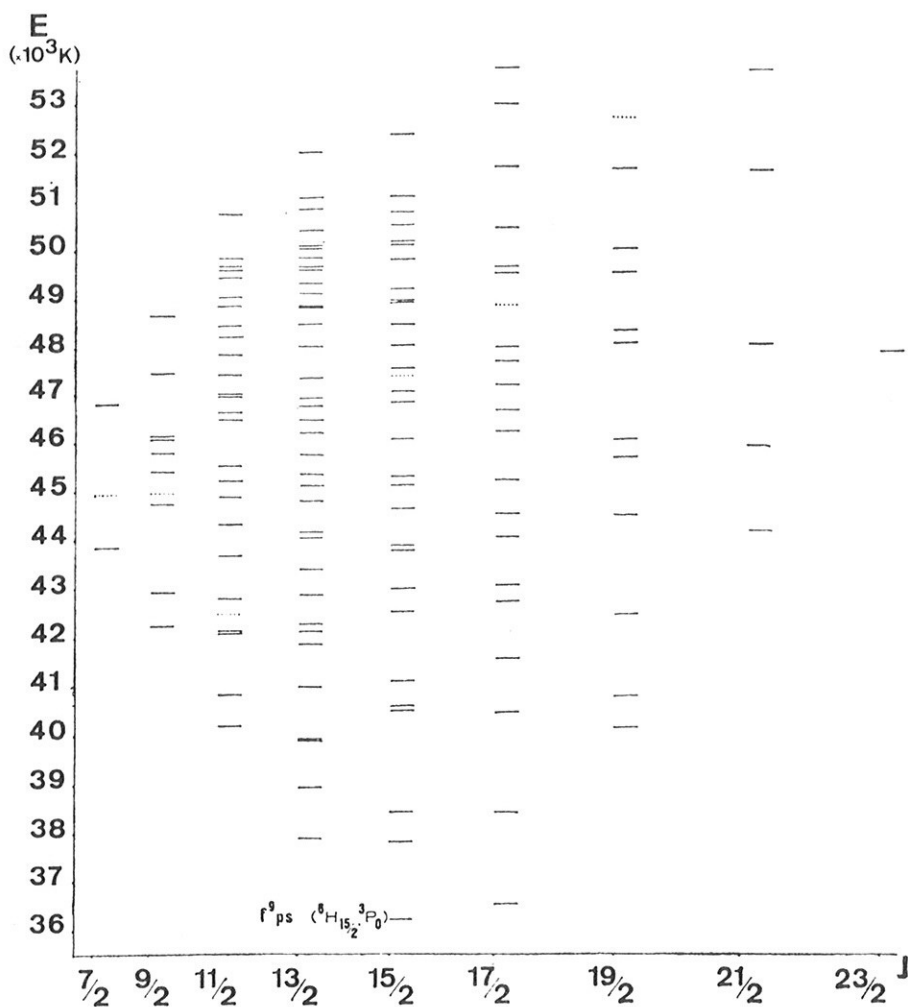


Fig. 1. Diagramme des niveaux $f^9 (d + s) p$ de Dy II (pointillé: pour chaque J , premiers niveaux prévus théoriquement, mais pas trouvés).

d'énergie classent les raies les plus intenses. On a effectué le calcul des deux configurations selon les méthodes de Racah, sur une base tronquée $f^9 ({}^6\text{H} + {}^6\text{F}) \times (d + s)p$; ceci implique le traitement de 789 vecteurs de base répartis en 12 matrices d'ordre maximum 124. Etant donné la structure du cœur $4f^9$, déjà décrite précédemment²), le calcul des valeurs propres de l'opérateur $(Q + A)$, Q représentant l'interaction coulombienne et A l'interaction spin-orbite, sur cette base, doit permettre d'interpréter les niveaux profonds de cet ensemble de configurations dans un domaine de 20000 K à partir du plus bas niveau. Les identifications sont fondées sur la comparaison des facteurs de Landé g_c calculés en couplage intermédiaire avec les g_o expérimentaux. Certains écarts $g_o - g_c$ nettement plus élevés que la moyenne apparaissent isolément dans deux cas:

a) un niveau de $4f^{10} (5d + 6s)$ perturbe un niveau très proche de $4f^9 (5d + 6s) 6p$ (par exemple $39944,237g_{13/2} = 1,235$ perturbant $39896,718g_{13/2} = 1,245g_c = 1,34$);

b) le couplage déterminé par des paramètres que l'on ajuste à l'aide des seules énergies est localement déficient; dans ce cas les sommes $\sum_i g_{oi}$ et $\sum_i g_{ci}$ sont approximativement égales. On trouve dans les colonnes successives du tableau I et par valeurs de J croissantes, l'énergie observée E_o et l'énergie calculée E_c ,

TABLEAU II

Les paramètres radiaux ajustés et leurs écarts - type (en K) dans les configurations $4f^9 5d 6p$ et $4f^9 6s 6p^a$

$f^9 ({}^6\text{H} + {}^6\text{F}) dp$		$f^9 ({}^6\text{H} + {}^6\text{F}) ps$	
E_{av}	53481 (158)	$E_{av} = E_{av} (f^9 dp)$	
$E_3 (4f^9)$	598 (20)	$E_3 (4f^9)$	578 (12)
$F_2 (4f, 5d)$	182,2 (3,4)	$F_2 (4f, 6p)$	81,2 (8)
$F_4 (4f, 5d)$	20,3 (0,9)	$G_2 (4f, 6p)$	7,2 (2)
$G_1 (4f, 5d)$	170,9 (6)	$G_4 (4f, 6p)$	7,5 (3)
$G_3 (4f, 5d)$	21,8 (1)	$G_3 (4f, 6s)$	237 (36)
$G_5 (4f, 5d)$	3,1	$G_1 (6s, 6p)$	5700
$F_2 (4f, 6p)$	62,6 (6,4)	$\zeta 4f$	2095,5 (29)
$G_2 (4f, 6p)$	6,6 (1,2)	$\zeta 6p$	2926,8 (63)
$G_4 (4f, 6p)$	10,5 (1,5)		
$F_2 (5d, 6p)$	323 (10)	<i>Interaction</i>	
$G_1 (5d, 6p)$	449 (12)	S (dp-sp)	5527 (240)
$G_3 (5d, 6p)$	9,1 (2,6)	$R^{(1)} (6p6s, 5d6p)$	-10 613 (379)
$\zeta 4f$	2014 (23)	$R^{(2)} (6p6s, 6p5d)$	-8939 (402)
$\zeta 5d$	1123 (49)	$R^{(2)} (4f6s, 4f5d)$	500
$\zeta 6p$	2275 (41)	$R^{(3)} (4f6s, 5d4f)$	1000
χ	3,5 (2)		

^a $N = 126$ niveaux observés, $p = 26$ paramètres libres, $\langle \Delta E \rangle = (\sum \Delta E_i^2 / N - p)^{1/2} = 107$ K (0,6% du domaine interprété).

l'écart $\Delta E = E_o - E_c$, les facteurs de Landé observés et calculés g_o et g_c , le pourcentage de f^9dp entrant dans la composition du niveau, enfin le nom et le carré de l'amplitude de la principale composante (vecteur normé à 100). Les vecteurs de base sont notés:

$$f^9dp \quad [(f^9S_1L_1, d) S_{12}L_{12}, p] \text{ SLJ:} \quad L_1^{2S_{12}+1}L_{12}^{2S+1}L$$

$$f^9ps \quad [f^9S_1L_1, (sp) S_2L_2] \text{ SLJ:} \quad L_1^{2S_2+1}L_2^{2S+1}L.$$

Les niveaux d'énergie expérimentaux et (pour chaque valeur de J entre 7/2 et 19/2) les plus profonds niveaux calculés restant à découvrir ont été représentés sur un diagramme d'énergie (fig. 1). Les paramètres radiaux ajustés sont donnés dans le tableau II. Sur les 30 paramètres introduits, trois ont été fixés: $R^{(2)}$ (fd, fs), $R^{(3)}$ (fd, sf) et $G^{(1)}$ (sp) car tous les niveaux observés de f^9sp sont issus de sp^3P ; en outre G_3fd/G_5fd a été maintenu constant.

TABLEAU III

Niveaux d'énergie pairs non interprétés dans le domaine 36000–54000 K

J	E_o (K)	g_o
13/2	39944,237	1,235
11/2	42150,665	1,095
11/2	47833,920	1,155
11/2	49058,033	1,380
11/2	49462,328	1,290
11/2	49607,502	1,150
13/2	50051,480	1,260
13/2	50101,905	1,115
13/2	50408,820	1,180
11/2	50768,520	1,355

Dix niveaux situés dans le domaine d'énergie décrit demeurent non identifiés à l'issue de ce calcul. A l'exception du niveau 39944,237 $J = 13/2$ déjà cité plus haut, tous apparaissent dans des régions où la densité de niveaux calculés est élevée et les facteurs de Landé en concordent pas avec ceux des niveaux théoriques les plus proches. L'énergie, le J et le g de ces niveaux sont donnés dans le tableau III.

3. *Généralisation des résultats.* D'autres auteurs ont déjà remarqué, à la suite de Racah³⁾ que les positions relatives des configurations électroniques varient régulièrement le long de la série des lanthanides⁴⁾. Il est donc possible d'estimer empiriquement l'énergie à laquelle doit apparaître une configuration, par interpolation entre des configurations analogues observées dans des éléments voisins.

Dans la seconde demi-couche des lanthanides la structure électronique externe des seuls éléments gadolinium (atome neutre $Z = 64$) thulium ($Z = 69$) et ytterbium ($Z = 70$) pouvait être considérée comme bien connue^{5,6,7,8}). Les résultats obtenus dans le dysprosium ($Z = 66$) permettent de prévoir avec une précision accrue l'écart entre les différentes configurations attendues dans trois spectres en cours d'analyse Tb II, Ho II, Er II. Les configurations observées dans les lanthanides sont construites sur les cœurs $4f^N$ ou $4f^{N-1}$. Nous avons choisi de comparer dans un graphique des configurations fondées sur $4f^{N-1}$ seulement (fig. 2). Les énergies, rapportées à $4f^{N-1}6s^2$, sont celles du plus bas niveau de chaque configuration. Par interpolation, nous attendons les différentes configurations des éléments Tb, Ho, Er aux énergies suivantes:

	Tb II	Ho II	Er II
f^8ds	X	$f^{10}s^2$ Y	$f^{11}s^2$ Z
f^8s^2	X + 2900 K	$f^{10}ds$ Y	$f^{11}ds$ Z + 2500 K
f^8d^2	X + 6800 K	$f^{10}d^2$ Y + 10500 K	$f^{11}d^2$ Z + 14200 K
f^8sp	X + 26100 K	$f^{10}sp$ Y + 24300 K	$f^{11}sp$ Z + 24900 K
f^8dp	X + 26800 K	$f^{10}dp$ Y + 27500 K	$f^{11}dp$ Z + 30000 K

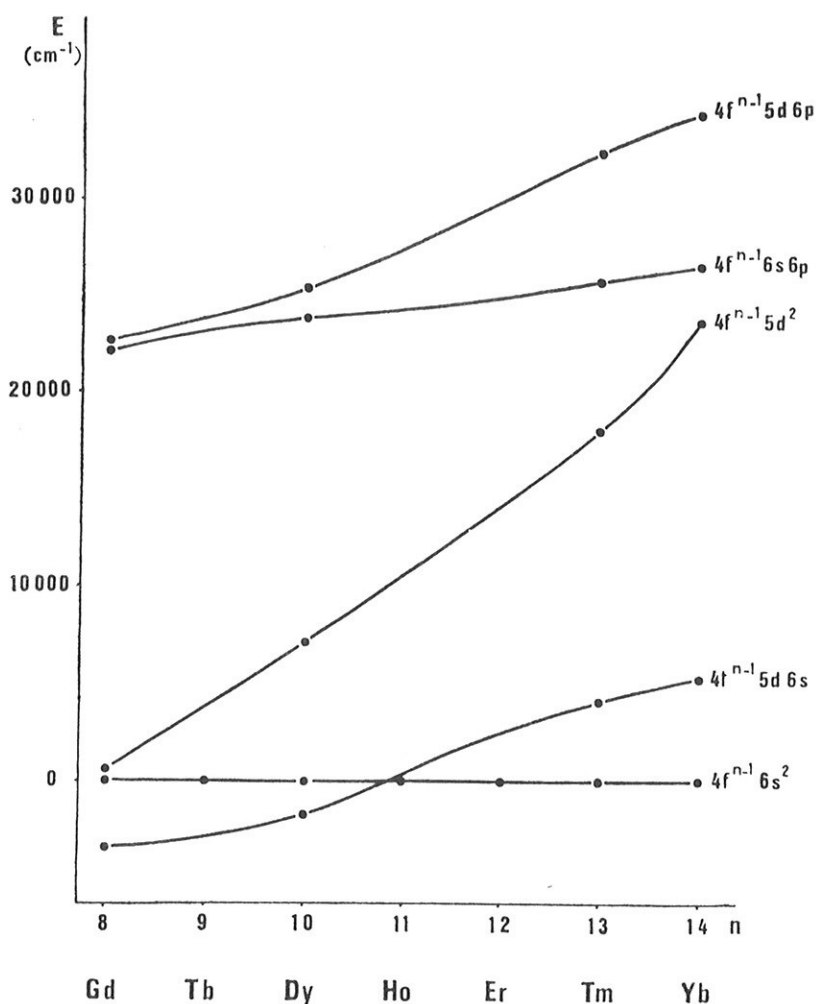


Fig. 2. Graphique des niveaux fondamentaux des configurations basées sur $4f^{N-1}$ dans les atomes une fois ionisés des lanthanides de la seconde demi-couche.

Dans le cas du terbium, les plus bas niveaux de f^8ds ont été reconnus par Meinders⁹). Cependant deux niveaux de $J = 6$ qui possèdent le même facteur de Landé $g_6 = 1,46$ sont observés aux énergies: 2663,17 et 3193,55 K. Le calcul paramétrique indique que l'on ne doit attendre qu'un seul niveau de f^8ds avec $g_6 = 1,46$ dans ce domaine d'énergie. Toutefois, ni le calcul effectué l'aide d'un jeu de paramètres ajustés sur un trop petit nombre de niveaux, ni les courbes empiriques de la fig. 2 ne sont assez précis pour affirmer lequel de ces deux niveaux est le 7F_6 fondamental de la configuration f^8s^2 .

Remerciements. J'exprime ma reconnaissance à J. Conway et E. Worden qui m'ont communiqué de longue date les résultats de la classification préliminaire de Dy I et Dy II et à L. Brewer pour l'échange fructueux d'informations concernant la position des configurations. M. Fred a réalisé à Argonne National Laboratory les excellents spectrogrammes Zeeman qui sont à l'origine de ce travail et je l'en remercie vivement.

REFERENCES

- 1) Wyart, J.F., CR Acad. Sci. **272B** (1971) 933.
- 2) Crosswhite, H.M. et Dieke, G.H., J. chem. Phys. **35** (1961) 1535.
- 3) Racah, G., Cours au Collège de France (Paris, 1964).
- 4) Brewer, L., J. Opt. Soc. Amer. **61** (1971) 1101 et 1666.
- 5) Russell, H.N., J. Opt. Soc. Amer. **40** (1950) 550.
- 6) Blaise, J., Van Kleef, Th.A.M. et Wyart, J.F., J. Physique **32** (1971) 617.
- 7) Camus, P., Thèse de Doctorat (Orsay, 1971).
- 8) Meggers, W.F., J. Res. Nat. Bur. Stand. **71A** (1967) 396.
- 9) Meinders, E., Thèse (Amsterdam, 1970).

ANNEXE n° IV

ÉTUDE DES CONFIGURATIONS PAIRES 4f⁴ 6s ET 4f⁴ 5d DE Nd II

par Jean-François WYART

Laboratoire Aimé Cotton, C. N. R. S. II, Faculté des Sciences, 91, Orsay, France

(Reçu le 15 avril 1970)

Résumé. — La classification du spectre de Nd II a entraîné la découverte de 47 nouveaux niveaux pairs profonds appartenant à 4f⁴ 6s et 4f⁴ 5d. Les calculs théoriques des énergies et des facteurs de Landé des niveaux de l'ensemble de ces configurations ont permis d'interpréter les 78 niveaux expérimentaux avec un écart quadratique moyen de 57 K. Les vecteurs propres sont donnés dans le couplage *LS*. Nous avons ajusté les paramètres radiaux par la méthode des moindres carrés.

Abstract. — The classification of Nd II spectrum has led to the discovery of 47 new low levels which belong to the 4f⁴ 6s and 4f⁴ 5d configurations. The theoretical calculation of the energy eigen values and the Landé *g*-factors of the two configurations taken together has allowed the interpretation of the 78 experimental levels with a r. m. s. error of 57 K. Eigen vectors are given in the *LS* scheme. The values of the radial parameters have been fitted by the least-squares method.

1. **Introduction.** — Les premières études du spectre d'étincelle du néodyme ont été réalisées en 1942 par Albertson, Harrison et Mac Nally [1] qui ont localisé les dix premiers niveaux de 4f⁴ 6s, 21 niveaux de 4f⁴ 5d et 59 niveaux supérieurs attribués à 4f⁴ 6p et 4f³ 5d 6s. Depuis 1966, la classification de ce spectre a été révisée ; au laboratoire Aimé Cotton, nous avons observé les structures Zeeman de plus de 4 000 raies et les spectres d'émission infrarouge ont été enregistrés au moyen d'un spectromètre SISAM par J. Vergès et J. Boudet [2] entre 0,8 et 2,5 μm, et d'un spectromètre à grille par C. Morillon entre 2,4 et 4,1 μm. Simultanément R. Hoekstra, au Zeeman Laboratorium d'Amsterdam, mesurait les longueurs d'onde du domaine spectral 8 712-2 475 Å au moyen d'un comparateur automatique [3]. Les spectrogrammes étudiés avaient été réalisés par M. Fred sur le spectrographe Paschen-Runge d'Argonne National Laboratory, la source étant constituée d'un tube sans électrodes excitée en haute fréquence. Nous avons exposé en 1968 les premiers résultats obtenus [4], en particulier dans la classification de Nd II, les écarts entre les niveaux des termes ⁶F, ⁴F et ⁶S de 4f⁴ 6s et 13 niveaux de 4f⁴ 5d. Ultérieurement, à l'aide d'un programme de recherche automatique des niveaux d'énergie utilisant les longueurs d'onde récemment mesurées, R. Hoekstra et P. Kruijer ont découvert les derniers niveaux de la sous-configuration 4f⁴ (⁵I) 5d. Nos données sur l'effet Zeeman ont permis de confirmer et d'identifier les niveaux trouvés par cette voie et de localiser en outre les termes de 4f⁴ 6s ⁶F, ⁴F, ⁶S, ⁴S, ⁴K, ²K [5]. Nous

connaissons donc actuellement 78 niveaux pairs profonds, apparemment bien isolés des autres configurations paires — 100 niveaux élevés que l'on peut attribuer à 4f³ 6s 6p et 4f³ 5d 6p, découverts entre 34 600 et 47 000 cm⁻¹.

Pour limiter la recherche des niveaux à un faible domaine d'énergie, nous avons calculé les configurations f⁴ s et f⁴ d selon les méthodes de Racah et Judd [6, 7]. L'accroissement progressif des données expérimentales et l'extension de la chaîne de programmes utilisée nous a permis de mener à bien l'étude théorique de l'ensemble de configurations 4f⁴ (5d + 6s) sans troncature du cœur 4f⁴.

2. **Méthode.** — La dégénérescence d'une configuration est levée par l'interaction coulombienne *Q* et le couplage spin-orbite *A*, et les fonctions d'onde des états stationnaires sont les vecteurs propres de la matrice de l'opérateur (*Q* + *A*). L'emploi des vecteurs de base du couplage Russell-Saunders s'imposait pour deux raisons : le nombre des éléments de matrice devant être calculés explicitement est moins élevé dans ce cas, et le couplage *LS* est une assez bonne approximation du couplage réel, la moyenne des plus fortes composantes des vecteurs propres finals s'étant révélée égale à 74 %. Nous avons utilisé pour établir les formules des coefficients angulaires deux méthodes différentes, celle exposée par Judd [7] et une méthode graphique décrite par Yutsis [8]. Les valeurs des coefficients de parenté fractionnelle de la configuration f⁴ ont été extraites des tables de Nielson et Koster [9]. Nous avons réalisé le calcul des coeffi-

TABLEAU I
Ordre des matrices de $f^4 s$ et $f^4 d$

J	1/2	3/2	5/2	7/2	9/2	11/2	13/2	15/2	17/2	19/2	21/2	23/2	25/2
$f^4 s$	13	24	30	32	33	27	20	14	9	4	2		
$f^4 d$	54	99	132	146	142	126	103	74	49	29	15	6	2

cients à l'aide du programme AGENAC écrit par Y. Bordarier et A. Carlier [10]. Les matrices obtenues ont été constituées en configurations par le programme ASSAC. Les configurations $f^4 s$ et $f^4 d$ se composent respectivement de 12 et 13 matrices dont les ordres $n(J)$ figurent dans le tableau I.

Le programme de diagonalisation DIAGAC permet d'obtenir à partir d'un jeu de paramètres radiaux les valeurs propres des matrices, qui sont les énergies calculées des niveaux, et les facteurs de Landé g_c correspondants. L'identification des N énergies expérimentales E_0 aux énergies calculées E_c conduit à un système de N équations à p inconnus — les paramètres radiaux — que l'on résout en recherchant l'écart quadratique moyen minimal

$$\overline{\Delta E} = \left[\frac{\sum (E_0 - E_c)^2}{N - p} \right]^{1/2}.$$

Cette optimisation, effectuée par le programme GRAMAC qui utilise les dérivées des énergies par rapport aux paramètres, calculées dans le programme précédent, conduit à un nouveau jeu de paramètres radiaux. Quelques itérations sont en général nécessaires pour obtenir un écart quadratique moyen constant et un jeu de paramètres inchangé (*).

3. Les données de la classification. — Dans le spectre de Nd I, nous ne connaissons de la configuration $4f^4 6s^2$ que le multiplet fondamental 5I mais il est possible d'évaluer au moyen d'un calcul paramétrique les positions des multiplets supérieurs. Les paramètres radiaux proposés par B. G. Wybourne [11] constituent pour cela de bonnes valeurs initiales et attribuent aux premiers niveaux des termes de f^4 immédiatement supérieurs à 5I les énergies suivantes : 5F : 10 200 cm^{-1} 5S : 11 700 cm^{-1} 3K : 13 150 cm^{-1} 3H : 14 700 cm^{-1} 5G : 14 900 cm^{-1} .

Le mélange de ces différents termes entre eux n'excède pas 3 %.

Chaque terme $^{2S_1+1}L_1$ de la configuration f^4 engendre par addition d'un électron s un couple de termes ($^{2S_1}L_1, ^{2S_1+2}L_1$). Chacun de ces couples groupe les niveaux profonds d'un système de transitions dont les niveaux élevés peuvent être attribués à la sous-configuration $f^4(^{2S_1+1}L_1)p$. Les transitions du type $f^4(^5I)s - f^4(^5I)p$ sont les plus intenses du spectre de Nd II.

Le faible mélange entre les termes profonds de f^4 a pour conséquence une relative indépendance des différents systèmes, et si les écarts entre les niveaux d'un même couple de multiplets sont assez faciles à déterminer, la liaison des couples ($^{2S_1}L_1, ^{2S_1+2}L_1$) ne peut s'établir qu'à partir de quelques rares transitions d'intercombinaison. Nous avons atteint actuellement la limite de ce que nos données expérimentales nous permettent d'obtenir dans cette voie. Quelques structures Zeeman observées autour de 24 000 cm^{-1} indiquent l'existence d'un niveau $^6G_{3/2}$ ($g = 0$) — probablement $f^4(^5G)s$ $^6G_{3/2}$ — mais nous n'avons pu le relier aux termes $^6I, ^4I, ^6F, ^4, ^6S, ^4S, ^4K, ^2K$ déjà localisés.

Tous les niveaux de la configuration $4f^4 5d$ construits sur le terme parent 5I de f^4 ont été trouvés. Les premiers termes identifiés par Albertson et al. sont très purs en couplage LS et suivent remarquablement la loi de Landé. Par contre, le mélange est important entre les niveaux plus élevés qui ont été identifiés au moyen du calcul paramétrique. Les deux termes 4K de $4f^4 6s$ et $4f^4 5d$ advenant à la même énergie sont les seuls où les deux configurations apparaissent notablement mélangées. Les 78 niveaux expérimentaux ont été rassemblés dans un diagramme de Grotrian (Fig. 1).

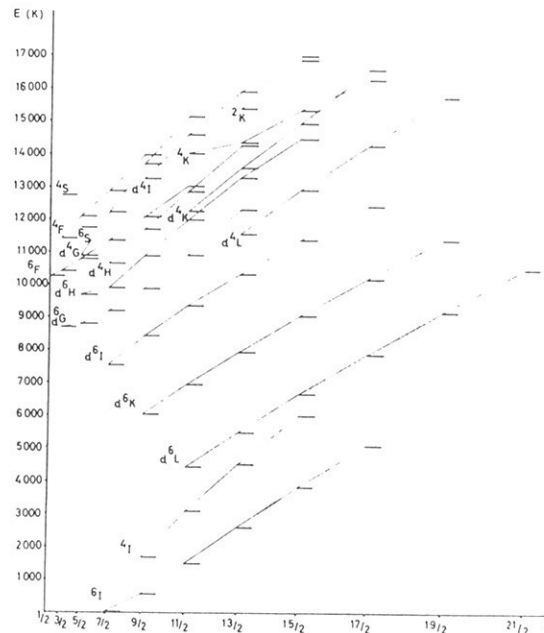


FIG. 1. — Niveaux d'énergie de $4f^4 6s$ et $4f^4 5d$.

4. Calculs théoriques — Au début de cette étude, nous avons effectué le calcul des configurations dans les limites imposées par les programmes alors en

(*) Ce travail a été effectué sur le calculateur UNIVAC 1108 de la Faculté des Sciences d'Orsay.

usage. En calculant $4f^4 5d$, le cœur f^4 a été successivement limité au terme fondamental 5I , aux trois termes les plus profonds $^5I, ^5F, ^5S$, aux 13 termes de f^4 qui apportent dans la composition du multiplet fondamental une contribution supérieure à 10^{-4} (en considérant le carré des composantes vectorielles) :

$$^5I, ^3G_1, ^3G_2, ^3G_3, ^3H_1, ^3H_2, ^3H_3, ^3H_4, ^3I_1, ^3I_2, ^3K_1, ^3K_2, ^3L.$$

Pour calculer initialement $4f^4 6s$, nous avons limité le cœur à 7 termes sélectionnés à la fois sur des critères d'énergie et de composition : $^5I, ^5F, ^5G, ^5S, ^3K_1, ^3K_2, ^1L_2$. Il nous a paru intéressant de rassembler dans le tableau II quelques données sur les résultats finals de ces calculs : l'écart quadratique moyen $\overline{\Delta E}$, le nombre de niveaux expérimentaux et le nombre de paramètres libres de varier. Les quatre niveaux $4K_{15/2}$ et $4K_{17/2}$ de $4f^4 6s$ et $4f^4 5d$, fortement mélangés, n'ont été utilisés pour ajuster les paramètres que

dans le calcul de $4f^4(5d + 6s)$ après introduction des paramètres d'interaction. Les résultats les plus satisfaisants ont été obtenus avec une base complète, l'amélioration de l'écart quadrati-

que étant sensiblement proportionnelle au nombre de termes introduits dans la base. Nous ne pouvons donc proposer ici aucune troncature avantageuse.

5. Paramètres obtenus. — Nous avons rassemblé dans le tableau III, trois jeux de paramètres radiaux utilisés dans la dernière diagonalisation de $4f^4 6s$, de $4f^4 5d$ et de $4f^4(5d + 6s)$. Les paramètres en cm^{-1} sont suivis de leurs écarts-types. Il a été démontré [12] que l'on peut rendre compte en partie des effets linéaires de l'interaction de configurations lointaines en introduisant un opérateur effectif AL^2 , dont les éléments de matrice sur la base $(f^{NL}SLM_S M_L)$ sont diagonaux et de la forme $AL(L + 1)$. Nous nous sommes limités à une correction de ce type qui porte à 15 le nombre de paramètres d'orbite, car les niveaux déterminés expérimentalement dépendent presque exclusivement de 18 termes de $f^4(5d + 6s)$. Dans le cas de la configuration $4f^4 6s$ et à la suite de Racah et Trees, nous avons appelé α le paramètre effectif qui agit alors sur les termes du cœur f^4 . Dans l'étude de $4f^4 5d$, l'introduction d'un tel paramètre α ne se justifiait pas, tous les niveaux connus étant issus du même parent 5I de f^4 ; il est néanmoins

TABLEAU II

Configuration	$f^4(^5I) d$	$f^4(^5I, ^5F, ^5S) d$	f^4 (13 termes) d	$f^4 d$ complet
$\overline{\Delta E}$	183 K	178 K	135 K	78 K

TABLEAU III

Valeurs des paramètres radiaux (en K)

Paramètres	$4f^4 6s$	$4f^4 5d$	$4f^4(5d + 6s)$
$E_0(4f^4 6s)$	13 063,7 (16)		13 026 (38)
E_1	4 548 (63)	4 548 fixé	4 324 (46)
E_2	29,1 (2,7)	29,1 fixé	18,5 (3,6)
E_3	435,7 (0,8)	435,7 fixé	438 (5,6)
$G_3(4f, 6s)$	197,6 (2,8)		199,6 (5,6)
$\zeta_4 f(4f^4 6s)$	779,2 (3,6)		783,1 (7)
α	0 fixé		3 (3)
$E_0(4f^4 5d)$		23 097 (56)	23 248 (120)
$F_2(4f, 5d)$		141,2 (3,7)	144,6 (2,9)
$F_4(4f, 5d)$		12,6 (0,5)	12,2 (0,4)
$G_1(4f, 5d)$		203,3 (3,3)	205,9 (2,6)
$G_3(4f, 5d)$		23,4 (0,6)	22,6 (0,6)
$G_5(4f, 5d)$		2,11 (0,1)	2,32 (0,1)
$\zeta_4 f(4f^4 5d)$		782,3 (5,7)	780 (4,3)
$\zeta_5 d$		458 (23)	461,9 (17)
A		9,8 (1,2)	8,7 (1,1)
$R^2(4f 5d, 4f 6s)$			800 fixé
$R^3(4f 5d, 6s 4f)$			- 1 264 (222)
ΔE	28	78	57
$\delta E(f^4 s)$	49		39
$\delta E(f^4 d)$		71	55

apparu que le paramètre A améliore sensiblement l'écart quadratique moyen (l'introduction de A fait passer l'écart quadratique moyen de 130 à 78 cm^{-1}). L'interaction électrostatique Q entre $f^4 s$ et $f^4 d$ fait intervenir deux paramètres $R^2(fd, fs)$ et $R^3(fd, sf)$; les vecteurs de base étant du type

$$\langle f^4 S_1, s \rangle S, \langle f^4 L_1, l \rangle LJM_J |,$$

nous donnons ci-dessous l'expression du coefficient angulaire de ces deux paramètres.

$$R^2(fd, fs) : \frac{8\sqrt{21}}{15} \delta(S, S') \cdot \delta(L, L') \\ \times \delta(S_1, S'_1) \sum_{\bar{s}, \bar{l}} \langle f^3 \bar{S} \bar{L} | \rangle f^4 S_1 L_1 \cdot \langle f^3 \bar{S} \bar{L} | \rangle f^4 S'_1 L'_1 \\ \times (-1)^{L+\bar{L}+1} (2L_1 + 1)^{1/2} \cdot \begin{Bmatrix} 3 & 3 & 2 \\ L_1 & L & \bar{L} \end{Bmatrix}.$$

$$R^3(fd, sf) : \frac{8}{\sqrt{21}} \delta(S, S') \times \\ \times \delta(L, L') \sum_{\bar{s}, \bar{l}} \langle f^3 \bar{S} \bar{L} | \rangle f^4 S_1 L_1 \cdot \langle f^3 \bar{S} \bar{L} | \rangle f^4 S'_1 L'_1 \\ \times (-1)^{L+S_1+S'_1+\bar{L}} [(2S_1 + 1)(2S'_1 + 1)(2L_1 + 1)]^{1/2} \\ \times \begin{Bmatrix} 2 & 3 & 3 \\ \bar{L} & L_1 & L \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} S_1 & \frac{1}{2} & S \\ S'_1 & \frac{1}{2} & \bar{S} \end{Bmatrix}.$$

Au cours des itérations, le paramètre $R^3(fd, sf)$ a rapidement convergé vers sa valeur définitive, alors que $R^2(fd, fs)$ demeurait en valeur absolue toujours inférieur à son écart-type. Différents essais ont été effectués en fixant R^2 à certaines valeurs comprises

entre -2000 et $+2000 \text{ cm}^{-1}$ et nous avons choisi de fixer sa valeur à 800 cm^{-1} . Il nous a paru intéressant pour rendre compte de l'amélioration apportée aux énergies calculées par l'introduction de l'interaction de configuration, de porter dans le tableau des paramètres les déviations moyennes sur tous les niveaux — perturbés ou non — de chaque configuration :

$$\delta E = \left[\frac{\sum (E_c - E_0)^2}{N} \right]^{1/2}.$$

6. Résultats. — Les 78 niveaux connus entre 0 et 17001 cm^{-1} ont été interprétés avec un écart quadratique moyen de 57 cm^{-1} sur les énergies (soit $3,5 \times 10^{-3}$ du domaine d'énergie interprété) et de 0,05 unité Lorentz sur les facteurs de Landé (cependant, la déviation $g_0 - g_c$ n'est supérieure à l'incertitude expérimentale de 0,01 u. L. que pour 24 niveaux). Le tableau IV contient les principaux résultats, classés par valeur de J du dernier calcul de $f^4(d+s)$; l'énergie calculée des niveaux E_c figure en première colonne; l'énergie expérimentale E_0 , l'écart $E = E_0 - E_c$, les facteurs de Landé calculés et expérimentaux g_c et g_0 constituent les colonnes suivantes.

On trouve enfin les valeurs (carrés des composantes vectorielles, précédées de leur signe) des trois plus fortes composantes du niveau calculé; le nom LS des termes est précédé de s ou d selon que le vecteur de base appartient à $f^4 s$ ou $f^4 d$. Pour alléger les notations, nous n'avons explicité le terme parent de f^4 (dans la notation proposée par Nielson et Koster [9]), que pour les termes de $f^4 d$ non issus de 5I . Pour cette raison aussi, nous nous sommes limités aux niveaux calculés inférieurs à 17000 cm^{-1} .

TABLEAU IV

	E_c	E_0	ΔE	g_c	g_0	Composition					
	—	—	—	—	—	—					
$J = 1/2$	10 277	10 255,98	— 19	— 0,642	— 0,650	— 96	$s^6 F$	+ 3	$s^4 D_{31}$	— 1	$s^4 D_{32}$
$J = 3/2$	8 681	8 716,45	35	0,011	0,010	+ 92	$d^6 G$	+ 5	$d(^5F) ^6G$	— 1	$d(^3H_4) ^4F$
	10 457	10 439,14	— 18	1,047	1,050	+ 93	$s^6 F$	+ 3	$s^4 F$	— 3	$s^4 D_{31}$
	11 423	11 440,65	17	0,436	0,430	— 92	$s^4 F$	+ 3	$s^6 F$	+ 2	$s^2 D_{31}$
	12 757	12 747,51	— 10	1,970	1,970	+ 95	$s^4 S$	— 3	$s^2 P_2$	+ 1	$s^4 P_2$
	14 960			0,032		+ 93	$s^6 G$	— 4	$s^4 F_4$	— 2	$s^4 F_3$
	16 149			0,053		— 81	$d(^5F) ^6G$	+ 6	$d^6 G$	— 5	$d(^5F) ^4F$
	16 950			1,837		+ 68	$d(^5S) ^6D$	— 25	$d(^5F) ^6D$	— 2	$d(^3P_2) ^4P$
$J = 5/2$	8 728	8 796,39	68	0,745	0,755	— 57	$d^6 G$	— 31	$d^4 G$	— 4	$d^6 H$
	9 557	9 674,84	117	0,471	0,455	+ 58	$d^6 H$	— 22	$d^6 G$	+ 15	$d^4 G$
	10 797	10 786,66	— 10	1,279	1,300	+ 87	$s^6 F$	+ 6	$s^4 F$	— 2	$s^4 D_{31}$
	10 854	10 887,25	33	0,533	0,520	+ 45	$d^4 G$	— 33	$d^6 H$	— 13	$d^6 G$
	11 781	11 748,73	— 33	1,971	1,975	— 94	$s^6 S$	+ 4	$s(^3P_2) ^4P$	— 1	$s^6 F$
	12 061	12 091,06	30	1,053	1,055	+ 89	$s^4 F$	— 6	$s^6 F$	— 1	$s(^3D_1) ^2D$
	15 229			0,836		— 83	$s^6 G$	— 6	$s^4 G$	+ 3	$s^4 F_4$
	15 668			0,314		+ 83	$d(^5F) ^6H$	+ 7	$d(^5G) ^6H$	— 3	$d(^3D_1) ^4G$
	16 083			0,596		+ 78	$s^4 G$	+ 7	$s^4 G_2$	— 4	$s^6 G$
	16 457			0,874		+ 77	$d(^5F) ^6G$	— 6	$d^6 G$	4	$d(^5F) ^4F$

	E_c	E_0	ΔE	g_c	g_0	Composition			
	—	—	—	—	—	—			
$J = 7/2$	12	0,0	— 12	0,449	0,445	— 98	$s^6 I$	+ 1 $s^4 H_4$	— 1 $s^4 H_3$
	7 566	7 524,74	— 41	0,482	0,480	+ 83	$d^6 I$	+ 11 $d^4 H$	— 2 $d^6 I$
	9 240	9 198,40	— 42	0,991	0,925	+ 52	$d^6 G$	+ 18 $d^4 G$	— 15 $d^4 H$
	9 991	9 908,65	— 83	0,803	0,862	+ 38	$d^4 H$	+ 32 $d^6 H$	— 14 $d^6 G$
	10 613	10 666,78	53	0,851	0,845	— 47	$d^6 H$	+ 18 $d^4 H$	+ 14 $d^6 G$
	11 374	11 377,48	3	1,382	1,390	— 91	$s^6 F$	— 5 $s^4 F$	+ 1 $s^4 F_3$
	12 227	12 222,18	— 5	0,951	0,957	— 58	$d^4 G$	+ 15 $d^6 H$	+ 11 $d^6 G$
	12 868	12 878,95	10	1,228	1,230	+ 89	$s^4 F$	— 5 $s^6 F$	— 1 $s^4 G_2$
	15 432			0,826		+ 49	$s^6 G$	+ 15 $s^4 H_4$	— 10 $s^4 G_2$
	15 983			0,848		+ 29	$s^4 G$	+ 21 $s^6 G$	— 15 $s^4 H_4$
	16 169			0,841		+ 78	$d(^5F)^6H$	+ 6 $d(^5G)^6H$	— 2 $d(^3D_1)^4G$
$J = 9/2$	505	513,33	8	0,803	0,805	— 70	$s^6 I$	— 28 $s^4 I$	— 1 $s^4 H_4$
	1 635	1 650,21	15	0,758	0,760	— 70	$s^4 I$	+ 28 $s^6 I$	+ 1 $s^2 H_4$
	5 977	6 005,28	28	0,555	0,550	— 95	$d^6 K$	— 2 $d^4 I$	+ 1 $d(^3H_4)^4I$
	8 459	8 420,33	— 39	0,839	0,840	— 90	$d^6 I$	— 5 $d^4 H$	+ 2 $d(^5G)^6I$
	9 942	9 877,17	— 65	1,131	1,095	— 43	$d^6 G$	+ 25 $d^4 H$	— 10 $d^4 G$
	10 899	10 883,26	— 16	1,100	1,140	— 32	$d^6 G$	— 29 $d^6 H$	— 22 $d^4 H$
	11 686	11 709,60	23	1,045	1,050	+ 53	$d^6 H$	— 19 $d^4 H$	— 7 $d^6 G$
	12 085	12 087,10	2	1,418	1,430	— 92	$s^6 F$	— 3 $s^4 F$	— 2 $s^4 G_2$
	13 116	13 246,15	130	0,812	0,815	+ 67	$d^4 I$	— 10 $d^4 G$	— 6 $d^4 H$
	13 723	13 703,42	— 20	1,113	1,101	+ 60	$d^4 G$	+ 12 $d^4 H$	— 6 $d^6 G$
	13 917	13 971,50	54	1,320	1,325	+ 90	$s^4 F$	— 3 $s^6 F$	+ 2 $s^2 G_2$
	15 677			1,127		— 33	$s^6 G$	— 13 $s^4 H_4$	+ 10 $s^4 G_2$
	16 805			1,078		— 81	$d(^5F)^6H$	— 6 $d(^5G)^6H$	+ 3 $d(^5F)^6G$
$J = 11/2$	1 463	1 470,10	7	1,023	1,025	— 80	$s^6 I$	— 19 $s^4 I$	+ 1 $s^4 H_4$
	3 053	3 066,75	14	0,978	0,980	— 80	$s^4 I$	+ 19 $s^6 I$	
	4 415	4 437,57	23	0,621	0,620	+ 96	$d^6 L$	+ 1 $d^4 K$	— 1 $d(^3H_4)^4K$
	6 914	6 931,81	17	0,843	0,840	— 96	$d^6 K$	— 1 $d^4 I$	+ 1 $d(^3H_4)^4I$
	9 403	9 357,92	— 45	1,033	1,035	+ 93	$d^6 I$	— 2 $d(^5G)^6I$	+ 1 $d^4 H$
	10 984	10 942,01	— 42	1,244	1,230	— 46	$d^6 G$	+ 25 $d^4 H$	+ 12 $d^6 H$
	12 011	12 021,35	10	1,191	1,157	— 34	$d^6 G$	— 31 $d^6 H$	— 12 $d^4 H$
	12 366	12 276,21	— 90	0,851	0,870	— 68	$d^4 K$	+ 15 $d^6 H$	+ 2 $d(^3H_4)^4K$
	12 961	12 887,08	— 74	1,147	1,165	— 35	$d^6 H$	+ 30 $d^4 H$	+ 6 $d^6 G$
	13 007	13 048,52	41	1,432	1,450	— 91	$s^6 F$	— 3 $s^4 G_2$	— 1 $d^6 H$
	13 918	14 049,81	132	0,773	0,767	— 72	$s^4 K$	+ 25 $s^4 K_1$	— 1 $d^4 K$
	14 540	14 624,78	85	1,011	1,008	— 64	$d^4 I$	— 11 $d^4 H$	— 7 $d^4 G$
	15 203	15 148,00	— 55	1,242	1,230	+ 70	$d^4 G$	+ 9 $d^4 H$	— 4 $d(^5F)^4G$
$J = 13/2$	2 586	2 585,46	0	1,152	1,150	+ 87	$s^6 I$	+ 12 $s^4 I$	
	4 510	4 512,50	3	1,111	1,110	+ 87	$s^4 I$	— 11 $s^6 I$	— 1 $s^4 K_2$
	5 459	5 487,67	28	0,854	0,850	— 97	$d^6 L$	— 1 $d(^3H_4)^4K$	— 1 $d^4 K$
	7 943	7 950,09	7	1,015	1,015	— 97	$d^6 K$	— 1 $d^6 I$	— 1 $d^4 I$
	10 393	10 337,10	— 56	1,151	1,150	+ 91	$d^6 I$	— 2 $d^4 K$	+ 2 $d(^5G)^6I$
	11 630	11 580,87	— 49	0,809	0,805	+ 85	$d^4 L$	— 5 $d(^3K_2)^4L$	— 2 $d(^3L)^4L$
	12 337	12 334,23	— 3	1,327	1,325	— 57	$d^6 G$	+ 17 $d^4 H$	— 14 $d^6 H$
	13 234	13 298,89	65	1,287	1,285	+ 54	$d^6 H$	+ 27 $d^6 G$	— 5 $d^4 I$
	13 675	13 597,85	— 77	0,999	1,010	— 68	$d^4 K$	— 9 $d^6 H$	— 4 $s^4 K_2$
	14 317	14 259,38	— 58	0,984	1,223	+ 49	$s^4 K_2$	— 17 $s^4 K_1$	— 14 $s^2 K_2$
	14 457	14 387,40	— 70	1,189	0,953	— 45	$d^4 H$	— 16 $d^6 H$	— 8 $d^4 K$
	15 436	15 417,30	— 19	0,922	0,920	+ 51	$s^2 K_2$	— 17 $s^2 K_1$	— 14 $s^4 L$
	15 875	15 923,26	48	1,124	1,115	— 65	$d^4 I$	— 17 $d^4 H$	— 3 $d^4 K$
$J = 15/2$	3 813	3 801,93	— 12	1,235	1,235	— 93	$s^6 I$	— 5 $s^4 I$	— 1 $s^4 K_2$
	6 002	5 985,56	— 17	1,198	1,200	— 92	$s^4 I$	— 5 $s^6 I$	— 2 $s^2 K_2$
	6 604	6 637,42	33	1,005	1,005	— 98	$d^6 L$		
	9 045	9 042,75	— 3	1,126	1,130	— 96	$d^6 K$	— 1 $d^4 L$	— 1 $d(^3K_2)^4L$
	11 443	11 373,49	— 70	1,228	1,230	— 89	$d^6 I$	+ 4 $d^4 K$	— 2 $d(^5G)^6I$
	12 937	12 906,57	— 30	0,971	0,970	+ 85	$d^4 L$	— 5 $d(^3K_2)^4L$	— 2 $d(^3L)^4L$
	14 363	14 481,96	119	1,322	1,333	— 90	$d^6 H$	+ 4 $d^4 I$	— 2 $d(^5F)^6H$
	14 957	14 957,61	0	1,087	1,090	— 38	$d^4 K$	— 30 $s^4 K_2$	— 10 $s^4 K_1$
	15 286	15 357,95	72	1,085	1,073	— 40	$d^4 K$	+ 27 $s^4 K_2$	— 9 $s^4 K_1$

	E_c	E_0	ΔE	g_c	g_0	Composition					
	—	—	—	—	—	—					
	16 885	16 868,73	— 17	1,099	1,043	— 31	d^4I	+ 31	s^2K_2	— 9	s^2K_1
	16 947	17 001,50	54	1,132	1,195	— 47	d^4I	— 19	s^2K_2	+ 6	s^2K_1
$J = 17/2$	5 109	5 085,61	— 23	1,290	1,295	— 97	s^6I	— 2	s^4K_2	+ 1	s^4K_1
	7 833	7 868,91	36	1,108	1,110	+ 98	d^6L	+ 1	$d(^3K_2)^4M$		
	10 204	10 194,80	— 10	1,202	1,200	— 95	d^6K	+ 2	d^4L	— 2	$d(^3K_2)^4L$
	12 546	12 460,00	— 84	1,281	1,280	+ 87	d^6I	— 5	d^4K	+ 3	$d(^3K_2)^4K$
	14 318	14 301,79	— 16	1,080	1,074	— 83	d^4L	+ 4	$d(^3K_2)^4L$	— 3	d^6K
	16 179	16 295,73	— 116	1,160	1,171	— 49	s^4K_2	+ 15	s^4K_1	— 14	d^4K
	16 629	16 610,55	— 18	1,172	1,170	— 64	d^4K	+ 10	s^4K_2	— 6	d^6I
$J = 19/2$	9 128	9 166,19	38	1,181	1,180	— 98	d^6L	— 1	$d(^3K_2)^4M$		
	11 407	11 392,10	— 15	1,255	1,250	+ 93	d^6K	— 3	d^4L	+ 3	$d(^3K_2)^4L$
	15 754	15 749,20	— 5	1,158	1,160	— 81	d^4L	— 5	d^6K	+ 4	$d(^3K_2)^4L$
$J = 21/2$	10 477	10 516,77	40	1,236	1,240	+ 97	d^6L	+ 2	$d(^3K_2)^4M$	— 1	$d(^3K_1)^4M$

7. **Conclusion.** — Au terme de cette étude, nous avons interprété tous les niveaux connus des configurations $4f^4 6s$ et $4f^4 5d$, et obtenu une première estimation des paramètres radiaux introduits. Parmi ceux-ci, nous proposons la première valeur de $R^3(fd, sf)$ qui ait été obtenue dans les spectres II des lanthanides où l'interaction des configurations $f^n d$ et $f^n s$ est difficile à mettre en évidence. Nous espérons trouver quelques nouveaux niveaux expérimentaux, en palliant par l'emploi d'un programme de recherche automatique au manque croissant de données Zeeman. Pour cela, les calculs que nous venons d'exposer permettront de limiter avantageusement nos recherches.

8. **Remerciements.** — Je veux exprimer ma gratitude à M. J. Blaise, Directeur de Recherche au C. N. R. S., pour l'aide précieuse qu'il m'a apportée dans la classification du spectre ; dans le cadre d'une étroite collaboration, des échanges fréquents de résultats avec MM. R. Hoekstra et P. Kruiver du Zeeman Laboratorium de l'Université d'Amsterdam ont stimulé nos recherches et je tiens à les en remercier. Mes remerciements s'adressent aussi à Y. Bordarier, A. Carlier et P. Dagoury qui ont rendu cette étude possible en adaptant les programmes de calcul aux dimensions de ce problème particulier.

Bibliographie

- [1] ALBERTSON (W. E.), HARRISON (G. R.) et MC NALLY JR (J. R.), *Phys. Rev.*, 1942, **61**, 167.
- [2] BLAISE (J.), BOUDET (J.), VERGÈS (J.) et WYART (J. F.), *Spectrochimica Acta*, article à paraître.
- [3] HOEKSTRA (R.), *Applied Optics*, 1967, **6**, 807.
- [4] WYART (J. F.), Thèse de 3^e Cycle, Université de Paris, 1968.
- [5] HOEKSTRA (R.), Thèse, Université d'Amsterdam, 1969.
- [6] RACAH (G.), I. *Phys. Rev.*, 1942, **61**, 186 ; II. *Phys. Rev.*, 1942, **62**, 438 ; III. *Phys. Rev.*, 1943, **63**, 367.
- [7] JUDD (B. R.), *Operator techniques in Atomic Spectroscopy*, Mc Graw Hill Book Co, New York, 1963.
- [8] YUTSIS (A. P.), LEVINSON (I. B.) et VANAGAS (V. V.), *Mathematical Apparatus of the Theory of Angular Momentum*, Israel Program for Scientific Translations, 1962.
- [9] NIELSON (C. W.) et KOSTER (G. F.), *Spectroscopic coefficients for the $p^n d^n$ and f^n configurations*, the M. I. T., Press, 1963.
- [10] BORDARIER (Y.) et CARLIER (A.), Programme AGENAC de calcul de formules suivant l'algèbre de Racah.
- BORDARIER (Y.), Programme ASSAC de Regroupement des résultats d'AGENAC.
- BORDARIER (Y.) et DAGOURY (P.), Programme DIAGAC de diagonalisation et de calcul des dérivées des énergies et des g , Orsay, 1968.
- BORDARIER (Y.), Programme GRAMAC d'optimisation des paramètres par moindres carrés, Brochure en préparation.
- [11] WYBOURNE (B. G.), *Spectroscopic Properties of Rare Earths*, Interscience Publishers (J. Wiley & S.).
- [12] FENEUILLE (S.), Colloque C1, *J. Physique*, suppl. au n° 1, 1969, **30**, C1-31.

SPECTROSCOPIE ATOMIQUE. — *Étude paramétrique des configurations impaires profondes des spectres I et II du gadolinium.* Note (*) de M. JEAN-FRANÇOIS WYART, présentée par M. Pierre Jacquinot.

L'étude selon les méthodes de Racah, des configurations impaires profondes des spectres de Gd I et Gd II a abouti à une nouvelle interprétation de $4f^7(5d+6s)^2$ et de $4f^7(5d+6s)^2$. On montre que l'accord entre la théorie et l'expérience est nettement amélioré en introduisant dans les bases de calcul les termes issus de $4f^7{}^6P^0$.

Les progrès récemment accomplis dans la classification des spectres I et II du gadolinium ont déjà fait l'objet de trois Notes [(¹), (²), (³)]. Une première interprétation des niveaux d'énergie y était proposée, fondée sur la mesure de leurs facteurs de Landé et sur quelques calculs paramétriques préliminaires. Les résultats que nous exposons ici ont été obtenus au moyen de la chaîne de programmes (construction et assemblage de matrices angulaires, diagonalisation, optimisation des paramètres radiaux) écrite au Laboratoire Aimé Cotton pour le calculateur UNIVAC 1108 de la Faculté des Sciences d'Orsay (⁴).

A. CONFIGURATIONS IMPAIRES PROFONDES DE Gd I. — Bien que les seuls niveaux expérimentaux actuellement identifiés soient construits sur le terme fondamental ${}^8S^0$ de $4f^7$, nous avons pu montrer que l'extension de la base de calcul permet d'améliorer notablement l'accord entre la théorie et l'expérience, en particulier pour les deux premiers termes ${}^9D^0$ et ${}^7D^0$ de $f^7 ds^2$: Dans la cas d'une base $f^7({}^8S)d$, l'écart quadratique moyen est de 124 cm^{-1} sur les énergies et de $0,011$ unités Lorentz sur les facteurs de Landé; avec une base $f^7({}^8S + {}^6P + {}^6D + {}^6I)d$, ils deviennent respectivement 49 cm^{-1} et $0,008$ u. L. Cependant, ce traitement augmente d'un facteur supérieur à 10 le nombre des vecteurs de base. C'est pourquoi l'étude des configurations $f^7(d+s)^2$ a été effectuée sur des bases vectorielles limitées aux termes issus de ${}^8S^0$ pour $f^7 d^2 s$ et $f^7 d^3$ et de ${}^8S^0$ et ${}^6P^0$ pour $f^7 ds^2$. Sur la base que nous avons choisie, l'interaction électrostatique entre les configurations est décrite par trois paramètres de Slater.

Les seuls termes de $f^7 d^3$ dont dépend le paramètre $R^{(2)}(6s^2, 5d^2)$ n'ayant pu être identifiés, sa valeur a été fixée à $8\,000 \text{ cm}^{-1}$ au cours des itérations. Le paramètre $R^{(2)}(5d6s, 5d^2)$ décrivant l'interaction des configurations $f^7 ds^2$ et $f^7 d^2 s$ a convergé vers $-8\,500 \text{ cm}^{-1}$, valeur à laquelle nous l'avons fixé dans la dernière itération, en raison de son écart-type élevé ($2\,700 \text{ cm}^{-1}$). Nous avons constaté que les deux paramètres $R^{(2)}(ds, d^2)$ ont conservé au cours de ce calcul le signe négatif qui avait été attribué à leur

valeur initiale, conformément aux évaluations de la méthode du potentiel paramétrique de Klapisch (5). Introduite pour rendre compte des effets linéaires de l'interaction de configurations lointaines sur les niveaux de $f^7 d^2 s$, la correction $AL(L+1)$ (\vec{L} moment orbital total), justifiée par Feneuille (6),

TABLEAU.

Gadolinium I.			Gadolinium II.		
$f^7(^8S + ^6P) ds^2 + (f^7(^8S) d^2)s + f^7(^8S) d^3$.			$f^7(^8S + ^6P)s^2 + (f^7(^8S + ^6P) d)s + f^7(^8S + ^6P) d^2$.		
Paramètres.		Écart type.	Paramètres.		Écart type.
E_0	7 828	70	$E_0 f^7 s^2$	4 493,6	83
Écart $^8S - ^6P$	30 000	Fixé	$E_0 f^7 ds$	12 285,7	51
Écart $\left\{ \begin{array}{l} d^2 s - ds^2 \dots\dots \\ d^3 - ds^2 \dots\dots \end{array} \right.$	18 074	147	$E_0 f^7 d^2$	23 363,7	29
	36 640	164	Écart $^8S - ^6P$	30 000	Fixé
$F_2(5d^2) \left\{ \begin{array}{l} f^7 d^2 s \dots\dots \\ f^7 d^3 \dots\dots \end{array} \right.$	446,9	5,3	$F_2(5d^2)$	551,9	2,2
	398,7	5,1	$F_4(5d^2)$	37,7	0,4
$F_4(5d^2) \left\{ \begin{array}{l} f^7 d^2 s \dots\dots \\ f^7 d^3 \dots\dots \end{array} \right.$	27,7	1	$G_1(4f, 5d) \left\{ \begin{array}{l} f^7 ds \dots\dots \\ f^7 d^2 \dots\dots \end{array} \right.$	167,1	2,3
	28,1	1,4		155,1	1,1
$G_1(4f, 5d) f^7 ds^2$	167,3	5,1	$G_3(4f, 5d) \left\{ \begin{array}{l} f^7 ds \dots\dots \\ f^7 d^2 \dots\dots \end{array} \right.$	20	Fixé
$G_3(4f, 5d) f^7 ds^2$	15	Fixé		17	»
$G_5(4f, 5d) f^7 ds^2$	2	»	$G_5(4f, 5d)$	3	»
$G(4f, 5d) \left\{ \begin{array}{l} f^7 d^2 s \dots\dots \\ f^7 d^3 \dots\dots \end{array} \right.$	695,9	6,2	$G_3(4f, 6s)$	235,7	5,1
	611,6	6,8	$G_2(5d, 6s)$	2 092	50
$G_3(4f, 6s)$	181,1	5,7	ζ_{4f}	1 400	Fixé
$G_2(5d, 6s)$	1 803,4	45	$\zeta_{5d} \left\{ \begin{array}{l} f^7 ds \dots\dots \\ f^7 d^2 \dots\dots \end{array} \right.$	832,3	27,7
ζ_{4f}	1 200	Fixé		776,3	15,7
$\zeta_{5d} \left\{ \begin{array}{l} f^7 ds^2 \dots\dots \\ f^7 d^2 s \dots\dots \\ f^7 d^3 \dots\dots \end{array} \right.$	710	64	$R^{(2)}(6s^2, 5d^2)$	10 000	Fixé
	715	25	$R^{(2)}(5d 6s, 5d^2)$	-13 899	166
	652	39	Couplage moyen LS : 77 %		
A.....	13	4	$\langle \Delta E \rangle = 79 \text{ cm}^{-1}$ (0,26 % du domaine d'énergie interprété).		
$R^{(2)}(5d 6s, 5d^2) ds^2 - d^2 s$	- 8 500	Fixé			
$R^{(2)}(6s^2, 5d^2) ds^2 - d^2 s$	8 000	»			
$R^{(2)}(5d 6s, 5d^2) d^2 s - d^2 s$	-10 838	736			

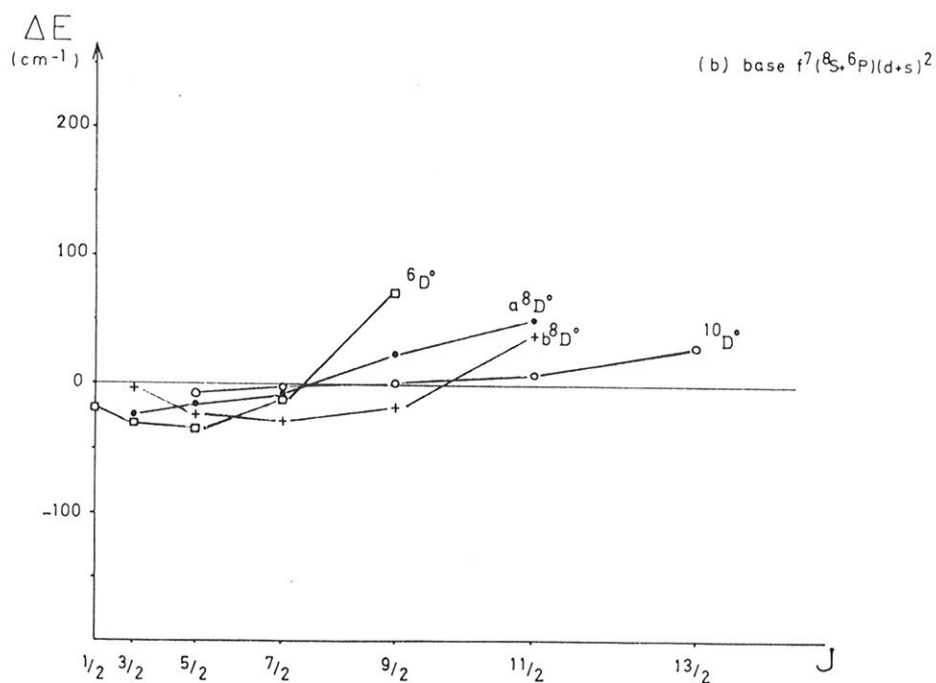
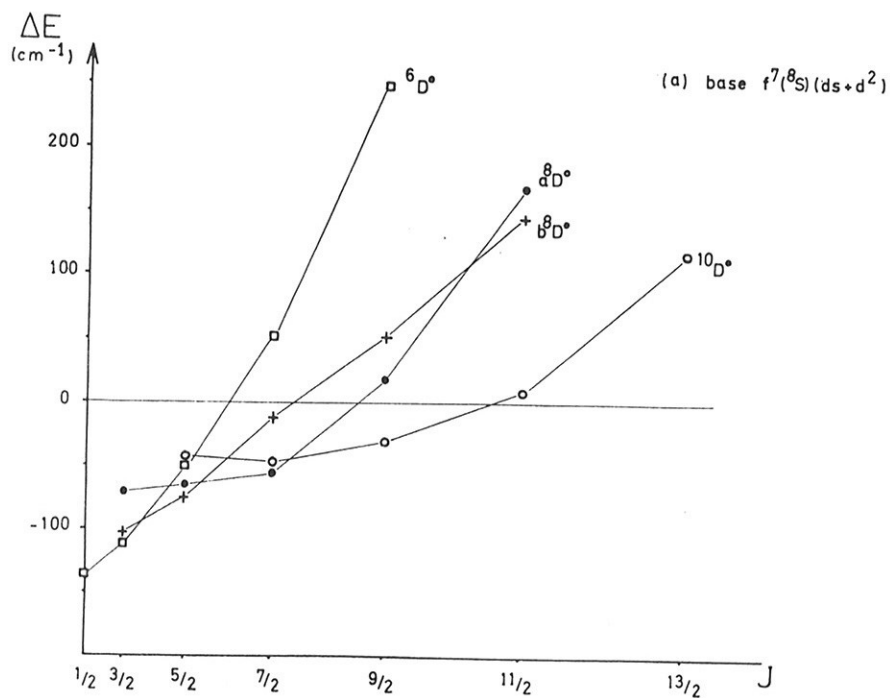
Couplage moyen LS : 74 %.

$\langle \Delta E \rangle = 138 \text{ cm}^{-1}$ (0,36 % du domaine d'énergie interprété).

a permis d'améliorer l'écart quadratique moyen. Les paramètres de Slater ajustés dans ce calcul figurent dans le tableau.

B. CONFIGURATIONS IMPAIRES PROFONDES DE Gd II. — Les 64 niveaux des configurations $f^7 s^2$, $f^7 ds$ et $f^7 d^2$ issus du terme fondamental de f^7 sont actuellement tous connus. En interprétant par les méthodes paramétriques

(3)



ces niveaux sur deux bases vectorielles différentes, on constate que l'on ne peut rendre compte correctement de la pente des multiplets construits sur $f^7(^8S)$ sans introduire le paramètre ζ_{4f} qui intervient par des éléments de matrice du type $(f^7(^8S)l'l''SL \parallel W^{(11)} \parallel f^7(^6P)l'l''S'L')$.

a. Sur une base $f^7(^8S)(ds + d^2)$, analogue à celle que Smith et Wybourne (7) avaient adoptée pour interpréter les 54 niveaux trouvés par Russell (8), nous obtenons pour 63 niveaux identifiés et 12 paramètres libres de varier un écart quadratique sur les énergies $\langle \overline{\Delta E} \rangle = 135 \text{ cm}^{-1}$.

b. L'interprétation sur une base $f^7(^8S + ^6P)(d + s)^2$, des 64 niveaux connus permet d'améliorer notablement l'accord théorie-expérience avec $\langle \overline{\Delta E} \rangle = 79 \text{ cm}^{-1}$. La réduction de l'écart quadratique moyen sur les g ($\langle \overline{\Delta E} \rangle = 0,064 \text{ u. L.}$ au lieu de $0,077 \text{ u. L.}$) montre aussi que les fonctions d'onde obtenues rendent mieux compte des résultats expérimentaux. Les paramètres radiaux ajustés ont été portés dans le tableau. En accord avec Spector, nous avons adopté pour les vecteurs de base de $f^7 ds$ le schéma de couplage suivant $([(f^7 S_1 L_1 d) S_{12}, L] s SLJ M_1)$ (9).

La figure illustre ces résultats : Nous avons indiqué les déviations $\Delta E = E_0 - E_c$ différence de l'énergie expérimentale et de l'énergie calculée, pour les 20 premiers niveaux de $f^7 ds$ formant les multiplets 4D , a^8D , b^8D , 6D , (a) dans le cas d'une base $f^7(^8S)(ds + d^2)$ et (b) dans le cas d'une base $f^7(^8S + ^6P)(d + s)^2$. Il semble que l'intérêt de ces résultats peut s'étendre aux nombreuses configurations construites sur le cœur f^7 que l'on connaît actuellement dans les spectres du gadolinium et de l'euporium.

(*) Séance du 5 octobre 1970.

(1) J. BLAISE et TH. A. M. VAN KLEEF, *Comptes rendus*, 268, série B, 1969, p. 792.

(2) TH. A. M. VAN KLEEF, R. SLOOTEN, J. BLAISE et P. CAMUS, *Comptes rendus*, 270, série B, 1970, p. 204.

(3) J. BLAISE, J. F. WYART et TH. A. M. VAN KLEEF, *Comptes rendus*, 270, série B, 1970, p. 261.

(4) Y. BORDARIER et A. CARLIER, Programme AGENAC de calcul de formules suivant l'algèbre de Racah : Y. BORDARIER, *Programme ASSAC de regroupement des résultats d'AGENAC*; Y. BORDARIER et P. DAGOURY, *Programme DIAGAC de diagonalisation et calculs des dérivées des énergies et des g*, Orsay, 1968; Y. BORDARIER, *Programme GRAMAC d'optimisation des paramètres par moindres carrés*.

(5) M. KLAPISCH, *Thèse*, Orsay, 1969; *J. Phys.* (à paraître).

(6) S. FENEUILLE, *Colloque C 1, J. Phys.*, suppl. au n° 1, 1969, n° 30, p. C 1-31.

(7) G. SMITH et B. G. WYBOURNE, *J. Opt. Soc. Amer.*, 55, 1965, p. 1278.

(8) H. N. RUSSELL, *J. Opt. Soc. Amer.*, 40, 1950, p. 550.

(9) N. SPECTOR, *J. Opt. Soc. Amer.*, 60, 1970, p. 763.

(Laboratoire Aimé Cotton,
C. N. R. S. II, Faculté des Sciences,
91-Orsay, Essonne.)

ANNEXE n° VI

SPECTROSCOPIE ATOMIQUE. — *Classification préliminaire du spectre d'arc de l'holmium*. Note (*) de MM. JEAN BLAISE, PIERRE CAMUS, GUY GUELACHVILI, JEAN VERGES et JEAN-FRANÇOIS WYART, présentée par M. Pierre Jacquinot.

En analysant un spectre d'absorption dans l'ultraviolet et un spectre d'émission infrarouge récemment obtenus, on a déterminé les trois premiers niveaux du multiplet $4 f^{11} 6 s^2 {}^4I(0_{15/2}, 5419, 7_{13/2})$ et l'énergie de quelques niveaux appartenant à $4 f^{11} 6 s 7 s$ et $4 f^{11} 6 s 6 p$.

Le spectre de l'holmium neutre ($Z = 67$) a été observé par différents auteurs [(¹) à (⁶)], mais est resté jusqu'ici le seul spectre des lanthanides totalement dépourvu de classification. Dans le but d'en déterminer les premiers niveaux d'énergie, de nouvelles données spectroscopiques sont en cours d'analyse au Laboratoire Aimé Cotton :

a. Le spectre infrarouge émis par un tube sans électrodes excité en haute fréquence a été obtenu au moyen de spectromètres à transformation de Fourier entre 8 000 Å et $3,3 \mu$; la limite de résolution instrumentale est de $0,02 \text{ cm}^{-1}$ vers $8 000 \text{ cm}^{-1}$ et la structure hyperfine à huit composantes de nombreuses raies a pu être évaluée.

b. Le spectre d'absorption de l'élément, vaporisé dans un four chauffé par induction — modèle King, modifié par Tomkins et Ercoli (⁷) — a été photographié entre 2 400 et 4 000 Å et 343 raies ont été déjà mesurées dans le domaine 2 480-3 310 Å où Mossotti et Fassel n'avaient observé précédemment que 13 raies par spectroscopie de flamme; le spectre du thorium a fourni les raies de référence, et la résolution du spectrographe utilisé est de 180 000.

L'écart des deux plus profonds niveaux $f^{11} s^2 {}^4I_{15/2}^0$ et ${}^4I_{13/2}^0$ a ensuite été recherché par deux voies différentes.

— Les 80 raies d'absorption les plus intenses ont été classées *a priori* comme des transitions entre le niveau fondamental ${}^4I_{15/2}$ et des niveaux pairs élevés à partir desquels, au moyen d'un programme de différences de nombres d'ondes appliqué aux raies d'intensité faible et moyenne, nous avons trouvé l'énergie du second niveau ${}^4I_{13/2}$: $5 419,7 \text{ cm}^{-1}$, valeur très proche de celle prévue par Conway et Wybourne ($5 428 \text{ cm}^{-1}$) (⁸).

— Par analogie avec d'autres spectres des lanthanides, des niveaux de $4 f^{11} ({}^4I_{15/2}) 6 s 6 p$ ont été déterminés entre $15 855$ et $24 740 \text{ cm}^{-1}$, à l'aide de plusieurs raies d'émission intenses entre 6 400 et 8 000 Å (transitions $4 f^{11} 6 s 7 s \rightarrow 4 f^{11} 6 s 6 p$) et de six raies observées en absorption par Mossotti et Fassel entre 5 860 et 6 305 Å (transitions $4 f^{11} 6 s^2 \rightarrow 4 f^{11} 6 s 6 p$). La structure hyperfine étant approximativement la même pour tous les niveaux d'une configuration à couches d'électrons *s* complètes, telle $4 f^{11} 6 s^2$,

Niveaux impairs de Ho I

E (cm ⁻¹)	J	Identification
0.....	15/2	} f ¹¹ s ² 4I
5 419,7.....	13/2	
8 544,3.....	11/2	
31 115,9.....	17/2	} f ¹¹ (⁴ I _{15/2}) 6 s 7 s (³ S ₁)
31 443,17.....	15/2	
31 816,11.....	13/2	
33 005,11.....	15/2	f ¹¹ (⁴ I _{15/2}) 6 s 7 s (⁴ S ₀)

Niveaux pairs de Ho I

E (cm ⁻¹)	J	W (10 ⁻³ cm ⁻¹)	Identification
15 855,14.....	15/2	626	f ¹¹ (⁴ I _{15/2}) 6 s 6 p (³ P ₀)
16 437,98.....	15/2	~ 0	} f ¹¹ (⁴ I _{15/2}) 6 s 6 p (³ P ₁)
16 709,68.....	17/2	890	
{ 16 882,29.....	{ 15/2	{ -600	
{ 17 059,30.....	{ 13/2	{ -585	} f ¹¹ (⁴ I _{15/2}) 6 s 6 p (³ P ₂)
(17 882,57.....	19/2)		
18 337,13.....	15/2	800	} f ¹¹ (⁴ I _{15/2}) 6 s 6 p (⁴ P ₁)
18 858,23.....	13/2	-720	
24 360,55.....	17/2		} f ¹¹ (⁴ I _{15/2}) 6 s 6 p (⁴ P ₁)
24 660,46.....	15/2		
24 740,52.....	13/2		

E (cm ⁻¹)	J	E (cm ⁻¹)	J
35 664,51.....	15/2, 13/2	38 043,44.....	15/2, 13/2
35 887,00.....	-	38 129,72.....	-
35 941,95.....	-	38 174,75.....	-
36 163,67.....	-	38 244,65.....	-
36 398,95.....	-	38 513,79.....	-
36 453,97.....	-	38 828,16.....	-
36 664,30.....	-	39 098,76.....	-
36 797,59.....	-	39 171,93.....	-
37 092,67.....	-	39 338,09.....	-
37 233,43.....	-	39 554,49.....	-
37 404,14.....	-	39 676,57.....	-
37 481,94.....	-	39 747,85.....	-
37 651,71.....	-	39 904,45.....	-
37 865,77.....	-		
37 950,47.....	-		

le niveau ⁴I_{13/2} a été déterminé à l'aide de trois couples de raies présentant des structures de même largeur; ces structures sont données par Schöler et Schmidt (⁹) et Belyanin (¹⁰) pour les transitions aboutissant à ⁴I_{15/2}, les autres ont été récemment mesurées dans le proche infrarouge; c'est là aussi que l'écart ⁴I_{13/2} - ⁴I_{11/2} a été trouvé : 3124,6 cm⁻¹. De même que dans le cas du dysprosium, de l'erbium et du thulium, la transition inter-

dite, entre les deux premiers niveaux du terme fondamental a été observée dans l'infrarouge.

On trouve dans un tableau, et pour les niveaux actuellement connus, l'énergie E (en cm^{-1}) et, s'il y a lieu, le nombre quantique J et la largeur de la structure hyperfine rapportée à celle du niveau fondamental W (en $\text{cm}^{-1} \times 10^{-3}$). Les deux niveaux 16 882 et 17 059 doivent s'interpréter comme un mélange de $f^{11} sp$ et de $f^{10} ds^2$ et donnent l'un et l'autre des raies intenses avec $f^{11} 6 s 7 s$.

L'analyse de ce spectre se poursuit par la recherche de niveaux pairs profonds de $4 f^{10} 5 d 6 s^2$ et devrait s'améliorer dans un proche avenir.

(*) Séance du 5 juin 1972.

(1) A. S. KING, *Astroph. J.*, 72, 1930, p. 221.

(2) W. F. MEGGERS, C. H. CORLISS et B. F. SCRIBNER, *Tables of Spectral Lines Intensities*, N. B. S. Monograph 32, Part 1, 1961.

(3) V. G. MOSSOTTI et V. A. FASSEL, *Spectrochim. Acta*, 20, 1964, p. 1117.

(4) J. VERGÈS, *Thèse de Doctorat*, Orsay, 1969.

(5) A. E. LIVINGSTON Jr et E. H. PINNINGTON, *J. Opt. Soc. Amer.*, 61, 1971, p. 1429.

(6) J. CONNES, P. CONNES, H. DELOUIS, G. GUELACHVILI, J. P. MAILLARD, et G. MICHEL, *Nouv. Rev. Opt. appl.*, 1, 1970, p. 3.

(7) F. S. TOMKINS et B. ERCOLI, *Appl. Opt.*, 6, 1967, p. 1299.

(8) J. G. CONWAY et B. G. WYBOURNE, *Phys. Rev.*, 130, 1963, p. 2325.

(9) H. SCHÜFER et TH. SCHMIDT, *Naturwiss.*, 23, 1935, p. 69.

(10) V. B. BELYANIN, *Opt. i. Spekt.*, 3, 1958, p. 322.

Laboratoire Aimé Cotton
C. N. R. S., II,
Campus Universitaire,
91405 Orsay,
Essonne.

SPECTROSCOPIE ATOMIQUE. — Détermination des configurations $4f^{10} 5d 6s^2$ et $4f^{10} 6p 6s^2$ dans le spectre d'arc de l'holmium. Note (*) de MM. JEAN BLAISE, PIERRE CAMUS, GUY GUELACHVILI, JEAN VERGES et JEAN-FRANÇOIS WYART, transmise par M. Pierre Jacquinot.

Vingt-deux niveaux de la configuration $4f^{10} 5d 6s^2$ et trente-quatre niveaux appartenant aux configurations $4f^{10} 6p 6s^2$, $4f^{11} 5d 6s$ ou $4f^{10} 5d 6s 6p$ ont été trouvés dans le spectre de l'holmium neutre. L'énergie du plus profond niveau impair est de $8\,378,91\text{ cm}^{-1}$. Les identifications proposées se fondent sur un calcul paramétrique de la configuration $f^{10} ({}^5\text{I}) ds^2$.

Nous avons décrit dans une Note précédente les niveaux d'énergie profonds des configurations $4f^{11} 6s^2$, $4f^{11} 6s 6p$ et $4f^{11} 6s 7s$ (1). A l'aide de ces premiers résultats, et des spectres d'émission infrarouge obtenus par transformation de Fourier ($3\,000\text{--}12\,575\text{ cm}^{-1}$) — où plusieurs centaines de structures hyperfines ont été déjà évaluées — les niveaux profonds de deux nouvelles configurations, $4f^{10} 5d 6s^2$ et $4f^{10} 6p 6s^2$, ont été localisés, ainsi que de nombreux niveaux impairs élevés. Nos recherches ont été fondées sur un calcul paramétrique *a priori* de la sous-configuration $f^{10} ({}^5\text{I}) ds^2$ et sur l'analogie qui existe entre ce spectre et ceux, mieux connus, des éléments voisins dysprosium, erbium et thulium.

Brièvement, les différentes phases de cette classification ont été les suivantes :

1. Des couples de raies impliquant la différence $5\,419,70\text{ cm}^{-1}$ ont été classés comme transitions entre des niveaux pairs et les deux niveaux $f^{11} s^2 {}^3\text{I}_{5/2}$ et ${}^3\text{I}_{3/2}$ déjà connus, et quatre de ces niveaux sont identifiés comme $f^{10} ({}^5\text{I}_8) d_{5/2}$: $12\,339,02$ et $12\,344,53\text{ cm}^{-1}$; $f^{10} ({}^5\text{I}_7) d_{3/2}$: $15\,081,11$ et $15\,136,03\text{ cm}^{-1}$.

2. Les différences entre ces niveaux pairs se retrouvent de nombreuses fois entre les nombres d'ondes de fortes transitions infrarouges et l'on obtient ainsi des niveaux impairs élevés, le plus profond d'entre eux étant $4f^{10} ({}^5\text{I}_8) 6p_{1/2} 6s^2$ à $18\,572,30\text{ cm}^{-1}$ ($J = 15/2$).

3. A partir de niveaux impairs élevés, et à l'aide du programme de recherches automatique Combac, on étend le nombre de niveaux de $4f^{10} 5d 6s^2$, dont le terme fondamental, entièrement déterminé, classe de nombreuses raies dans le domaine visible.

Les 22 niveaux de $4f^{10} 5d 6s^2$ actuellement connus ont été interprétés dans un calcul paramétrique de la sous-configuration $f^{10} ({}^5\text{I}) d$ effectué au moyen d'une chaîne de programmes sur le calculateur Univac 1108 du Centre d'Orsay (2). Sept. paramètres radiaux ont été optimisés par diagonalisations et moindres carrés successifs :

$$\begin{array}{llll} E_{av} & = & 13\,926 & \pm 250\text{ cm}^{-1}, & G_1(4f, 5d) & = & 101 & \pm 13, \\ F_2(4f, 5d) & = & 134 & \pm 15 & \text{»} & , & G_2(4f, 5d) & = & 18,6 & \pm 5, \\ F_4(4f, 5d) & = & 8,4 & \pm 3 & \text{»} & , & \zeta_{av} & = & 796 & \pm 55, \\ \alpha & = & 13,6 & + 3 & \text{»} & , & & & & \end{array}$$

TABLEAU

Niveaux d'énergie de $4f^{10}5d6s^2$ et leur interprétation théorique

E_0	J	E_c	g_c	W	Première composante en couplage J j	
8 378,91	17/2	8 440	1,268	95	($^3I_8, ^2D_{3/2}$)	74
8 427,11	15/2	8 715	1,293	62	—	89
9 147,08	13/2	9 016	1,356	— 23	—	95
9 741,50	19/2	9 576	1,242	200	—	58
11 530,57	17/2	11 481	1,202	107	($^3I_8, ^2D_{3/2}$)	70
11 689,72	19/2	11 709	1,184	170	—	56
12 339,02	15/2	12 193	1,232	0	—	67
12 344,53	13/2	12 525	1,238	— 40	—	55
13 082,93	11/2	13 049	1,278	— 90	($^5I_7, ^2D_{3/2}$)	50
15 081,11	13/2	15 202	1,184	— 50	—	49
15 130,28	17/2	15 045	1,156	182	—	76
15 136,03	15/2	15 120	1,166	102	—	71
15 792,13	11/2	15 970	1,164	—100	($^5I_6, ^2D_{3/2}$)	30
16 154,20	15/2	16 122	1,170	170	($^5I_7, ^2D_{3/2}$)	82
16 438,00	17/2	16 435	1,142	212	—	72
16 735,91	13/2	16 604	1,192	— 60	—	63
16 937,44	11/2	16 774	1,229	—100	—	33
18 651,56	13/2	18 593	1,052		($^5I_6, ^2D_{3/2}$)	50
18 756,12	15/2	18 687	1,027		—	93
20 074,85	15/2	20 038	1,101		($^5I_6, ^2D_{3/2}$)	85
20 241,32	13/2	20 320	1,092		—	58
23 445,28	15/2	23 682	0,980		($^5I_5, ^2D_{3/2}$)	92

Nouveaux niveaux impairs

E_0	J	W	Identification	E_0	J	W
18 572,30	15/2	— 40	$f^{10}s^2p_{1/2}$	23 942,71	13/2	45
18 737,80	17/2	360	$f^{10}s^2p_{1/2}$	24 357,92	15/2	70
19 276,92	15/2	929	$f^{10}ds$	26 023,53	15/2	0
20 315,89	17/2	—205	$f^{10}ds$	26 127,22	15/2, 13/2	—195
20 493,76	13/2	—687	$f^{10}ds$	26 143,57	17/2	125
20 613,80	17/2	73	$f^{10}ds$	26 288,10	13/2	490
21 069,22	15/2	—702	$f^{10}ds$	26 456,73	15/2	184
21 378,53	17/2	168		26 480,50	17/2, 15/2	770
21 485,02	19/2	~ 50	$f^{10}s^2p_{3/2}$	26 673,70	13/2	26
21 552,02	17/2	245		26 770,17	17/2	185
21 682,90	15/2	15		26 922,40	15/2	550
22 014,12	15/2	—287		27 670,64	19/2, 17/2	870
22 024,18	13/2	—293		28 244,25	17/2	
22 392,86	13/2	—660		28 417,55	15/2	
23 585,33	13/2	256		30 048,97	15/2	875
23 818,53	15/2	220		30 338,72	13/2	835
23 885,74	17/2	—40		37 623,09	15/2	

Le paramètre de Slater G_3 a été fixé à la valeur $2,3 \text{ cm}^{-1}$, E_{av} représente l'énergie moyenne de la sous-configuration, α rend compte des effets linéaires d'interactions lointaines (opérateur $\propto L^2$) et l'interaction spin-orbite des électrons $4f$ est décrite par les énergies des cinq premiers niveaux de $4f^{10}$ observés par Dieke et Pandey dans le spectre de Ho IV ⁽³⁾. L'écart quadratique moyen final sur les énergies est de 164 cm^{-1} .

Alors que les deux niveaux du terme $4f^{10} 6p 6s^2$ (5I_8 , $^2P_{1/2}$) ont été déterminés facilement grâce à leurs fortes transitions avec $4f^{10} 5d 6s^2$ (3I_8 , $^2D_{3/2}$), les critères d'intensité ou de structure hyperfine n'ont pas permis d'identifier avec certitude les quatre niveaux $f^{10} ps^2$ (5I_8 , $^2P_{3/2}$). Il a déjà été montré que les configurations $4f^{n-1} 6p 6s^2$ pouvaient être perturbées par $4f^n 5d 6s$ ⁽⁴⁾ et une telle interaction est attendue dans l'holmium où Brewer évalue à $17\,600 \text{ cm}^{-1}$ l'énergie du premier niveau de $4f^{11} 5d6s$ ⁽⁵⁾.

Nous avons rassemblé dans le tableau tous les niveaux d'énergie récemment obtenus. On trouve successivement : l'énergie observée E_o (en cm^{-1}), le nombre quantique J , l'énergie et le facteur de Landé calculés E_c et g_c , la largeur de la structure hyperfine W (en $\text{cm}^{-1} \times 10^{-3}$) rapportée à celle, supposée nulle, du fondamental, enfin le nom de la principale composante en couplage Jj et le carré de son amplitude dans le vecteur normé à 100. Pour les niveaux impairs, ces données sont limitées à E_o , J , W et éventuellement, au nom du niveau.

La détermination du nombre quantique J des niveaux a constitué une des difficultés de ce travail ⁽⁶⁾. En effet, les écarts entre les composantes hyperfines des raies ne respectent pas la loi de Landé ce qui est dû au moment quadrupolaire de ^{163}Ho .

L'étude de l'effet Zeeman de l'holmium va être entreprise pour confirmer les identifications proposées et trouver de nouveaux niveaux d'énergie.

(*) Séance du 3 juillet 1972.

⁽¹⁾ J. BLAISE, P. CAMUS, G. GUELACHVILI, J. VERGÈS et J. F. WYART, *Comptes rendus*, 274, série B, 1972, p. 1302.

⁽²⁾ Y. BORDARIER, A. CARLIER et P. DAGOURY, Programmes AGENAC, ASSAC, DIAGAC, GRAMAC, Non publié, Orsay, 1968.

⁽³⁾ G. H. DIEKE et B. PANDY, *J. Chem. Phys.*, 41, 1964, p. 1952.

⁽⁴⁾ P. CAMUS, *J. Phys.*, 33, 1972, p. 203.

⁽⁵⁾ L. BREWER, *J. Opt. Soc. Amer.*, 61, 1971, p. 1101.

⁽⁶⁾ Le niveau 16 438 d'abord identifié ⁽¹⁾ à $f^{11}sp$ ($^4I_{5/2}$, 3P_1)_{15/2} est très probablement $f^{10} ds^2$ (5I_7 , $^2D_{3/2}$)_{17/2}. Par contre, le niveau 16 882,29 appartenant au même multiplet de $f^{11}sp$ possède un J de 15/2.

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

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