

ORSAY
n° d'ordre :

UNIVERSITE DE PARIS-SUD
CENTRE D'ORSAY

THESE

présentée

Pour obtenir

Le Titre de DOCTEUR de 3^{ème} cycle

PAR

Monsieur Dominique PAIN

SUJET :

ETUDE D'UN PLASMA D'OR PRODUIT PAR IMPACT LASER.
ANALYSE DES RAIES EMISES AU VOISINAGE DE $\lambda = 5\text{\AA}$.

soutenu le 11 décembre 1984 devant la Commission d'examen

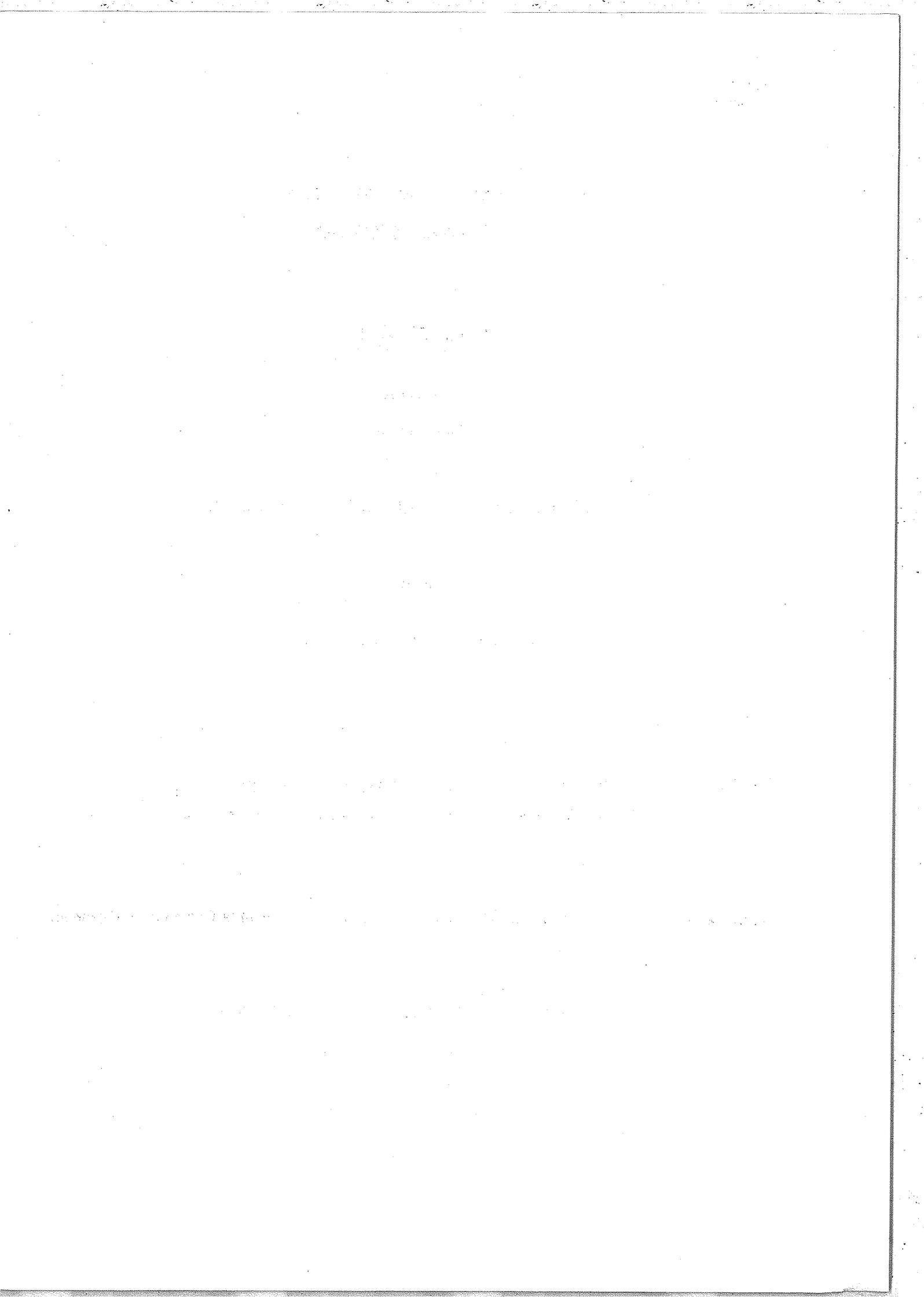
MM. J. BAUCHE Président

E. LUC-KOENIG

S. LIBERMAN

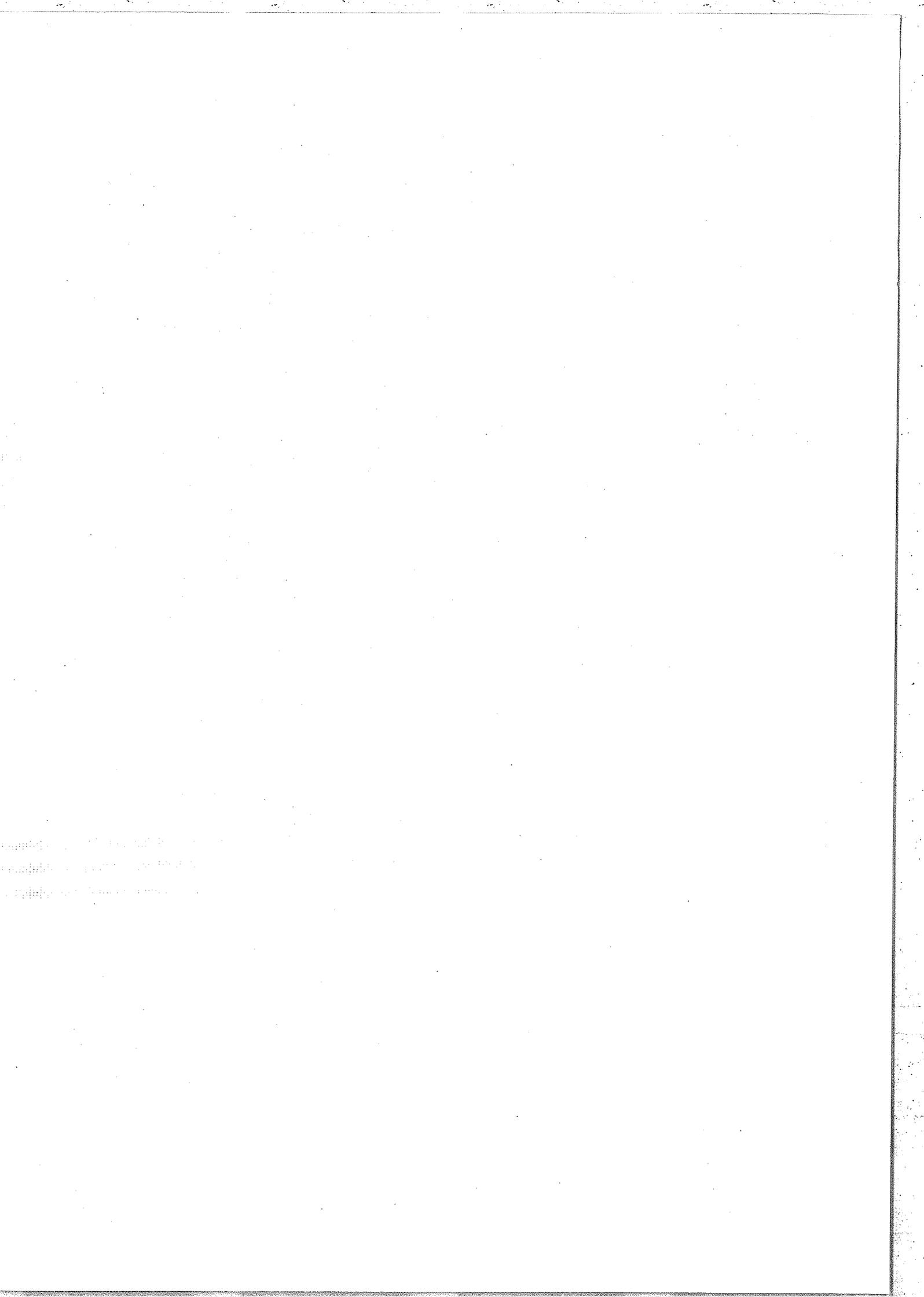
E. BERTHIER

J.C. GAUTHIER



PLAN

INTRODUCTION.....	1
PREMIERE PARTIE : METHODES GENERALES D'ANALYSE DES SPECTRES DE PLASMAS PRODUITS PAR IMPACT LASER.....	6
I. CONSTITUTION DES PLASMAS PRODUITS PAR IMPACT LASER..	6
1. Obtention des spectres.....	6
2. Choix d'un modèle statistique.....	7
2.1. Le modèle de l'équilibre thermodynamique....	7
2.2. Le modèle de l'équilibre thermodynamique local.....	9
3. Densités volumiques des ions du plasma.....	10
3.1. Relation indépendante de la température et de la densité.....	10
3.2. Utilisation de la température.....	12
3.3. Utilisation des intensités expérimentales des raies.....	13
II. METHODES THEORIQUES D'IDENTIFICATION DES RAIES SPECTRALES.....	15
1. Hamiltonien de Breit-Dirac.....	15
1.1. Equation de Dirac.....	15
1.2. Interaction de Breit.....	16
1.3. Hypothèse du champ central.....	17
2. Détermination des fonctions radiales relativistes	20
2.1. Méthode du potentiel paramétrique.....	20
2.2. Méthode Hartree-Fock relativiste.....	21
3. Sous-faisceaux non résolus.....	22
III. TRAVAUX D'ANALYSE DE SPECTRES DE PLASMAS LASER SERVANT DE REFERENCE A NOTRE ETUDE.....	24
1. Transitions dans les ions de la série du nickel..	24
1.1. Spectres de Sm, Gd et Dy.....	24
1.2. Spectres d'atomes plus lourds.....	25
1.3. Synthèse des résultats obtenus.....	25
2. Transitions dans les autres ions.....	26
2.1. Ions de la série du cobalt.....	26
2.2. Ions des séries du cuivre et du zinc.....	27
3. Conclusion.....	28



DEUXIEME PARTIE : ETUDE DU SPECTRE DE L'OR.....	29
I. ETUDE DU SPECTRE DE L'ION Au ⁺⁵¹ (isoélectronique du nickel).....	30
1. Calcul des longueurs d'onde des transitions 3p-4s, 3d-4p et 3d-4f.....	30
1.1. Calculs par la méthode du potentiel paramétrique.....	31
1.2. Calculs par la méthode Hartree-Fock.....	32
1.3. Extrapolation des résultats antérieurs.....	32
2. Intensités des raies principales.....	36
2.1. Point de vue classique.....	36
2.2. Effets relativistes.....	40
2.3. Effets du couplage intermédiaire.....	42
2.4. Conséquences sur le spectre.....	43
3. Etude du complexe 3 ¹⁷ 4.....	44
4. Autres transitions.....	47
4.1. Transitions 3d-5p et 3d-5f.....	47
4.2. Transitions vers 3d ⁹ 4s.....	47
II. CONTRIBUTION DES IONS MOINS CHARGES QUE Au ⁺⁵¹	58
1. Les ions Au ⁺⁵⁰ et Au ⁺⁴⁹	58
1.1. Calcul des transitions.....	58
1.2. Densités volumiques des différents ions.....	63
2. Ions moins chargés que l'ion Au ⁺⁴⁹	69
III. CONTRIBUTION DES IONS PLUS CHARGES QUE Au ⁺⁵¹	73
1. Transitions dans l'ion Au ⁺⁵²	73
1.1. Identification de raies du spectre.....	73
1.2. Autres transitions.....	75
2. Densités volumiques des ions plus chargés que Au ⁺⁵¹	77
2.1. Densité des ions Au ⁺⁵²	77
2.2. Densité des ions plus chargés que Au ⁺⁵²	79
CONCLUSION.....	81
BIBLIOGRAPHIE.....	85

I N T R O D U C T I O N

1. The first part of the document is a list of names and addresses of the members of the committee. The names are listed in alphabetical order, and the addresses are listed below each name. The list includes names such as Mr. J. H. Smith, Mr. J. B. Jones, and Mr. W. C. Brown, among others.

La matière apparaît, dans notre environnement immédiat, sous l'état gazeux, l'état liquide ou l'état solide.

La nature présente cependant un quatrième état de la matière dans les étoiles, qui sont composées d'atomes partiellement ou complètement ionisés et d'électrons libres. Cet ensemble de particules, toutes électriquement chargées, constitue ce que l'on appelle en physique un plasma. Ce type de milieu permet le déplacement des ions qu'il contient, de même que le plasma sanguin permet le déplacement des globules.

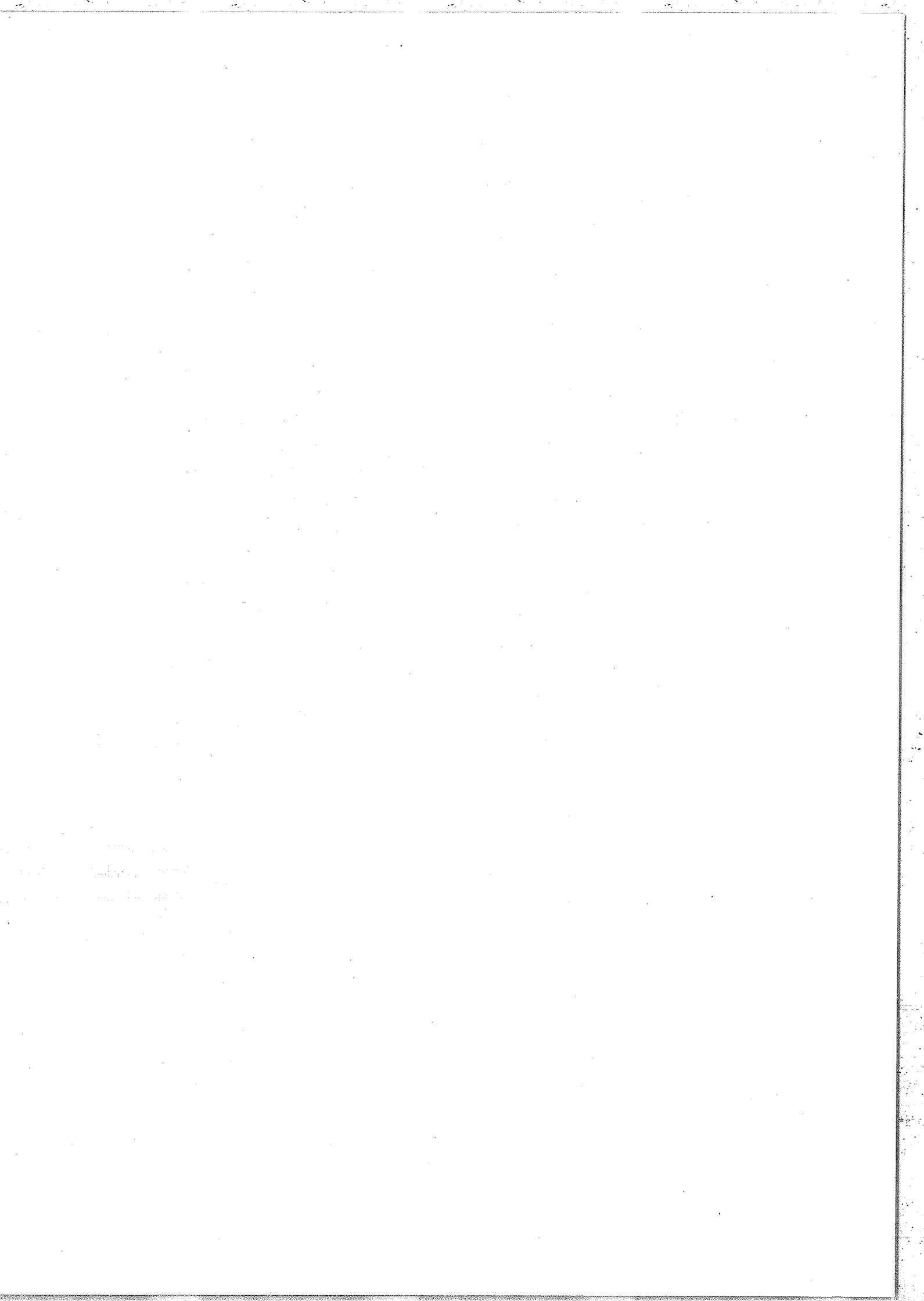
L'étude des plasmas a d'abord été développée par les astrophysiciens. Le plasma permanent le plus proche de nous est le Soleil. Il s'y produit continuellement des réactions de fusion nucléaire, qui sont la source de l'énergie qu'il émet. Cette énergie, considérable et gratuite, est à l'origine de toutes les sources d'énergies utilisées couramment sur la Terre (pétrole, charbon, énergies hydraulique, éolienne, ...), à l'exception de l'énergie de fission des noyaux utilisée pour la production de courant électrique dans les centrales nucléaires. Dès lors, la tentation est grande de chercher à provoquer le processus de fusion nucléaire à des fins de production d'électricité. On sait depuis plusieurs décennies déclencher des réactions de fusion nucléaire, mais on ne sait pas à ce jour les contrôler. Le malheur est qu'il est plus aisé de mettre au point une bombe thermonucléaire (type H) que de construire une centrale électrique utilisant le même principe. C'est cependant le but que se sont assigné les pays ayant investi dans la construction des machines toriques, dites TOKAMAKS, devant permettre de produire des plasmas d'intérêt thermonucléaire. En effet, les conditions nécessaires à la fusion nucléaire imposent de préparer la matière de façon telle qu'elle constitue un plasma. Les paramètres caractéristiques d'un plasma sont les densités volumiques des particules qu'il contient (divers ions, électrons), sa durée de vie et sa température. Il faut

Handwritten text, possibly bleed-through from the reverse side of the page. The text is faint and difficult to decipher but appears to contain several lines of writing.

en réalité parler de températures, qui se définissent, à la constante de Boltzmann près, comme les énergies cinétiques moyennes des diverses particules constituant le plasma. Elles sont exprimées soit en Kelvin (K), soit en électron-volts (eV). (On peut encore définir d'autres températures, comme nous le verrons par la suite).

Pour réaliser la fusion nucléaire de deux noyaux, il faut leur permettre de franchir la barrière de potentiel due à leur interaction coulombienne répulsive. Cela sera possible si l'on est capable de leur communiquer une énergie cinétique suffisante, c'est-à-dire si leur température est suffisamment élevée. Les tentatives actuelles sont effectuées avec des noyaux de deutérium et de tritium, mélange pour lequel la température d'ignition est proche de 10^8 K ! Le problème expérimental, non résolu à ce jour, est de produire un plasma à cette température ayant une densité et une durée de vie suffisamment grandes. Ces grandeurs doivent satisfaire au critère de LAWSON qui fixe la valeur minimum de leur produit. En pratique, le plasma de Tokamak est produit par décharge électrique et est chauffé de façon "interne" par effet Joule et de façon "externe" par injection de neutres rapides et par ondes de radiofréquence. Il est en outre "confiné" dans une région limitée de l'espace par un champ magnétique (le plasma n'est évidemment pas en contact avec les parois de la machine en raison de sa température !). La densité électronique du plasma ainsi produit avoisine 10^{11} à 10^{14} électrons par centimètre cube. Sa durée de vie est actuellement trop courte pour réaliser la fusion. Elle est limitée notamment par les pertes radiatives dues aux rayons X émis par des ions multichargés qui viennent "polluer" le plasma.

Une autre technique de production de plasma est actuellement expérimentée à l'aide de lasers très puissants. Il s'agit d'irradier, de plusieurs directions concourantes, une bille de verre contenant un mélange de deutérium et de tritium sous haute pression. La bille implose sous l'effet du rayonnement, ce qui augmente



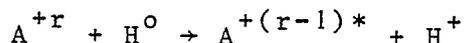
considérablement la température et la densité du gaz. On crée ainsi un plasma dont la densité électronique est comprise entre 10^{18} et 10^{23} particules par centimètre cube, mais dont la durée de vie, actuellement très courte, ne répond pas au critère de LAWSON. Les températures atteintes sont d'autre part mal connues.

Dans le but de mieux maîtriser leurs expériences, les physiciens des plasmas se tournent vers les physiciens atomistes.

En quoi la physique atomique peut-elle éclairer la physique des plasmas ?

La réponse à cette question se lit dans l'embarras où se trouvent actuellement les physiciens des plasmas quand il s'agit de connaître précisément les paramètres températures et densités des plasmas qu'ils produisent, c'est-à-dire obtenir ce qu'on appelle des diagnostics de température et de densité. La température électronique peut être mesurée en comparant les intensités de raies émises par des impuretés du plasma [1,2]. La présence de ces impuretés, qui s'avère utile ici, est habituellement un cauchemar pour l'expérimentateur sur Tokamak. Elle est en effet à l'origine de pertes énergétiques importantes.

L'origine du problème se trouve dans l'imperfection du confinement du plasma : des atomes arrachés aux parois de la machine s'incorporent au plasma, où il se produit alors des processus d'échange de charges entre les isotopes de l'hydrogène H et les ions d'impuretés A^{+r} selon le schéma suivant :



où r et r-1 désignent deux degrés d'ionisation consécutifs de l'atome A et $A^{+(r-1)*}$ représente l'atome A de charge (r-1) dans un état excité. L'étape suivante est la désexcitation radiative de $A^{+(r-1)*}$ qui représente une perte d'énergie pour le plasma.

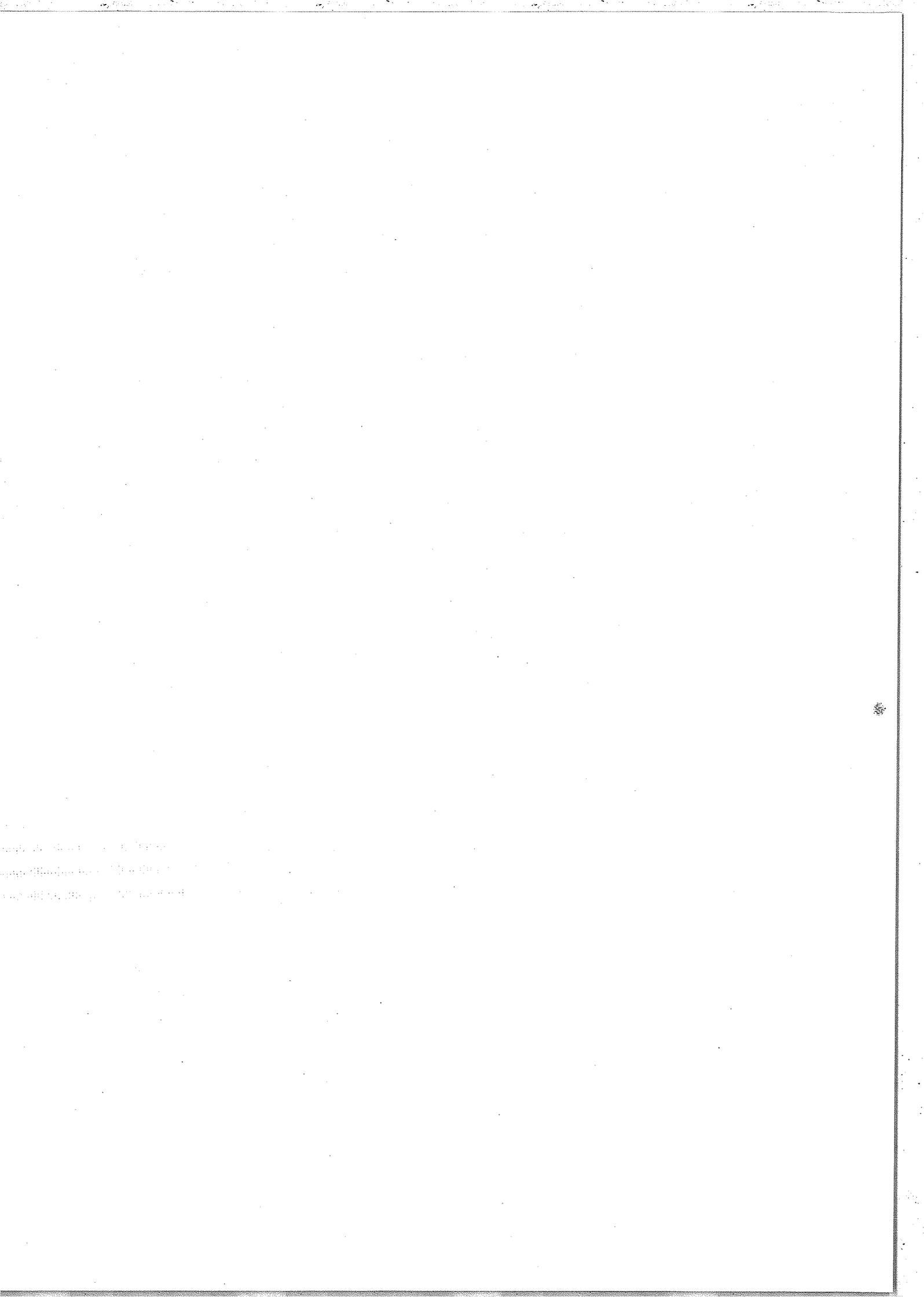
1944
1945
1946

Ces considérations montrent que le physicien des plasmas a intérêt à dominer les problèmes de l'échange de charge et de la densité des impuretés. Ce dernier paramètre est accessible par l'étude des intensités des raies interdites émises par les ions d'impuretés [2]. Les méthodes de diagnostics de plasmas de Tokamaks s'appliquent également aux plasmas produits par impact laser pour lesquels la physique atomique peut permettre en outre d'obtenir des indications sur le champ électromagnétique qui y règne. Il s'agit ici d'examiner le profil des raies émises par des impuretés lourdes, dont l'élargissement est dû à la fois aux effets Doppler, Stark et Zeeman.

Que peut retirer de telles études le physicien atomiste ?

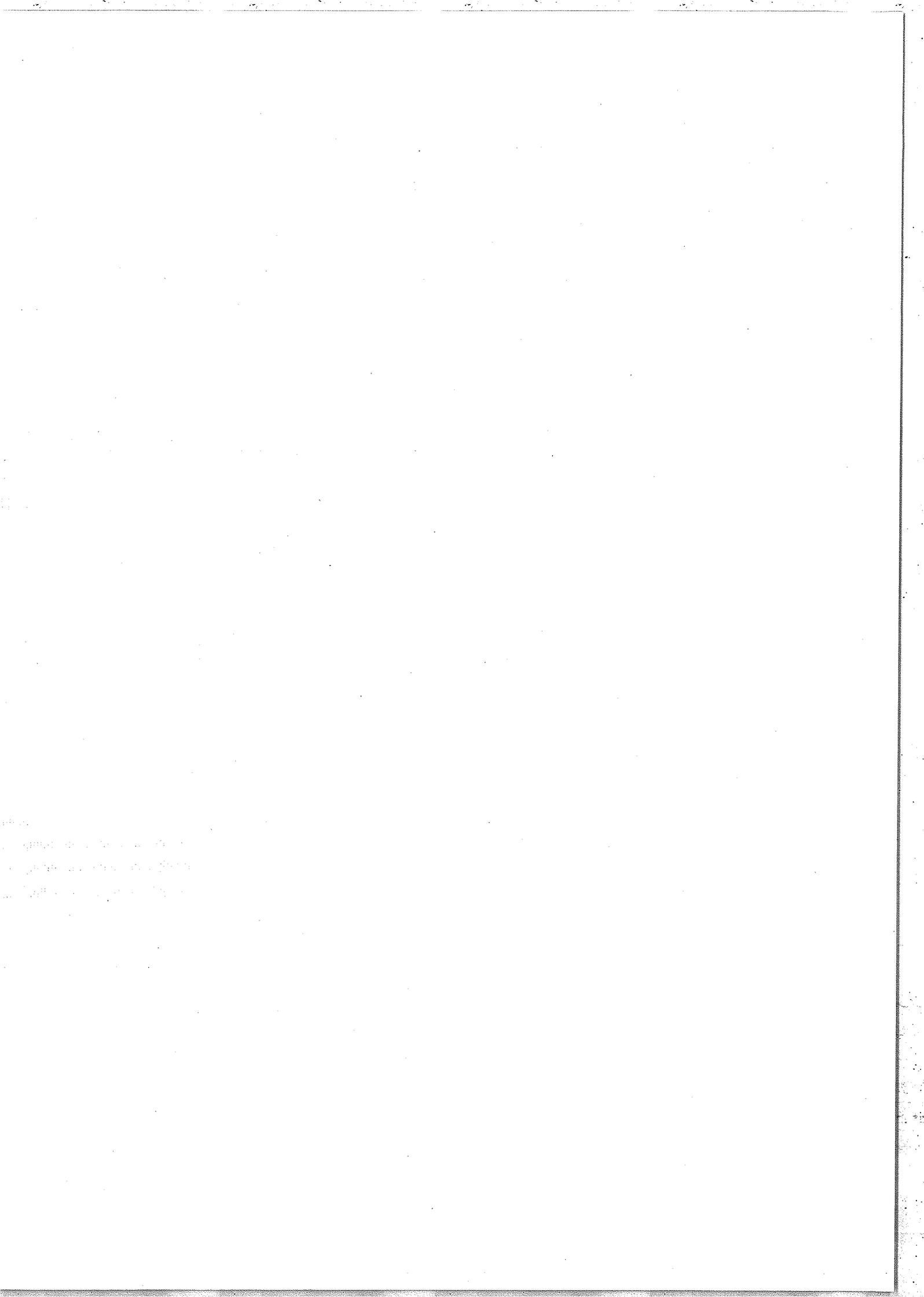
Par sa collaboration dans le domaine des plasmas, il se familiarise avec les spectres d'atomes très ionisés, grâce auxquels il peut obtenir des données spectroscopiques inconnues jusque là dans le domaine des rayons X mous et éprouver la validité de ses modèles de la structure atomique. C'est ainsi qu'il devient lui-même demandeur de spectres de plasma contenant les éléments qu'il souhaite étudier.

De tels plasmas ont d'abord été produits par fils explosés [3] puis par impact laser. Notre étude a été motivée par l'obtention par BUSQUET [4], au Centre d'Etudes de Limeil du Commissariat à l'Energie Atomique, d'enregistrements de spectres de l'or à partir de plasmas produits par impact laser, dans un domaine de longueur d'onde situé autour de 5 Å. L'or a déjà été utilisé dans certaines expériences sur Tokamak comme revêtement de paroi dans le but de réduire la densité des impuretés gazeuses (oxygène, azote, ...) dans le plasma. Son spectre a alors été enregistré [5] dans un domaine de longueur d'onde situé entre 20 et 350 Å.



Notre travail reprend et développe les études spectroscopiques effectuées sur des éléments plus légers par MANDELBAUM et al. [6,7] et introduit de nouvelles transitions pouvant être utilisées à des fins de diagnostics de température et de densité.

Dans une première partie, nous décrivons les méthodes théoriques d'analyse des spectres d'atomes très ionisés ainsi que les résultats qu'elles ont permis d'obtenir jusqu'ici. La deuxième partie décrit en détail notre analyse du spectre de l'or et met en évidence sur cet exemple particulier les caractéristiques générales des spectres de plasmas.



P R E M I E R E P A R T I E

METHODES GENERALES D'ANALYSE DES SPECTRES
DE PLASMAS PRODUITS PAR IMPACT LASER

1944
1945
1946

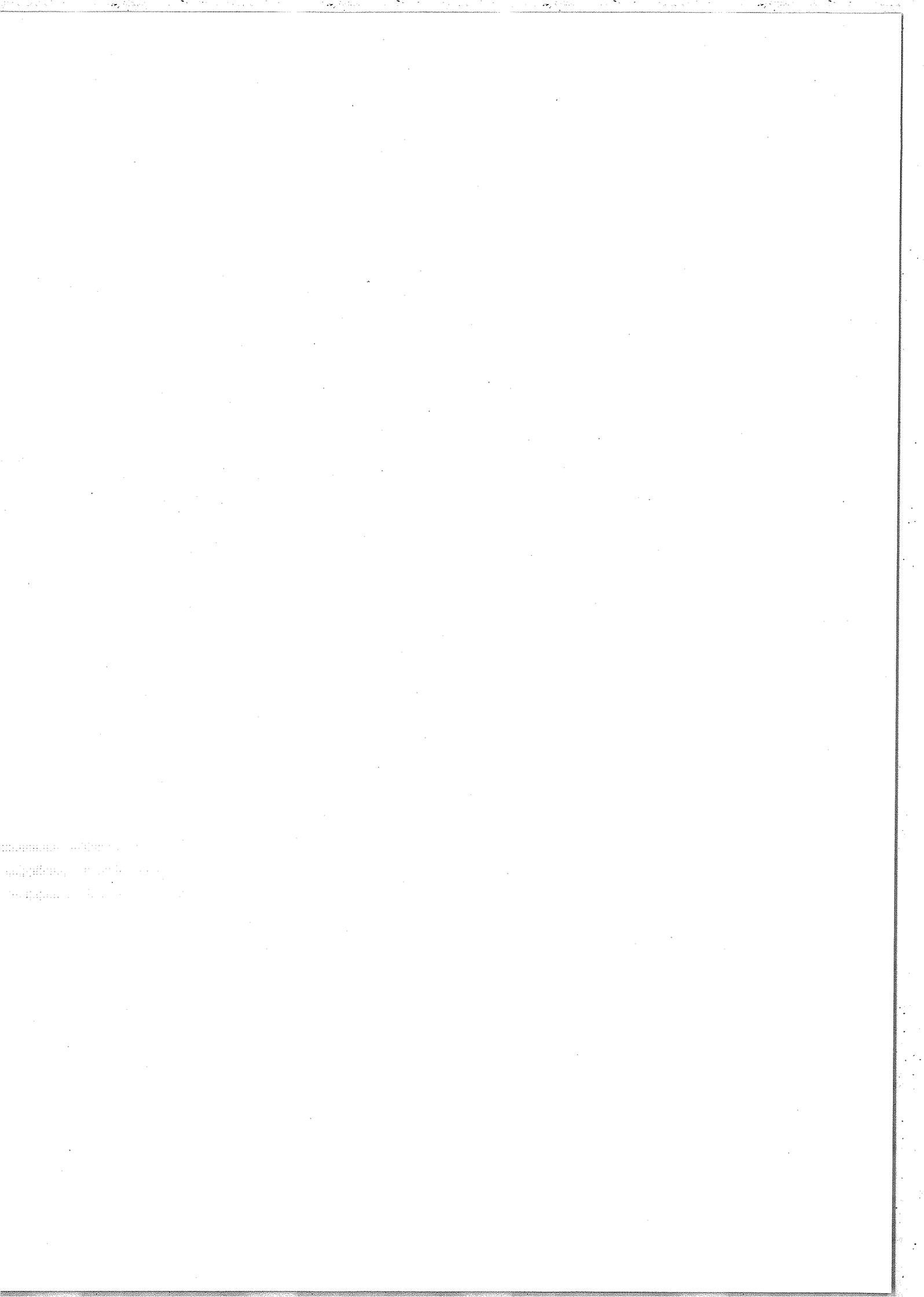
I. CONSTITUTION DES PLASMAS PRODUITS PAR IMPACT LASER

Les plasmas de forte densité sont actuellement obtenus par tir laser sur des cibles constituées de l'élément à étudier, éventuellement allié à un autre métal. Le spectre de l'élément, dans le domaine de longueur d'onde restreint qui est enregistré, est produit par des ions de plusieurs degrés d'ionisation consécutifs dont la nature et l'abondance dépendent de la zone observée et de l'instant d'observation [8].

Nous illustrons, dans ce chapitre, à l'aide de l'exemple de l'or que nous avons étudié, l'aspect expérimental de l'obtention de ce type de plasma. Nous rappelons d'autre part les lois régissant les populations des niveaux d'énergie des différents ions présents dans le plasma en fonction de sa température et de sa densité électronique, et examinons la possibilité de les appliquer aux spectres produits par impact laser.

1. OBTENTION DES SPECTRES

Le plasma dont l'étude fait l'objet de la deuxième partie de ce travail a été obtenu par BUSQUET [4]. Il a été produit par impact laser sur une cible d'or, allié à 12,5 % d'aluminium, qui a été réalisée en déposant simultanément ces deux métaux sur un substrat de verre. Les impulsions laser d'une durée de 800 ps et transportant une énergie de 50 J environ sont produites par un laser au néodyme ($\lambda = 1,06 \mu\text{m}$). Les spectres X obtenus ont été enregistrés sur des films Kodirex par l'intermédiaire de spectrographes à cristaux équipés de cristaux de TlAP. La fente d'entrée des spectrographes avait une largeur de 15 μm et était située à 10 mm de la cible. Les raies émises par l'aluminium présent dans la cible ont permis l'étalonnage du spectre en longueur d'onde.



2. CHOIX D'UN MODELE STATISTIQUE

L'étude de la répartition des atomes selon les différents degrés d'ionisation nécessite le choix d'un modèle statistique. Dans le milieu étudié, deux types de processus sont essentiellement responsables de l'équilibre dynamique des populations des différents niveaux des différents ions :

- les collisions électroniques, qui produisent l'ionisation et la recombinaison des ions, ainsi que l'excitation et la désexcitation des niveaux ;

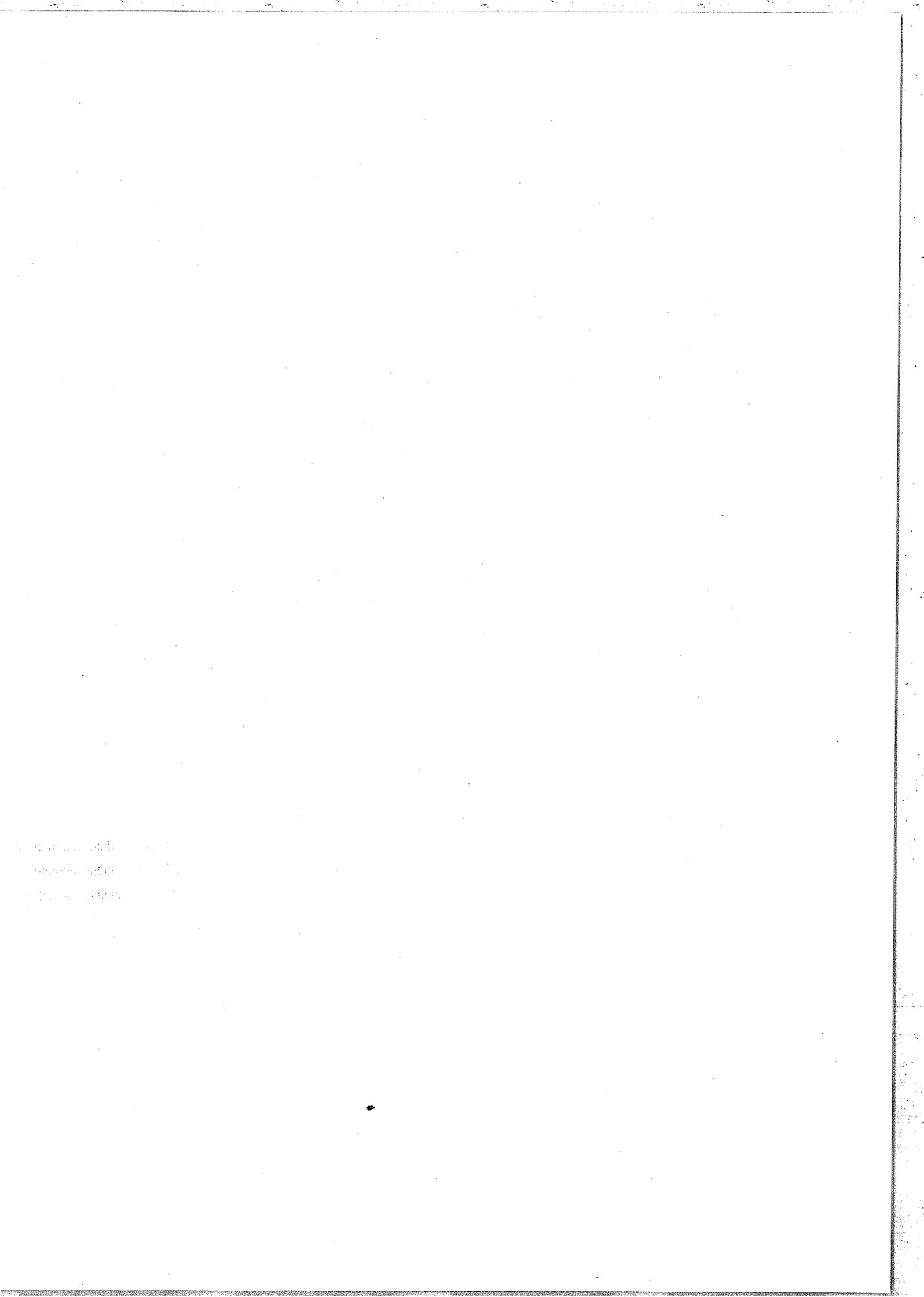
- Les transitions multipolaires électriques ou magnétiques qui participent à l'excitation et à la désexcitation des niveaux.

le cadre du modèle "collisionnel-radiatif". Ne disposant pas d'un programme de calcul pour ce type de modèle, nous nous sommes contentés d'utiliser un modèle très simple, celui de l'équilibre thermodynamique, qui reproduit assez bien la réalité physique dans le cas des plasmas denses dans lesquels les collisions jouent un rôle important. Nous en donnons ici les lois principales et discutons leur validité dans le cadre du modèle de l'équilibre thermodynamique local, plus adapté au type de plasma étudié.

2.1. Le modèle de l'équilibre thermodynamique

La température électronique s'identifie ici aux températures ioniques. Dans le cadre de ce modèle, la loi de Boltzmann permet de déterminer, pour un type d'ion donné, la population d'un niveau excité j relativement à celle du niveau fondamental f . Si n_{rj} et n_{rf} désignent respectivement les densités volumiques des ions de charge r occupant respectivement le niveau j et le niveau f , n_{rj} et n_{rf} vérifient la relation :

$$\frac{n_{rj}}{n_{rf}} = \frac{g_{rj}}{g_{rf}} e^{-\frac{\chi_{fj}}{kT}} \quad (I.1)$$



où g_{rj} et g_{rf} sont les poids statistiques des niveaux j et f , χ_{fj} est leur différence d'énergie et T est la température du plasma.

Nous pouvons utiliser la relation (I.1) pour exprimer la densité volumique totale n_r des ions de charge r , en fonction de la population de leur niveau fondamental, et écrire :

$$n_r = \sum_j n_{rj} = \frac{n_{rf}}{g_{rf}} \sum_j g_{rj} e^{-\frac{\chi_{fj}}{kT}} \quad (I.2)$$

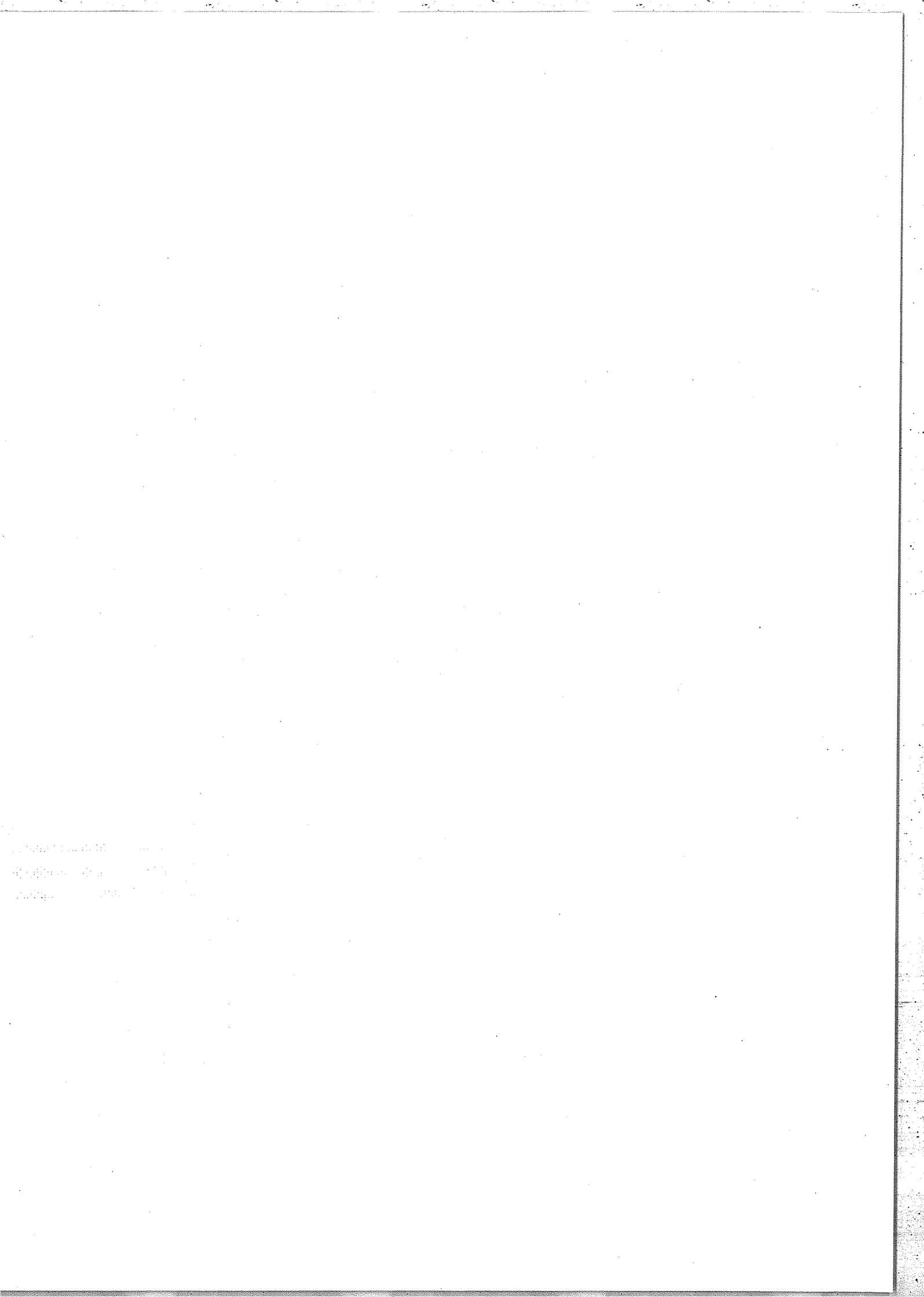
où la sommation apporte sur l'ensemble des niveaux peuplés de l'ion. Si cet ensemble contenait tous ses niveaux discrets, qui sont en nombre infini, on obtiendrait une expression de n_r contenant un nombre de termes infiniment grand. Une telle expression serait inutilisable. En fait, il n'y a plus de problème si est prise en compte la présence autour de l'ion considéré des autres ions du plasma. Ces ions créent un champ électrique ayant pour effet d'abaisser le potentiel d'ionisation de l'ion étudié. Il en résulte que n_r s'exprime en fonction d'une somme finie, que l'on appelle fonction de partition de l'ion de charge r :

$$U_r = \sum_{j=1}^{j_{\max}} g_{rj} e^{-\frac{\chi_{fj}}{kT}} \quad (I.3)$$

où j_{\max} désigne le niveau lié ayant l'énergie la plus grande. On en déduit :

$$n_r = \frac{n_{rf}}{g_{rf}} U_r \quad (I.4)$$

La détermination de j_{\max} nécessite l'évaluation de la correction $\Delta\chi_r$ à apporter au potentiel d'ionisation χ_r de l'ion de charge r isolé pour tenir compte des effets perturbateurs dus aux autres ions. Plusieurs formules donnant l'expression de $\Delta\chi_r$ en fonction de la température et/ou de la densité électronique sont disponibles dans la littérature [9,10].



Considérons maintenant les ions de charge r occupant leur niveau fondamental et les ions de charge $r+1$ occupant également leur niveau fondamental. L'équilibre entre ces deux types d'ions s'écrit :



La loi d'action de masse appliquée à cet équilibre permet d'écrire [10] :

$$\frac{n_{r+1,f}}{n_{r,f}} = \frac{g_{r+1,f}}{g_{r,f}} \frac{2}{n_e} \frac{(2\pi m_e kT)^{3/2}}{h^3} e^{-\frac{\chi_r - \Delta\chi_r}{kT}} \quad (\text{I.5})$$

où $n_{r+1,f}$ et $n_{r,f}$ sont les densités volumiques correspondant respectivement aux ions de charge $r+1$ et aux ions de charge r dans leurs états fondamentaux, T est la température, n_e et m_e la densité volumique et la masse électronique, h et k les constantes de Planck et de Boltzmann, $g_{r+1,f}$ et $g_{r,f}$ les poids statistiques des deux niveaux considérés et χ_r leur différence d'énergie qui est aussi le potentiel d'ionisation des ions de charge r . On peut modifier cette relation en utilisant (I.4) et écrire, avec les notations précédemment introduites :

$$\frac{n_{r+1}}{n_r} = \frac{2}{n_e} \frac{U_{r+1}}{U_r} \left(\frac{2\pi m_e kT}{h^2} \right)^{3/2} e^{-\frac{\chi_r - \Delta\chi_r}{kT}} \quad (\text{I.6})$$

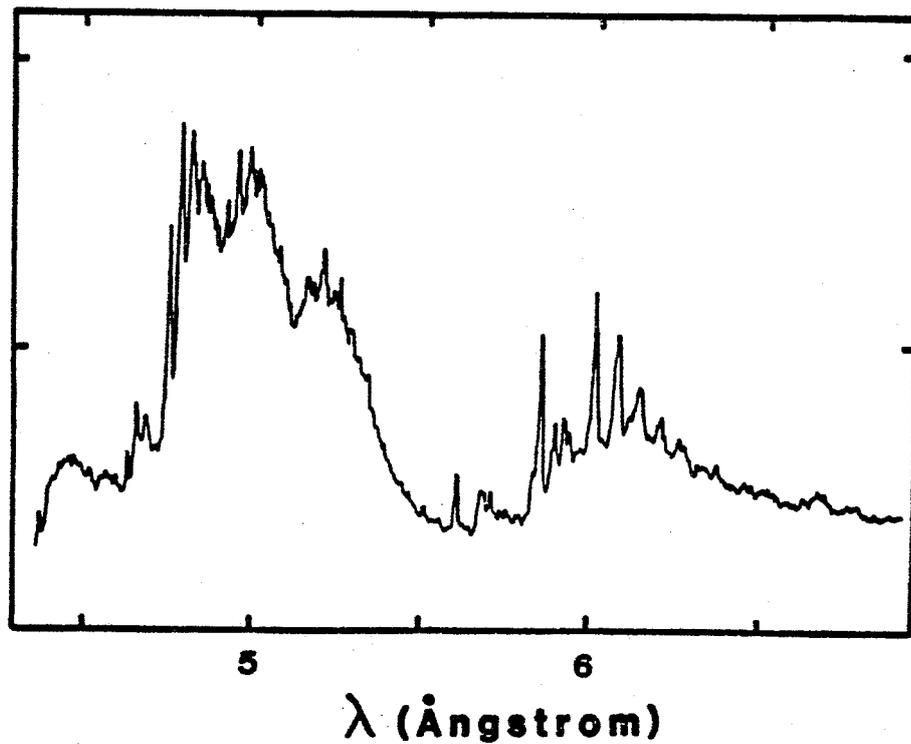
Cette équation est appelée relation de SAHA-EGGERT. On peut ainsi écrire un système d'équations faisant intervenir tous les ions présents dans le plasma.

2.2. Le modèle de l'équilibre thermodynamique local

Le modèle de l'équilibre thermodynamique n'est malheureusement pas applicable aux plasmas étudiés car il suppose la température uniforme dans le plasma, ce qui n'est pas réalisé. Il est donc nécessaire d'utiliser un autre modèle appelé modèle de l'équilibre thermodynamique local, qui

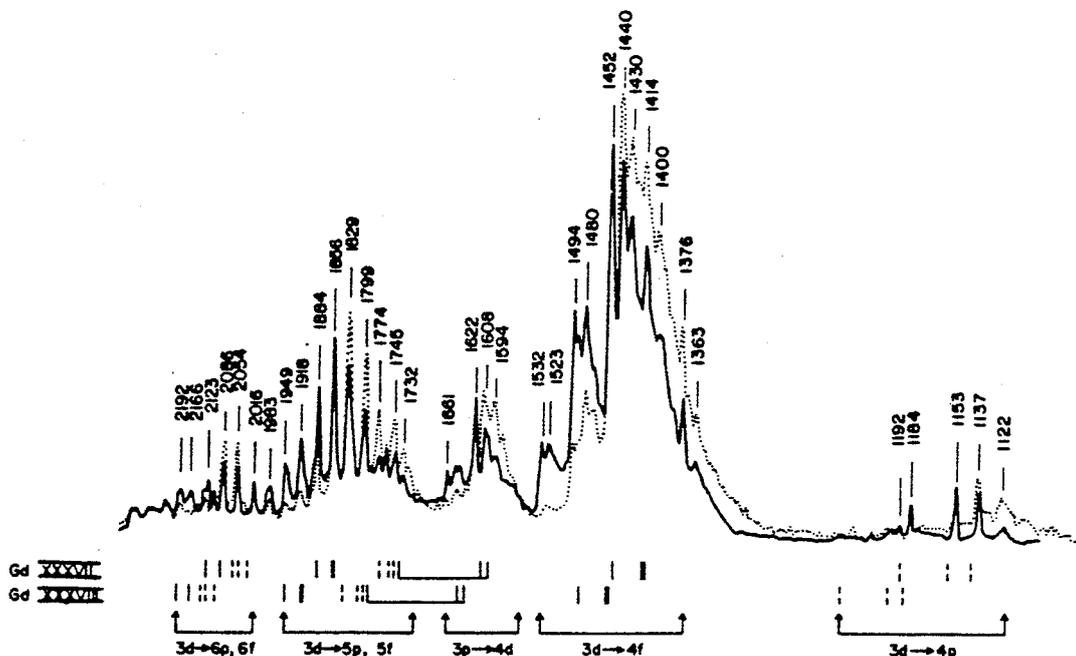
1. 1944-1945
2. 1946-1947
3. 1948-1949

FIGURE 1



Spectre émis par le plasma d'or autour de 5,5 Å

FIGURE 2



Spectre émis par un plasma de gadolinium

Courbe pleine : énergie du laser=4,2 J; courbe pointillée: 1,7 J

Les énergies des transitions identifiées sont en eV

Page 1
Page 2
Page 3

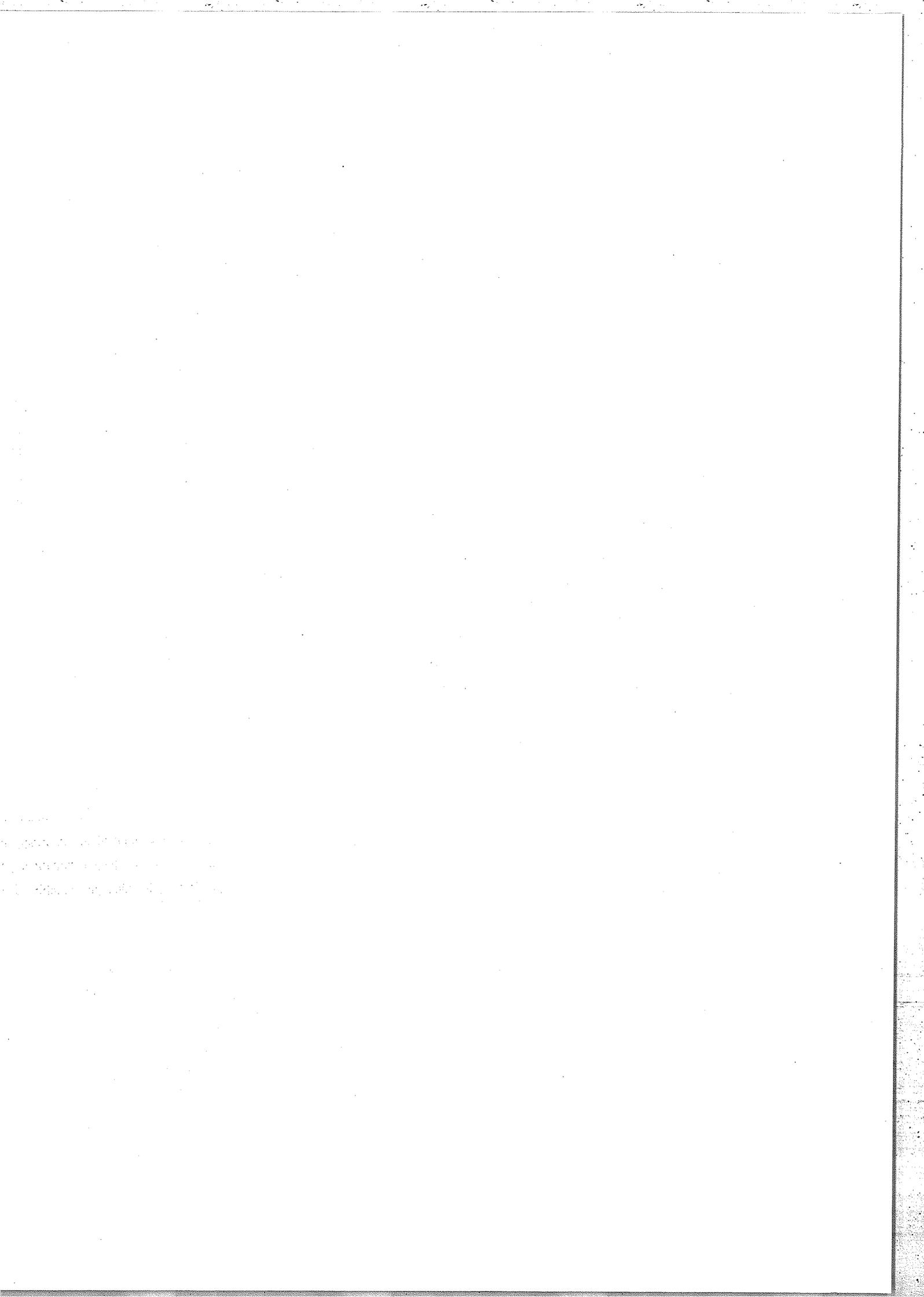
tient compte de la diversité des températures dans le plasma. Ce modèle suppose que l'on peut "découper" le plasma en zones à l'intérieur desquelles régissent des températures uniformes T_1, T_2, \dots et où l'équilibre thermodynamique est localement atteint. La loi de Saha, établie dans le cadre du modèle de l'équilibre thermodynamique, reste localement valable si l'on suppose que les processus radiatifs sont peu importants par rapport aux processus collisionnels : on peut alors négliger le déplacement de l'équilibre dû à la perte de photons par le système, ainsi que la photo-ionisation. Cette hypothèse se trouve assez bien réalisée dans les plasmas suffisamment denses comme ceux que l'on produit par impact laser [10]. Nous pourrions donc nous appuyer sur cette loi pour interpréter les spectres obtenus.

3. DENSITES VOLUMIQUES DES IONS DU PLASMA

Le spectre de l'or que nous avons analysé de façon détaillée est reproduit sur la figure 1. Sa forme est analogue à celles des spectres de terres rares obtenus par impact laser par BURKHALTER et al. [11]. Un de ces spectres est reproduit sur la figure 2. Ces auteurs ont pu y identifier des raies correspondant notamment aux transitions 3d-4f et 3d-4p dans les ions appartenant aux séries isoélectroniques du cobalt (27 électrons) et du nickel (28 électrons). Nous verrons plus loin que certaines structures des spectres ne sont pas interprétables par ces transitions. La loi de Saha nous autorise à en envisager l'interprétation par l'existence d'autres ions dans le plasma.

3.1. Relation indépendante de la température et de la densité

Nous ne pouvons utiliser la formule (I.6) que si nous connaissons les valeurs précises de la température et de la densité électronique. Or, nous ne connaissons, comme nous le verrons plus loin, que l'ordre de grandeur de la température.



Nous établissons ici une relation entre les abondances ioniques, indépendantes de la température et de la densité.

Soient trois degrés d'ionisation successifs $r-1$, r et $r+1$; en utilisant l'expression (I.5), on peut écrire le système d'équations suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{n_{r+1}^*}{n_r^*} = \frac{2}{n_e} \left(\frac{2\pi m_e kT}{h^2} \right)^{3/2} e^{-\frac{\chi_r - \Delta\chi_r}{kT}} \\ \frac{n_r^*}{n_{r-1}^*} = \frac{2}{n_e} \left(\frac{2\pi m_e kT}{h^2} \right)^{3/2} e^{-\frac{\chi_{r-1} - \Delta\chi_{r-1}}{kT}} \end{array} \right. \quad (I.7)$$

avec $n_{r+1}^* = \frac{n_{r+1,f}}{g_{r+1,f}}$ et $n_r^* = \frac{n_{rf}}{g_{rf}}$.

On en déduit :

$$\frac{n_{r-1}^*}{n_r^*} = \frac{n_r^*}{n_{r+1}^*} e^{-\frac{(\chi_r - \chi_{r-1}) - (\Delta\chi_r - \Delta\chi_{r-1})}{kT}} \quad (I.8)$$

Nous omettrons par la suite la correction $(\Delta\chi_r - \Delta\chi_{r-1})$.

Si nous identifions r au degré d'ionisation des ions appartenant à la série isoélectronique du nickel, les degrés d'ionisation $r-1$ et $r+1$ sont ceux des ions appartenant respectivement aux séries isoélectroniques du cuivre et du cobalt. Les potentiels d'ionisation $\chi_r = \chi_{Ni}$ et $\chi_{r-1} = \chi_{Cu}$ correspondent respectivement au départ d'un électron 3d et d'un électron 4s. On a donc évidemment $\chi_r > \chi_{r-1}$. La relation (I.8) montre que les ions appartenant à la série isoélectronique du cuivre ont une densité appréciable dans le plasma si kT et $(\chi_{Ni} - \chi_{Cu})$ sont du même ordre de grandeur.

1000
1000
1000
1000

Nous pouvons maintenant exprimer kT en fonction de $\frac{n_{r-1}^*}{n_r^*}$ et $\frac{n_r^*}{n_{r+1}^*}$, à l'aide de la relation (I.8), et écrire :

$$kT = \frac{\chi_r - \chi_{r-1}}{\text{Log} \left[\frac{n_r^*}{n_{r-1}^*} \cdot \frac{n_r^*}{n_{r+1}^*} \right]} \quad (\text{I.9})$$

Soit s un degré d'ionisation quelconque. Si l'on fait l'hypothèse que les raies émises par les ions le sont dans la même région du plasma, caractérisée par la température T localement uniforme, on peut écrire :

$$\forall (r,s), \quad \frac{\chi_r - \chi_{r-1}}{\text{Log} \left[\frac{n_r^*}{n_{r-1}^*} \cdot \frac{n_r^*}{n_{r+1}^*} \right]} = \frac{\chi_s - \chi_{s-1}}{\text{Log} \left[\frac{n_s^*}{n_{s-1}^*} \cdot \frac{n_s^*}{n_{s+1}^*} \right]}$$

$$\text{ou encore : } \frac{n_{s-1}^*}{n_s^*} \cdot \frac{n_{s+1}^*}{n_s^*} = \left[\frac{n_{r-1}^*}{n_r^*} \cdot \frac{n_{r+1}^*}{n_r^*} \right]^{\frac{\chi_s - \chi_{s-1}}{\chi_r - \chi_{r-1}}} \quad (\text{I.10})$$

Cette relation montre que l'on peut prévoir successivement les populations relatives des niveaux fondamentaux de tous les ions si l'on connaît les populations relatives des niveaux fondamentaux des ions appartenant à trois séquences consécutives, les potentiels d'ionisation étant connus par ailleurs. Nous verrons par la suite que la relation (I.10), établie rigoureusement (dans le cadre du modèle choisi), permet de justifier la prise en compte de tel ou tel ion pour l'interprétation des spectres.

3.2. Utilisation de la température

La connaissance de la température permet de réduire le nombre d'inconnues du problème posé dans le paragraphe 3.1 : les densités relatives $\frac{n_{r-1}^*}{n_r^*}$ et $\frac{n_{r+1}^*}{n_r^*}$ s'expriment en effet aisément l'une en fonction de l'autre selon la relation (I.8).

10/10/10
10/10/10
10/10/10

En outre, il devient possible d'exprimer, par l'intermédiaire de la fonction de partition, la densité volumique totale n_s des ions de charge s en fonction de la densité n_s^* de ces ions se trouvant dans leur état fondamental.

La valeur exacte de la température n'est malheureusement pas connue. L'utilisation d'une valeur approchée sera utilisée dans le cas de l'or pour fournir des ordres de grandeur des densités volumiques relatives des divers ions. On peut alors éviter de calculer précisément les fonctions de partition et les évaluer approximativement en ne prenant en compte, pour chaque ion, que le niveau fondamental et les niveaux peu excités.

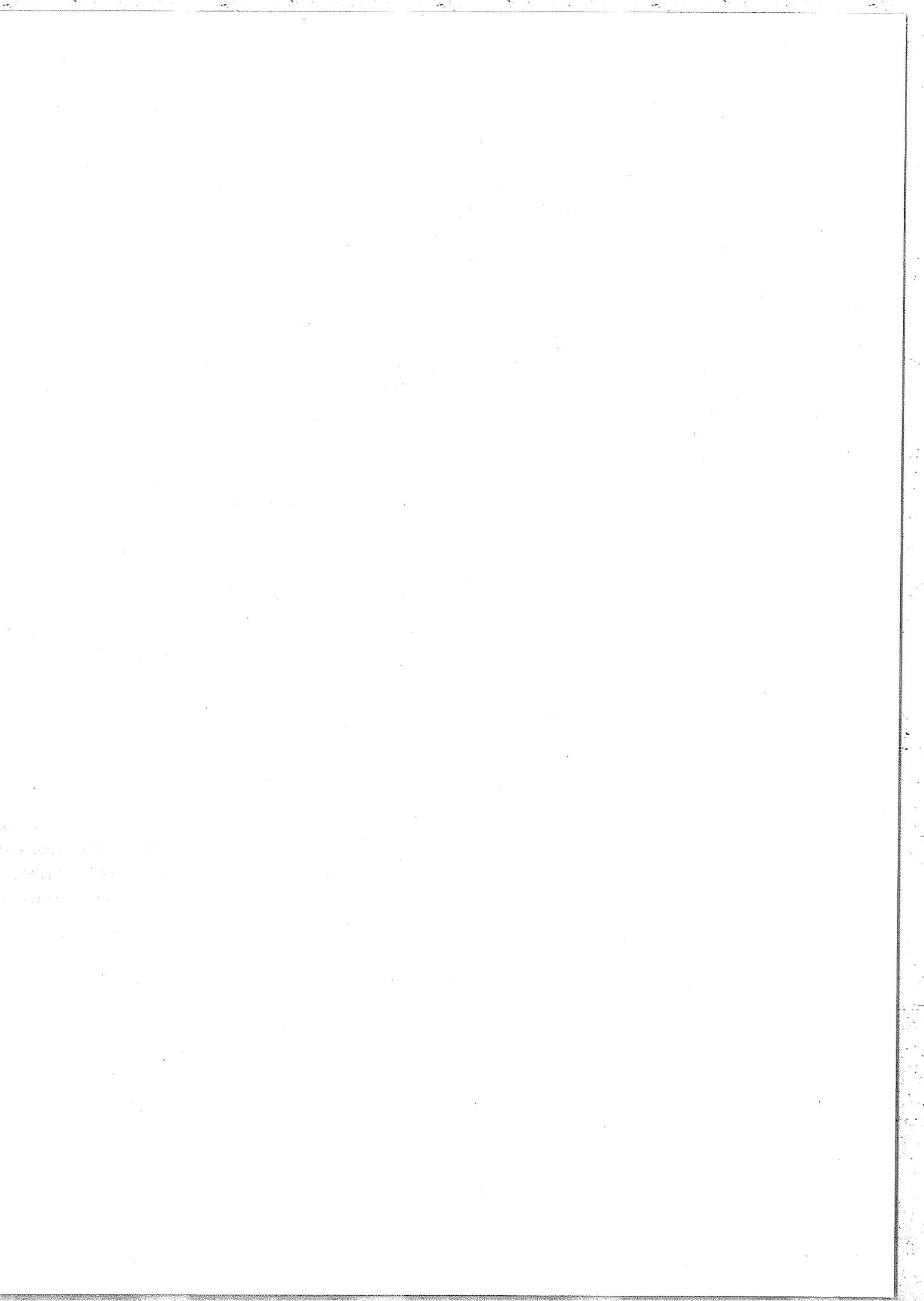
3.3. Utilisation des intensités expérimentales des raies

L'intensité I_{ji} d'une raie de fréquence ν_{ji} et de force S_{ji} est donnée par la relation suivante :

$$I_{ji} = \alpha \nu_{ji}^4 n_j^* S_{ji} \quad (\text{I.11})$$

où α dépend des facteurs géométriques de l'enregistrement et de constantes universelles, et où n_j^* désigne la population d'un des états du niveau supérieur. Considérons deux raies correspondant à un saut électronique identique dans deux ions de degrés d'ionisation consécutifs, r et $r-1$. La relation (I.11) permet de comparer les populations n_{rj}^* et $n_{r-1,j}^*$, de leurs états supérieurs si les fréquences, les forces de raies et les intensités des deux raies sont connues.

La détermination expérimentale des intensités des raies constitue une entreprise incertaine du fait de la non-linéarité du récepteur (plaque photo) et de la possibilité de réabsorption de la raie par le plasma qui ne peut être considéré comme optiquement mince. En outre, les spectres sont assez fortement non résolus. Nous verrons par la suite comment surmonter cette dernière difficulté.



Le problème est maintenant de déduire du rapport $\frac{n_{r-1,j'}^*}{n_{r,j}^*}$ le rapport des densités volumiques des deux ions.

Deux possibilités s'offrent à nous :

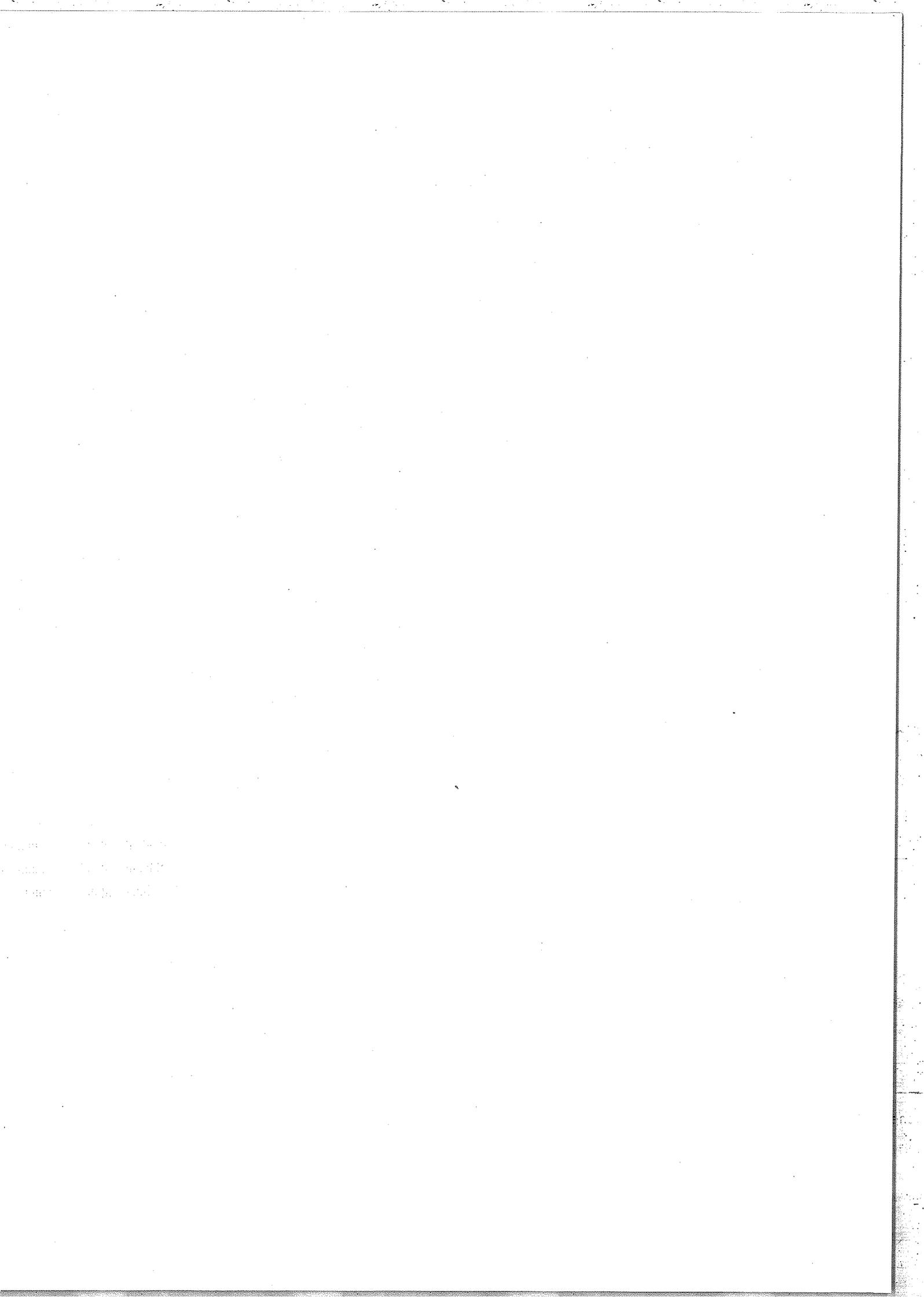
- appliquer la loi de Boltzmann à l'intégralité des niveaux des ions, quelles que soient leurs énergies, ce qui revient à considérer que le modèle de l'équilibre thermodynamique local décrit parfaitement le plasma ;

- appliquer la loi de Boltzmann uniquement aux niveaux proches du niveau fondamental (parmi lesquels les niveaux bas i et i' correspondant aux deux raies considérées) et faire l'hypothèse suivante :

$$\frac{n_{r-1,j'}^*}{n_{r-1,i'}^*} = \frac{n_{r,j}^*}{n_{r,i}^*} \quad (\text{I.12})$$

où $n_{r-1,i'}^*$ et $n_{r,i}^*$ sont les populations des états des niveaux bas. La relation (I.12) revient à considérer que, même en dehors du véritable équilibre thermodynamique local, les processus de peuplement d'états ne différant que par la présence d'un électron supplémentaire sont identiques. Il nous a paru raisonnable de ne faire cette hypothèse que lorsque l'électron supplémentaire est un électron spectateur, ce qui est le cas si l'ion de charge r ne possède que des sous-couches complètes dans son état fondamental. La relation (I.12) est évidemment compatible avec la loi de Boltzmann puisque l'écart énergétique entre niveau haut et niveau bas est pratiquement le même pour les deux ions.

Nous utiliserons cette méthode pour obtenir la valeur approximative de l'unique rapport d'abondances ioniques qu'il est nécessaire de connaître pour utiliser les méthodes décrites dans les paragraphes 3.1 et 3.2.



II. METHODES THEORIQUES D'IDENTIFICATION DES RAIES SPECTRALES

Nous avons montré dans le chapitre précédent que les spectres de plasmas obtenus par impact laser font apparaître des transitions concernant plusieurs types d'ions. L'analyse détaillée des spectres nécessite la connaissance raie par raie des longueurs d'onde et des intensités correspondant à chaque transition pour chaque ion. Nous présentons ici les méthodes de calcul que nous avons choisies ainsi que leurs justifications théoriques.

Le numéro atomique de l'atome d'or ($Z = 79$) étant assez élevé, nous nous sommes placés d'emblée dans le cadre de méthodes théoriques tenant compte des effets relativistes de façon non perturbative.

Dans une première partie, nous rappelons les expressions de l'hamiltonien obtenues par DIRAC [12] pour l'atome d'hydrogène, et par BREIT [13] pour un atome à plusieurs électrons, et nous rappelons les équations auxquelles doivent satisfaire les fonctions d'onde dans l'approximation du champ central. La deuxième partie de ce chapitre présente les méthodes de calcul des fonctions d'onde, des énergies atomiques et des forces de raies.

1. HAMILTONIEN DE BREIT-DIRAC

1.1. Equation de Dirac

Dirac fait sur l'atome d'hydrogène les hypothèses suivantes : le noyau fixe et ponctuel, ne possède ni moment magnétique, ni moment électrique. L'étude de l'atome se réduit alors de celle de son unique électron de masse m , considéré comme une particule libre. Partant de l'équation de Klein-Gordon établie à partir de l'invariant relativiste $E^2 = m^2 c^4 + p^2 c^2$, Dirac pose que la fonction d'onde électronique $|\psi\rangle$ obéit à l'équation d'onde suivante :



$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H_D |\psi\rangle \quad (\text{I.13})$$

$$\text{avec } H_D = C\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mC^2 \quad (\text{I.14})$$

H_D est appelé hamiltonien de Dirac. $\vec{\alpha}$ et β peuvent être écrits sous la forme de matrices carrées d'ordre 4 :

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \quad \text{où les composantes de } \vec{\sigma} \text{ sont les matrices de Pauli,}$$

$$\beta = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix} \quad \text{où } I_2 \text{ est la matrice unité d'ordre 2.}$$

On rappelle que $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ et $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, avec $i^2 = -1$. La fonction d'onde $|\psi\rangle$ est alors un vecteur colonne de dimension 4 pouvant être mis sous la forme $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix}$ où ϕ_1 et ϕ_2 sont deux vecteurs colonne de dimension 2, appelés spineurs.

L'introduction d'un champ électromagnétique non quantifié, caractérisé par le potentiel vecteur \vec{A} et le potentiel scalaire V , impose de modifier l'expression de H_D en lui ajoutant la quantité $-eV$ (où $-e$ est la charge de l'électron) et en y remplaçant \vec{p} par $\vec{\pi} = \vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}$. On obtient :

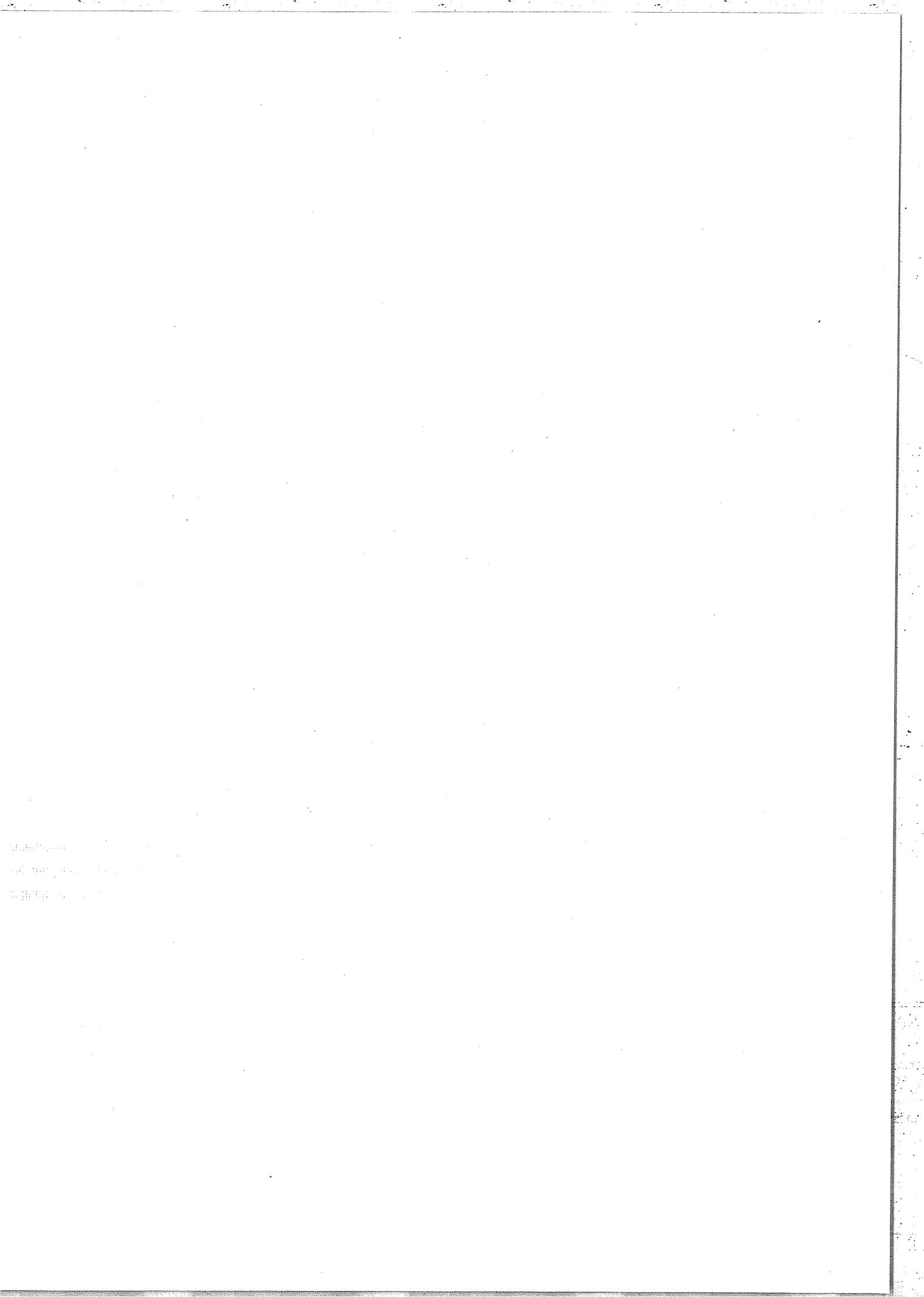
$$H_D = C\vec{\alpha} \cdot \vec{\pi} + \beta mC^2 - eV \quad (\text{I.15})$$

La fonction d'onde $|\psi\rangle$ correspondant à un état stationnaire d'énergie E est alors telle que ϕ_1 et ϕ_2 vérifient les équations suivantes :

$$\begin{cases} (E+eV-mC^2)\phi_1 - C(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})\phi_2 = 0 \\ -C(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})\phi_1 + (E+eV+mC^2)\phi_2 = 0 \end{cases} \quad (\text{I.16})$$

1.2. Interaction de Breit

L'étude de la structure atomique impose la prise en compte des interactions électroniques qui n'apparaissent pas dans l'hamiltonien de Dirac. Pour un atome à N électrons de



charge nucléaire faible, Breit a proposé l'hamiltonien suivant, appelé hamiltonien de Breit-Dirac :

$$H_{BD} = \sum_{i=1}^N \left(c \vec{\alpha}_i \cdot \vec{\pi}_i + \beta_i m c^2 - \frac{Ze^2}{r_i} \right) + \sum_{i<j=1}^N \frac{e^2}{r_{ij}} + H_B = H_D + H_C + H_B \quad (I.17)$$

où $H_D = \sum_{i=1}^N \left(c \vec{\alpha}_i \cdot \vec{\pi}_i + \beta_i m c^2 \right)$: H_D est la somme des hamiltoniens de Dirac ;
 $H_C = \sum_{i=1}^N \frac{-Ze^2}{r_i} + \sum_{i<j=1}^N \frac{e^2}{r_{ij}}$: H_C est la partie représentant les interactions coulombiennes ;

et $H_B = \sum_{i<j=1}^N \frac{-e^2}{2r_{ij}} \left[\vec{\alpha}_i \cdot \vec{\alpha}_j + \frac{1}{r_{ij}} \left(\vec{\alpha}_i \cdot \vec{r}_{ij} \right) \left(\vec{\alpha}_j \cdot \vec{r}_{ij} \right) \right]$ (I.18) :

l'opérateur effectif H_B représente une correction à l'interaction coulombienne limitée à l'ordre 2 en $(Z\alpha)$.

1.3. Hypothèse du champ central

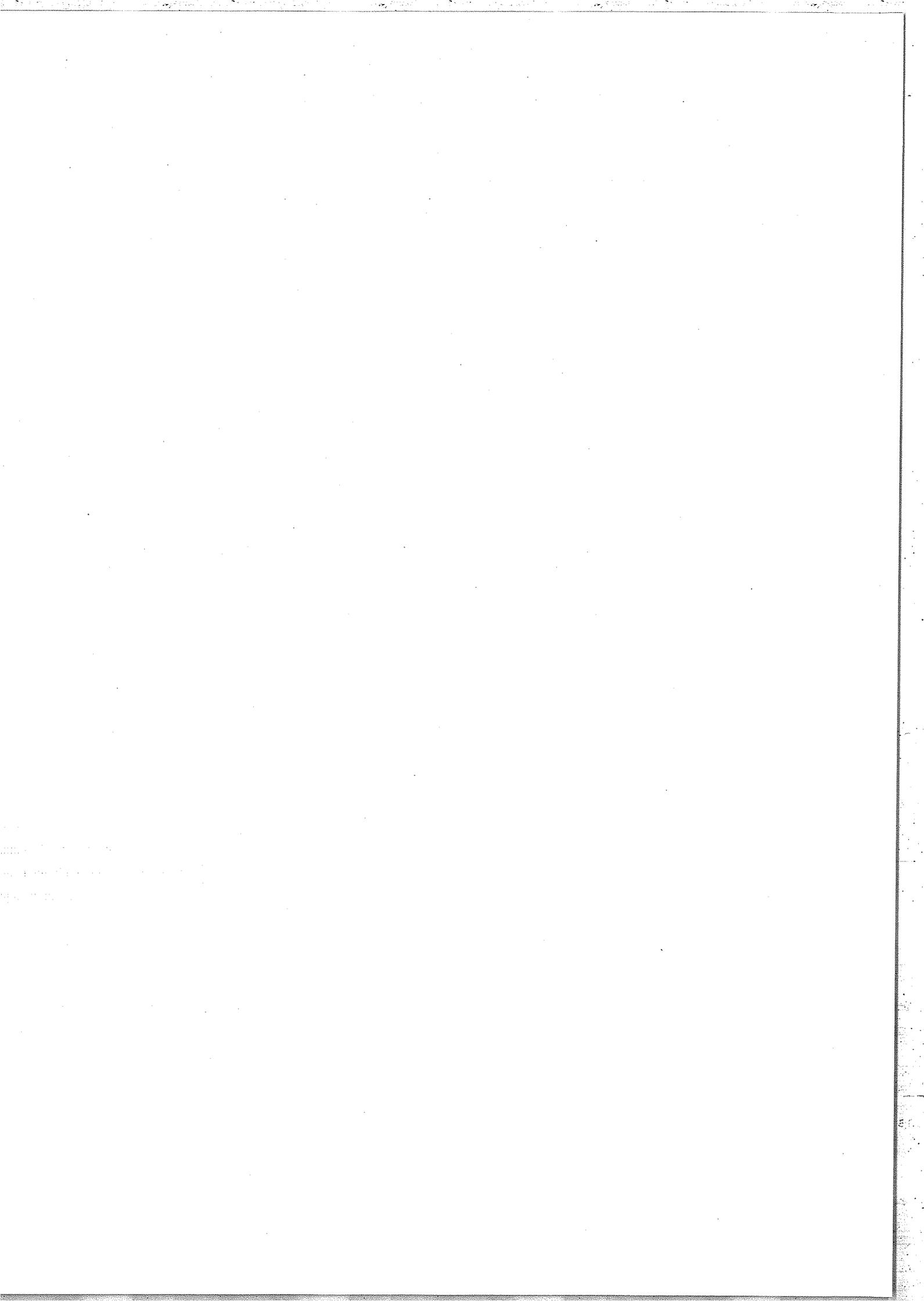
Le modèle du champ central, introduit par SLATER [14] et développé par CONDON et SHORTLEY [15] dans le cadre d'une théorie non relativiste, permet le regroupement des différentes parties de l'hamiltonien de Breit-Dirac en trois termes :

$$H_{BD} = H_0 + H_P + H_B \quad (I.19)$$

où $H_0 = \sum_{i=1}^N \left(c \vec{\alpha}_i \cdot \vec{\pi}_i + \beta_i m c^2 + V(r_i) \right) = \sum_{i=1}^N h_D(i)$
 $H_P = \sum_{i=1}^N \left(-V(r_i) - \frac{Ze^2}{r_i} \right) + \sum_{i<j=1}^N \frac{e^2}{r_{ij}}$

et H_B a l'expression donnée par la relation.

Le potentiel $V(r_i)$ doit être choisi de façon telle que $(H_P + H_B)$ puisse être considéré comme une perturbation faible de H_0 . On peut alors considérer qu'à l'ordre 0, chaque électron est placé dans un potentiel central $V(r)$.



1.3.1. Résolution à l'ordre zéro

Le problème se réduit à la résolution de N équations de Dirac monoélectroniques toutes identiques :

$$h_D(i) |\varphi_a(i)\rangle = \varepsilon_a |\varphi_a(i)\rangle \quad (I.20)$$

pour $i = 1, 2, \dots, N$

La fonction d'onde atomique $|\psi_0\rangle$, fonction propre de H_0 associée à l'énergie $E_0 = \sum_{k=1}^N \varepsilon_{a_k}$, est telle que :

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_{a_1}(1) & \varphi_{a_2}(1) & \dots & \varphi_{a_N}(1) \\ \varphi_{a_1}(2) & \varphi_{a_2}(2) & \dots & \varphi_{a_N}(2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \varphi_{a_1}(N) & \varphi_{a_2}(N) & \dots & \varphi_{a_N}(N) \end{vmatrix} \quad (I.21)$$

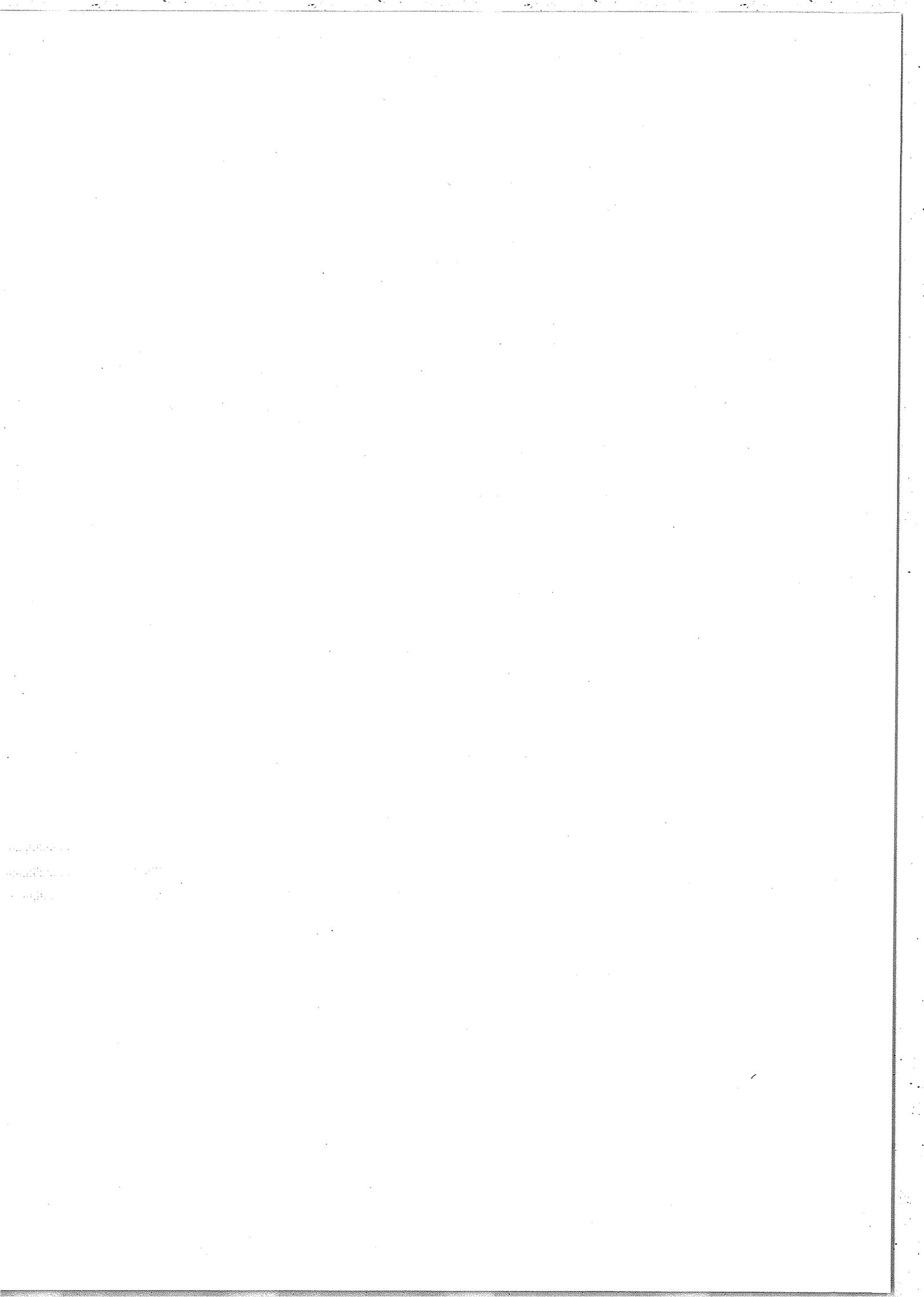
$|\psi_0\rangle$ est appelé état déterminantal.

Le moment cinétique total \vec{j}_i d'un électron i se définit par la relation :

$$\vec{j}_i = \vec{\ell}_i + \frac{1}{2} \vec{\sigma}_i \quad (I.22)$$

Le potentiel $V(r_i)$ étant central, $[h_D(i), \vec{j}_i] = 0$. Les fonctions monoélectroniques $|\varphi_a\rangle$ doivent d'autre part vérifier les équations (I.16). On démontre [16] qu'elles peuvent être exprimées en termes de fonctions propres $|\frac{1}{2} \ell jm\rangle$ de \vec{j}^2 et j_z , avec $j = \ell \pm \frac{1}{2}$, et être écrites sous la forme :

$$|\varphi_a\rangle = \begin{pmatrix} \frac{G(r)}{r} & |\frac{1}{2} \ell jm\rangle \\ i \frac{F(r)}{r} & |\frac{1}{2} \bar{\ell} jm\rangle \end{pmatrix} \quad (I.23)$$



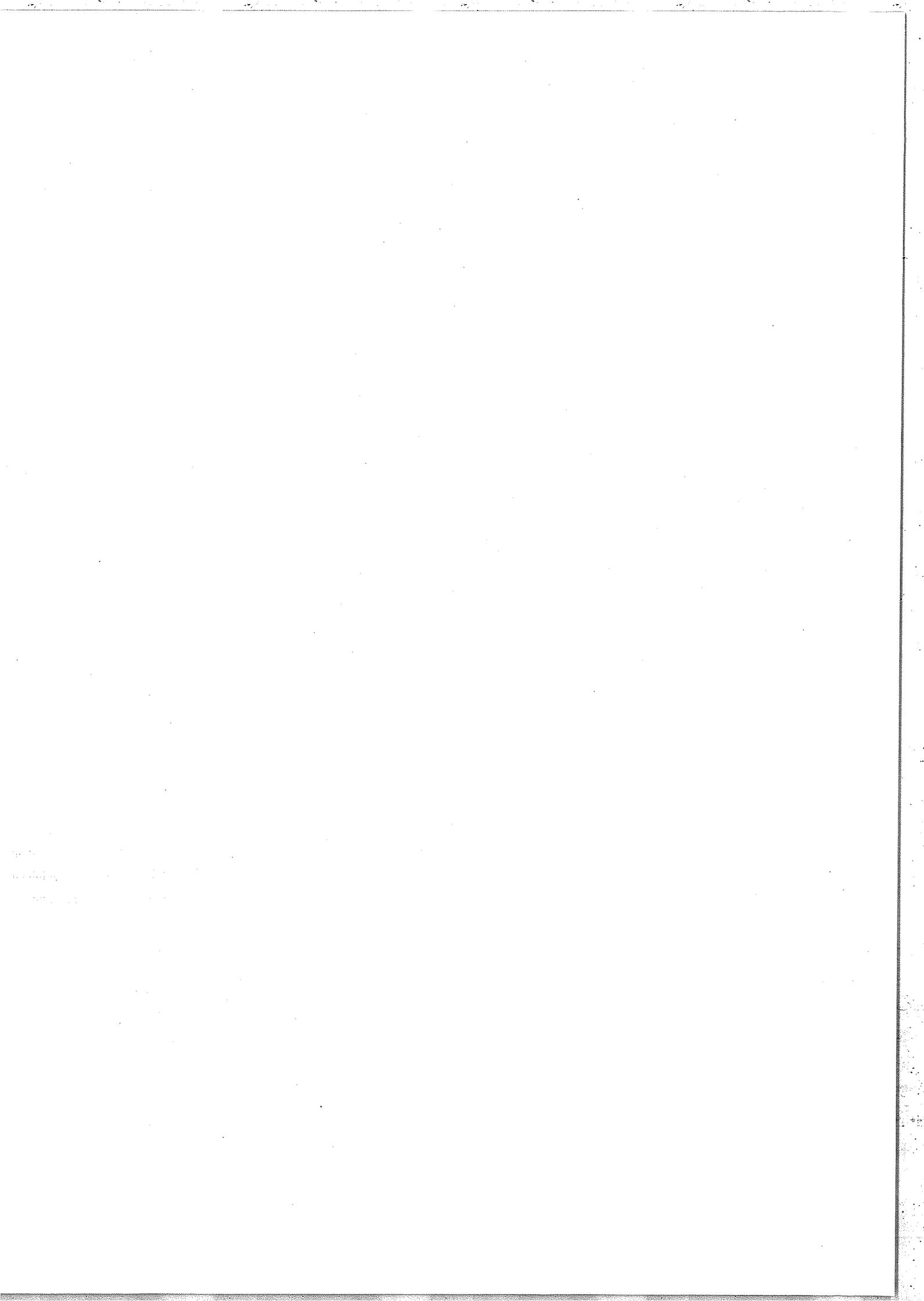
$$\text{avec } \begin{cases} \left(\left(\frac{d}{dr} + \frac{K}{r} \right) G(r) = \frac{1}{\hbar c} \left(mc^2 + \epsilon_a + eV(r) \right) F(r) \\ \left(\left(\frac{d}{dr} - \frac{K}{r} \right) F(r) = \frac{-1}{\hbar c} \left(mc^2 - \epsilon_a - eV(r) \right) G(r) \end{cases} \quad (\text{I.24})$$

$$\text{où } \bar{l} = 2j - l \text{ et } K = (-1)^{j+l+\frac{1}{2}} \left(j + \frac{1}{2} \right).$$

Le potentiel étant central, les énergies monoélectroniques et les fonctions radiales $F(r)$ et $G(r)$ correspondant à deux fonctions $|\varphi_a\rangle$ ne différant que par le nombre quantique m sont identiques. L'énergie totale E_0 est donc entièrement déterminée par la donnée de la liste des nombres quantiques n, l et j de tous les électrons. Cette liste est appelée configuration relativiste. A chaque trio (n, l, j) peuvent correspondre au plus $(2j+1)$ électrons. Dans la suite de ce travail, le terme de configuration sera employé pour distinguer, comme dans la théorie classique, la liste des nombres quantiques n et l de tous les électrons de l'atome dans un état déterminantal donné. La notation $n l^N$ désignera donc l'ensemble des configurations relativistes $\left(n, l, l - \frac{1}{2} \right)^{N_1} \left(n, l, l + \frac{1}{2} \right)^{N_2}$ avec $N_1 + N_2 = N$, $N_1 \leq 2l$ et $N_2 \leq 2l + 2$. Ces configurations relativistes seront appelées sous-configurations.

1.3.2. Corrections d'ordres supérieurs

La correction apportée par l'hamiltonien perturbateur $(H_p + H_B)$ à l'énergie totale E_0 est obtenue par sa diagonalisation sur la base des états déterminantaux dont il faut donc déterminer auparavant les fonctions radiales par la résolution d'équations du type (I.24). Cette résolution nécessite le choix de potentiels $V(r)$. Nous présentons dans notre deuxième partie deux méthodes que nous avons utilisées.



2. DETERMINATION DES FONCTIONS RADIALES RELATIVISTES

Nous exposons ici deux méthodes numériques de détermination des fonctions d'onde relativistes dites méthode du potentiel paramétrique et méthode Hartree-Fock relativiste.

2.1. Méthode du potentiel paramétrique [17,18]

Dans cette méthode, le potentiel central $V(r)$, apparaissant dans les équations (I.24), est décrit par une fonction analytique dépendant d'un jeu limité de paramètres $\{\theta\}$. KLAPISCH [19] a proposé la forme suivante :

$$V(r) = \frac{e}{r} \left[\sum_{n,\ell} q_{n\ell} f_{n\ell}(r) + Z - N + 1 \right] \quad (\text{I.25})$$

où $q_{n\ell}$ est le nombre d'occupation de la sous-couche $n\ell$ et

$$f_{n\ell}(r) = e^{-\theta_{n\ell} r} \sum_{t=0}^{2\ell+1} \left(1 - \frac{t}{2\ell+2} \right) \frac{1}{t!} \left(\theta_{n\ell} r \right)^t \quad (\text{I.26})$$

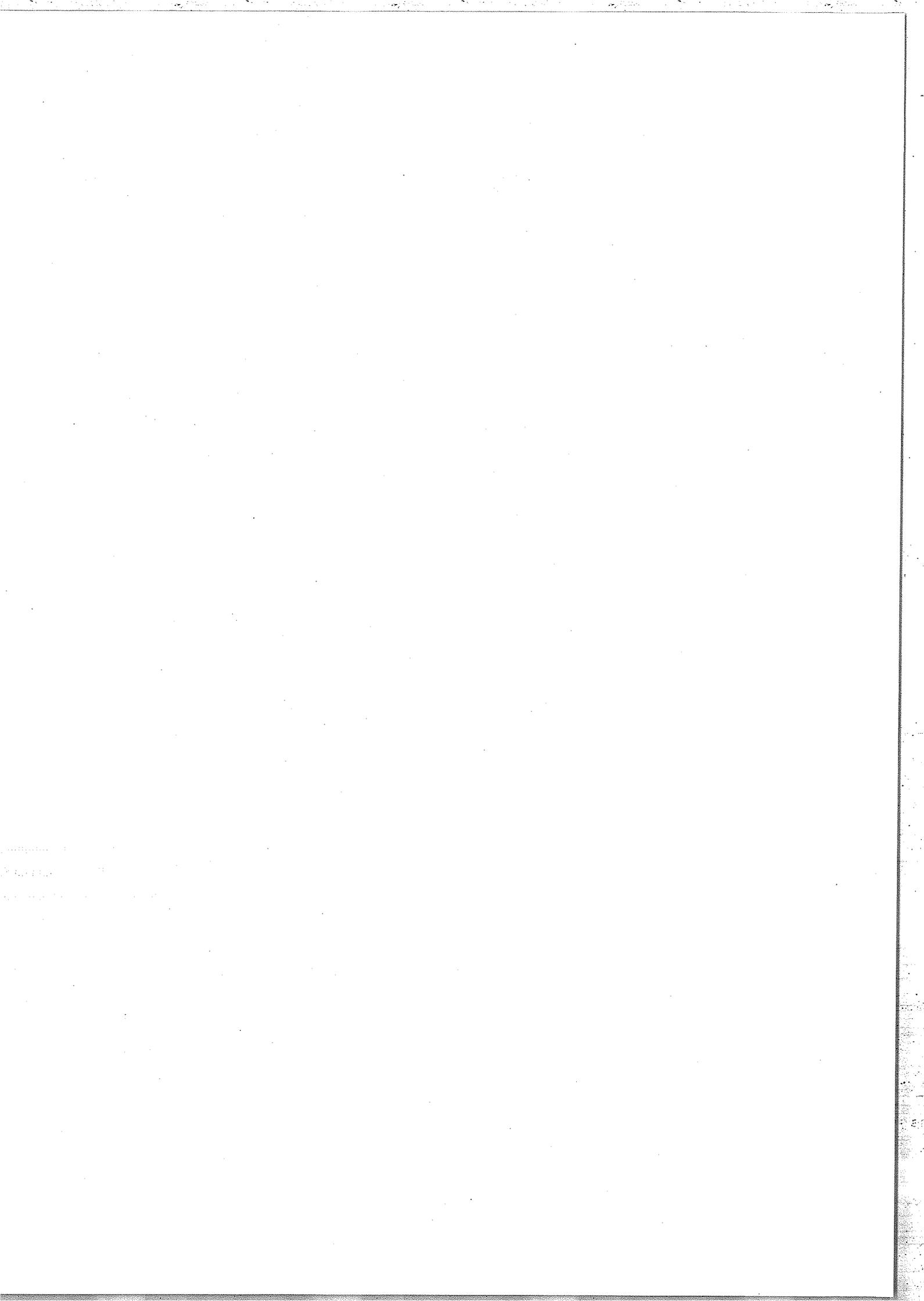
La forme de ce potentiel revient à considérer que la densité radiale de charge $D(r)$ dans une sous-couche est donnée par le carré d'une fonction de Slater sans noeud :

$$D(r) \sim \left(r^{\ell+1} e^{-\frac{1}{2}\theta_{n\ell} r} \right)^2.$$

Dans le but de limiter le nombre de paramètres, Klapisch a proposé pour $\theta_{n\ell}$ l'expression empirique suivante :

$$\theta_{n\ell} = \frac{\theta_n (\ell+1)}{1-0,03 \ell (\ell+1)} \quad (\text{I.27})$$

Le potentiel $U(r)$ correspond bien à l'idée intuitive d'un électron interagissant avec un nuage constitué du noyau et des autres électrons. Le jeu de paramètres $\{\theta\}$ est obtenu par minimisation de l'énergie moyenne totale de configurations choisies, calculée au premier ordre. Cette optimisation est effectuée par le programme RELAC [20] selon l'algorithme suivant :

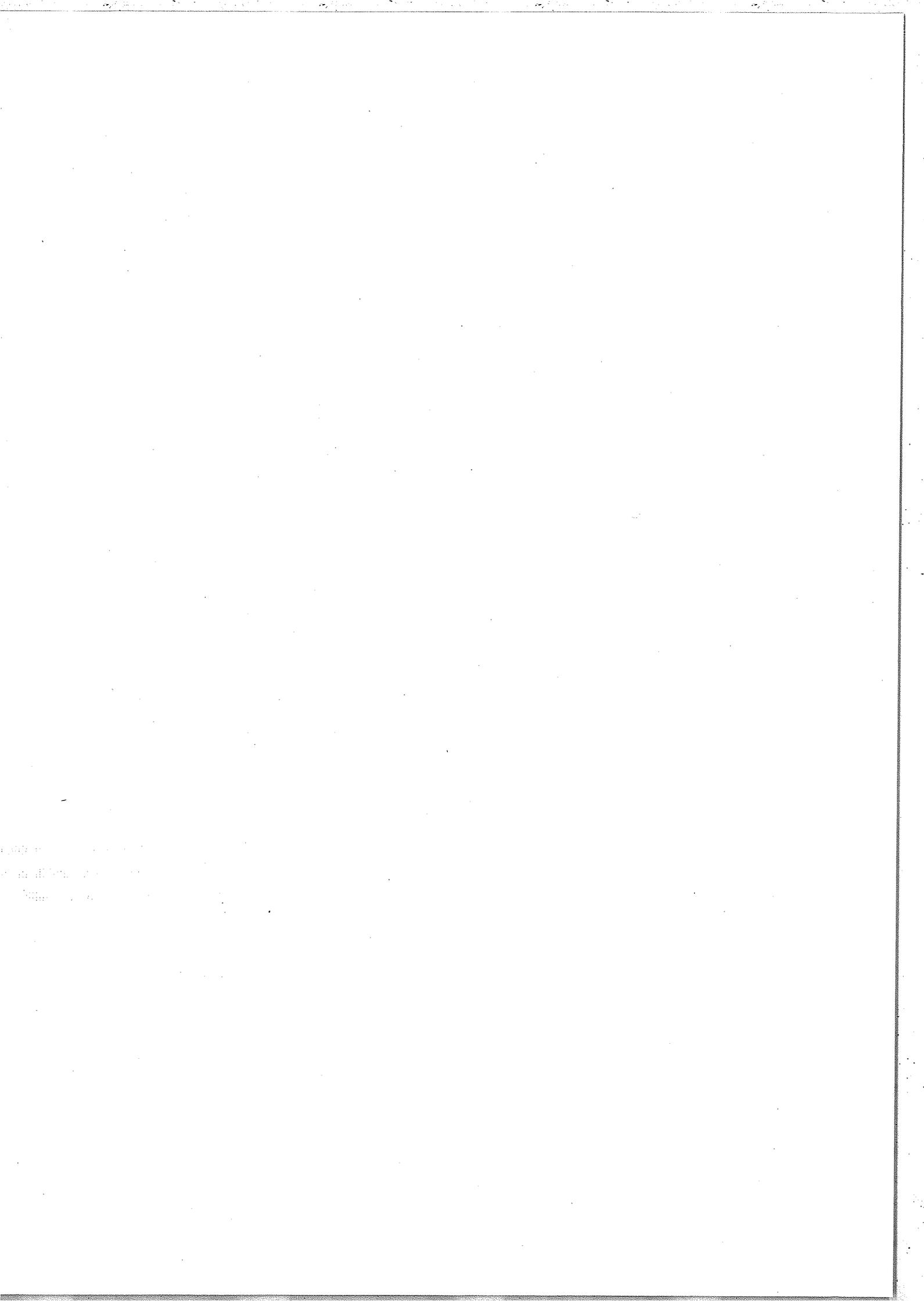


- ① Calcul numérique du potentiel $U(\{\theta_k\}, r)$ point par point
- ② Obtention des fonctions radiales F et G par résolution du système (I.24) selon la méthode proposée par DESCLAUX [21]
- ③ Calcul des énergies moyennes des configurations étudiées, nécessitant le calcul d'intégrales radiales monoélectroniques (par la méthode de Simpson) et diélectroniques (par la méthode de Froese)
- ④ Calcul de l'énergie moyenne totale. Si elle est minimale, aller en ⑥
- ⑤ Choix d'un nouveau jeu de paramètres $\{\theta_{k+1}\}$. Aller en ①
- ⑥ $U(\{\theta_k\}, r)$ est le potentiel optimal.

Les étapes ④ et ⑤ utilisent l'algorithme du "Simplex non linéaire" [22]. La liste des intégrales radiales et les valeurs de leurs coefficients, nécessaires à l'étape ③, sont fournies par le programme de GRANT [23]. J'ai moi-même adapté ce programme, amélioré par KLAPISCH [24], à l'ordinateur UNIVAC 1110 du Centre de Calcul de l'Université Paris XI.

2.2. Méthode de Hartree-Fock relativiste

La méthode Hartree-Fock [25,26] consiste en un calcul simultané de toutes les fonctions radiales électroniques de façon "auto-cohérente". Ces fonctions sont déterminées par minimisation de la quantité $E = \langle \psi | H | \psi \rangle$, qui est identifiée en fin de calcul à l'énergie totale de l'atome. L'utilisation de cette méthode impose d'effectuer un calcul par niveau d'énergie pour obtenir les "meilleures" énergies, ce qui n'est pas le cas de la méthode du potentiel paramétrique.



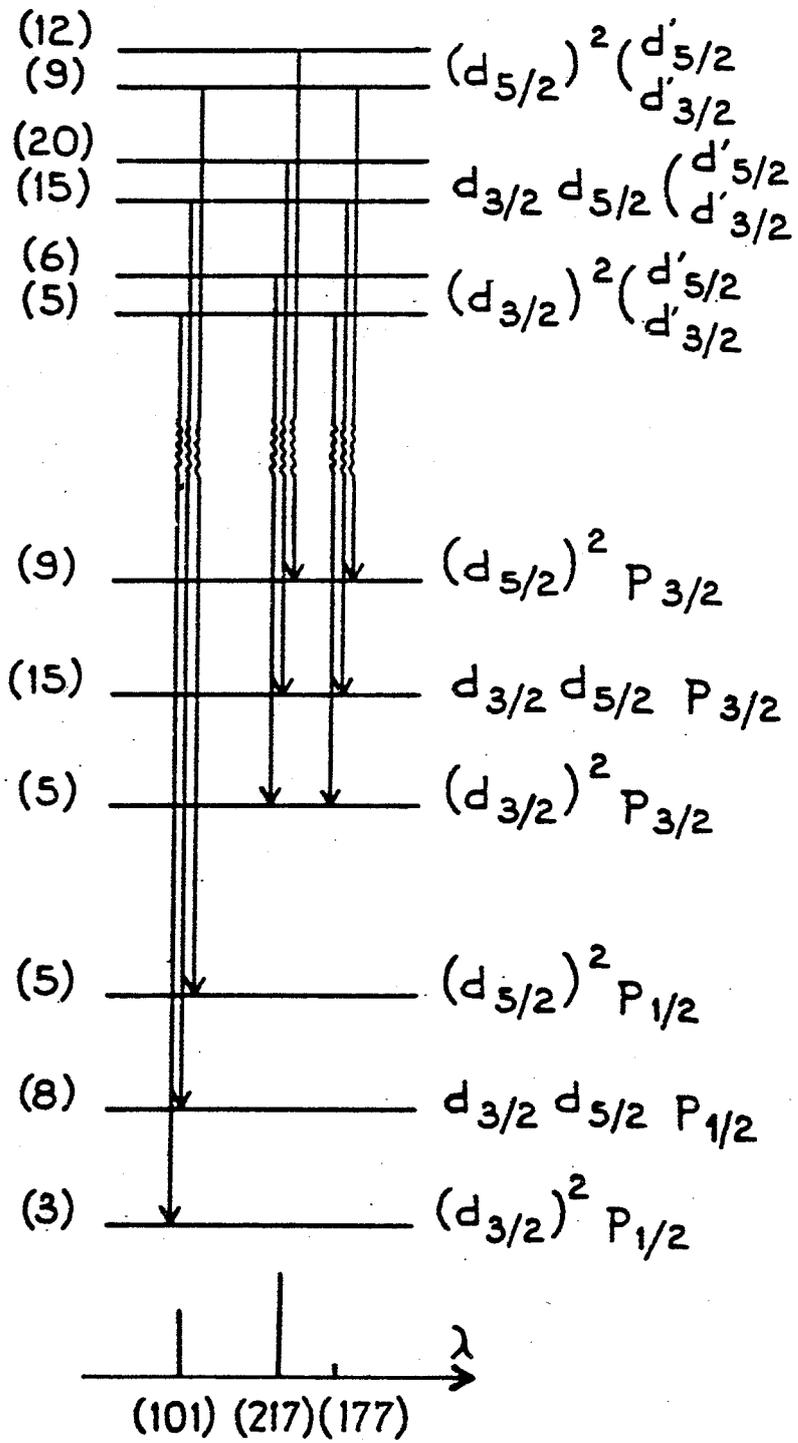
Cependant, cette dernière méthode introduit, avant toute optimisation, une forme de potentiel arbitraire. Nous avons donc voulu confronter les résultats obtenus par les deux méthodes. Le programme de détermination des énergies atomiques par la méthode Hartree-Fock relativiste a été mis au point par DESCLAUX [27]. L'utilisation que nous en avons faite est décrite dans la deuxième partie de ce travail.

3. SOUS-FAISCEAUX NON RESOLUS

Il arrive fréquemment, sur les spectres photographiques de plasmas aux courtes longueurs d'onde (5 à 200 Å), que l'ensemble des raies d'émission spontanée entre deux configurations, c'est-à-dire un faisceau de transitions, ne soit pas résolu. On n'observe alors qu'un seul pic plus ou moins large, résultant de la superposition des raies individuelles. La largeur à mi-hauteur d'un tel pic dépend extrêmement peu de celle des raies individuelles (due à l'effet Doppler, à l'effet Stark, à l'effet des collisions, à la limite de résolution expérimentale, etc ...) qui est la cause de leur "fusion" en un seul pic ; elle est presque uniquement la conséquence de la distribution des nombres d'ondes des raies, pondérée par leur intensité. La moyenne et la variance de cette distribution ont pu être écrites par BAUCHE-ARNOULT, BAUCHE et KLAPISCH [28,29] sous forme de formules compactes contenant les intégrales radiales de Slater et de spin-orbite, pour tous les types de faisceaux possible. Rappelons que la moyenne μ_1 d'une distribution est son moment d'ordre 1, et la variance σ^2 son moment centré d'ordre 2 (c'est-à-dire aussi, $\sigma^2 = (\mu_2 - (\mu_1)^2)$).

Plus récemment, les mêmes auteurs ont étudié le cas où un faisceau de transitions apparaît non pas sous forme d'un seul pic, mais décomposé en deux ou trois pics distants et plus étroits, appelés sous-faisceaux. Ce cas est celui où les intégrales de spin-orbite sont nettement plus grandes

FIGURE 3



que les intégrales de Slater. C'est en particulier celui des transitions dans les atomes lourds très ionisés, puisqu'il est bien connu que, dans l'hypothèse des fonctions radiales hydrogénoïdes, les intégrales de Slater sont proportionnelles à Z et celles de spin-orbite à Z^4 . La figure 3 montre, à titre d'exemple - comment les configurations d^2p et d^2d' se trouvent décomposées chacune en six sous-configurations quand les intégrales de spin-orbite ζ_d , ζ_p et $\zeta_{d'}$ sont beaucoup plus grandes que les intégrales de Slater (pour la simplicité du schéma, ces dernières ont même été supposées nulles) ; - comment le faisceau se trouve alors décomposé en trois pics d'intensités différentes, dont chacun résulte de la superposition de trois sous-faisceaux.

Dans la deuxième partie, nous avons utilisé les formules disponibles [30] pour donner une interprétation de pics bien typés du spectre de l'or.

1. The first part of the document is a list of names and addresses of the members of the committee.

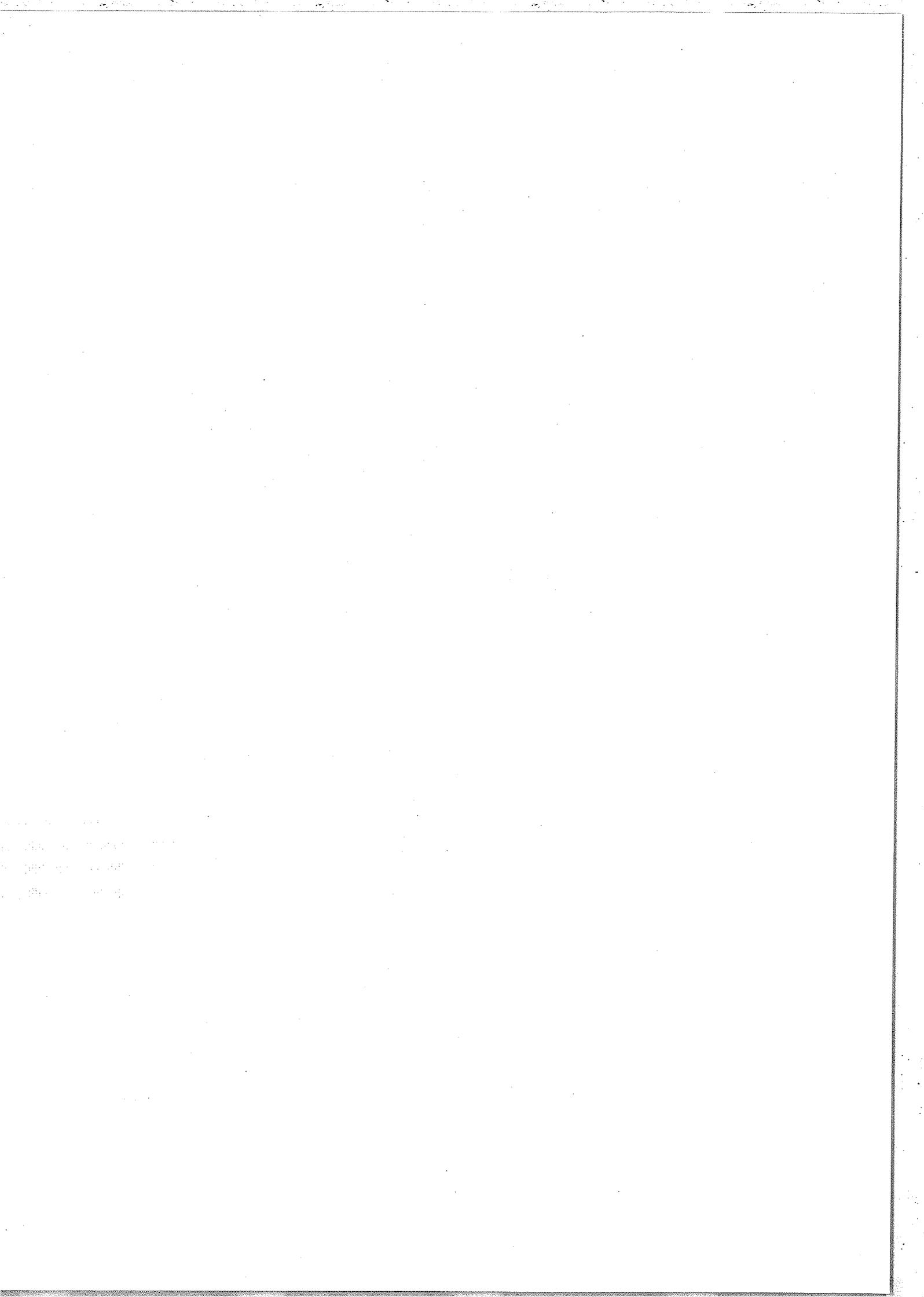
III. TRAVAUX D'ANALYSES DE SPECTRES DE PLASMAS LASER SERVANT DE REFERENCES A NOTRE ETUDE

Nous avons remarqué, dans le chapitre I, la similitude existant entre l'enregistrement du spectre de l'or que nous étudions et le spectre du gadolinium ($Z = 64$) enregistré par BURKHALTER et al. [11] à des longueurs d'onde voisines de 10 \AA . Les travaux de ces auteurs ont également porté sur le samarium ($Z = 62$) et le dysposium ($Z = 66$), et ont été suivis par les études de spectres d'atomes plus lourds ($Z = 69$ à $Z = 78$) effectuées dans le même domaine de longueurs d'onde par ZIGLER et al. [31], KLAPISCH et al. [32], et MANDELBAUM et al. [6,7]. Ces études ont en commun avec la nôtre le fait qu'elles concernent des atomes relativement lourds ($60 < Z < 80$) et un domaine de longueurs d'ondes restreint (4 à 11 \AA), et qu'elles sont menées au moyen de méthodes de calculs a priori des énergies atomiques. Pour chacun des spectres analysés, l'importance des transitions dans les ions appartenant à la série isoélectronique du nickel (28 électrons) a été mise en évidence. Nous exposons dans ce chapitre l'ensemble des résultats obtenus.

1. TRANSITIONS DANS LES IONS DE LA SERIE DU NICKEL

1.1. Spectres de Sm, Gd et Dy

Les identifications des raies principales des spectres de Sm, Gd et Dy ont été réalisées à l'aide du programme de LIBERMAN et al. [33], basé sur la méthode du champ auto-cohérent. Les résultats obtenus ont été comparés aux valeurs expérimentales déduites des spectres après leur étalonnage utilisant les raies de sodium, du magnésium et de l'aluminium (ces éléments ont été introduits dans les cibles sous la forme de couches de leur oxyde). BURKHALTER et



al. ont pu ainsi identifier des raies dues aux transitions $3d^{10}-3d^9np$ et $3d^{10}-3d^9nf$, avec $n = 4, 5$ ou 6 , dans les ions appartenant à la série isoélectronique du nickel. Dans le cas des transitions $3d^{10}-3d^94p$ et $3d^{10}-3d^94f$, ils ont comparé leurs résultats aux valeurs obtenues par extrapolation des transitions $3d-4p$ et $3d-4f$ observées antérieurement dans des ions moins chargés appartenant à la même séquence. L'accord entre ces différentes valeurs est correct à 1 ou 2 % près.

1.2. Spectres d'atomes plus lourds

Les travaux de BURKHALTER et al. ont été étendus par ZIGLER et al. aux spectres du hafnium ($Z = 72$), du tantale ($Z = 73$), du tungstène ($Z = 74$) et du rhénium ($Z = 75$). Ces auteurs ont pu y identifier des raies correspondant aux transitions $3p-4s$, $3p-4d$, $3d-4p$ et $3d-4f$ en calculant a priori, grâce au programme RELAC, leurs longueurs d'onde et leurs intensités. Deux potentiels paramétriques ont été optimisés pour chaque ion de la série du nickel, l'un pour la configuration fondamentale $3d^{10}$, l'autre pour toutes les configurations excitées. Un couplage très proche du couplage jj a été observé pour tous les niveaux, excepté les niveaux supérieurs de la transition $3d-4f$.

1.3. Synthèse des résultats obtenus

ZIGLER et al. ont montré empiriquement, en rassemblant leurs résultats et ceux de BURKHALTER et al., que les énergies E des raies $3p_{3/2}-4s_{1/2}$, $3d_{3/2}-4f_{5/2}$, $3d_{5/2}-4f_{5/2}$, $3d_{5/2}-4f_{7/2}$, $3d_{3/2}-4p_{1/2}$, $3d_{3/2}-4p_{3/2}$ et $3d_{5/2}-4p_{3/2}$, observées dans les sept spectres, peuvent être considérées comme des fonctions polynomiales de degré 2 en Z , nombre de charge de l'atome considéré, dont les termes constants sont nuls : un schéma représentant pour chaque transition les sept points $(\frac{E}{Z}, Z)$ permet en effet de constater, en très bonne approxima-

000000
000000
000000

tion, l'alignement de ces points.

La figure 4 reproduit les schémas correspondant aux sept transitions.

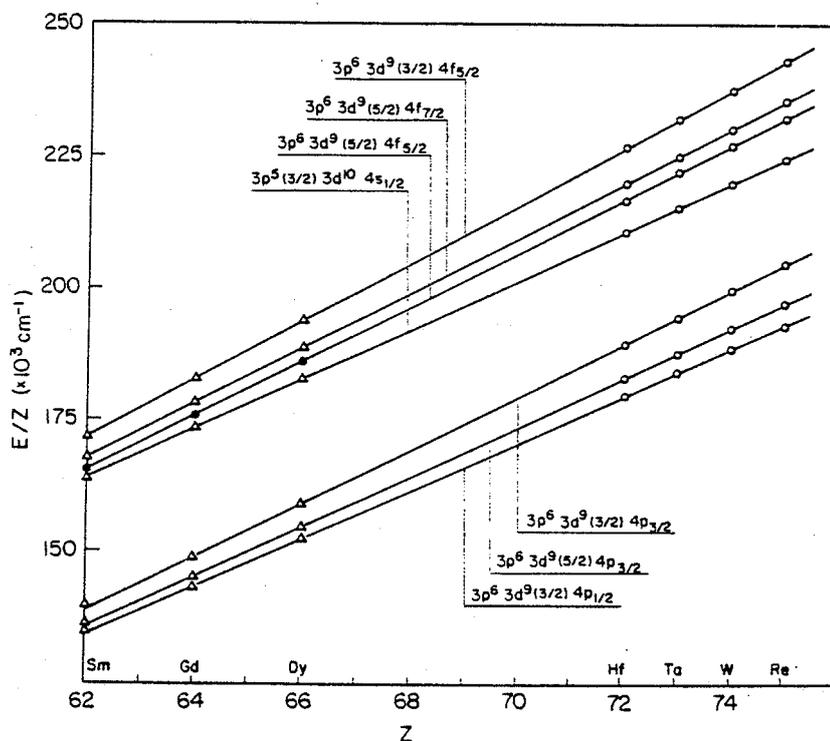


FIGURE 4

2. TRANSITIONS DANS LES AUTRES IONS

2.1. Ions de la série du cobalt

La figure 2 reproduit l'enregistrement du spectre de gadolinium obtenu par BURKHALTER et al. Outre les transitions dans l'ion Gd^{+36} , qui appartient à la série du nickel, cette figure fait apparaître des raies dues à des transitions analogues dans l'ion Gd^{+37} , qui appartient à la série du cobalt (27 électrons). Ces raies ont été identi-



fiées de la même façon que les raies de l'ion Gd^{+36} .

KLAPISCH et al., puis MANDELBAUM et al. ont limité l'étude des ions de la série du cobalt au calcul par le programme RELAC de la transition $3d^9-3d^84p$ dans les ions Tm^{+42} , Yb^{+43} , Hf^{+45} , Ta^{+46} , W^{+47} , Re^{+48} . La figure 5 reproduit les enregistrements correspondants. On observe que plus le numéro atomique de l'élément est grand, plus les intensités des raies $3d^{10}-3d^94p$ s'affaiblissent relativement aux intensités des raies émises par les ions de la série du nickel.

2.2. Ions des séries du cuivre et du zinc

Les enregistrements présentés par les figures 2 et 5 font apparaître des structures (juxtaposition de raies) qui ne peuvent être interprétées par les transitions évoquées précédemment. KLAPISCH et al. puis MANDELBAUM et al. ont alors étudié la transition $3d-4p$ dans les ions de la série du cuivre (29 électrons) [6,32], puis du zinc (30 électrons) [6], pour les éléments dont les spectres sont présentés sur la figure 5. Plus récemment, MANDELBAUM et al. [7] ont calculé les transitions $3p-4s$ et $3p-4d$ dans les ions correspondant à ces éléments et appartenant à la série isoélectronique du cuivre. L'ensemble des calculs ont été effectués à l'aide du programme RELAC. Ils permettent d'interpréter les spectres de façon satisfaisante.

1947
1948
1949

FIGURE 5

Spectres de différents plasmas produits par impact laser

(a=Tm, b=Yb, c=Hf, d-Ta, e=W, f=Re, g=Pt ; les lettres capitales, minuscules et grecques repèrent les raies émises respectivement par les ions des séries isoélectroniques du cobalt, du cuivre et du zinc .)

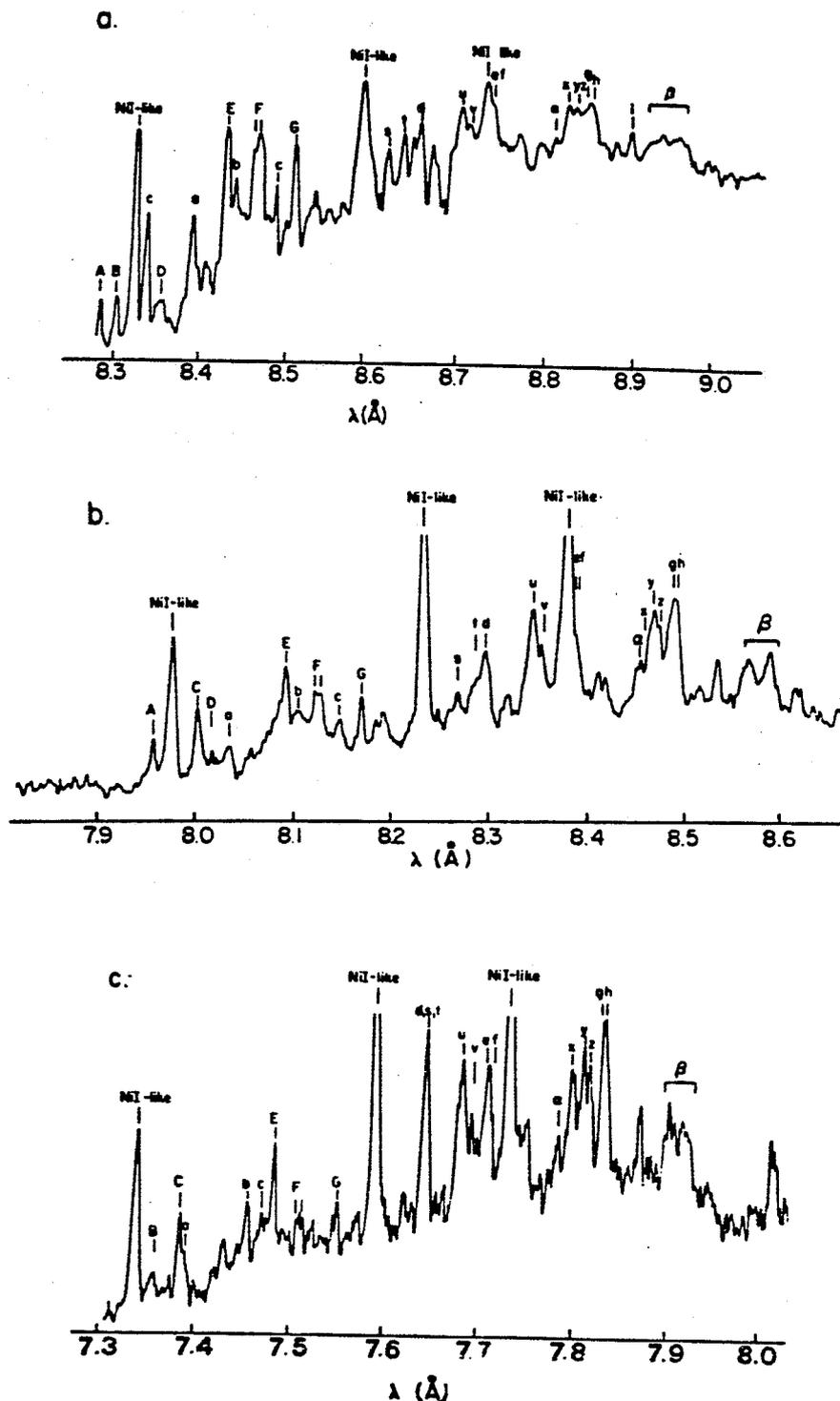




FIGURE 5 (Suite)

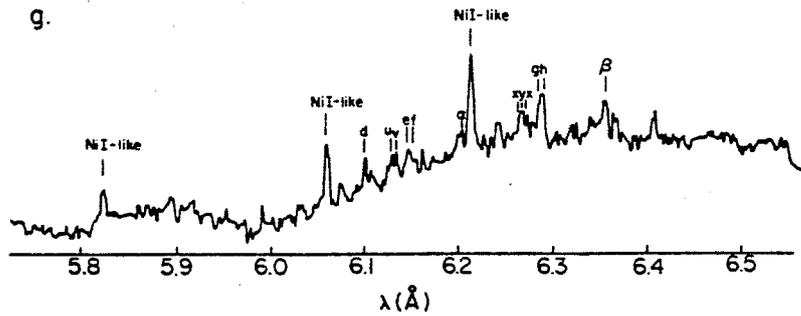
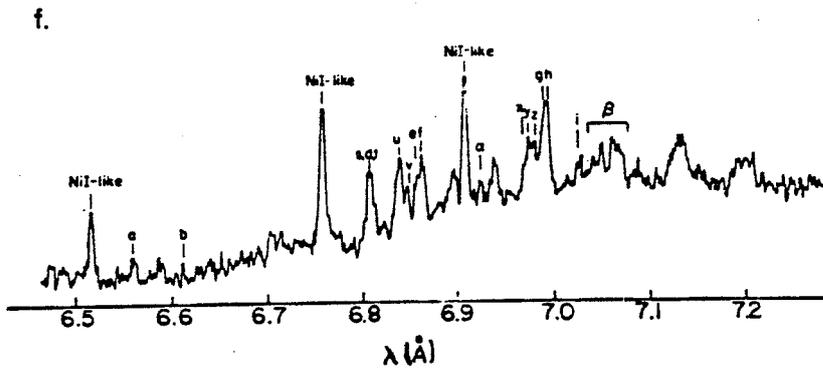
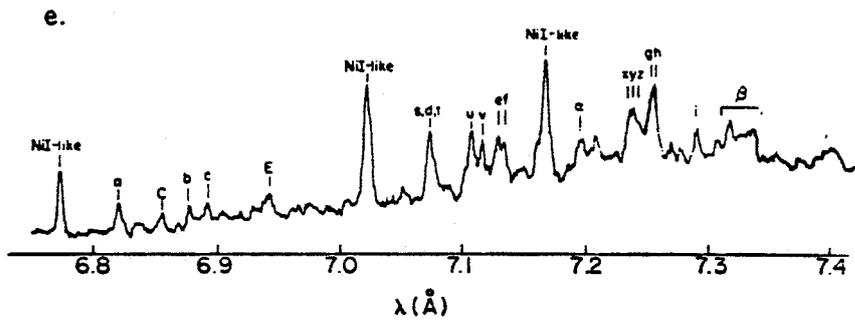
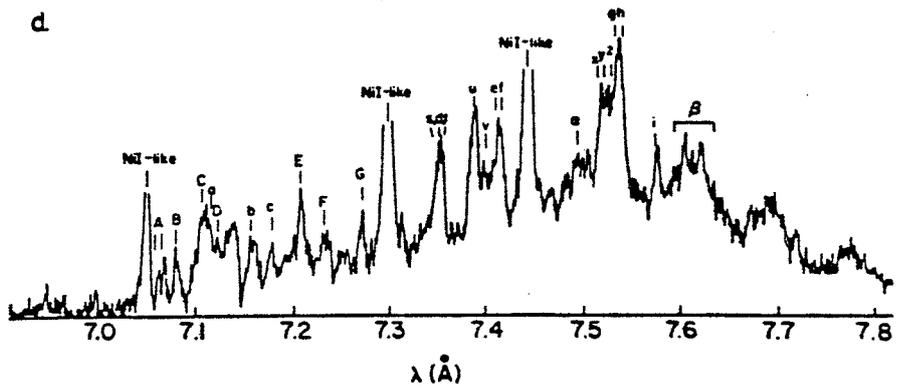
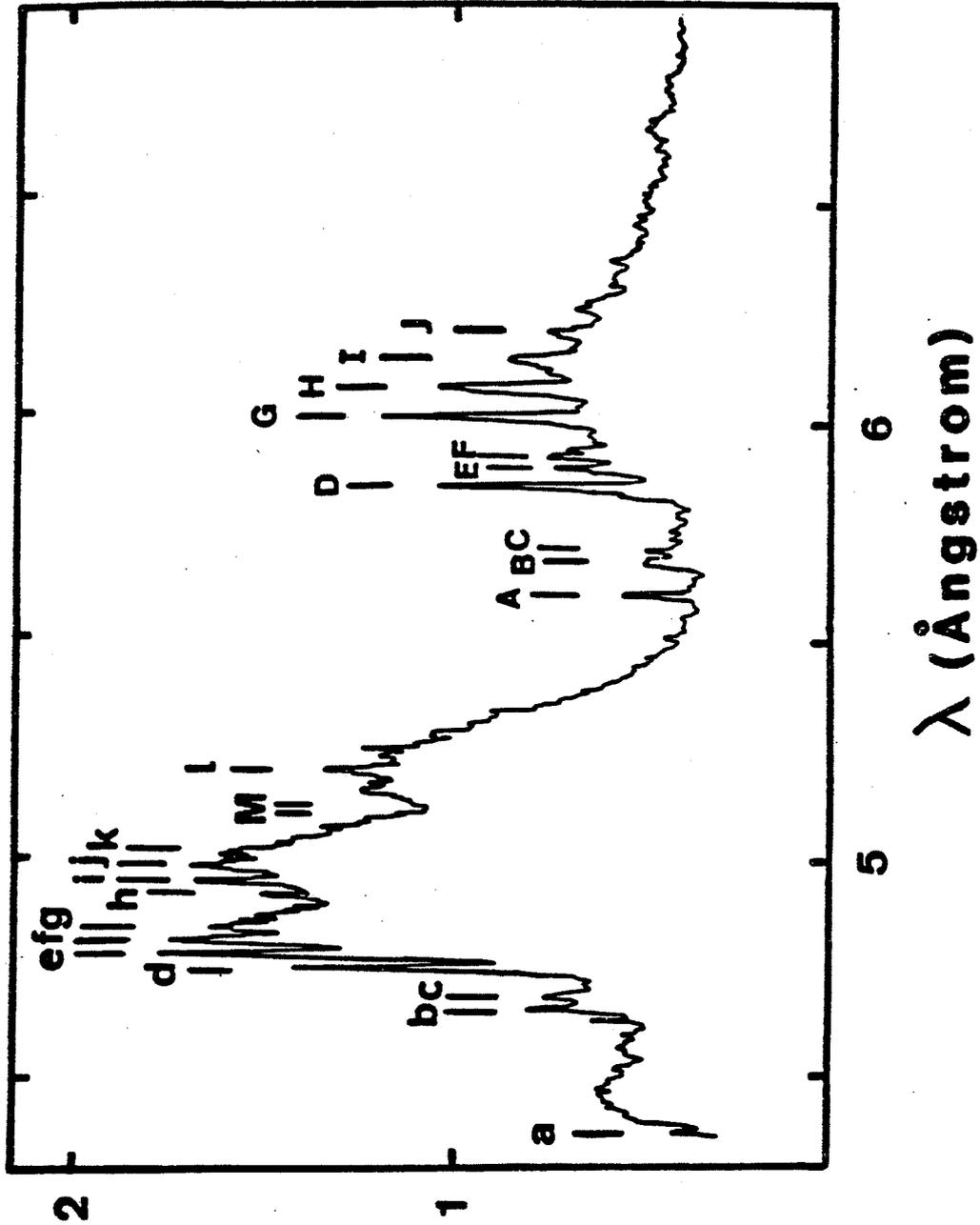
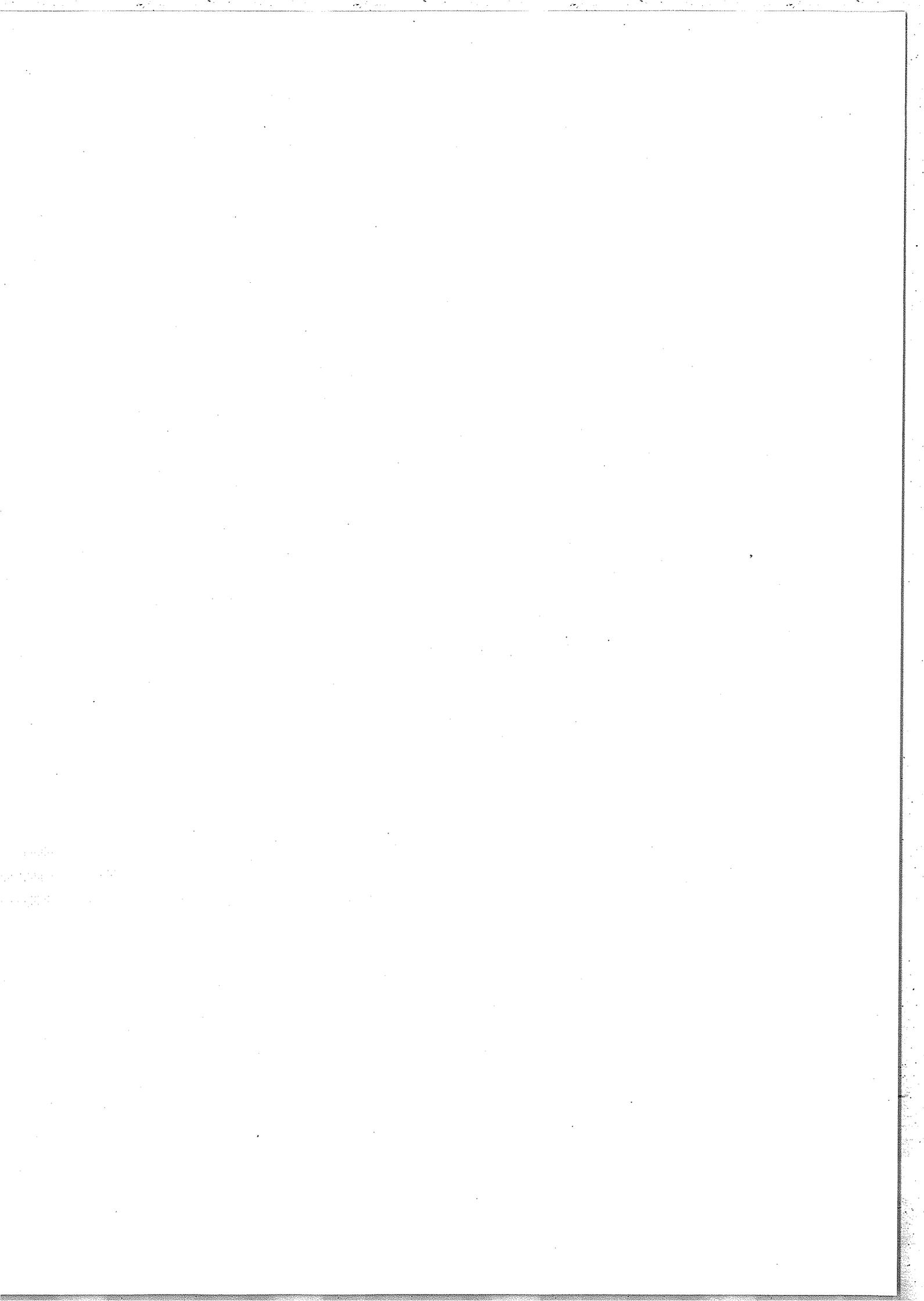




FIGURE 6

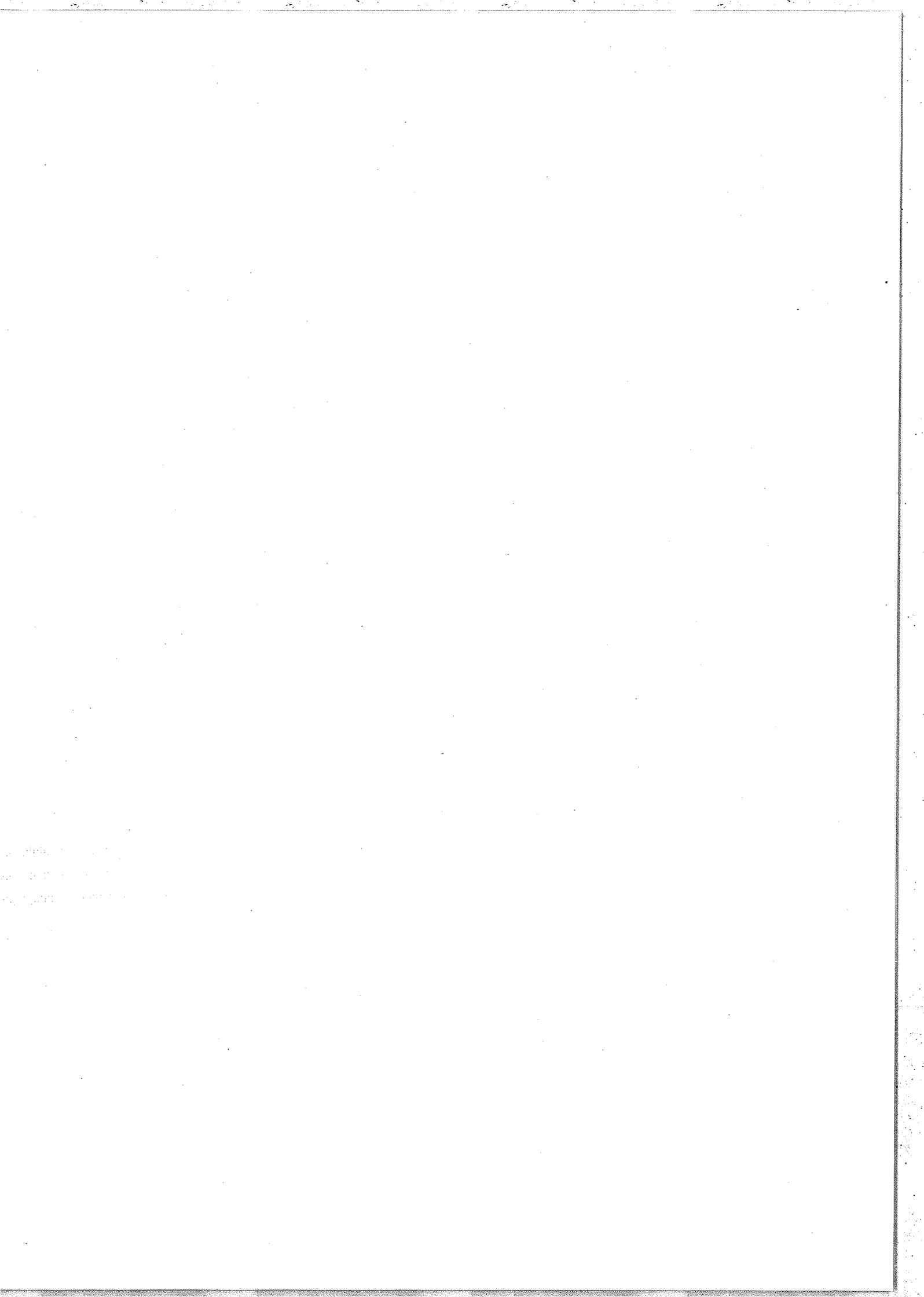
Enregistrement du spectre de l'or et pics identifiés dans la deuxième partie





3. CONCLUSION

Les études exposées dans ce chapitre nous ont suggéré la marche à suivre pour l'interprétation du spectre de l'or. Les travaux présentés dans le paragraphe 1 nous incitent à rechercher d'abord l'interprétation des raies principales par le calcul des transitions 3p-4s, 3d-4p et 3d-4f dans l'ion Au^{+51} qui appartient à la série isoélectronique du nickel. Les études résumées dans le paragraphe 2 nous invitent quant à elles à considérer les transitions analogues dans les ions appartenant aux séries isoélectroniques du cobalt, du cuivre et du zinc. Le programme RELAC semble être parfaitement indiqué pour ce travail qui fait l'objet de notre deuxième partie.



DEUXIEME PARTIE

ETUDE DU SPECTRE DE L'OR



Nous avons décrit dans la première partie l'ensemble des méthodes d'analyse des spectres de plasma, permettant de déterminer les divers degrés d'ionisation y intervenant ainsi que les longueurs d'onde et les intensités des raies émises. Nous avons d'autre part évoqué les premiers travaux déjà parus sur des spectres analogues. Nous décrivons dans cette deuxième partie l'application de ces méthodes au spectre de l'or dont l'enregistrement, effectué par M. BUSQUET est reproduit sur la figure 6. Un spectre de l'or a été obtenu avant nous par BURKHALTER et al. [44] par fil explosé. Son enregistrement est reproduit sur la figure 7. La résolution de cet enregistrement n'est cependant pas suffisante pour permettre d'en donner une interprétation détaillée.

Dans un premier chapitre, nous nous intéressons à l'ion Au^{51+} appartenant à la série isoélectronique du nickel dont le rôle prépondérant a été mis en évidence dans la première partie. Les chapitres suivants concernent les autres ions de degrés d'ionisation inférieurs et supérieurs. Les résultats des calculs effectués sur les transitions décrites dans cette partie sont rassemblés dans le tableau I que nous présentons à la fin du chapitre I.

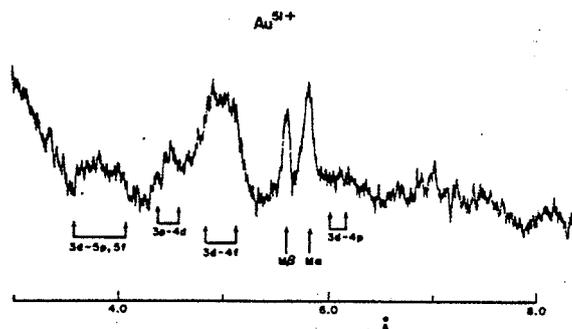
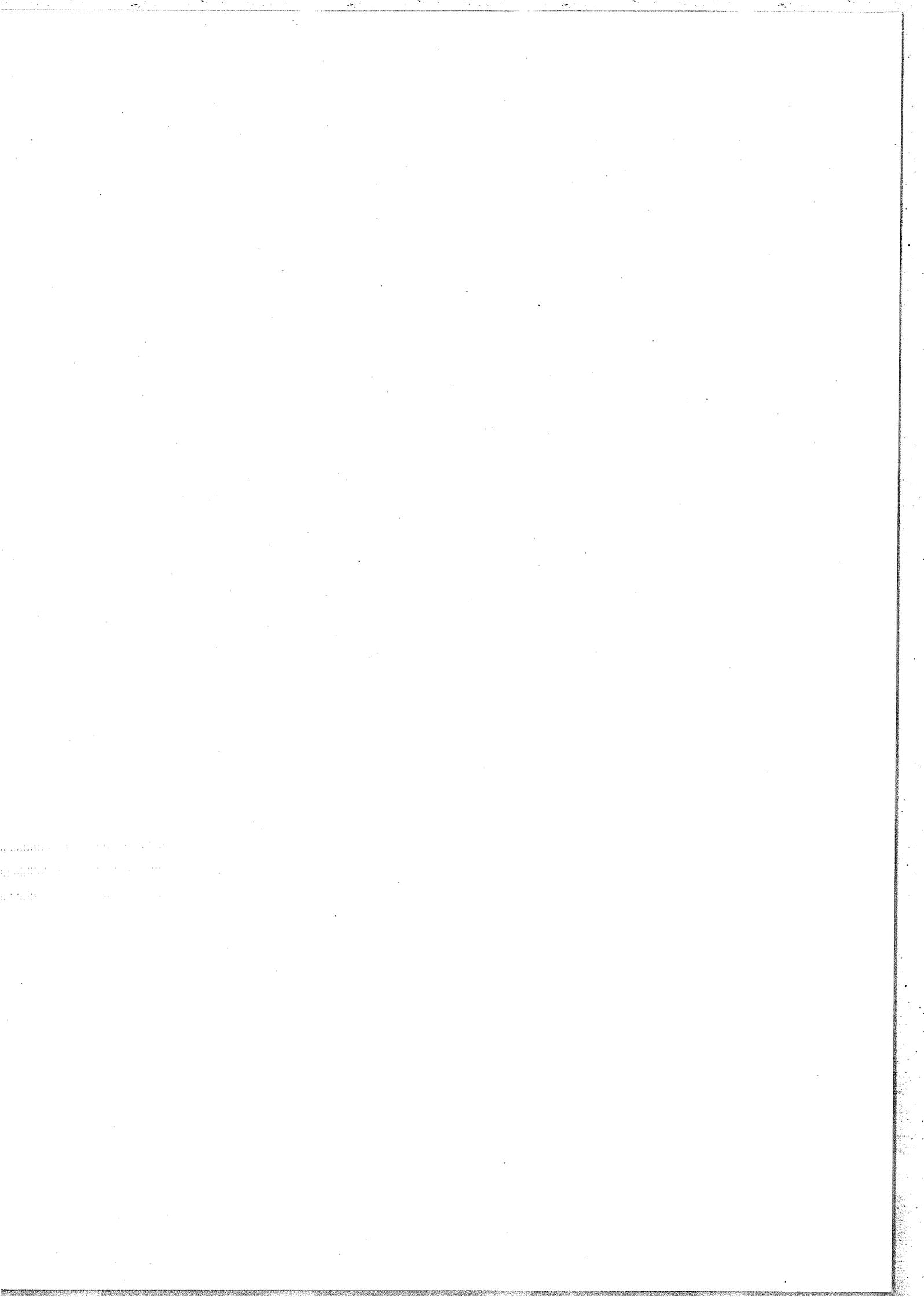


FIGURE 7



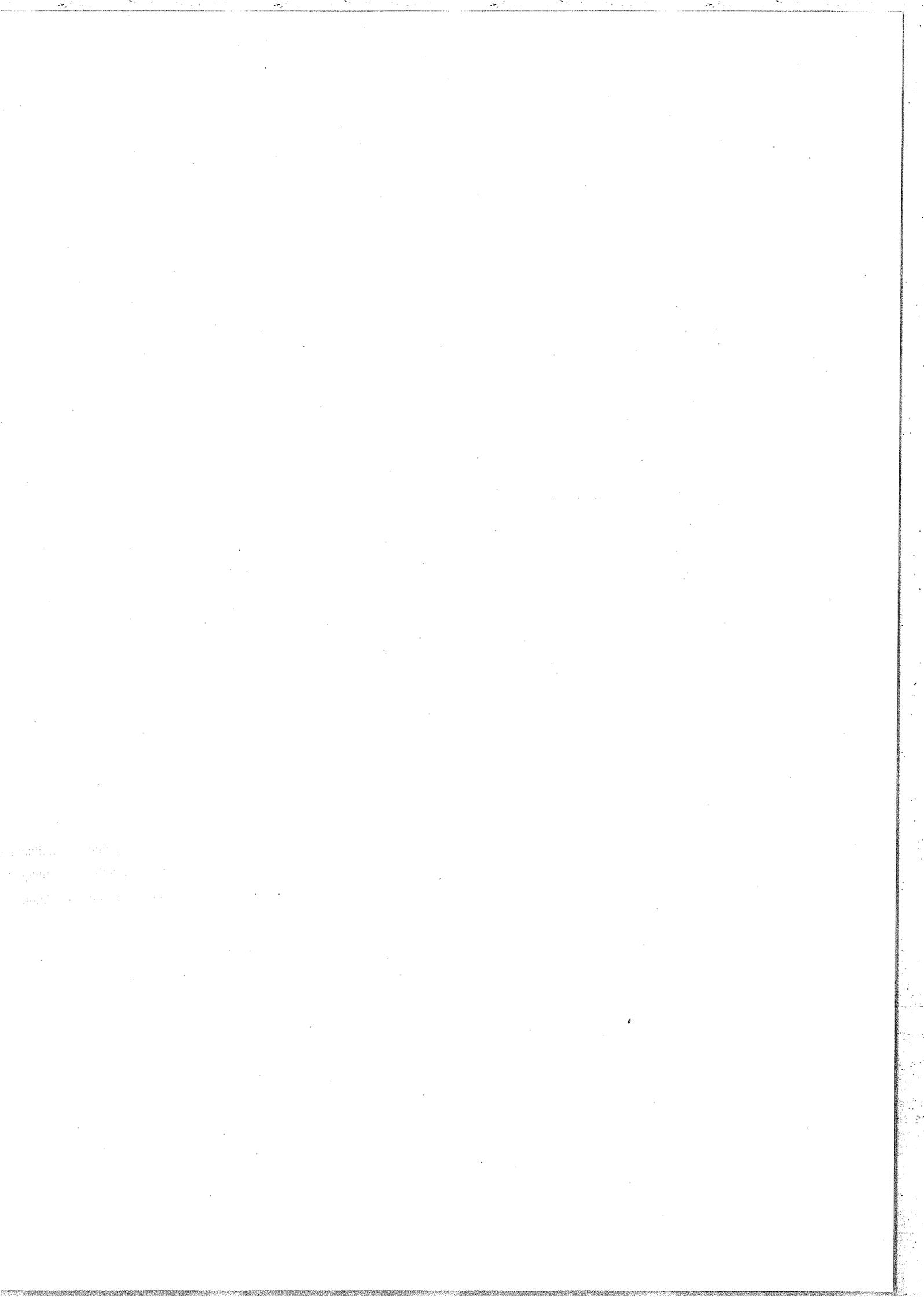
I. ETUDE DU SPECTRE DE L'ION Au⁺⁵¹ (ISOÉLECTRONIQUE DU NICKEL)

La configuration fondamentale de l'ion Au⁺⁵¹ est $1s_{1/2}^2 2s_{1/2}^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3s_{1/2}^2 3p_{1/2}^2 3p_{3/2}^4 3d_{3/2}^4 3d_{5/2}^6$. Le nombre quantique total correspondant est $J = 0$. Les transitions dipôlares électriques $E1$ ne font donc intervenir que des niveaux excités dont le nombre quantique total est $J' = 1$. Les auteurs précédemment cités [11,31] ont étudié les sauts électroniques $3p-4s$, $3d-4p$ et $3d-4f$. Les transitions correspondantes dans l'ion Au⁺⁵¹ sont $3d^{10}-(3d_{3/2}^3 3d_{5/2}^6 4f_{5/2}, J=1)$, $3d^{10}-(3d_{3/2}^4 3d_{5/2}^5 4f_{5/2}, J=1)$ et $3d^{10}-(3d_{3/2}^4 3d_{5/2}^5 4f_{7/2}, J=1)$; $3p^6 3d^{10}-(3p_{1/2}^1 3p_{3/2}^4 3d^{10} 4s_{1/2}, J=1)$ et $3p^6 3d^{10}-(3p_{1/2}^2 3p_{3/2}^3 3d^{10} 4s_{1/2}, J=1)$; $3d^{10}-(3d_{3/2}^3 3d_{5/2}^6 4p_{1/2}, J=1)$, $3d^{10}-(3d_{3/2}^3 3d_{5/2}^6 4p_{3/2}, J=1)$ et $3d^{10}-(3d_{3/2}^4 3d_{5/2}^5 4p_{3/2}, J=1)$. Chaque sous-configuration excitée ne contient qu'un seul niveau de moment cinétique total $J = 1$. Les transitions étudiées ne donnent donc lieu qu'à huit raies. Le problème correspondant est suffisamment simple pour que nous trouvions intéressant d'en faire une étude détaillée que nous présentons dans ce chapitre.

1. CALCUL DES LONGUEURS D'ONDE DES TRANSITIONS

3p-4s, 3d-4p et 3d-4f

L'ion Au⁺⁵¹ possède 28 électrons et se place ainsi parmi les atomes très ionisés, pour lesquels le modèle du champ central convient bien, les corrélations électroniques n'y jouant pas un rôle déterminant. Nous avons utilisé le programme RELAC pour déterminer ses niveaux d'énergie. Le programme Hartree-Fock relativiste de DESCLAUX nous a permis de confirmer la validité du potentiel paramétrique déterminé et utilisé par le programme RELAC. Nous avons enfin comparé nos résultats à ceux de BURKHALTER et al. [11] et ZIGLER et al. [31], par extrapolation de la courbe $\frac{E}{Z}$ en fonction de Z tracée par ces derniers auteurs (figure 4).



1.1. Calculs par la méthode du potentiel paramétrique

Dans l'application du programme RELAC, le potentiel paramétrique obtenu dépend a priori du nombre de configurations introduites. Dans le cas présent, il y a quatre façons de calculer les longueurs d'onde des huit raies considérées. On peut en effet,

- soit optimiser séparément quatre potentiels dont chacun correspond soit à la configuration fondamentale $3d^{10}$, soit à l'une des trois configurations excitées, ce qui nécessite quatre calculs ;

- soit introduire à la fois dans le calcul RELAC la configuration fondamentale et l'une des trois configurations excitées, ce qui nécessite trois calculs. Une variante de cette méthode consiste en la détermination d'un seul potentiel par optimisation sur la configuration fondamentale et l'une des configurations excitées. Ce potentiel est alors utilisé pour déterminer les énergies des autres niveaux excités ;

- soit calculer un seul potentiel pour l'ensemble des configurations excitées et un potentiel pour la configuration fondamentale ;

- soit calculer un seul potentiel pour l'ensemble des configurations fondamentale et excitées.

Toutes ces méthodes permettent d'introduire les effets du couplage intermédiaire à l'intérieur d'une configuration. Les deux dernières méthodes permettent en outre de tenir compte des mélanges éventuels entre les configurations excitées.

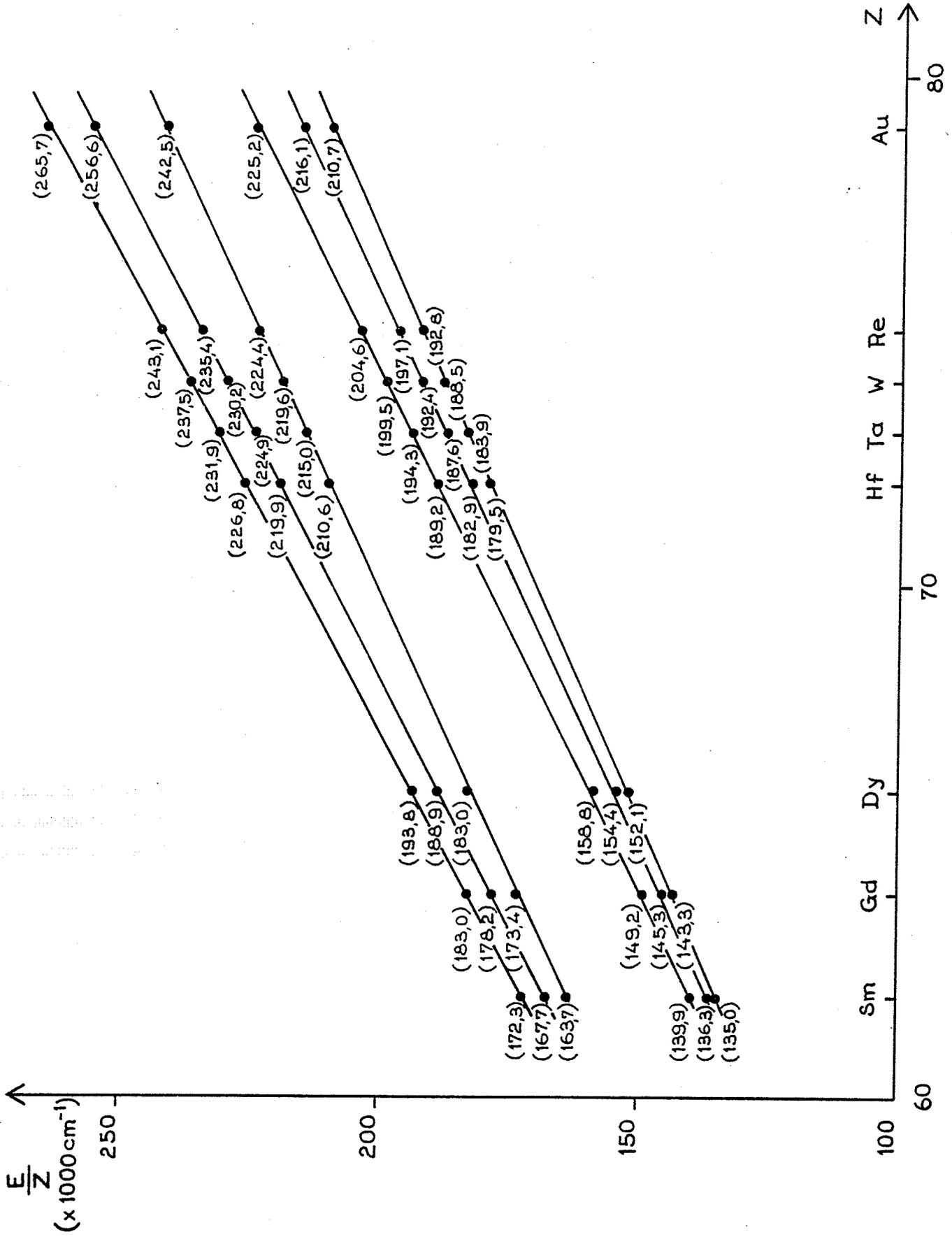
Les résultats des calculs par les différentes méthodes sont rassemblés dans le tableau II. On constate que les quatre méthodes fournissent des valeurs pratiquement identiques. On préférera donc, pour l'étude des autres ions, la



Niveaux	1ère méthode		2ème méthode (variante)		3ème méthode		4ème méthode	
	énergie (u.a)	λ (Å)	énergie (u.a)	λ (Å)	énergie (u.a)	λ (Å)	énergie (u.a)	λ (Å)
3d ¹⁰	-17039,7886	-	-17039,7966	-	-17039,7886	-	-17039,7957	-
3p _{1/2} ¹ 3p _{3/2} ⁴ 3d ¹⁰ 4s _{1/2}	-16936,9033	4,428	-16936,8653	4,426	-16936,8842	4,428	-16936,8646	4,426
3p _{1/2} ² 3p _{3/2} ³ 3d ¹⁰ 4s _{1/2}	-16952,5040	5,220	-16,952,4844	5,218	-16952,4753	5,218	-16952,4836	5,218
3d _{3/2} ³ 3d _{5/2} ⁶ 4p _{1/2}	-16964,0066	6,012	-16963,9796	6,010	-16964,0151	6,013	-16963,9787	6,010
3d _{3/2} ³ 3d _{5/2} ⁶ 4p _{3/2}	-16958,7502	5,622	-16958,7257	5,620	-16958,7667	5,623	-16958,7248	5,620
3d _{3/2} ⁴ 3d _{5/2} ⁵ 4p _{3/2}	-16962,0004	5,857	-16962,0025	5,857	-16962,0321	5,860	-16962,0014	5,857
3d _{3/2} ³ 3d _{5/2} ⁶ 4f _{5/2}	-16944,1375	4,763	-16944,1205	4,762	-16944,1611	4,765	-16944,1197	4,762
3d _{3/2} ⁴ 3d _{5/2} ⁵ 4f _{5/2}	-16948,7934	5,007	-16948,7859	5,006	-16948,8241	5,009	-16948,7849	5,006
3d _{3/2} ⁴ 3d _{5/2} ⁵ 4f _{7/2}	-16947,4474	4,934	-16947,4378	4,933	-16947,4752	4,936	-16947,4368	4,933

TABLEAU II

FIGURE 8



variante de la deuxième méthode ou la quatrième méthode, qui n'impliquent qu'une seule optimisation et permettent ainsi des économies substantielles de temps de calcul.

Le tableau III reproduit la matrice des états propres obtenue par la diagonalisation sur la base des états configurationnels de l'hamiltonien obtenu par la quatrième méthode d'optimisation. Cette matrice fait apparaître des mélanges extrêmement faibles entre les configurations $3p^5 4s$, $3d^9 4p$ et $3d^9 4f$, et un couplage très proche du couplage jj .

1.2. Calculs par la méthode Hartree-Fock

Les calculs ont été menés à l'aide du programme de J.P. DESCLAUX successivement sur les transitions $3d-4f$ et $3d-4p$. La liste des intégrales radiales nécessaires au calcul ainsi que leurs coefficients angulaires ont été fournis par le programme de GRANT. Les résultats obtenus sont reportés dans le tableau IV. Les écarts relatifs entre les valeurs de longueurs d'onde obtenues par ce calcul et les calculs du programme RELAC n'excèdent pas 4% . Nous en concluons que les calculs que nous avons menés avec le programme RELAC sont satisfaisants. Ce dernier programme étant d'un maniement beaucoup plus aisé pour les calculs de couplage intermédiaire, de mélange de configurations et d'intensités, c'est lui que nous avons utilisé dans la suite de notre étude.

1.3. Extrapolation des résultats antérieurs

La figure 8 reproduit la courbe de la figure 4 sur laquelle nous avons ajouté les points provenant des calculs effectués par le programme RELAC. On constate que ces points peuvent être considérés comme alignés avec les autres points si l'on tolère une erreur relative maximale de 4% .



TABLEAU III

Décomposition des états propres sur les états de base*

Etats propres de base	$[3p^1 3p^4 4s]$	$[3p^2 3p^3 4s]$	$[3d^3 3d^6 4p^*]$	$[3d^3 3d^6 4p]$	$[3d^4 3d^5 4p]$	$[3d^3 3d^6 4f^*]$	$[3d^4 3d^5 4f^*]$	$[3d^4 3d^5 4f]$
$ 3p^1 3p^4 4s\rangle$	99,90	0,00	-0,02	0,04	0,00	0,03	0,00	0,01
$ 3p^2 3p^3 4s\rangle$	-0,00	99,66	0,00	0,07	0,24	0,01	0,00	0,01
$ 3d^3 3d^6 4p^*\rangle$	0,02	0,00	99,69	0,04	0,25	0,01	0,00	0,00
$ 3d^3 3d^6 4p\rangle$	-0,04	-0,08	-0,05	99,59	0,22	-0,00	0,00	-0,01
$ 3d^4 3d^5 4p\rangle$	-0,00	-0,23	-0,24	-0,24	99,25	0,02	0,00	0,01
$ 3d^3 3d^6 4f^*\rangle$	-0,02	-0,01	-0,00	0,00	-0,01	89,18	0,20	-10,58
$ 3d^4 3d^5 4f^*\rangle$	0,00	-0,01	0,00	0,00	-0,00	0,22	92,50	7,27
$ 3d^4 3d^5 4f\rangle$	-0,02	-0,01	-0,00	0,01	-0,02	10,52	-7,30	82,12

* Le tableau présente les carrés des projections sur les états de base, affectés des signes de ces projections. La notation $...n\ell^*N\ell N$... signifie que N électrons admettent pour nombres quantiques n, ℓ et j = $\ell - \frac{1}{2}$ et que N' électrons admettent pour nombres quantiques n, ℓ et j = $\ell - \frac{1}{2}$.

Raie	Longueur d'onde calculée	
	par le programme de DESCLAUX	par le programme RELAC
$3d_{3/2} - 4p_{1/2}$	6,013	6,010
$3d_{3/2} - 4p_{3/2}$	5,624	5,620
$3d_{5/2} - 4p_{3/2}$	5,859	5,857
$3d_{3/2} - 4f_{5/2}$	4,780	4,762
$3d_{5/2} - 4f_{5/2}$	5,005	5,006
$3d_{5/2} - 4f_{7/2}$	4,928	4,933

TABLEAU IV

Comparaison des méthodes de Hartree-Fock et du potentiel paramétrique.

Blank page with faint text at the bottom left corner.

2. INTENSITES DES RAIES PRINCIPALES

Nous nous intéressons ici aux intensités des raies 3p-4s, 3d-4p et 3d-4f et examinons l'incidence des effets relativistes et du couplage entre configurations excitées.

2.1. Point de vue classique

2.1.1. Base Russell-Saunders

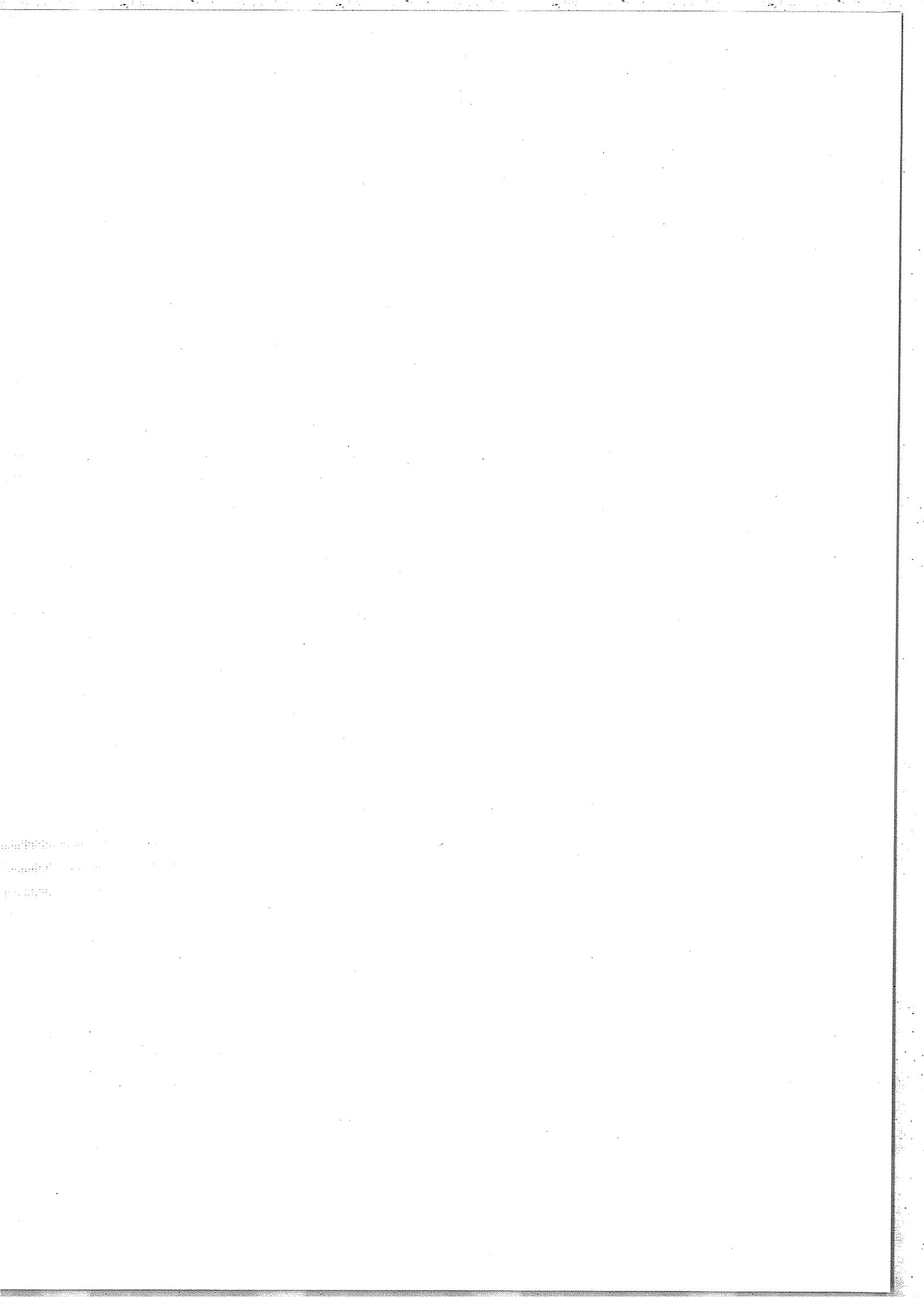
Le calcul classique de la force d'une raie nécessite la détermination du carré de l'élément de matrice de l'opérateur dipolaire électrique $\vec{D} = -e \sum_i \vec{r}_i$ (où $-e$ est la charge électronique et \vec{r}_i est le rayon-vecteur de l'électron i), calculé entre les deux états propres du hamiltonien qui correspondent aux niveaux impliqués dans la transition. L'utilisation du couplage Russell-Saunders permet de mener ce calcul assez simplement. La base d'états est alors constituée des vecteurs $|SLJM_J\rangle$, où S , L , J et M_J sont les nombres quantiques correspondant aux observables \vec{S}^2 , \vec{L}^2 , \vec{J}^2 et J_z . Les transitions qui nous intéressent ici s'effectuent entre niveaux résultant du mélange d'états $^{2S+1}L_{JM_J}$, les énergies ne dépendent pas des nombres quantiques M_J . La force d'une raie a donc pour expression

$$S = \sum_{M_J, M_J'} |\langle SLJM_J | \vec{D} | S'L'J'M_J' \rangle|^2 \quad (\text{II.1})$$

L'utilisation du formalisme des opérateurs tensoriels permet alors d'écrire :

$$S = \frac{e^2}{3} |\langle SLJ || \sum_i r_i^{(1)} || S'L'J' \rangle|^2 \quad (\text{II.2})$$

Les transitions étudiées admettent toutes $3d^{10}$ comme configuration inférieure. Celle-ci contient un seul terme spectral, noté 1S_0 ($S = 0$, $L = 0$, $J = 0$). Les règles de sélection s'appliquant aux transitions dipolaires électriques imposent donc de ne considérer, dans les configurations supérieures, que le niveau 1P_1 ($S = 0$, $L = 1$, $J = 1$). L'ensemble des ni-



veaux ($3p^5_4s, J=1$) contient, outre ce niveau, le niveau 3P_1 . Chacun des ensembles ($3d^9_4p, J=1$) et ($3d^9_4f, J=1$) contient aussi le niveau 1P_1 ainsi que les niveaux 3P_1 et 3D_1 .

2.1.2. Base_jj

Le calcul des intensités des raies dans le cadre du couplage jj peut être mené en utilisant les résultats du paragraphe 3.1.1. Il suffit de connaître la décomposition des vecteurs de la base utilisée ici sur les vecteurs constituant la base de Russell-Saunders. Cette décomposition est donnée dans le tableau V.

La première colonne de chacune de ces matrices rassemble les projections des vecteurs de la base jj sur ceux du niveau 1P_1 qui intervient seul dans les calculs d'intensités. Elle permet de déterminer très aisément les forces relatives des raies émises vers $3d^{10}$ dans le cas d'un couplage jj pur. Le tableau VI en donne les valeurs, en fonction de constantes a, b, et c que nous n'explicitons pas.

Raie	$3p_{1/2}^{-4}s_{1/2}$	$3p_{3/2}^{-4}s_{1/2}$	$3d_{3/2}^{-4}p_{1/2}$	$3d_{3/2}^{-4}p_{3/2}$	$3d_{5/2}^{-4}p_{3/2}$
Force	a	2a	5b	b	9b
Raie	$3d_{3/2}^{-4}f_{5/2}$	$3d_{5/2}^{-4}f_{5/2}$	$3d_{5/2}^{-4}f_{7/2}$		
Force	14c	c	20c		

TABLEAU VI

<u>Matrices jj-LS</u>	$3p^5 4s$	$1P_1$	$3P_1$	
	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	
	$\frac{3}{2}, \frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	
	$3d^9 4p$	$1P_1$	$3P_1$	$3D_1$
	$\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$
	$\frac{3}{2}, \frac{3}{2}$	$-\frac{1}{\sqrt{15}}$	$\frac{4}{\sqrt{30}}$	$\frac{1}{\sqrt{20}}$
	$\frac{5}{2}, \frac{3}{2}$	$\sqrt{\frac{3}{5}}$	$\sqrt{\frac{3}{10}}$	$-\frac{1}{\sqrt{10}}$
	$3d^9 4f$	$1P_1$	$3P_1$	$3D_1$
	$\frac{3}{2}, \frac{5}{2}$	$\sqrt{\frac{2}{5}}$	$-\frac{1}{\sqrt{5}}$	$\sqrt{\frac{2}{5}}$
	$\frac{5}{2}, \frac{5}{2}$	$-\frac{1}{\sqrt{35}}$	$\sqrt{\frac{18}{35}}$	$\frac{4}{\sqrt{35}}$
	$\frac{5}{2}, \frac{7}{2}$	$\frac{2}{\sqrt{7}}$	$\sqrt{\frac{2}{7}}$	$-\frac{1}{\sqrt{7}}$

TABLEAU V

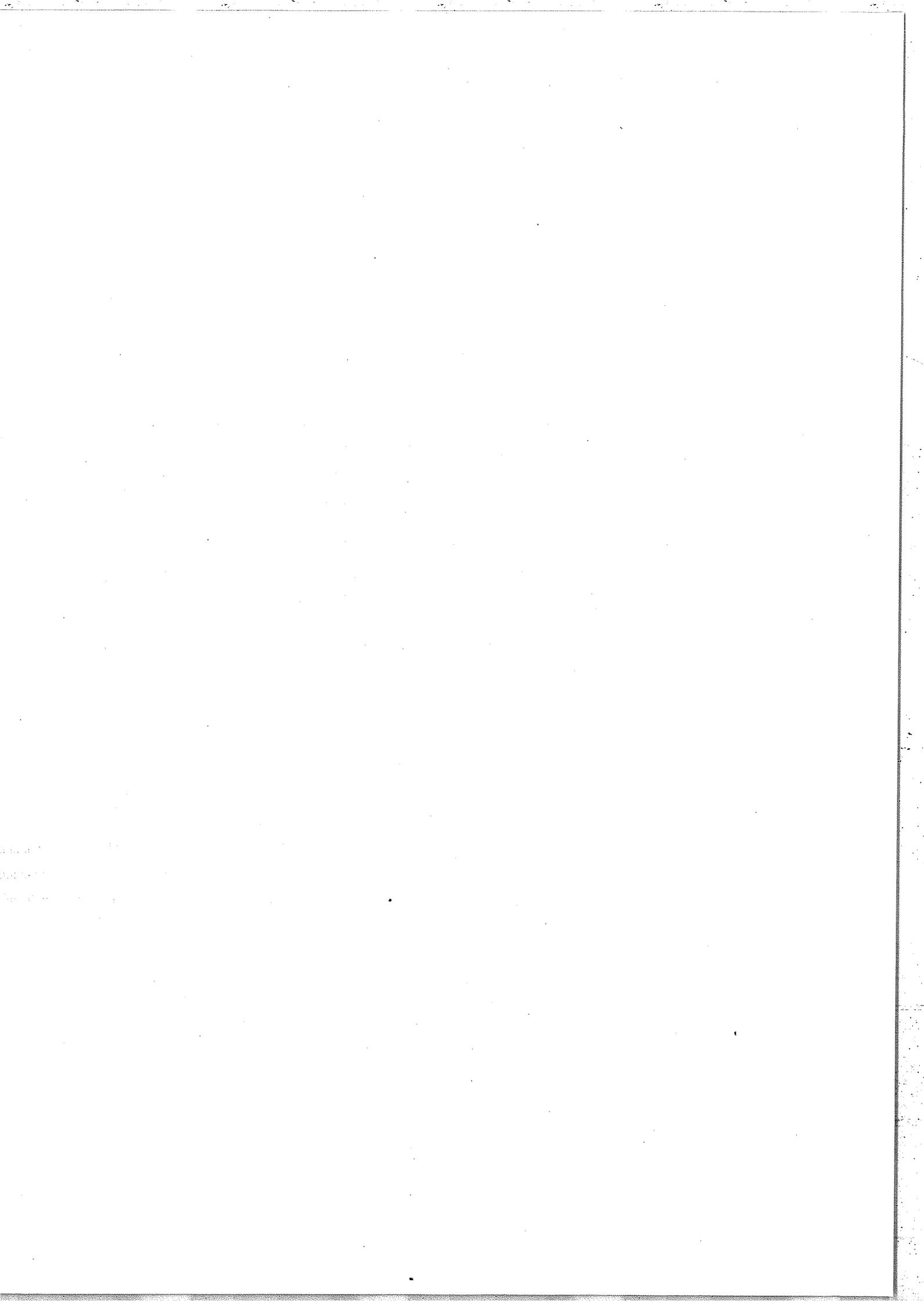
La probabilité de transition A_{ij} d'un niveau i vers un niveau j s'exprime, en fonction de la force de raie S_{ij} , de la façon suivante :

$$A_{ij} = \frac{4}{3} \frac{|E_i - E_j|^3}{\hbar^4 C^3} \frac{S_{ij}}{g_i} \quad (\text{II.3})$$

où E_i et E_j sont les énergies des deux niveaux et g_i est la dégénérescence du niveau i .

La force d'oscillateur f_{ij} (sans dimension) associée à la transition est liée à A_{ij} suivant la relation :

$$f_{ij} = \frac{m\hbar^2 C^3}{2e^2 |E_i - E_j|^2} A_{ij} \quad (\text{II.4})$$



où g_i est la dégénérescence du niveau i .

On appelle facteur gf associé à la transition le produit de g_i par f_{ij} .*

En utilisant les formules (II.3) et (II.4), on trouve :

$$g_i f_{ij} = \frac{2m |E_i - E_j|}{3\hbar^2 e^2} S_{ij} \quad (\text{II.5})$$

Comparons, à l'aide de la relation (II.5), les facteurs gf et $g'f'$ de deux raies admettant pour niveaux supérieurs des niveaux dont les énergies sont respectivement E et E' , et un même niveau inférieur d'énergie E_0 . Appelons S et S' les forces des deux raies. La relation (II.5) permet d'écrire :

$$\frac{g'f'}{gf} = \left| \frac{E' - E_0}{E - E_0} \right| \frac{S'}{S} = \frac{\lambda S'}{\lambda' S} \quad (\text{II.6})$$

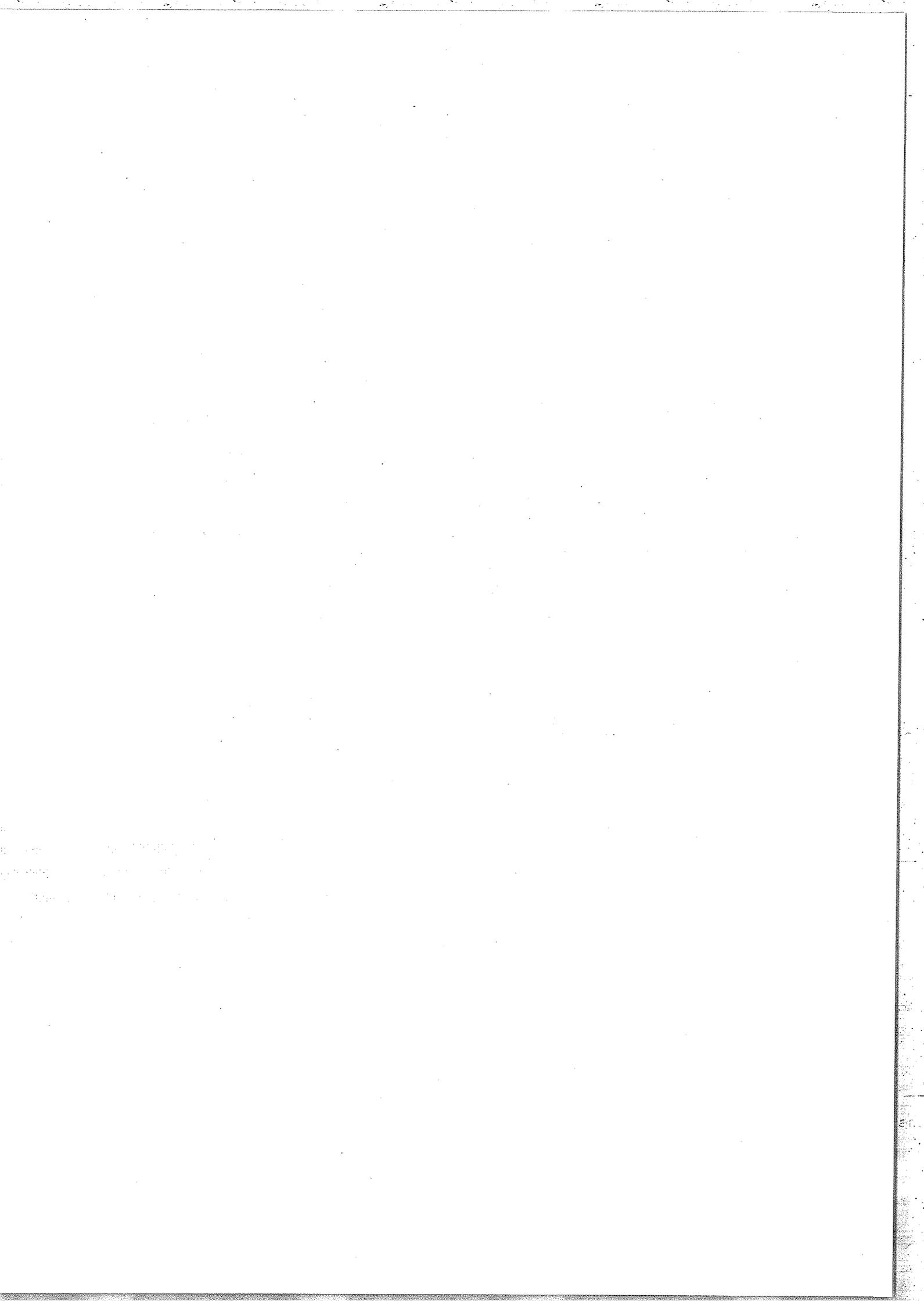
où λ et λ' désignent les longueurs d'onde des deux raies considérées. Nous avons appliqué cette relation aux raies présentées dans le tableau VI. Les résultats obtenus sont rassemblés dans le tableau VII.

Raie	$3p_{1/2} - 4s_{1/2}$	$3p_{3/2} - 4s_{1/2}$	$3d_{3/2} - 4p_{1/2}$	$3d_{3/2} - 4p_{3/2}$	$3d_{5/3} - 4p_{3/2}$
λ	4,426	5,218	6,008	5,619	5,856
Force	a	2a	5b	b	9b
gf	a'	1,70.a'	4,68.b'	b'	8,64.b'

Raie	$3d_{5/2} - 4f_{5/2}$	$3d_{5/2} - 4f_{5/2}$	$3d_{5/2} - 4f_{7/2}$
λ	4,761	5,005	4,932
Force	14c	c	20c
gf	14,7.c'	c'	20,3.c'

TABLEAU VII

* On peut aussi définir le facteur gf par le produit de g_j par f_{ji} puisque $g_i f_{ij} = g_j f_{ji}$.



2.2. Effets relativistes

Tous les calculs relativistes sont effectués dans le cadre du couplage jj. Dans ce paragraphe, nous nous plaçons dans le cas d'un couplage jj pur afin de pouvoir comparer les résultats avec ceux obtenus en 3.1.2.

2.2.1. Probabilité de transition relativiste

Considérons une transition d'un niveau i , de moment cinétique J_i et d'énergie E_i , vers un niveau j , d'énergie E_j . Le programme RELAC calcule la probabilité de transition $A_{i \rightarrow j}$ en utilisant l'expression suivante :

$$A_{i \rightarrow j} = \frac{2,14183 \cdot 10^{10}}{2J_i + 1} (E_i - E_j)^3 B^2 \quad (\text{II.7})$$

où A_{ij} est en s^{-1} lorsque $(E_i - E_j)$ et B sont en unités atomiques, B étant le produit d'une intégrale radiale (notée E_l) dont la valeur est fournie par le programme RELAC et d'un coefficient angulaire (notée C) que l'on peut calculer à l'aide du programme de GRANT. Les carrés des coefficients C relatifs aux différentes transitions envisagées dans le paragraphe 1 sont dans les mêmes rapports que les forces de raies dont les valeurs relatives sont rassemblées dans le tableau VI. La relation (II.7) constitue une approximation de la formule de type "longueur" proposée par GRANT [34].

2.2.2. Application à l'ion Au^{+51}

Comparons, en couplage jj pur, les intensités de deux raies respectivement émises par des niveaux d'énergies E et E' vers le même niveau d'énergie E_0 . Appelons gf et $g'f'$ les facteurs gf , définis à l'aide de la relation (II.4), correspondant à ces deux transitions. Les relations (II.4) et (II.7) permettent de comparer leurs valeurs. On peut en effet écrire :

1000
1000
1000

$$\frac{g'f'}{gf} = \left| \frac{E' - E_0}{E - E_0} \right| \left(\frac{C'E_1}{CE_1} \right)^2 = \frac{\lambda}{\lambda'} \left(\frac{C'E_1}{CE_1} \right)^2 \quad (\text{II.8})$$

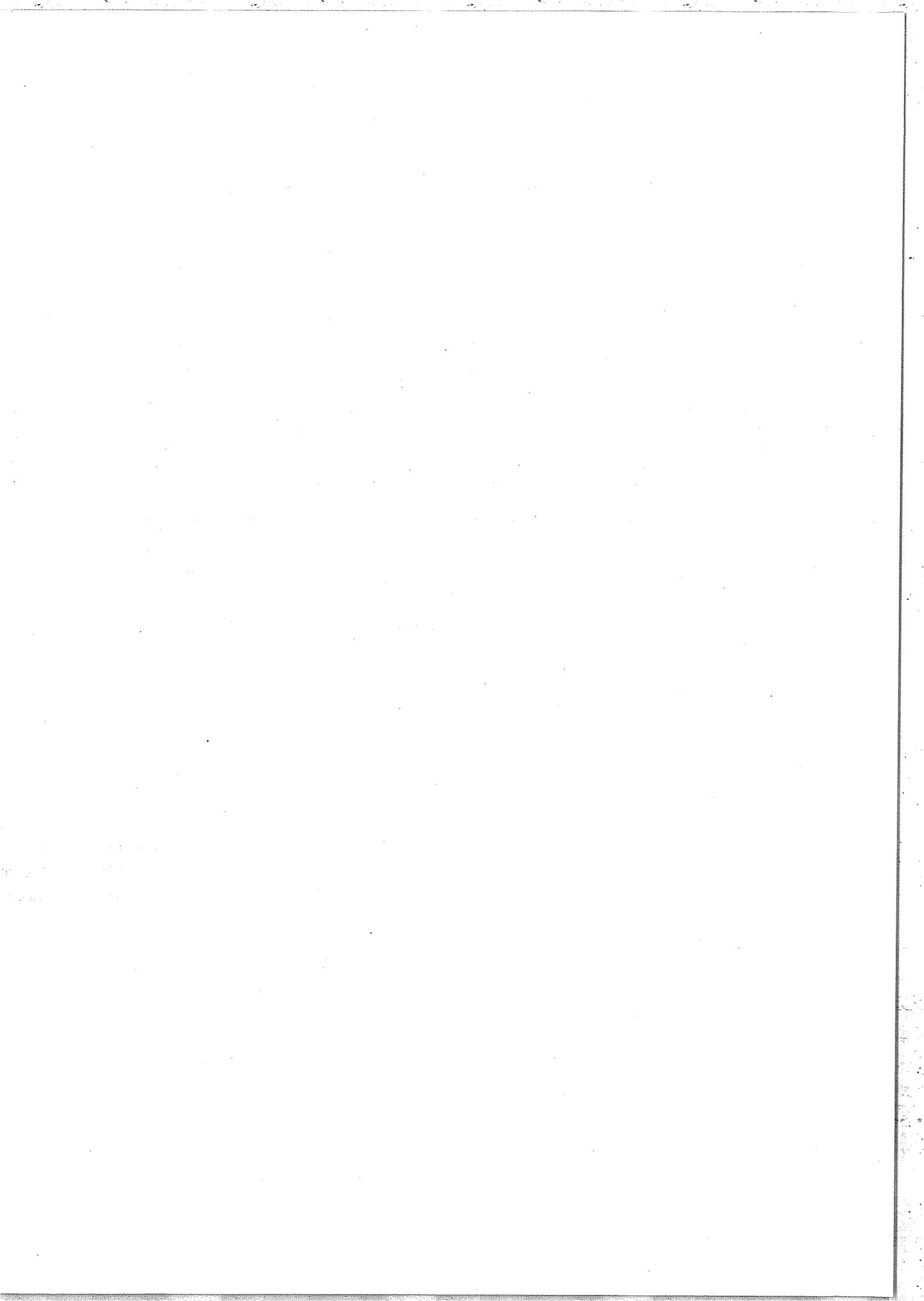
Le tableau VIII donne pour les huit raies précédemment étudiées les valeurs de ces rapports et rappelle les résultats obtenus par la méthode "classique".

Raie	$3p_{1/2} - 4s_{1/2}$	$3p_{3/2} - 4s_{1/2}$	$3d_{3/2} - 4p_{1/2}$	$3d_{3/2} - 4p_{3/2}$	$3d_{5/2} - 4p_{3/2}$
λ	4,426	5,218	6,008	5,619	5,856
C	-0,81650	1,15470	1,15470	-0,51640	1,54919
E_1	0,04213	0,06596	0,04803	0,03289	0,03747
gf_{rel}	a''	4,16.a''	9,97.b''	b''	11,2.b''
gf_{class} (rappel)	a'	1,70.a'	4,68.b'	b'	8,64.b'

Raie	$3d_{3/2} - 4f_{5/2}$	$3d_{5/2} - 4f_{5/2}$	$3d_{5/2} - 4f_{7/2}$
λ	4,761	5,005	4,932
C	-1,54919	-0,41404	-1,85164
E_1	0,1439	0,1496	0,1488
gf_{rel}	1,36.c''	c''	20,1.c''
gf_{class} (rappel)	14,7.c'	c'	20,3.c'

TABLEAU VIII

Le tableau VIII fait apparaître des différences importantes entre les théories classiques et relativistes pour la transition 3p-4s à laquelle correspondent deux intégrales E_1 dont les valeurs sont sensiblement différentes. Il en est de même, dans une mesure moindre, pour la transition 3d-4p, alors que pour la transition 3d-4f, les effets relativistes sont peu importants du fait des écarts relatifs très faibles (moins de 4 %) existant entre les valeurs des intégrales E_1 .



2.3. Effets du couplage intermédiaire

Considérons un état excité $|\psi\rangle$ de l'ion Au^{+51} se décomposant sur la base jj de la façon suivante :

$$|\psi\rangle = \sum_{a,b} \alpha_{ab} |j_a, j_b\rangle \quad (\text{II.9})$$

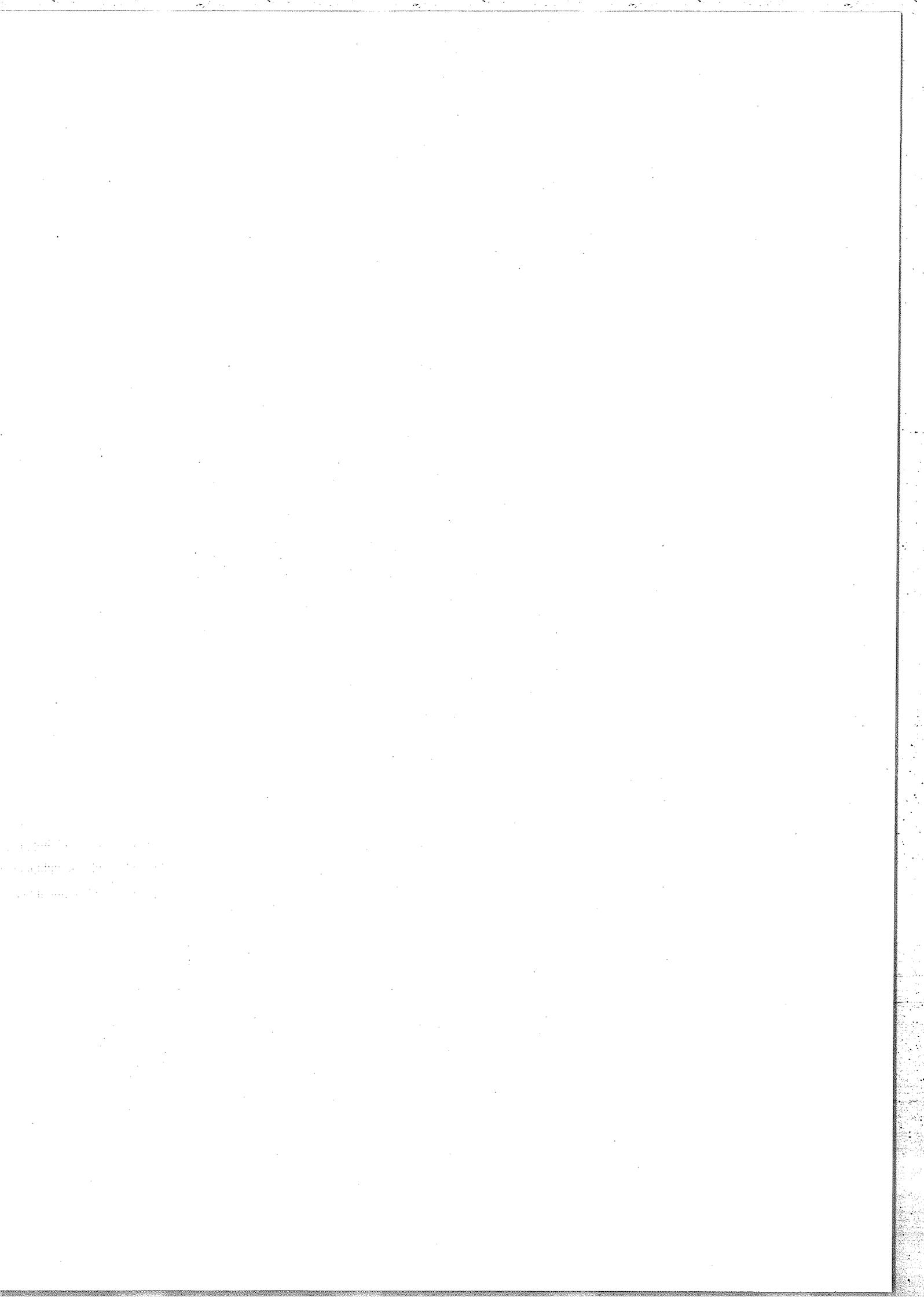
La relation (II.7) donnant la probabilité de transition d'un niveau i vers un niveau j est applicable ici à condition de définir B de la façon suivante :

$$B = \sum_{a,b} \alpha_{ab} C_{ab} E_{ab} \quad (\text{II.10})$$

où C_{ab} et E_{ab} sont respectivement le coefficient angulaire et l'intégrale radiale relatifs au vecteur de base $|j_a, j_b\rangle$. Le facteur gf de la transition reste défini par la relation (II.4). Sa détermination nécessite la connaissance de la matrice des états propres de l'hamiltonien dans la base jj . Cette matrice a déjà été donnée dans le paragraphe I.1.3, Tableau III. On remarque un mélange assez fort ($\sim 10\%$) entre les trois niveaux de la configuration $3d^9 4f$. Le mélange entre niveaux appartenant à des configurations non-relativistes différentes paraît être très faible. Nous allons cependant montrer qu'il peut influencer fortement sur l'intensité d'une raie. Prenons le cas de la raie $3p^6 3d^{10} - 3p_{1/2}^1 3p_{3/2}^4 3d^{10} 4s_{1/2}$ qui fait intervenir des niveaux jj presque purs (voir tableau). Les valeurs des intégrales E_{ab} , des coefficients angulaires C et de la longueur d'onde intervenant dans les calculs qui suivent figurent dans le tableau VIII.

Considérons d'abord que le niveau supérieur est en couplage jj pur. Les relations (II.4) et (II.7) permettent de déterminer le facteur gf de la raie. Nous trouvons :
 $gf = 0,081$.

Reprenons maintenant le calcul en couplage intermédiaire en utilisant la matrice des vecteurs propres et les



relations (II.4), (II.7) et (II.10). Nous obtenons :
 $gf = 0,047$. (Cette valeur diffère légèrement de celle fournie par le programme RELAC (0,051) en raison de l'utilisation d'une formule différant légèrement de la formule (II.7)). Cet exemple illustre l'influence considérable des mélanges entre niveaux sur les intensités des raies.

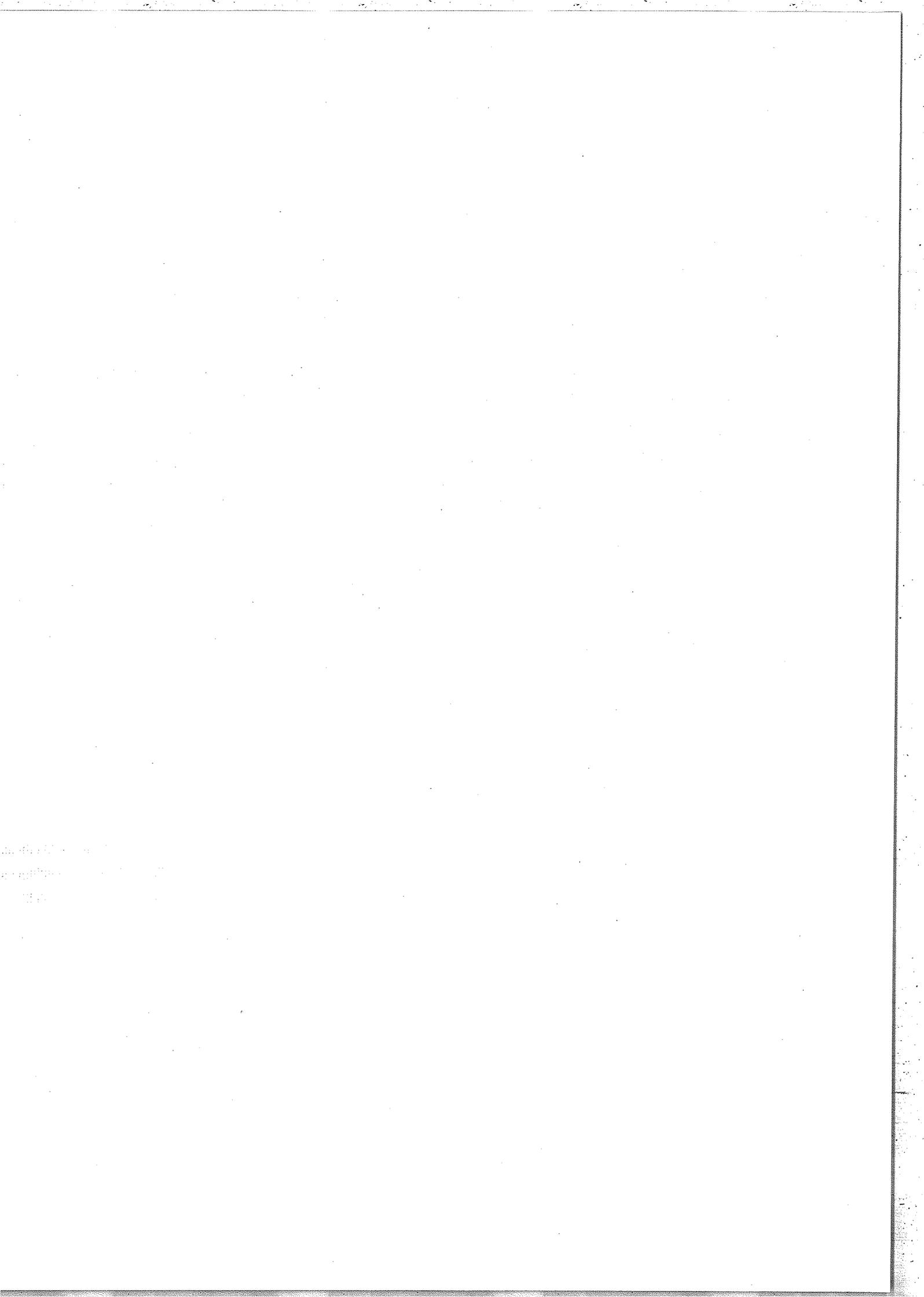
Le tableau IX rassemble les valeurs des intensités des raies calculées par le programme RELAC et rappelle leurs longueurs d'onde.

Transition	$3p_{1/2}^{-4}s_{1/2}$	$3p_{3/2}^{-4}s_{1/2}$	$3d_{3/2}^{-4p_{1/2}}$	$3d_{3/2}^{-4p_{3/2}}$
λ (Å)	4,426	5,218	6,008	5,619
gf	0,051	0,356	0,160	0,023
Transition	$3d_{5/2}^{-4p_{3/2}}$	$3d_{3/2}^{-4f_{5/2}}$	$3d_{5/2}^{-4f_{5/2}}$	$3d_{5/2}^{-4f_{7/2}}$
λ (Å)	5,856	4,761	5,005	4,932
gf	0,256	5,78	0,002	2,28

TABLEAU IX

2.4. Conséquences sur le spectre

Les trois raies correspondant à la transition $3d^{10}-3d^94p$ sont repérées sur la figure 6 par les lettres A, D et G, l'une des deux raies (5,219 Å) de la transition $3p^63d^{10}-3p^53d^{10}4s$ par la lettre l et deux des trois raies de la transition $3d^{10}-3d^94f$ par les lettres d et h. A toutes ces raies est associée la notation Ni(l) dans la colonne 3 du tableau I. Le facteur gf calculé de la troisième raie de la transition 3d-4f est si faible que nous n'avons pas cherché à repérer cette raie à 5,007 Å sur le spectre expérimental. D'autre part, le facteur gf théorique correspondant à la raie A est nettement inférieur à ceux correspondant aux raies D et G (voir tableau I). On peut ainsi ex-



plier le fait que les raies correspondant aux sauts électroniques $3d_{5/2}^{-4f_{5/2}}$ et $3d_{3/2}^{-4p_{3/2}}$ dans les ions plus ou moins chargés que l'ion Au^{+51} n'ont pu être identifiés dans le spectre.

3. ETUDE DU COMPLEXE 3^{17}_4

Les transitions $3d-4p$, $3p-4s$ et $3d-4f$ ne sont pas les seules du type $(n=3)-(n=4)$ que l'on puisse envisager dans l'ion Au^{+51} . On peut y ajouter les transitions $3s-4p$ et $3p-4d$. Les cinq configurations correspondantes (plus la configuration $3s3p^63d^{10}4f$, qui ne contient pas de niveau $J = 1$) constituent le complexe de Layzer 3^{17}_4 impair (17 électrons sur la couche $n = 3$, 1 sur la couche $n = 4$). Nous avons voulu étudier leur mélange en introduisant dans un même calcul tous les niveaux correspondants possédant un nombre quantique total $J = 1$. Les résultats obtenus sont présentés et comparés aux résultats des paragraphes 1 et 2, dans le tableau X. On constate que les longueurs d'onde des raies obtenues par l'un et l'autre calcul sont pratiquement identiques et que les valeurs des facteurs gf sont inchangées à 3 % près, excepté la valeur de celui correspondant au saut électronique $3p_{1/2}^{-4s_{1/2}}$ ($\lambda = 4,424 \text{ \AA}$) sur lequel ont déjà été montrés au paragraphe 2.3 les effets du couplage intermédiaire. Le calcul de la matrice des états propres fait, en effet, apparaître (voir tableau XI) un mélange important ($\sim 15 \%$), entre les niveaux $(3p_{1/2}^1 3p_{3/2}^4 3d_{3/2}^4 3d_{5/2}^6 4s_{1/2}, J=1)$ et $(3p_{1/2}^2 3p_{3/2}^3 3d_{3/2}^4 3d_{5/2}^6 4d_{3/2}, J=1)$, qui a pour effet de multiplier par un facteur supérieur à 4 le facteur gf considéré. On note également un mélange de 5 % entre les niveaux supérieurs des transitions $3s_{1/2}^{-4p_{1/2}}$ ($\lambda = 3,902 \text{ \AA}$) et $3p_{1/2}^{-4d_{3/2}}$ ($\lambda = 3,844 \text{ \AA}$) et un mélange encore plus faible ($\sim 1 \%$) entre les niveaux supérieurs des transitions $3p_{1/2}^{-4s_{1/2}}$ ($\lambda = 4,424 \text{ \AA}$) et $3p_{3/2}^{-4d_{5/2}}$ ($\lambda = 4,387 \text{ \AA}$). Les mélanges entre les autres niveaux appartenant à des configurations différentes sont négligeables.

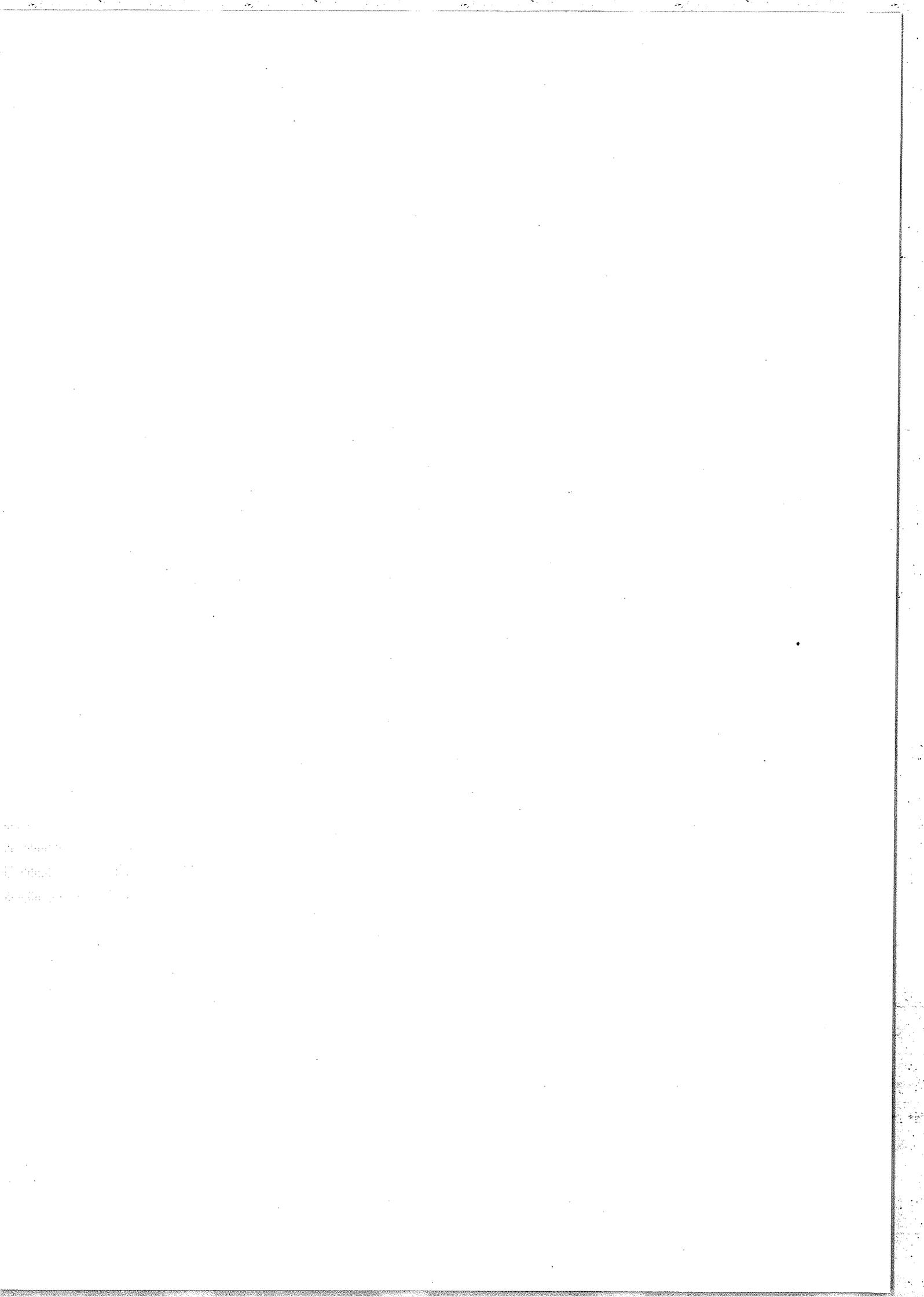
1. 4000
2. 4000
3. 4000

	$3s_{1/2}^{-4p}3/2$	$3p_{1/2}^{-4s}1/2$	$3p_{3/2}^{-4s}1/2$	$3p_{1/2}^{-4d}3/2$	$3p_{3/2}^{-4d}3/2$	$3p_{3/2}^{-4d}5/2$	$3d_{3/2}^{-4p}1/2$	$3d_{3/2}^{-4p}3/2$
λ_1	3,902	4,424	5,218	3,844	4,444	4,387	6,008	5,619
λ_2	-	4,426	5,218	-	-	-	6,008	5,619
gf ₁	0,316	0,211	0,366	0,293	0,014	1,18	0,157	0,024
gf ₂	-	0,051	0,356	-	-	-	0,160	0,023

	$3d_{5/2}^{-4p}3/2$	$3d_{3/2}^{-4f}5/2$	$3d_{5/2}^{-4f}5/2$	$3d_{5/2}^{-4f}7/2$
λ_1	5,856	4,762	5,006	4,933
λ_2	5,856	4,761	5,005	4,932
gf ₁	0,256	5,85	0,002	2,34
gf ₂	0,256	5,78	0,002	2,28

Indice 1 : tout le complexe
 Indice 2 : paragraphes 1 et 2

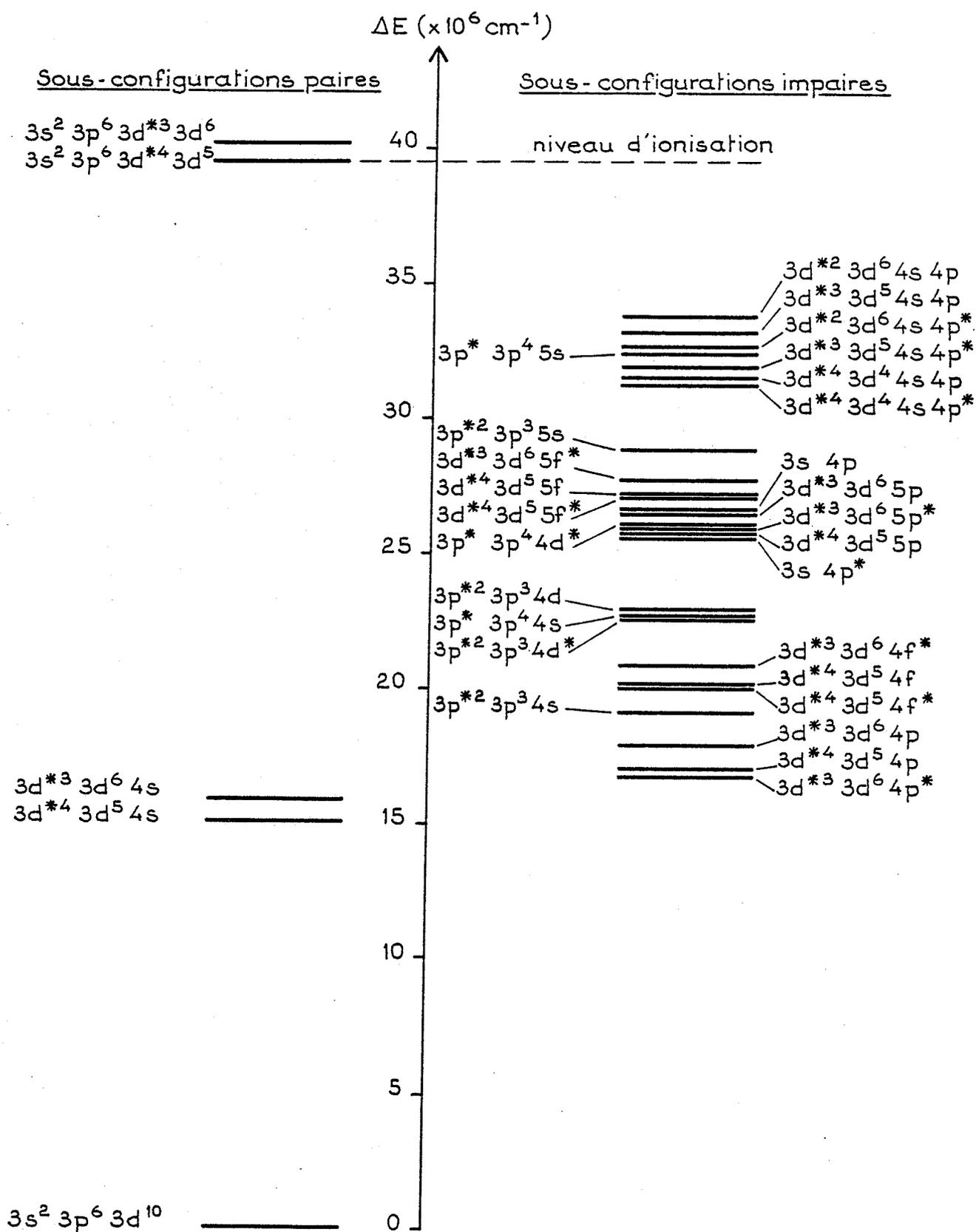
TABLEAU X



Etats de base	Etats propres	[1]	[2]	[3]	[4]	[5]	[6]	[7]	[8]	[9]	[10]	[11]	[12]	[13]
$ 3s3d^{10}4p^{*}> \equiv 1>$		94,80	0,02	0,00	-0,02	-5,00	0,15	0,00	0,00	-0,00	-0,00	0,00	0,00	0,00
$ 3s3d^{10}4p^{*}> \equiv 2>$		-0,01	99,81	0,03	0,00	0,04	-0,04	0,06	0,00	0,00	0,00	0,01	0,00	0,00
$ 3p^{*1}3p^44s^{*}> \equiv 3>$		0,03	-0,04	83,62	0,00	0,00	-14,18	-2,03	-0,02	0,04	0,00	0,03	0,00	0,01
$ 3p^{*2}3p^34s^{*}> \equiv 4>$		0,02	0,00	0,00	99,62	0,00	0,01	0,00	0,00	0,07	0,24	0,02	0,01	0,01
$ 3p^{*1}3p^44d^{*}> \equiv 5>$		4,99	-0,03	0,00	0,00	94,94	0,01	0,00	0,00	-0,00	0,00	0,02	0,00	-0,00
$ 3p^{*2}3p^34d^{*}> \equiv 6>$		-0,13	0,01	15,44	-0,01	0,00	83,19	1,09	0,01	0,00	-0,00	0,00	0,013	0,00
$ 3p^{*2}3p^34d^{*}> \equiv 7>$		0,01	-0,08	0,81	0,00	0,00	-2,25	96,78	0,00	0,00	0,00	0,00	-0,02	0,04
$ 3d^{*3}3d^64p^{*}> \equiv 8>$		0,00	0,00	0,01	0,00	0,00	-0,01	0,00	99,67	0,04	0,25	0,01	0,00	0,00
$ 3d^{*3}3d^64p^{*}> \equiv 9>$		0,00	0,00	-0,03	-0,09	0,00	0,01	0,00	-0,05	99,58	0,22	-0,00	0,00	-0,01
$ 3d^{*4}3d^54p^{*}> \equiv 10>$		0,00	0,00	0,00	-0,23	0,00	0,00	0,00	-0,24	-0,25	99,23	0,02	0,00	0,01
$ 3d^{*3}3d^64f^{*}> \equiv 11>$		-0,01	-0,00	-0,02	-0,01	-0,02	0,00	0,01	-0,00	0,00	-0,01	89,13	0,21	-10,58
$ 3d^{*4}3d^54f^{*}> \equiv 12>$		-0,00	0,00	-0,02	-0,01	0,00	-0,11	0,00	0,00	0,00	-0,00	0,22	92,19	7,45
$ 3d^{*4}3d^54f^{*}> \equiv 13>$		0,00	-0,01	-0,01	-0,01	0,00	0,03	-0,04	-0,00	0,01	-0,02	10,55	-7,44	81,89

TABLEAU XI

FIGURE 9



Energies des sous-configurations de l'ion Au^{+51}

4. AUTRES TRANSITIONS

Toutes les sous-configurations introduites dans ce paragraphe et dans les précédents sont représentées sur le diagramme d'énergie de la figure 9 qui permet de comparer leur énergies moyennes, calculées par le programme RELAC.

4.1. Transitions 3d-5p et 3d-5f

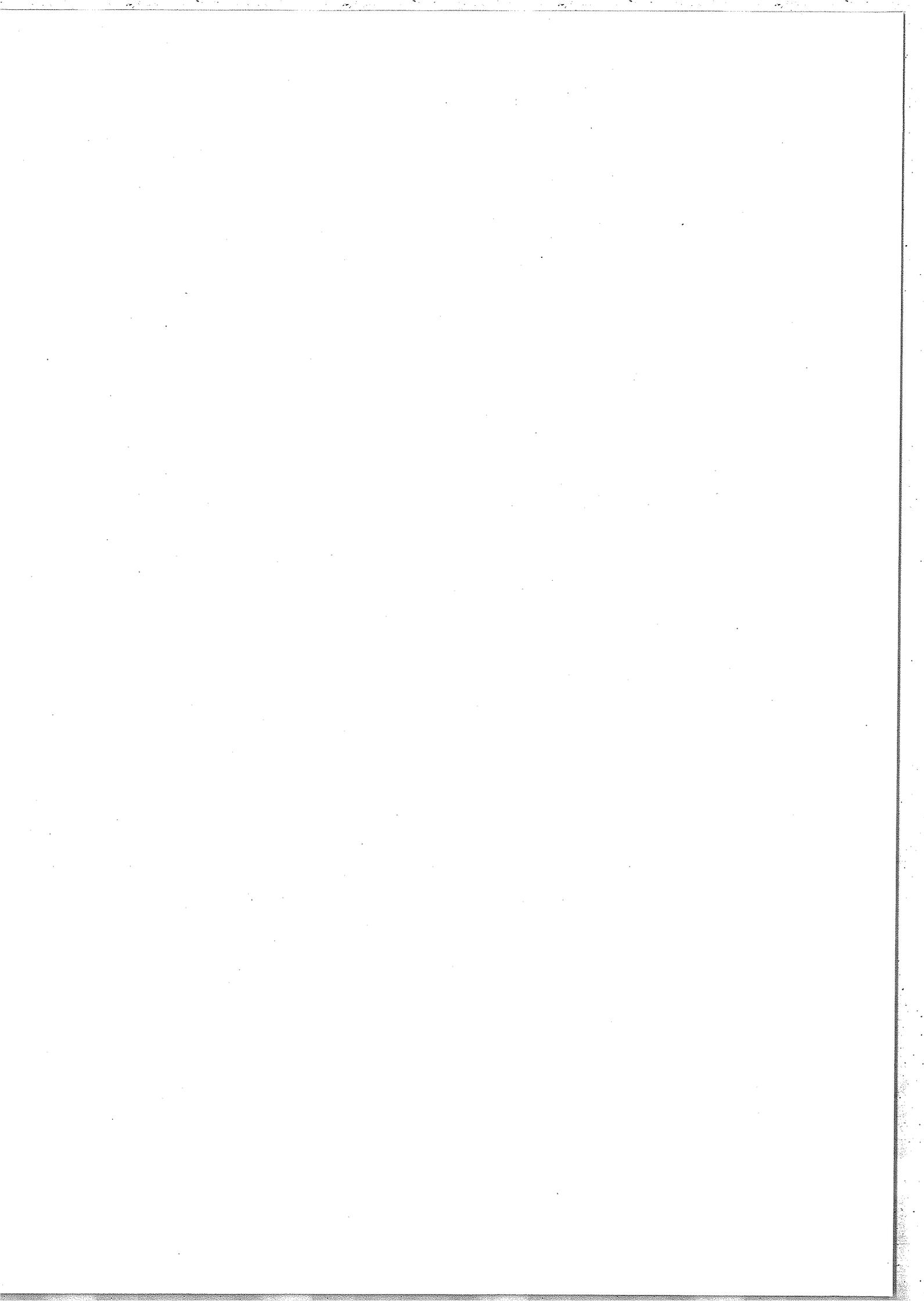
Nous nous intéressons ici aux transitions entre niveau fondamental et niveaux excités tels que les longueurs d'onde associées soient supérieures à 3,5 Å, pour compléter le tableau X où apparaissent des longueurs d'onde supérieures ou égales à 3,725 Å. La figure 9 nous suggère de calculer les transitions 3d-5p et 3d-5f qui tombent dans le bon domaine de longueurs d'onde, contrairement à la transition 3p-5s. Les résultats des calculs sont rassemblés dans le tableau XII.

Raies	$3d_{3/2}-5p_{1/2}$	$3d_{3/2}-5p_{3/2}$	$3d_{5/2}-5p_{3/2}$	$3d_{3/2}-5f_{5/2}$
λ (Å)	3,865	3,785	3,893	3,587
gf	0,036	0,088	0,011	1,13
Raies	$3d_{5/2}-5f_{5/2}$	$3d_{5/2}-5f_{7/2}$		
λ (Å)	3,698	3,677		
gf	0,0005	0,952		

TABLEAU XII

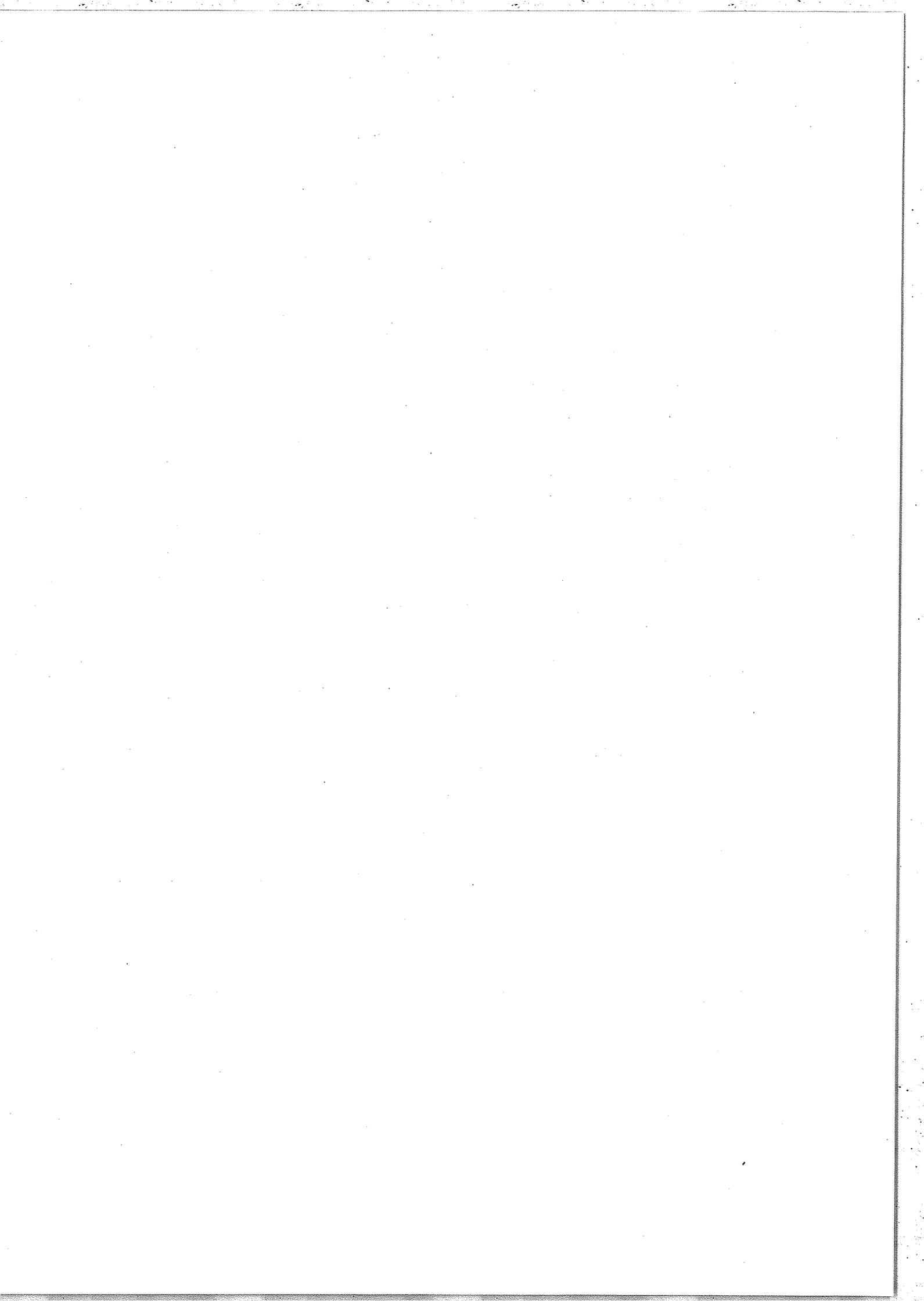
4.2. Transitions vers $3d^9 4s$

Les transitions étudiées jusqu'ici admettent toutes comme configuration inférieure la configuration fondamentale $3s^2 3p^6 3d^{10}$ de l'ion Au^{+5} . On peut envisager pour le même ion l'existence de transitions pour lesquelles le niveau in-



férieure appartiendrait à la configuration excitée la plus profonde : $3d^9 4s$. Cette configuration contient les configurations relativistes $3d_{3/2}^3 3d_{5/2}^4 4s_{1/2}$ et $3d_{3/2}^4 3d_{5/2}^5 4s_{1/2}$ à chacune desquelles correspondent deux niveaux $J = 1$ et $J = 2$ pour la première, $J = 2$ et $J = 3$ pour la seconde.

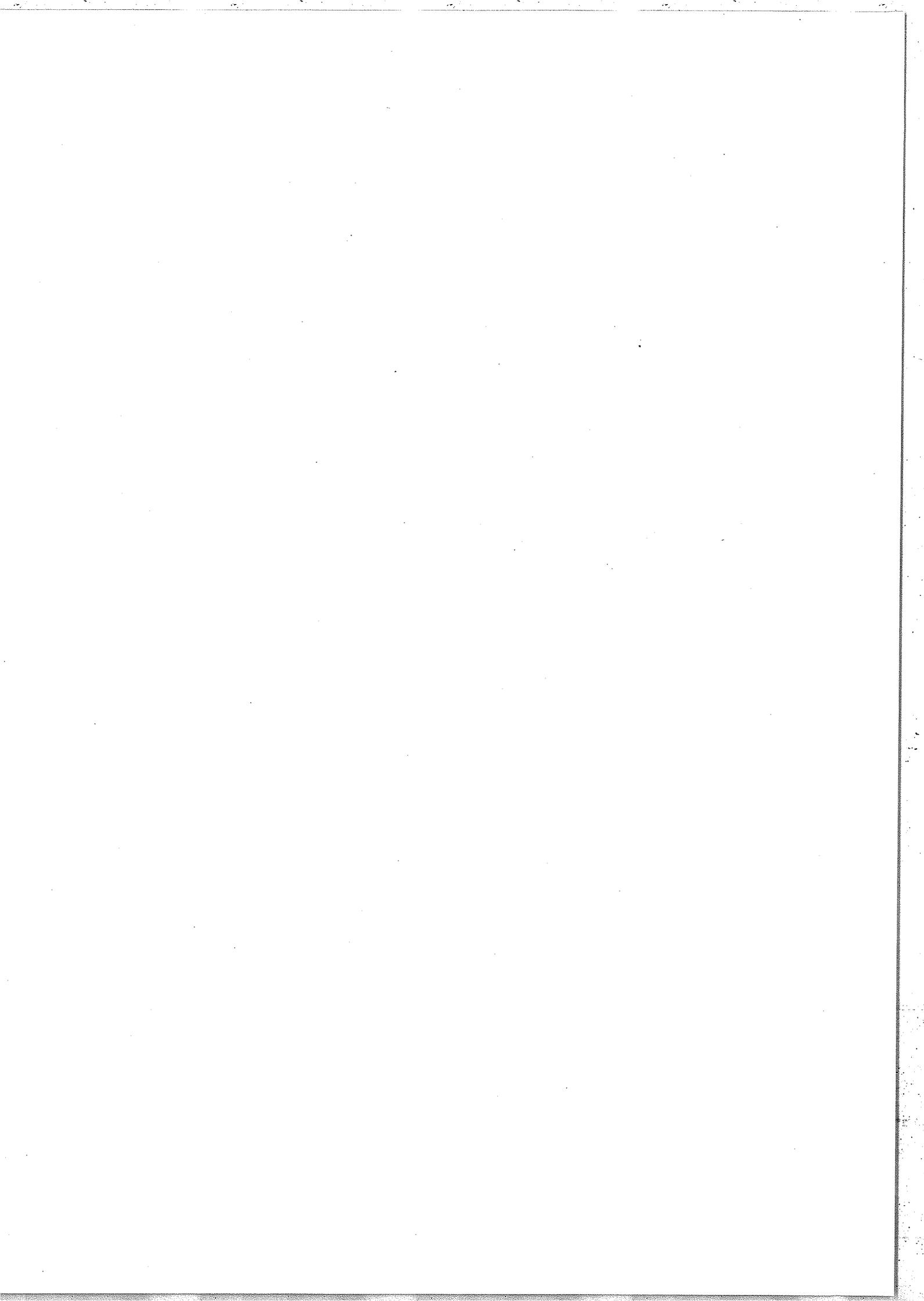
Nous nous sommes limités au calcul de la transition $3d^9 4s - 3d^8 4s 4p$ qui peut être considérée comme une transition satellite de la transition $3d^9 - 3d^8 4p$ (cf. III) dans l'ion Au^{+52} . Les longueurs d'onde correspondantes sont notées Ni(2) dans la troisième colonne du tableau I. Deux des niveaux de la configuration inférieure $3d^9 4s$ possèdent le même nombre quantique total $J = 2$. Nous notons $J = 2+$ le nombre quantique total du niveau d'énergie le plus élevé ($3d_{3/2}^3 3d_{5/2}^6 4s_{1/2}, J=2$) et $J = 2-$ le nombre quantique total de l'autre niveau ($3d_{3/2}^4 3d_{5/2}^5 4s_{1/2}, J=2$). Les longueurs d'onde calculées correspondent aux longueurs d'onde de petites structures du spectre, situées notamment entre les structures C et D, que nous n'avons pu interpréter autrement, notamment par le calcul d'autres transitions dans l'ion Au^{+52} .



NOTICE D'EXPLICATION DU TABLEAU I

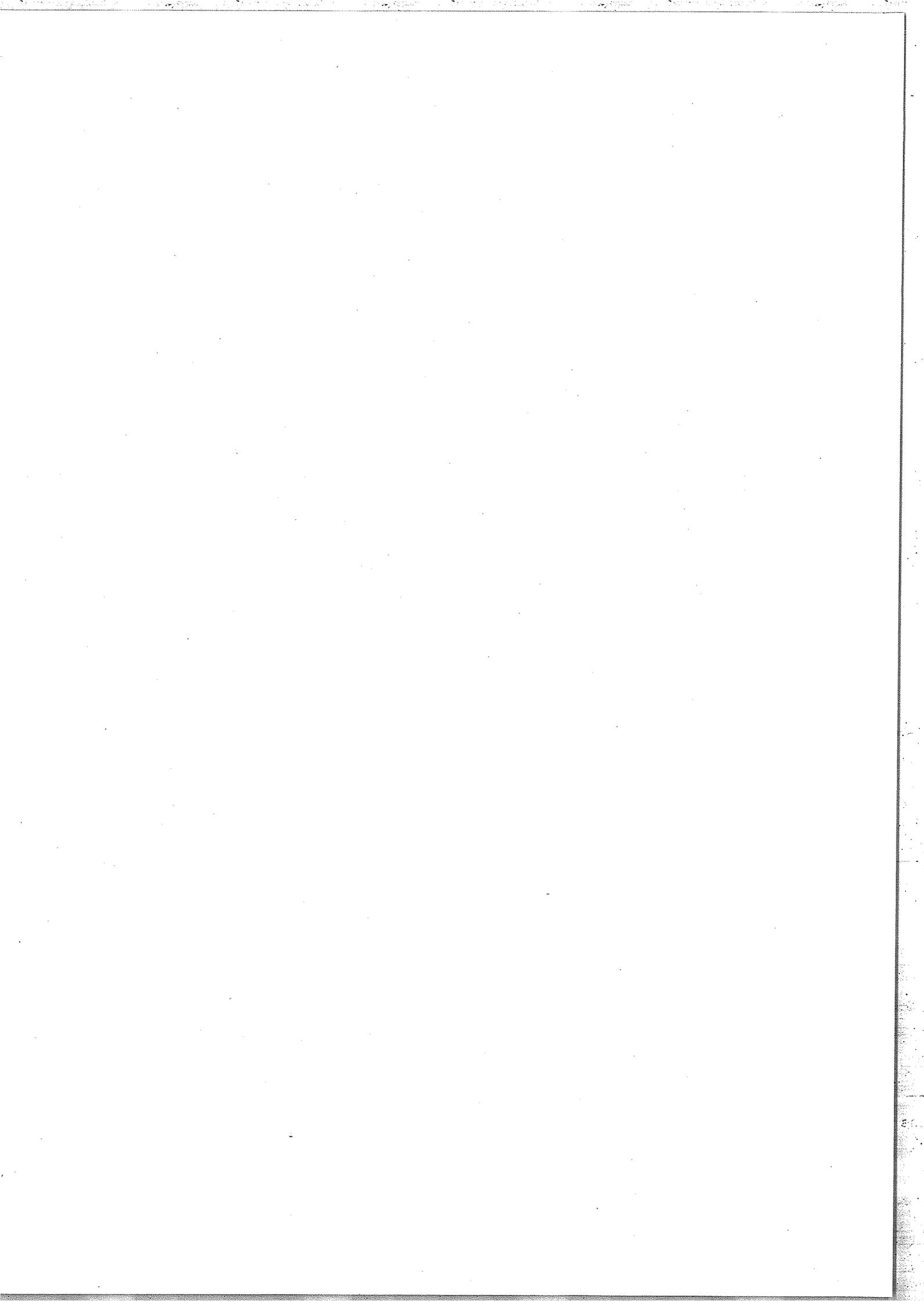
La première colonne regroupe les lettres minuscules et majuscules repérant les différentes structures sur la figure 6, ainsi que les longueurs d'onde expérimentales moyennes qui leur correspondent.

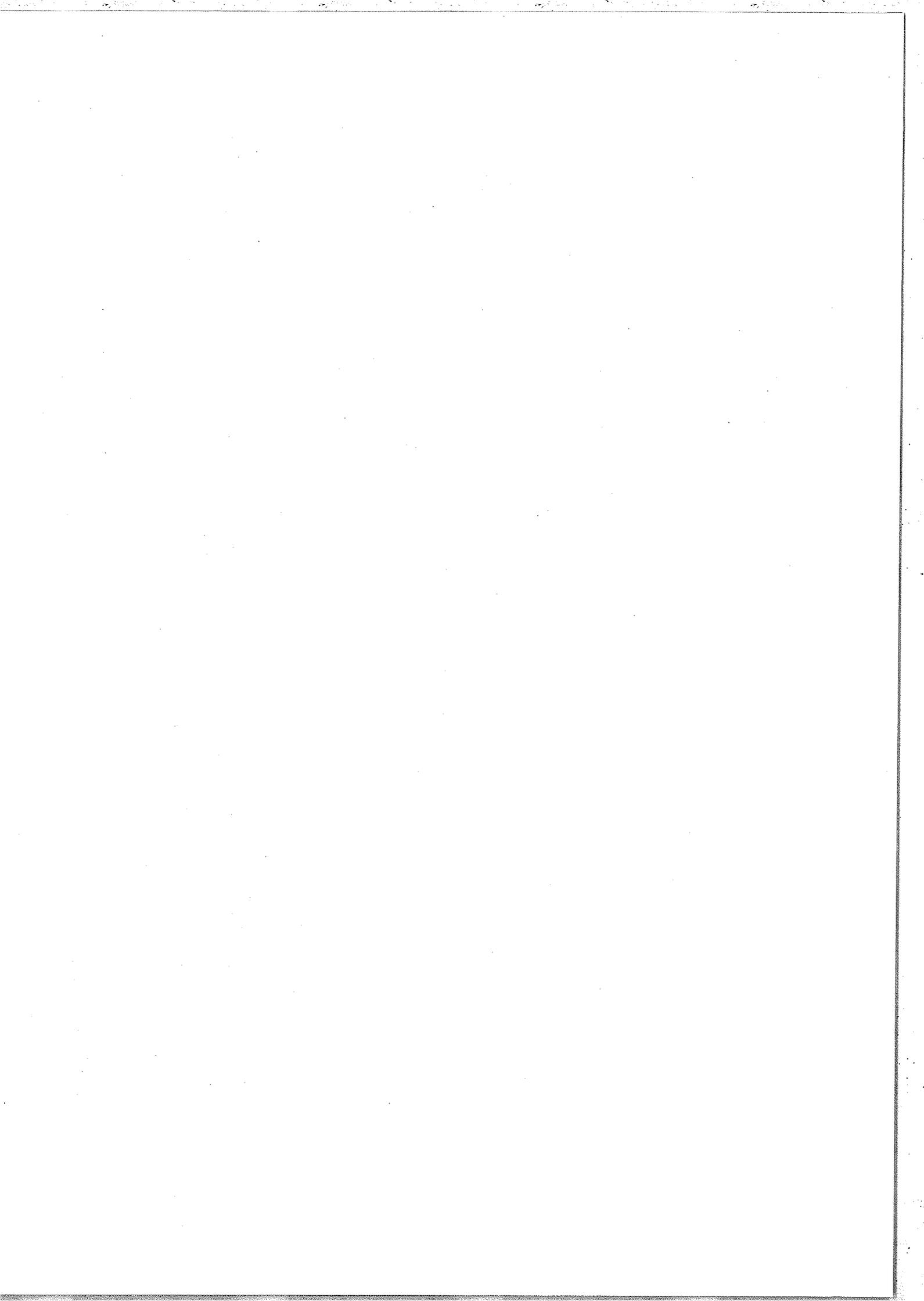
Les autres colonnes font successivement apparaître, pour les raies les plus intenses, la longueur d'onde calculée, la séquence, le facteur gf théorique, la composition du niveau supérieur selon une notation expliquée plus loin, le nombre quantique total J' du niveau supérieur, le nombre quantique total J du niveau inférieur et, pour finir, le saut électronique correspondant à la raie. La notation des niveaux fait apparaître les nombres quantiques j correspondant à chaque électron (ou trou) appartenant à une sous-couche relativiste ouverte et, s'il y a lieu, les nombres quantiques intermédiaires correspondant au couplage de deux d'entre eux. Par exemple, la notation $[(j_a, j_b)J_1, j_c]$ signifie que les nombres quantiques j des deux premiers électrons (ou trous) sont j_a et j_b et sont couplés ensemble en J_1 . Le couplage du nombre quantique j_c du troisième électron avec J_1 donne le nombre quantique total J' du niveau considéré. Les électrons appartenant aux sous-couches fermées n'apparaissent pas dans cette notation. Nous donnons dans la colonne 5 le carré de la composante principale du vecteur propre et, pour quelques transitions, nous indiquons entre parenthèses la valeur de la somme de ses composantes sur tous les vecteurs de base correspondant à la même sous-configuration. L'examen de la colonne 5 montre qu'un couplage extrême, où les nombres quantiques j des électrons (ou trous) sont de "bons" nombres quantiques, est proche du couplage réel, y compris lorsque les nombres quantiques intermédiaires J_1 ne sont pas de "bons" nombres quantiques.

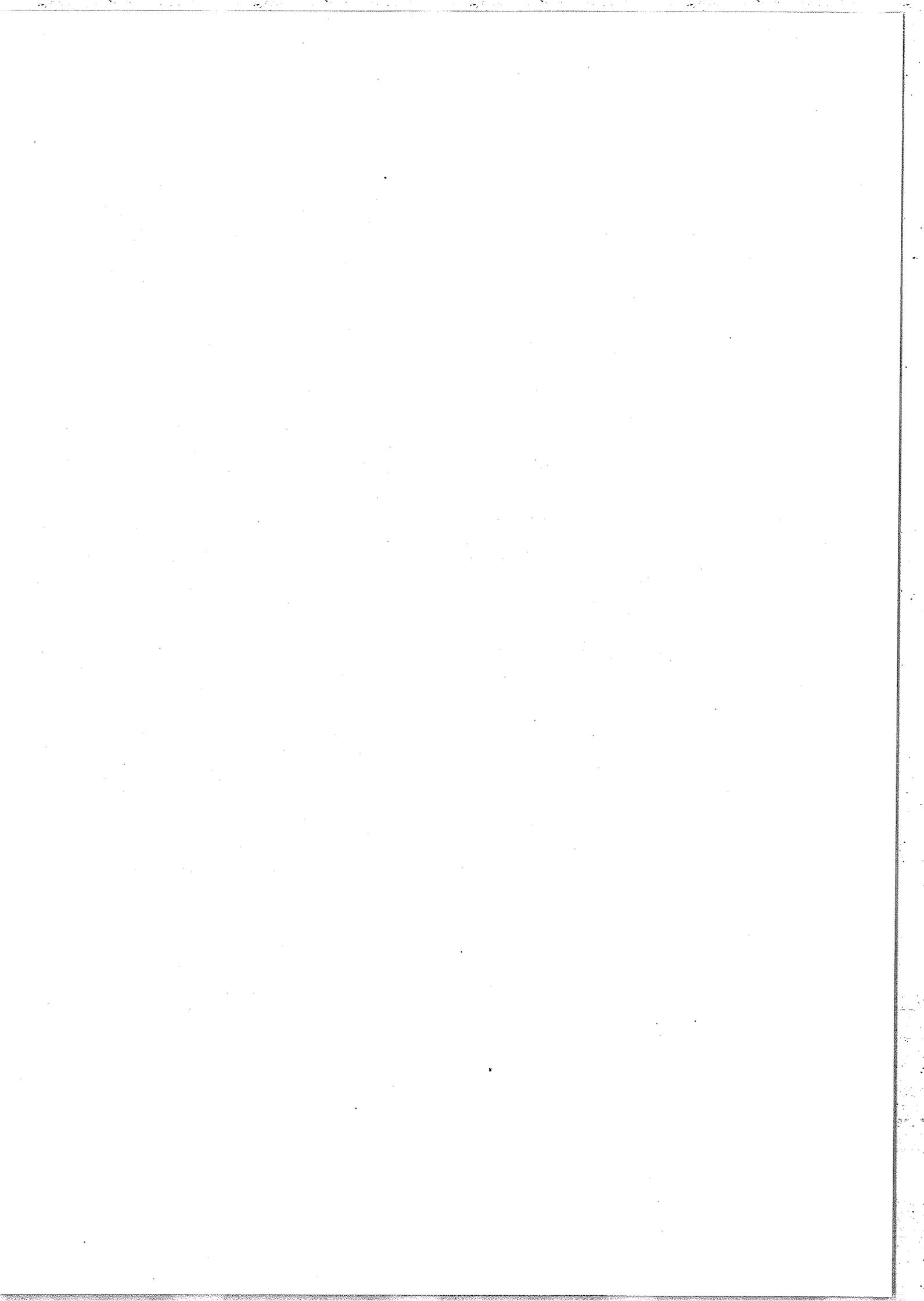


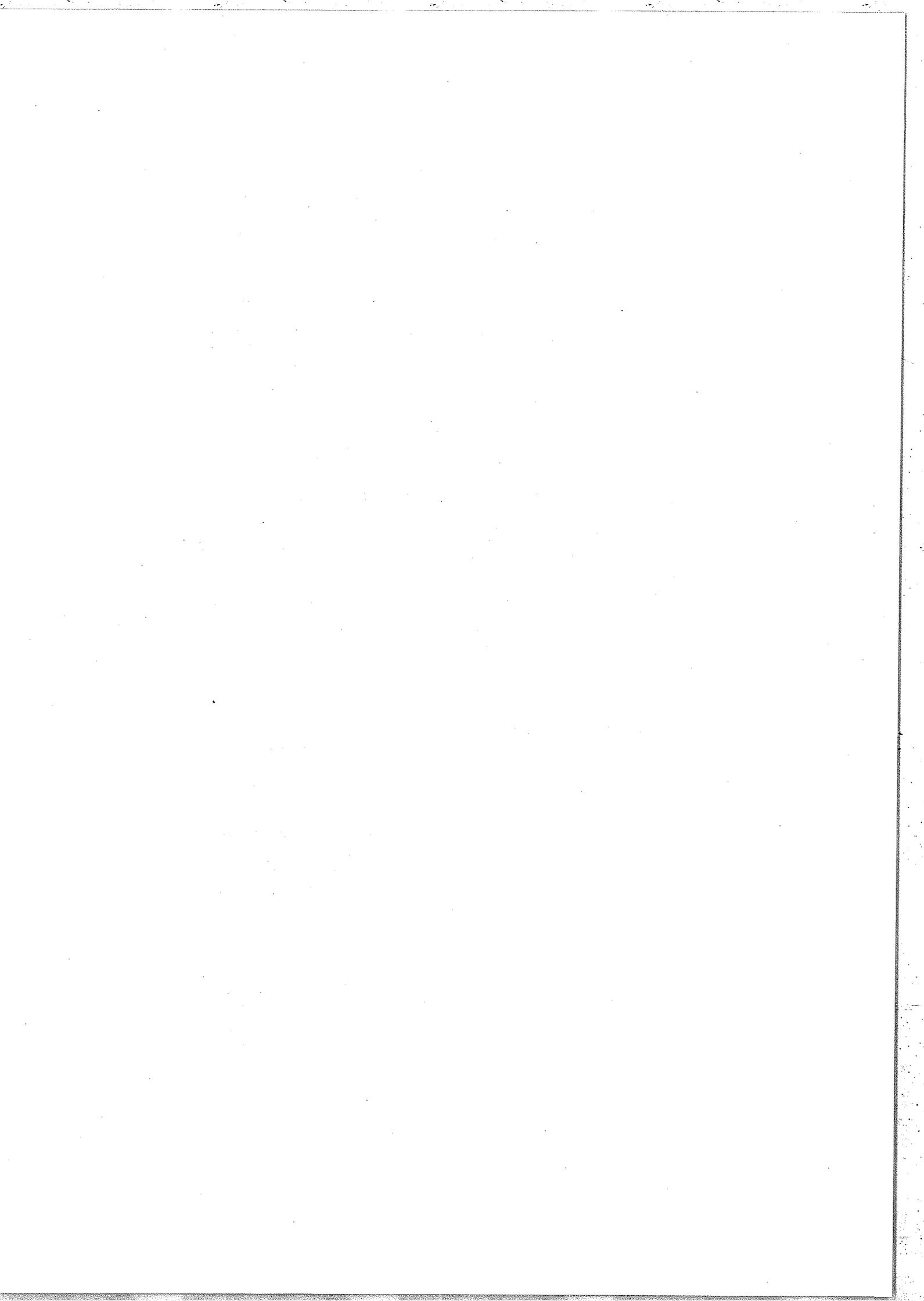
Les niveaux inférieurs correspondent à des sous-configurations constituées de sous-couches fermées auxquelles s'ajoutent un ou deux électrons ou bien un trou. Les énergies de toutes les transitions calculées pour chaque ion sont inférieures au potentiel d'ionisation correspondant.

La comparaison des deux premières colonnes entre elles montre que le désaccord entre les valeurs expérimentales et les valeurs calculées des longueurs d'onde est généralement inférieur à $0,01 \text{ \AA}$.









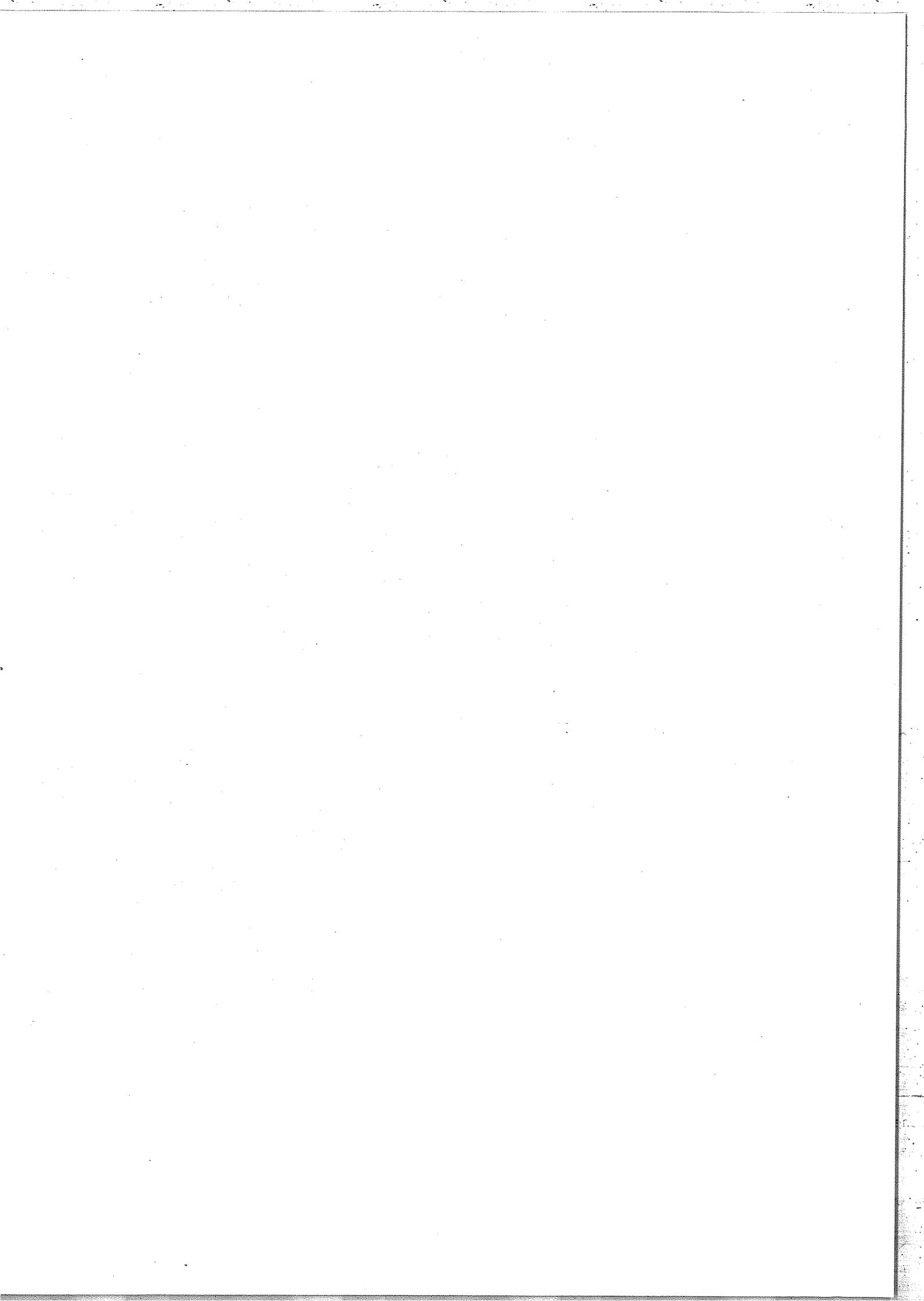


TABLEAU I (suite)

λ exp	λ th	ion	gf	χ	χ	configuration	J'	J	saut
	5.085	Co(1)	0.270	98.81		[(3/2, 5/2)1, 1/2]	3/2	5/2	3p-4s
	5.106	Co(1)	0.471	97.40		[(3/2, 5/2)3, 1/2]	5/2	5/2	3p-4s
	5.114	Co(1)	0.164	97.35		[(3/2, 5/2)3, 1/2]	7/2	5/2	3p-4s
	5.114	Co(1)	0.614	95.89		[(3/2, 3/2)3, 1/2]	5/2	3/2	3p-4s
	5.114	Co(1)	0.215	75.93		[(3/2, 3/2)1, 1/2]	1/2	3/2	3p-4s
	5.117	Co(1)	0.217	93.09		[(3/2, 3/2)1, 1/2]	3/2	3/2	3p-4s
	5.138	Co(1)	0.223	93.17		[(3/2, 3/2)2, 1/2]	3/2	3/2	3p-4s
	5.147	Co(1)	0.169	98.92		[(3/2, 5/2)2, 1/2]	3/2	5/2	3p-4s
	5.150	Co(1)	0.191	99.13		[(3/2, 5/2)2, 1/2]	5/2	5/2	3p-4s
	5.166	Co(1)	0.715	99.75		[(3/2, 5/2)3, 1/2]	7/2	5/2	3p-4s
λ : 5.22	5.219	Ni(1)	0.367	100.00		(3/2, 1/2)	1	0	3p-4s
	5.232	Cu(2)	0.179	59.10		[(3/2, 1/2)2, 3/2]	3/2	3/2	3p-4s
	5.240	Cu(2)	0.380	56.56		[(3/2, 1/2)1, 3/2]	5/2	3/2	3p-4s
	5.243	Zn(3)	0.093	69.27		[(3/2, 1/2)2, (3/2, 3/2)2]	1	2+	3p-4s
	5.253	Cu(1)	0.337	100.00		(3/2)	3/2	1/2	3p-4s
	5.262	Zn(3)	0.041	69.26		[(3/2, 1/2)2, 1/2 5/2, 3/2]	1	2-	3p-4s
	5.266	Cu(2)	0.222	99.55		[(3/2, 1/2)1, 1/2]	1/2	1/2	3p-4s
	5.266	Cu(2)	0.204	90.82		[(3/2, 1/2)1, 3/2]	1/2	3/2	3p-4s
	5.269	Cu(2)	0.380	85.24		[(3/2, 1/2)1, 1/2]	3/2	1/2	3p-4s
	5.273	Zn(2)	0.210	100.00		(3/2, 3/2)	2	2	3p-4s
	5.277	Zn(3)	0.125	46.05		[(3/2, 1/2)2, 1/2 3/2, 3/2]	1	1	3p-4s
	5.277	Zn(3)	0.513	65.46		[(3/2, 1/2)1, (3/2, 3/2)2]	3	2+	3p-4s
	5.278	Zn(2)	0.083	99.73		(3/2, 3/2)	0	1+	3p-4s
	5.279	Cu(2)	0.287	57.06		[(3/2, 1/2)2, 3/2]	5/2	3/2	3p-4s
	5.285	Zn(3)	0.301	55.65		[(3/2, 1/2)1, 1/2 1/2, 3/2]	2	1	3p-4s
	5.286	Cu(2)	0.264	59.97		[(3/2, 1/2)1, 3/2]	3/2	3/2	3p-4s
	5.286	Zn(2)	0.043	99.86		(3/2, 3/2)	1	2	3p-4s
	5.286	Zn(2)	0.589	100.00		(3/2, 3/2)	3	2	3p-4s
	5.288	Zn(2)	0.168	99.88		(3/2, 1/2)	1	0	3p-4s
	5.288	Zn(3)	0.191	57.79		[(3/2, 1/2)2, 1/2 5/2, 3/2]	2	2-	3p-4s
	5.293	Cu(2)	0.063	85.72		[(3/2, 1/2)2, 1/2]	3/2	1/2	3p-4s
	5.295	Zn(3)	0.400	51.40		[(3/2, 1/2)1, 1/2 3/2, 3/2]	3	2-	3p-4s
	5.297	Zn(3)	0.058	55.65		[(3/2, 1/2)1, 1/2 1/2, 3/2]	2	2-	3p-4s
	5.302	Zn(3)	0.326	97.11		[(3/2, 1/2)1, (3/2, 3/2)0]	1	0+	3p-4s
	5.304	Zn(3)	0.515	91.86		[(3/2, 1/2)1, (3/2, 3/2)2]	2	2+	3p-4s
	5.304	Zn(2)	0.416	100.00		(3/2, 1/2)	2	2+	3p-4s
	5.308	Zn(2)	0.084	99.88		(3/2, 1/2)	2	1-	3p-4s
	5.317	Zn(3)	0.272	56.09		[(3/2, 1/2)1, 1/2 1/2, 3/2]	1	2-	3p-4s
	5.318	Zn(3)	0.108	95.90		[(3/2, 1/2)1, 1/2 3/2, 3/2]	1	1-	3p-4s
	5.321	Zn(2)	0.207	100.00		(3/2, 3/2)	2	1+	3p-4s
	5.322	Zn(3)	0.329	98.61		[(3/2, 1/2)1, (1/2, 1/2)0]	1	0-	3p-4s
	5.326	Zn(3)	0.357	46.40		[(3/2, 1/2)1, 1/2 3/2, 3/2]	3	2-	3p-4s
	5.331	Zn(3)	0.240	71.79		[(3/2, 1/2)1, (3/2, 3/2)2]	1	2+	3p-4s
	5.331	Zn(3)	0.286	33.83		[(3/2, 1/2)2, 1/2 3/2, 3/2]	2	2-	3p-4s
	5.334	Zn(2)	0.206	99.86		(3/2, 3/2)	1	1+	3p-4s
	5.337	Zn(3)	0.262	65.25		[(3/2, 1/2)2, (3/2, 3/2)2]	3	2+	3p-4s
	5.339	Zn(3)	0.227	35.65		[(3/2, 1/2)2, 1/2 3/2, 3/2]	2	1	3p-4s
	5.344	Zn(3)	0.191	45.84		[(3/2, 1/2)1, 1/2 3/2, 3/2]	1	1	3p-4s

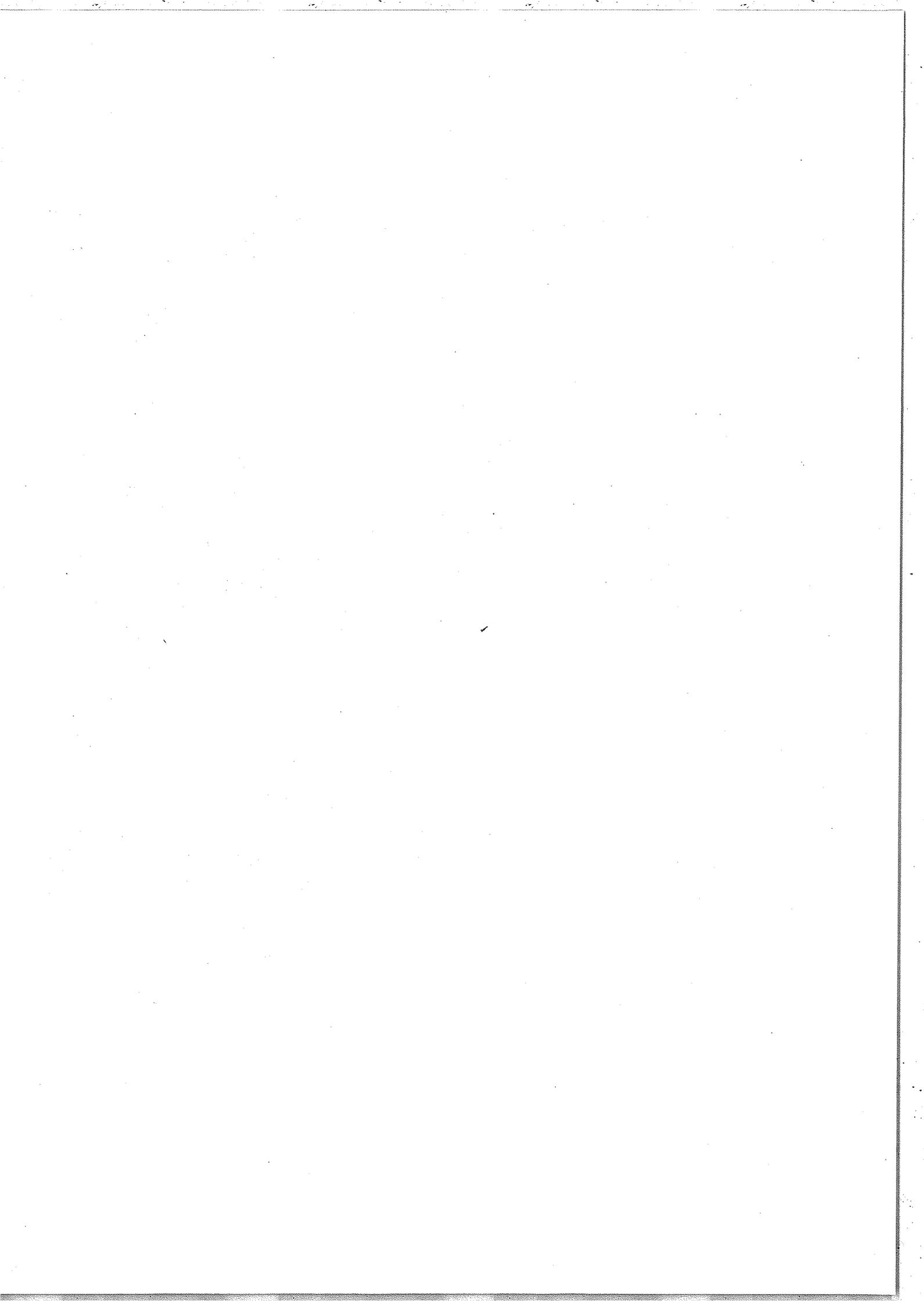


TABLEAU I (suite)

λ exp	λ th	ion	gf	x	x	configuration	J'	J	saut
A : 5.62	5.620	Ni(1)	0.024	99.76		(3/2, 3/2)	1	0	3d-4p
	5.684	Co(1)	0.238	90.38		(3/2, 5/2)4, 3/2	5/2	3/2	3d-4p
	5.687	Co(1)	0.194	97.18		(5/2, 5/2)2, 3/2	3/2	5/2	3d-4p
B : 5.69	5.693	Co(1)	0.117	95.74		(3/2, 5/2)2, 3/2	1/2	3/2	3d-4p
	5.694	Co(1)	0.081	88.46		(3/2, 5/2)2, 3/2	5/2	5/2	3d-4p
	5.699	Co(1)	0.216	95.51		(5/2, 5/2)2, 3/2	3/2	3/2	3d-4p
	5.700	Co(1)	0.055	97.53		(3/2, 5/2)2, 3/2	5/2	5/2	3d-4p
	5.703	Co(2)	0.217	97.63		(1/2, 5/2)3, 3/2	3/2	1/2	3d-4p
	5.703	Co(2)	0.177	95.33		(3/2, 5/2)3, 3/2	3/2	3/2	3d-4p
	5.715	Co(1)	0.227	95.13		(5/2, 5/2)4, 3/2	5/2	5/2	3d-4p
	5.717	Co(1)	0.228	85.75		(5/2, 5/2)4, 3/2	7/2	5/2	3d-4p
	5.718	Ni(2)	0.084	83.68		((5/2, 5/2)2, 1/2	1	2-	3d-4p
	5.718	Co(2)	0.124	99.32		((1/2, 5/2)2, 3/2	1/2	1/2	3d-4p
	5.721	Ni(2)	0.078	47.77		((5/2, 5/2)2, 1/2	2	3	3d-4p
	5.721	Ni(2)	0.287	96.33		((3/2, 5/2)4, 1/2	3	2+	3d-4p
C : 5.72	5.722	Co(1)	0.138	98.18		((3/2, 5/2)3, 3/2	3/2	3/2	3d-4p
	5.724	Ni(2)	0.061	81.33		((3/2, 5/2)2, 1/2	1	1	3d-4p
	5.727	Ni(2)	0.111	47.77		((3/2, 5/2)2, 1/2	2	2-	3d-4p
	5.738	Ni(2)	0.090	58.19		((5/2, 5/2)4, 1/2	4	3	3d-4p
	5.740	Ni(2)	0.107	62.37		((3/2, 5/2)2, 1/2	3	2+	3d-4p
	5.741	Ni(2)	0.207	74.59		((5/2, 5/2)4, 1/2	3	3	3d-4p
	5.744	Co(2)	0.196	62.63		((3/2, 5/2)2, 3/2	5/2	3/2	3d-4p
	5.747	Ni(2)	0.150	74.59		((5/2, 5/2)4, 1/2	3	2-	3d-4p
	5.755	Ni(2)	0.058	86.84		((3/2, 5/2)3, 1/2	2	1	3d-4p
	5.759	Ni(2)	0.119	86.84		((3/2, 5/2)3, 1/2	2	2+	3d-4p
	5.761	Ni(2)	0.054	87.39		((3/2, 5/2)2, 1/2	3	2+	3d-4p
	5.764	Ni(2)	0.199	81.99		((3/2, 5/2)4, 1/2	2	2+	3d-4p
	5.767	Ni(2)	0.059	81.99		((3/2, 5/2)4, 1/2	2	2+	3d-4p
	5.768	Ni(2)	0.054	95.59		((3/2, 5/2)2, 1/2	1	2+	3d-4p
	5.769	Ni(2)	0.199	73.21		((5/2, 5/2)2, 1/2	2	3	3d-4p
	5.772	Ni(2)	0.059	85.25		((5/2, 5/2)2, 1/2	1	2-	3d-4p
	5.775	Co(2)	0.163	70.83		((3/2, 5/2)2, 1/2	5/2	3/2	3d-4p
	5.779	Ni(2)	0.058	62.23		((5/2, 5/2)4, 3/2	3	3	3d-4p
	5.791	Ni(2)	0.197	77.82		((5/2, 5/2)2, 1/2	3	3	3d-4p
	5.794	Co(1)	0.068	98.37		((3/2, 3/2)0, 1/2	1/2	3/2	3d-4p
	5.796	Ni(2)	0.067	77.82		((5/2, 5/2)4, 1/2	3	2-	3d-4p
	5.796	Ni(2)	0.221	97.89		((5/2, 5/2)4, 1/2	2	2-	3d-4p
	5.796	Ni(2)	0.179	49.84		((5/2, 5/2)4, 1/2	4	3	3d-4p
	5.800	Ni(2)	0.093	98.46		((3/2, 5/2)3, 1/2	1	1	3d-4p

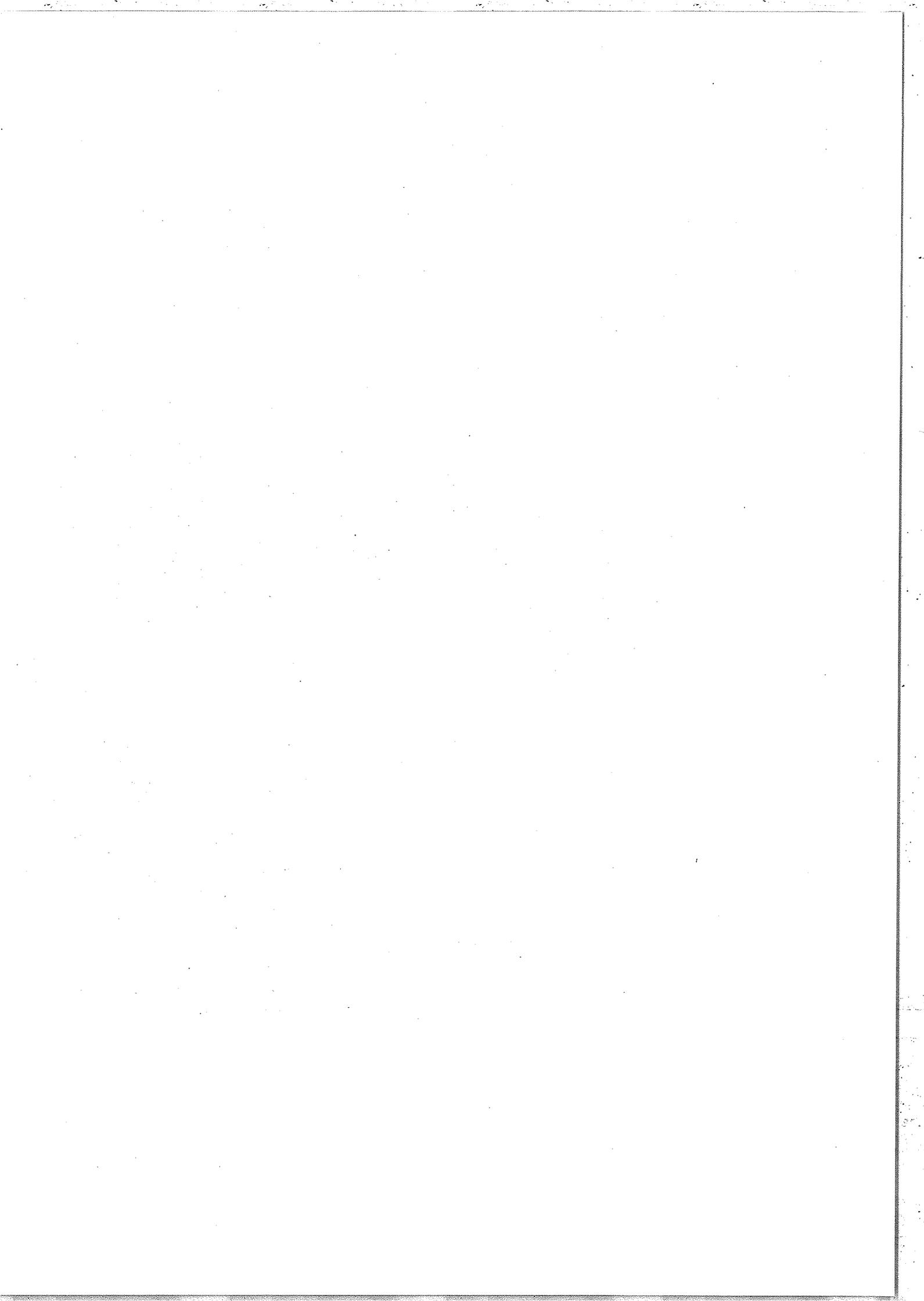


TABLEAU I (suite)

λ exp	λ th	ion	gf	x	x	configuration	J'	J	saut
	5.836	Co(1)	0.352	98.69		$\{(3/2, 5/2)4, 1/2\}$	7/2	5/2	3d-4p
	5.839	Co(1)	0.153	92.25		$\{(3/2, 5/2)1, 1/2\}$	3/2	5/2	3d-4p
D : 5.86	5.852	Ni(2)	0.086	97.49		$\{(3/2, 3/2)0, 1/2\}$	1	2+	3d-4p
	5.856	Co(1)	0.144	96.26		$\{(3/2, 5/2)2, 1/2\}$	5/2	5/2	3d-4p
	5.857	Ni(1)	0.259	99.55		$\{(5/2, 3/2)\}$	1	0	3d-4p
	5.859	Co(1)	0.273	91.91		$\{(3/2, 5/2)2, 1/2\}$	3/2	3/2	3d-4p
	5.872	Co(1)	0.069	99.27		$\{(3/2, 3/2)2, 1/2\}$	5/2	3/2	3d-4p
	5.872	Co(2)	0.243	94.43		$\{(3/2, 3/2)3, 1/2\}$	5/2	3/2	3d-4p
	5.886	Co(1)	0.131	96.69		$\{(3/2, 5/2)3, 1/2\}$	7/2	5/2	3d-4p
	5.887	Cu(1)	0.140	88.08		$\{(5/2, 1/2)3, 3/2\}$	3/2	1/2	3d-4p
	5.894	Ni(2)	0.283	98.37		$\{(3/2, 5/2)4, 1/2\}$	3	2-	3d-4p
	5.894	Cu(2)	0.166	95.35		$\{(5/2, (3/2, 3/2)2\}$	3/2	3/2	3d-4p
E : 5.90	5.896	Cu(2)	0.277	68.52		$\{(5/2, (3/2, 3/2)2\}$	5/2	3/2	3d-4p
	5.897	Ni(2)	0.150	95.65		$\{(3/2, 5/2)1, 1/2\}$	2	3	3d-4p
	5.904	Ni(2)	0.123	82.81		$\{(3/2, 5/2)1, 1/2\}$	1	2-	3d-4p
	5.905	Ni(2)	0.260	71.46		$\{(3/2, 5/2)4, 1/2\}$	4	3	3d-4p
	5.905	Co(2)	0.193	94.03		$\{(1/2, 3/2)2, 1/2\}$	3/2	1/2	3d-4p
	5.909	Ni(2)	0.150	71.78		$\{(3/2, 5/2)4, 1/2\}$	4	3	3d-4p
	5.912	Ni(2)	0.136	96.73		$\{(3/2, 5/2)2, 1/2\}$	3	3	3d-4p
	5.917	Ni(2)	0.171	97.41		$\{(3/2, 3/2)2, 1/2\}$	1	1	3d-4p
	5.919	Cu(2)	0.236	81.36		$\{(5/2, 1/2)3, 3/2\}$	3/2	1/2	3d-4p
	5.921	Cu(2)	0.106	93.56		$\{(5/2, 1/2)2, 3/2\}$	1/2	1/2	3d-4p
	5.922	Ni(2)	0.292	67.12		$\{(3/2, 3/2)2, 1/2\}$	2	2+	3d-4p
	5.923	Ni(2)	0.124	88.84		$\{(3/2, 5/2)2, 1/2\}$	2	2-	3d-4p
	5.924	Zn(2)	0.105	87.89		$\{(5/2, 1/2)3, (3/2, 3/2)0\}$	3	2	3d-4p
	5.929	Ni(2)	0.083	98.59		$\{(3/2, 3/2)2, 1/2\}$	3	2+	3d-4p
	5.938	Cu(1)	0.123	99.55		$\{(5/2, 1/2)2, 3/2\}$	1/2	1/2	3d-4p
	5.941	Cu(1)	0.104	88.59		$\{(5/2, 1/2)2, 3/2\}$	3/2	1/2	3d-4p
	5.947	Zn(2)	0.051	19.76		$\{(5/2, 1/2)3, 1/2\}$	2	1-	3d-4p
	5.949	Ni(2)	0.067	84.82		$\{(3/2, 5/2)3, 1/2\}$	2	2-	3d-4p
	5.949	Zn(3)	0.051	99.66		$\{(5/2, 1/2)2, (3/2, 3/2)2\}$	1	1	3d-4p
	5.950	Ni(2)	0.080	67.22		$\{(3/2, 3/2)2, 1/2\}$	1	1	3d-4p
	5.951	Zn(3)	0.353	99.64		$\{(5/2, (3/2, 3/2)3/2\}$	3	2+	3d-4p
	5.952	Zn(3)	0.110	79.43		$\{(5/2, (3/2, 3/2)3/2\}$	2	2+	3d-4p
	5.957	Zn(2)	0.139	46.32		$\{(5/2, 1/2)3, 1/2\}$	2	2+	3d-4p
	5.957	Ni(2)	0.169	90.99		$\{(3/2, 5/2)3, 1/2\}$	3	1+	3d-4p
	5.959	Zn(2)	0.072	53.77		$\{(3/2, 5/2)3, 1/2\}$	2	2-	3d-4p
	5.962	Zn(3)	0.209	62.71		$\{(5/2, 1/2)3, (3/2, 3/2)2\}$	2	2-	3d-4p
	5.964	Zn(3)	0.244	69.30		$\{(5/2, 1/2)2, (3/2, 3/2)2\}$	2	2-	3d-4p
	5.964	Zn(3)	0.370	56.08		$\{(5/2, 1/2)3, (3/2, 3/2)2\}$	3	1+	3d-4p
	5.964	Zn(2)	0.093	85.65		$\{(5/2, 1/2)3, (3/2, 3/2)2\}$	3	2-	3d-4p
	5.965	Zn(2)	0.196	70.55		$\{(5/2, 1/2)3, (3/2, 3/2)2\}$	1	1+	3d-4p
	5.965	Zn(3)	0.049	99.66		$\{(5/2, 1/2)2, (3/2, 3/2)2\}$	2	2-	3d-4p
	5.969	Zn(3)	0.060	99.53		$\{(5/2, 1/2)3, (3/2, 3/2)2\}$	1	1	3d-4p
	5.969	Zn(2)	0.254	57.45		$\{(5/2, 1/2)2, (3/2, 3/2)3\}$	1	2	3d-4p
	5.971	Zn(2)	0.058	82.81		$\{(5/2, 1/2)2, (3/2, 3/2)2\}$	1	2	3d-4p

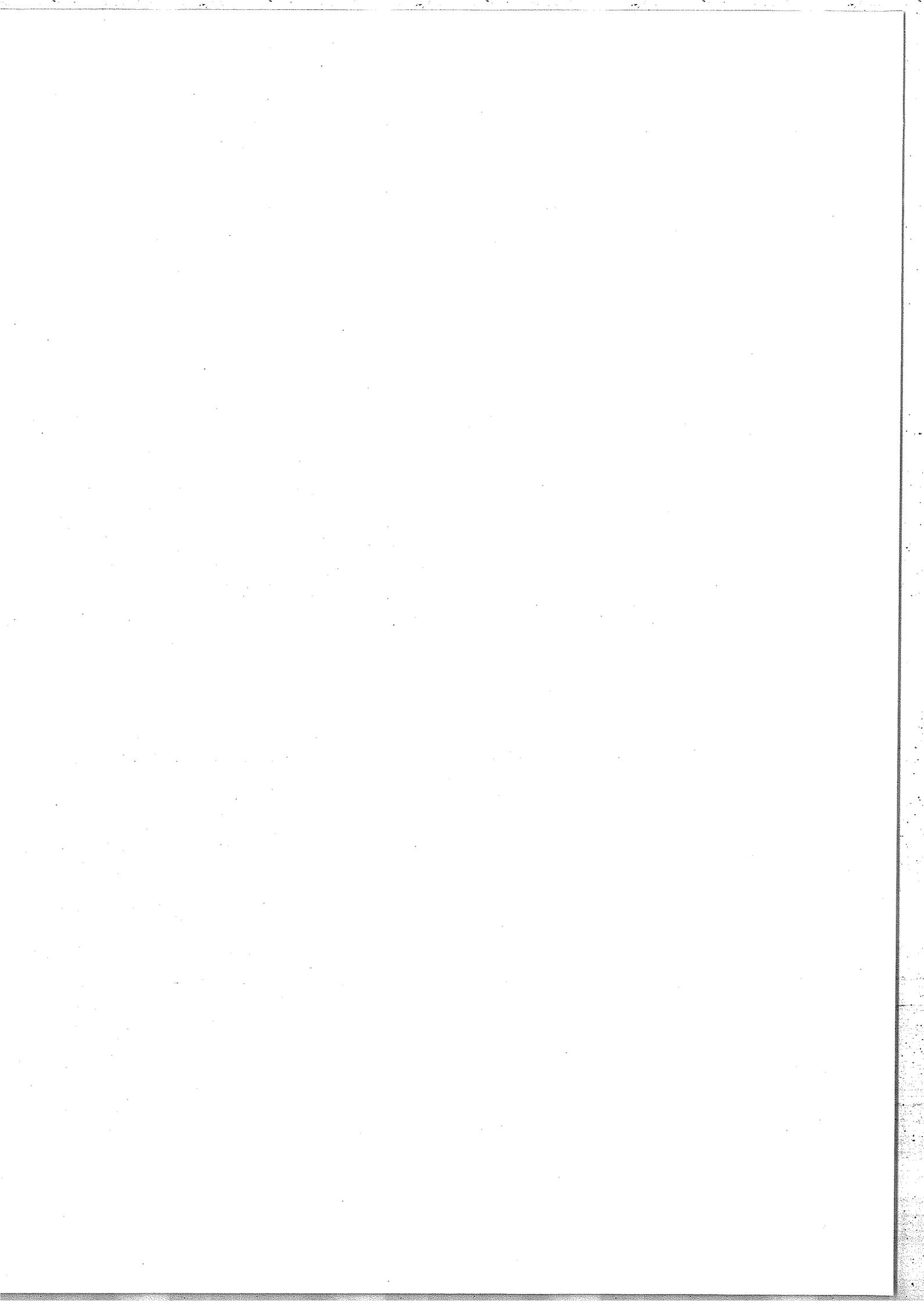
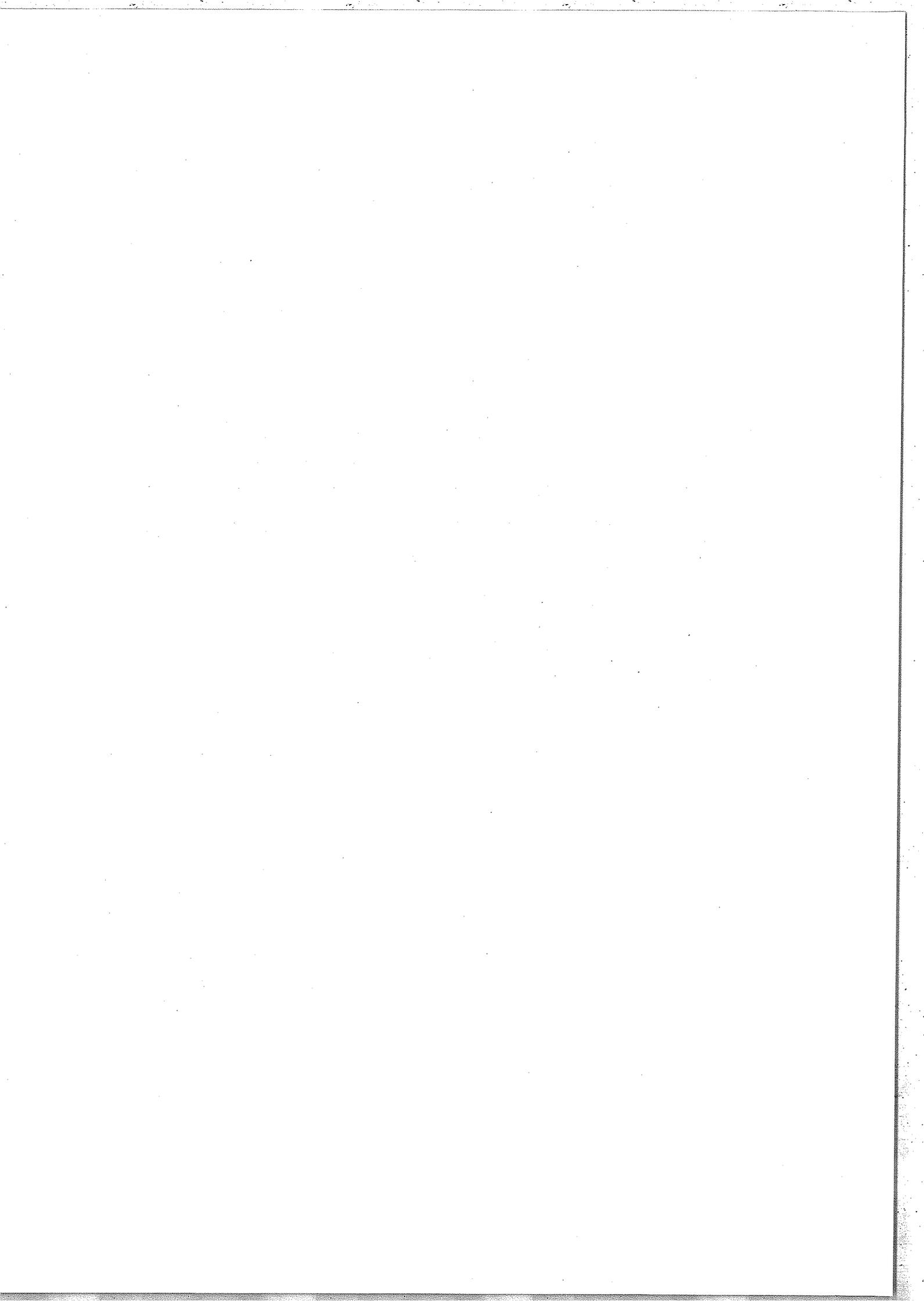


TABLEAU I (suite)

λ_{exp}	λ_{th}	ion	gf	x	x	configuration	J'	J	saut
	5.981	Zn(2)	0.136	89.24		{(5/2, 1/2)2, (3/2, 3/2)0}	2	1+	3d-4p
	5.989	Zn(1)	0.214	99.52		{(5/2, 3/2)}	1	0	3d-4p
	5.994	Zn(2)	0.056	98.82		{(5/2, 1/2)2, 1/2 3/2, 3/2}	0	1-	3d-4p
	5.997	Zn(2)	0.121	79.28		{(5/2, 1/2)2, 1/2 3/2, 3/2}	1	1-	3d-4p
	6.000	Zn(2)	0.141	76.80		{(5/2, 1/2)2, 1/2 5/2, 3/2}	1	0	3d-4p
	6.000	Zn(2)	0.079	44.81		{(5/2, 1/2)2, 1/2 3/2, 3/2}	2	1-	3d-4p
G :	6.01	Ni(1)	0.159	99.72		{(3/2, 1/2)}	1	0	3d-4p
	6.035	Ga	0.177	99.63		{5/2, (3/2, 3/2)2}	3/2	3/2	3d-4p
	6.037	Ga	0.341	90.33		{5/2, (3/2, 3/2)2}	5/2	3/2	3d-4p
	6.042	Ga	0.114	99.77		{(5/2, 1/2)2, 3/2}	1/2	1/2	3d-4p
	6.044	Ga	0.161	66.79 (99.80)		{(5/2, 1/2)2, 3/2}	3/2	1/2	3d-4p
	6.058	Ga	0.086	66.36 (99.44)		{(5/2, 1/2)3, 3/2}	3/2	1/2	3d-4p
	6.060	Cu(2)	0.138	99.39		{3/2, (1/2, 1/2)0}	3/2	1/2	3d-4p
	6.061	Cu(2)	0.153	49.71		{3/2, (1/2)1, 3/2}	3/2	3/2	3d-4p
	6.065	Cu(2)	0.164	65.17		{(3/2, 1/2)1, 3/2}	5/2	3/2	3d-4p
	6.071	Cu(1)	0.087	99.06		{(3/2, 1/2)1, 1/2}	1/2	1/2	3d-4p
H :	6.08	Cu(2)	0.084	85.24		{(3/2, 1/2)1, 3/2}	1/2	3/2	3d-4p
	6.074	Cu(1)	0.160	61.82		{(3/2, 1/2)2, 1/2}	3/2	1/2	3d-4p
	6.075	Cu(2)	0.079	70.66		{(3/2, 1/2)2, 3/2}	5/2	3/2	3d-4p
	6.096	Zn(3)	0.091	99.37		{(3/2, (1/2, 1/2)0 3/2, 3/2)}	2	1	3d-4p
	6.105	Zn(3)	0.095	99.35		{(3/2, (1/2, 1/2)0 3/2, 3/2)}	1	1	3d-4p
	6.107	Zn(3)	0.137	88.36		{(3/2, 1/2)1, (3/2, 3/2)2}	1	2+	3d-4p
	6.108	Zn(3)	0.235	66.61		{(3/2, 1/2)1, (3/2, 3/2)2}	3	2+	3d-4p
	6.110	Zn(3)	0.216	84.74		{(3/2, 1/2)1, (3/2, 3/2)2}	2	2+	3d-4p
	6.112	Zn(3)	0.085	99.37		{(3/2, (1/2, 1/2)0 3/2, 3/2)}	2	2-	3d-4p
	6.114	Zn(2)	0.064	97.79		{(3/2, 1/2)1, (1/2, 1/2)0}	1	0	3d-4p
	6.120	Zn(3)	0.245	99.43		{(3/2, (1/2, 1/2)0 3/2, 3/2)}	3	2-	3d-4p
	6.121	Zn(2)	0.209	41.90		{(3/2, 1/2)1, 1/2 1/2, 3/2}	2	2	3d-4p
	6.122	Zn(2)	0.181	42.95		{(3/2, 1/2)1, 1/2 3/2, 3/2}	3	2	3d-4p
	6.129	Zn(3)	0.139	71.47		{(3/2, 1/2)1, 1/2 1/2, 3/2}	1	2	3d-4p
	6.129	Zn(3)	0.106	66.63		{(3/2, 1/2)2, (3/2, 3/2)2}	3	2+	3d-4p
	6.130	Zn(2)	0.109	47.89		{(3/2, 1/2)2, 1/2 3/2, 3/2}	1	1+	3d-4p
	6.134	Zn(2)	0.193	32.54		{(3/2, 1/2)2, 1/2 3/2, 3/2}	2	1+	3d-4p
	6.136	Zn(2)	0.177	97.96		{(3/2, 1/2)2, (1/2, 1/2)0}	2	1-	3d-4p
	6.142	Zn(1)	0.149	99.70		{3/2, 1/2}	1	0	3d-4p
	6.156	Zn(2)	0.154	63.89		{(3/2, 1/2)2, 1/2 3/2, 3/2}	3	2	3d-4p
	6.184	Ga	0.190	98.11		{(3/2, 1/2)1, 3/2}	3/2	3/2	3d-4p
	6.186	Ga	0.166	56.83 (99.60)		{(3/2, 1/2)1, 3/2}	5/2	3/2	3d-4p
J :	6.20	Ga	0.138	99.35		{3/2, (1/2, 1/2)0}	3/2	1/2	3d-4p
	6.193	Ga	0.099	98.93		{(3/2, 1/2)1, 3/2}	1/2	3/2	3d-4p
	6.208	Ga	0.119	57.08 (99.87)		{(3/2, 1/2)2, 3/2}	5/2	3/2	3d-4p



II. CONTRIBUTION DES IONS MOINS CHARGES QUE Au⁺⁵¹

MANDELBAUM et al. [6] ont mis en évidence la présence dans les plasmas d'ions appartenant aux séries isoélectroniques du cuivre (29 électrons) et du zinc (30 électrons). Les calculs des transitions 3d-4p dans ces ions leur ont permis d'interpréter nombre de structures dans les spectres apparaissant à des longueurs d'onde légèrement supérieures à celles des raies correspondant aux mêmes sauts électroniques dans les ions de la série isoélectronique du nickel.

Les calculs que nous présentons dans ce chapitre montrent également l'importance des ions appartenant aux séries du cuivre et du zinc (ici, les ions Au⁺⁵⁰ et Au⁺⁴⁹). Ils ne permettent pas cependant d'interpréter la totalité des structures importantes situées dans le voisinage des raies de l'ion Au⁺⁵¹, à des longueurs d'onde plus grandes. Nous avons donc étendu notre étude à l'ion Au⁺⁴⁸ appartenant à la série isoélectronique du gallium (N = 31).

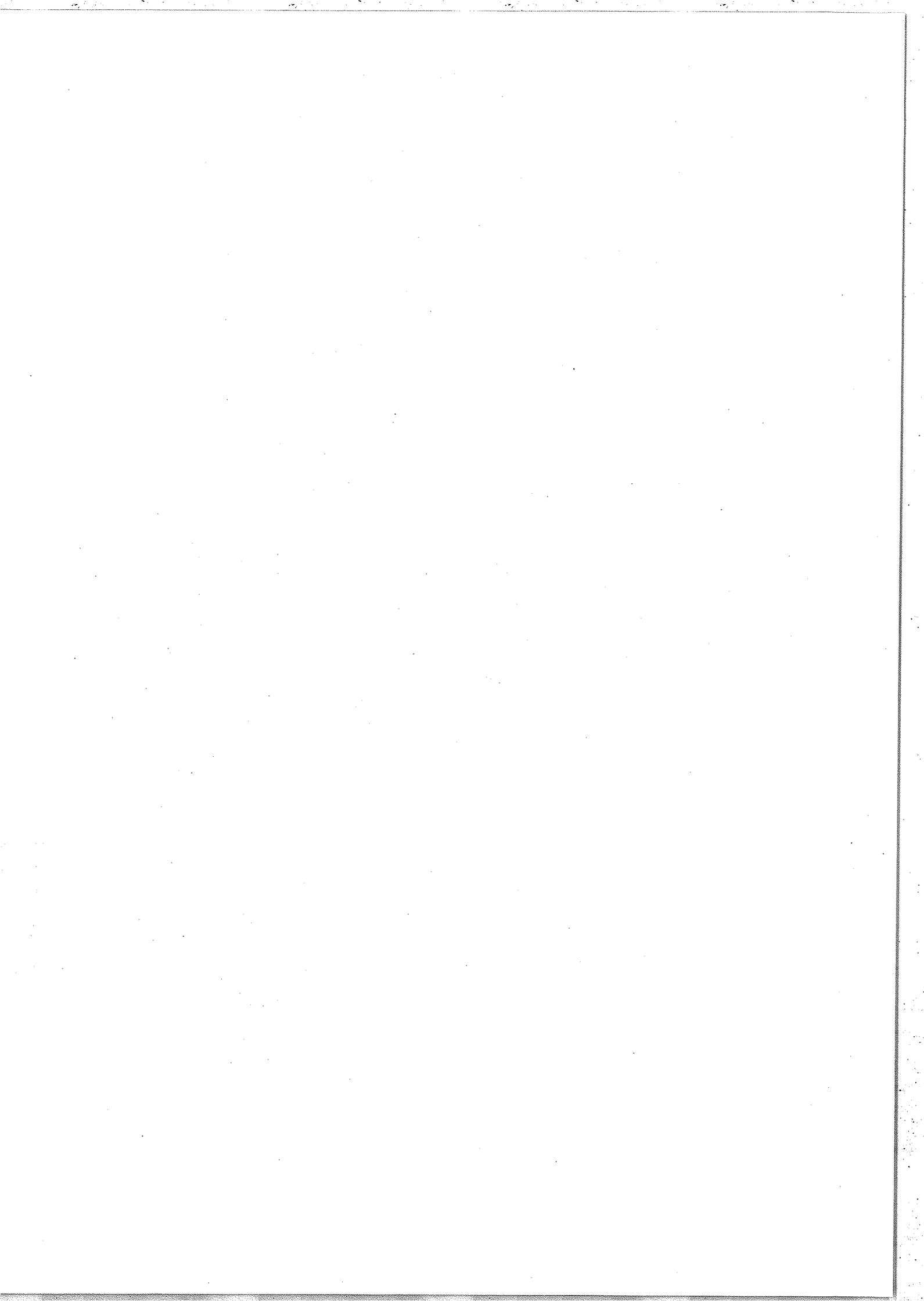
Nous examinons d'autre part, à l'aide de la loi de Saha, la possibilité de la présence, en quantité significative, de tous les ions moins chargés que Au⁺⁵¹.

1. LES IONS Au⁺⁵⁰ ET Au⁺⁴⁹ (isoélectroniques du cuivre et du zinc)

1.1. Calcul des transitions

1.1.1. Transitions calculées dans l'ion Au⁺⁵⁰

Nous avons calculé les transitions suivantes dans l'ion Au⁺⁵⁰ : $3p^6 3d^{10} 4s - 3p^5 3d^{10} 4s^2$, $3d^{10} 4s - 3d^9 4s 4p$, $3d^{10} 4s - 3d^9 4s 4f$; $3p^6 3d^{10} 4p - 3p^5 3d^{10} 4s 4p$, $3d^{10} 4p - 3d^9 4p^2$, $3d^{10} 4p - 3d^9 4p 4f$. Ces transitions sont analogues à celles observées dans l'ion Au⁺⁵¹ : elles n'en diffèrent que par

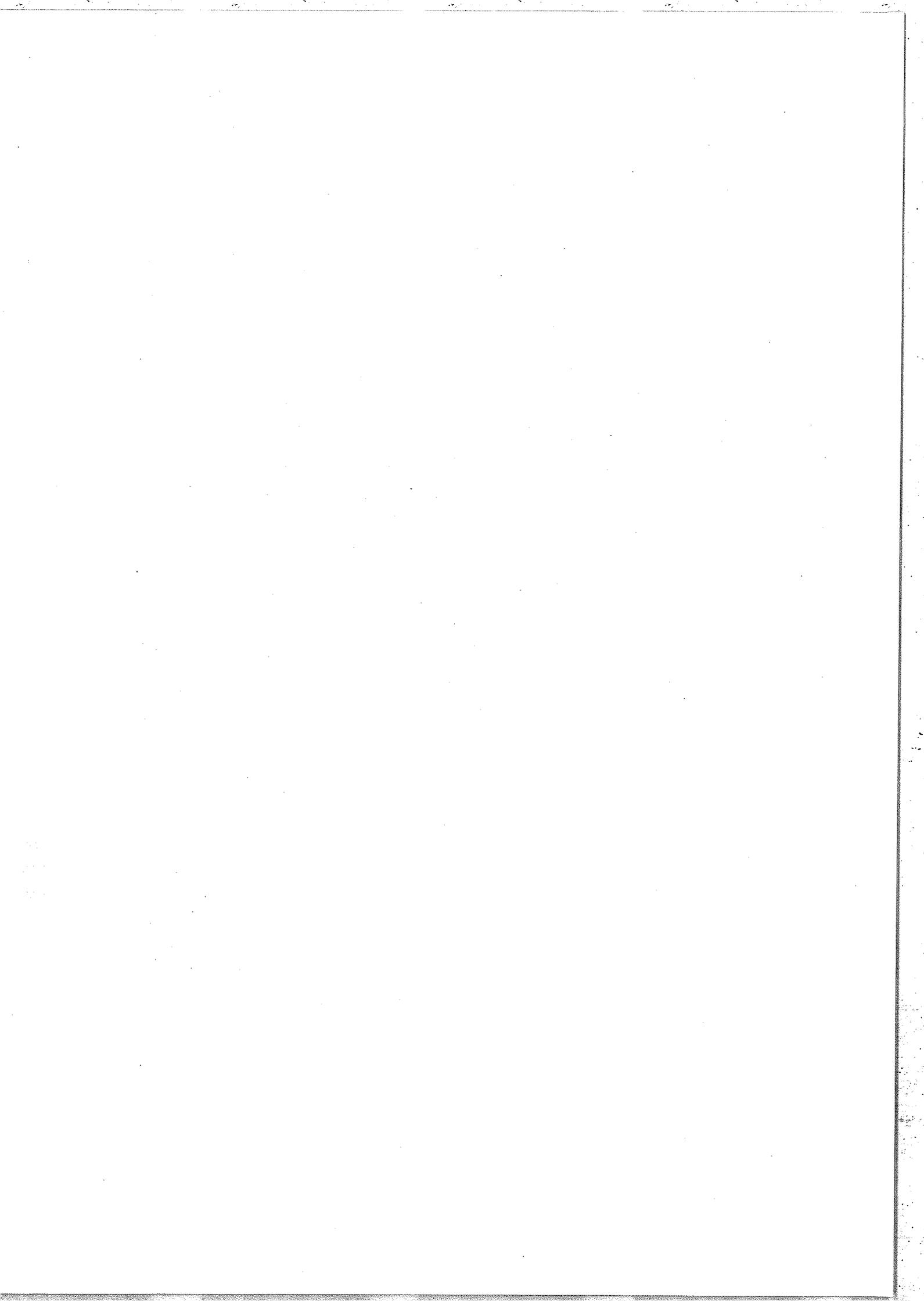


la présence dans l'ion Au^{+50} d'un électron "spectateur" $4s$ ou $4p$. Dans le premier cas, les raies calculées sont désignées dans le tableau I par la notation Cu(1) alors qu'elles sont désignées par la notation Cu(2) dans le second cas.

Nous avons étudié le mélange des configurations $3d^9 4p^2$ et $3d^9 4s 4d$, qui s'avère être très faible.

1.1.2. Transitions calculées dans l'ion Au^{+49}

Nous avons seulement calculé les transitions suivantes : $3d^{10} 4s^2 - 3d^9 4s^2 4p$, $3d^{10} 4s^2 - 3d^9 4s^2 4f$; $3p^6 3d^{10} 4s 4p - 3p^5 3d^{10} 4s^2 4p$, $3d^{10} 4s 4p - 3d^9 4s 4p^2$; $3d^{10} 4p^2 - 3d^9 4p^3$. Ces transitions sont analogues à celles observées dans les ions Au^{+51} et Au^{+50} , avec, dans le cas de l'ion Au^{+49} , une paire d'électrons spectateurs $4s^2$, $4s 4p$ ou $4p^2$. Les raies correspondant à chacun de ces trois cas sont désignées respectivement par les notations Zn(1), Zn(2) et Zn(3) dans le tableau I. Dans le deuxième cas, la configuration basse ($3d^{10} 4s 4p$) comprend quatre niveaux dont deux possèdent le même nombre quantique total $J = 1$. Nous désignons le niveau dont l'énergie est la plus grande ($3d^{10} 4s 4p_{3/2}, J=1$) par la notation $J = 1+$ dans le tableau I alors que l'autre niveau ($3d^{10} 4s 4p_{1/2}, J=1$) est désigné par $J = 1-$. Dans le troisième cas, la configuration basse ($3d^{10} 4p^2$) comprend cinq niveaux parmi lesquels deux niveaux sont caractérisés par le nombre quantique total $J = 0$ et deux autres niveaux par $J = 2$. Dans le tableau I, $J = 0+$, $0-$, $2+$ et $2-$ désignent respectivement les niveaux ($3d^{10} 4p_{3/2}^2, J=0$), ($3d^{10} 4p_{1/2}^2, J=0$), ($3d^{10} 4p_{3/2}^2, J=2$) et ($3d^{10} 4p_{1/2}^2 4p_{3/2}, J=2$). Le mélange des configurations $3d^9 4s 4p^2$ et $3d^9 4s^2 4d$, étudié par MANDELBAUM et al. [6] dans le cas du tungstène, a été introduit dans nos calculs.



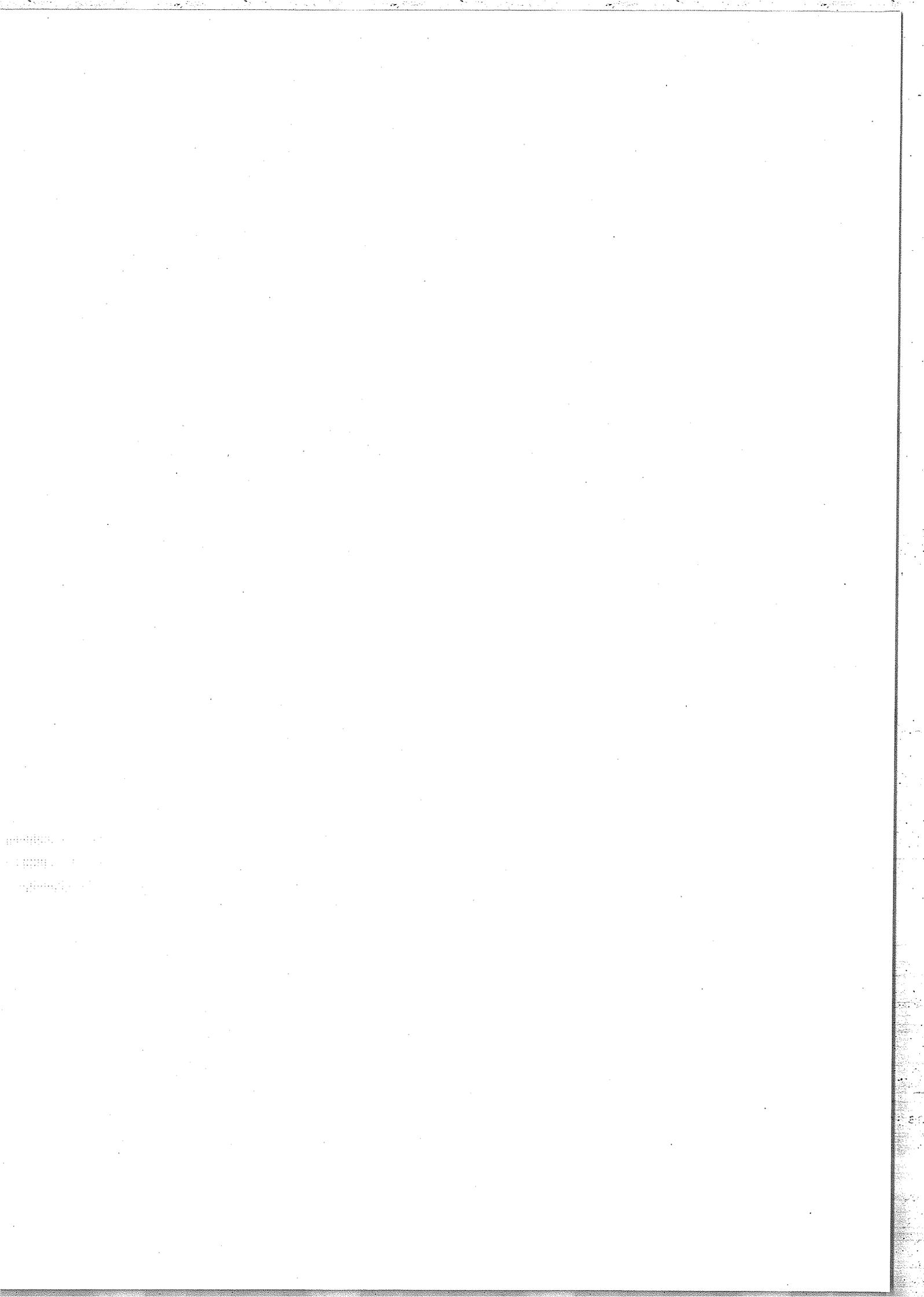
1.1.3. Résultats

Les résultats des calculs des transitions décrites dans les paragraphes 1.1 et 1.2 sont rassemblés dans le tableau I. Ils permettent d'interpréter les structures e, f, i, j, E, F, H et I du spectre. La colonne 6 du tableau I montre que chacune de ces structures regroupe des raies correspondant toutes au même saut électronique. (La structure f contient en plus deux raies $3d_{5/2}^{-4}f_{7/2}$, faisant exception à cette règle, mais on peut remarquer que dans les deux cas, le couplage jj est très éloigné du couplage réel).

Le tableau XIII résume la façon dont les raies émises par les ions Au^{+50} et Au^{+49} sont regroupées et rappelle les résultats obtenus pour l'ion Au^{+51} . A une raie émise par l'ion Au^{+51} correspondant à un saut électronique déterminé, sont associées, à des longueurs d'onde immédiatement supérieures, une ou deux structures regroupant des raies émises par les ions Au^{+50} , puis une ou deux structures regroupant des raies émises par les ions Au^{+49} , toutes ces raies correspondant au même saut électronique.

1.1.4. Sous-faisceaux non résolus

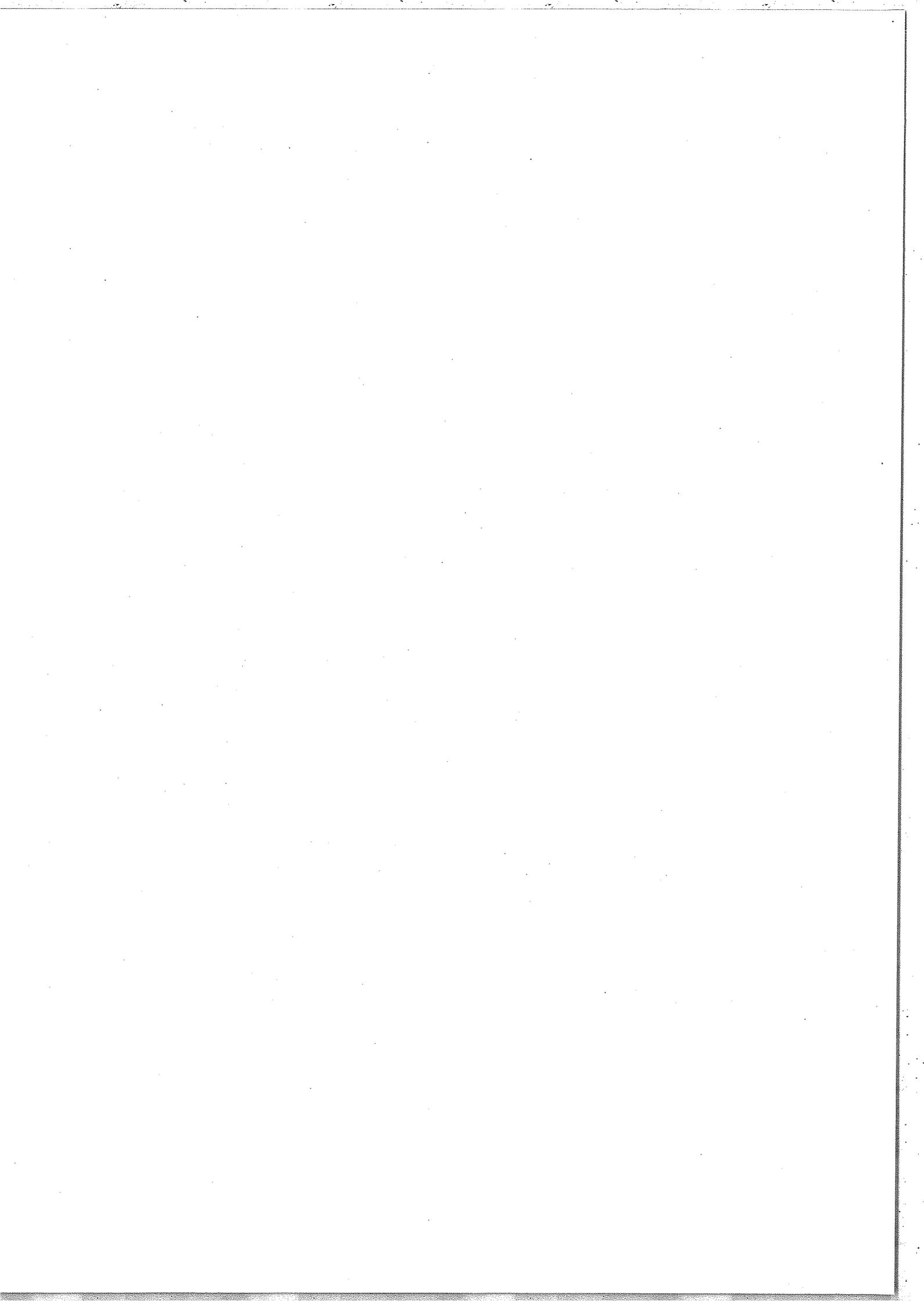
Le regroupement des raies correspondant à un même saut électronique en pics de largeurs relativement restreintes suggère la possibilité d'appliquer au spectre les méthodes de calcul des faisceaux non résolus, dont nous avons exposé le principe dans la première partie. Les éléments du spectre ne correspondent pas à des faisceaux complets de transitions entre configurations car nous sommes ici dans le cas où les intégrales de spin-orbite ζ_{3d} et ζ_{4p} sont nettement plus grandes que les intégrales de Slater. En revanche, chacun correspond à l'une des cinq raies principales émises par l'ion Au^{+51} et regroupe des sous-faisceaux issus de transitions entre sous-configurations d'un ion dé-



Saut électronique	Raie émise par Au ⁺⁵¹		Structure regroupant des raies émises par Au ⁺⁵⁰		Structure regroupant des raies émises par Au ⁺⁴⁹	
	désignation	long. d'onde (Å)	désignation	long. d'onde moyenne (Å)	désignation	long. d'onde moyenne (Å)
$3d_{3/2}^{-4}f_{5/2}$	d	4,76	e	4,80	f	4,82
$3d_{5/2}^{-4}f_{7/2}$	h	4,93	i	4,96	j	5,00
$3d_{5/2}^{-4}p_{3/2}$	D	5,86	E et F	5,90 et 5,94	E et F	5,90 et 5,94
$3d_{3/2}^{-4}p_{1/2}$	G	6,01	H	6,09	I	6,14

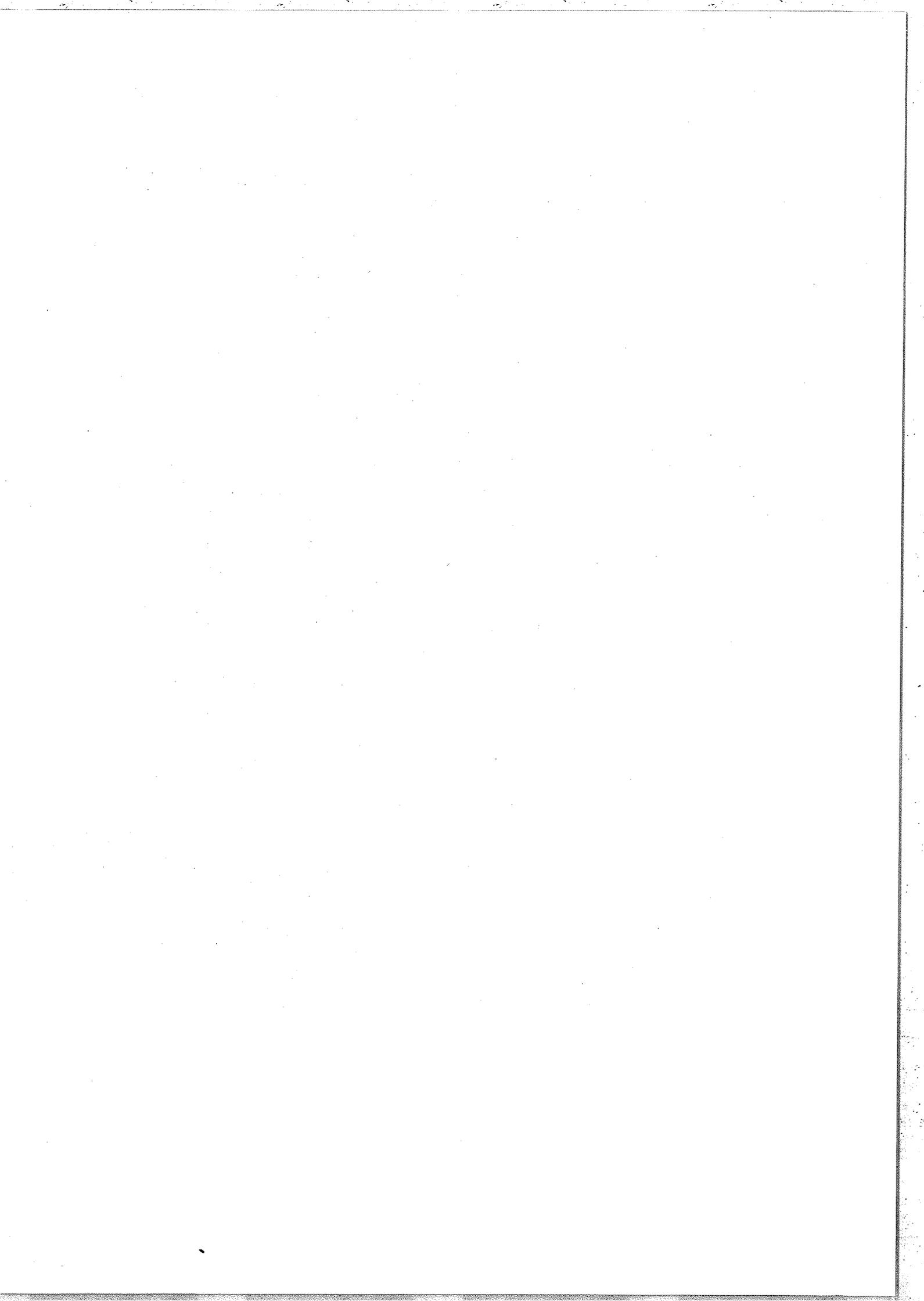
TABLEAU XIII

Regroupement des raies émises par les ions Au⁺⁵⁰ et Au⁺⁴⁹ (cf. Figure 6)



terminé, qui diffèrent des sous-configurations de l'ion Au⁺⁵¹ par l'addition d'électron(s) spectateur(s).

Nous nous sommes d'abord intéressés au cas de l'ion Au⁺⁵⁰. Nous avons calculé les six sous-faisceaux dérivés des transitions $3d^{10} - (3d_{3/2}^3 3d_{5/2}^6 4f_{5/2}, J=1)$ et $(3d^{10} - 3d_{3/2}^4 3d_{5/2}^5 4f_{7/2}, J=1)$ par addition d'un électron-spectateur $4s_{1/2}$, $4p_{1/2}$ ou $4p_{3/2}$. Nous avons calculé pour chaque sous-faisceau sa longueur d'onde moyenne μ_1 et l'écart-type σ de la distribution des raies. Le poids de chaque raie étant sa force. Nous avons utilisé pour cela les résultats numériques fournis par le programme RELAC, à savoir les valeurs des intégrales de Slater et des intégrales de spin-orbite et les valeurs des énergies des sous-configurations, que nous avons introduites dans les formules données par l'article cité en référence [30]. Les valeurs calculées de μ_1 et σ sont rassemblées dans le tableau XIV. Il apparaît que l'étalement des raies d'un sous-faisceau est du même ordre de grandeur que la distance de deux sous-faisceaux consécutifs correspondant au même saut électronique. Nous avons donc calculé, en tenant compte des forces relatives S des sous-faisceaux, une longueur d'onde moyenne $\langle \mu_1 \rangle$ et un écart-type $\langle \sigma^2 \rangle^{1/2}$ pour la distribution de toutes les raies des deux pics e et i qui regroupent chacun trois sous-faisceaux. Les résultats sont donnés dans le tableau XVI. Ils sont en accord qualitatif avec les largeurs expérimentales à mi-hauteur des structures e et i (si une distribution est gaussienne et admet σ pour écart-type, sa largeur à mi-hauteur vaut $2,355 \sigma$). Les longueurs d'onde moyennes calculées diffèrent de 0,01 et 0,02 Å des valeurs expérimentales. Ces écarts semblent être dus au fait que l'hypothèse du couplage jj pur n'est pas parfaitement adapté au cas étudié ici (voir la colonne 5 du tableau I).



Sous-faisceau	μ_1 (Å)	σ (Å)	S	$\langle \mu_{31} \rangle$ (Å)	$\langle \sigma^2 \rangle^{1/2}$ (Å)
$d^{*4}d^6s-d^{*3}d^6sf^*$	4,8083	0,0016	1	} 4,8082	0,0026
$d^{*4}d^6p^*-d^{*3}d^6p^*f^*$	4,8107	0,0033	1		
$d^{*4}d^6p-d^{*3}d^6pf^*$	4,8068	0,0015	2		
$d^{*4}d^6s-d^{*4}d^5sf$	4,9771	0,0019	1	} 4,9768	0,0032
$d^{*4}d^6p^*-d^{*4}d^5p^*f$	4,9780	0,0011	1		
$d^{*4}d^6p-d^{*4}d^5pf$	4,9761	0,0041	2		

TABLEAU XIV

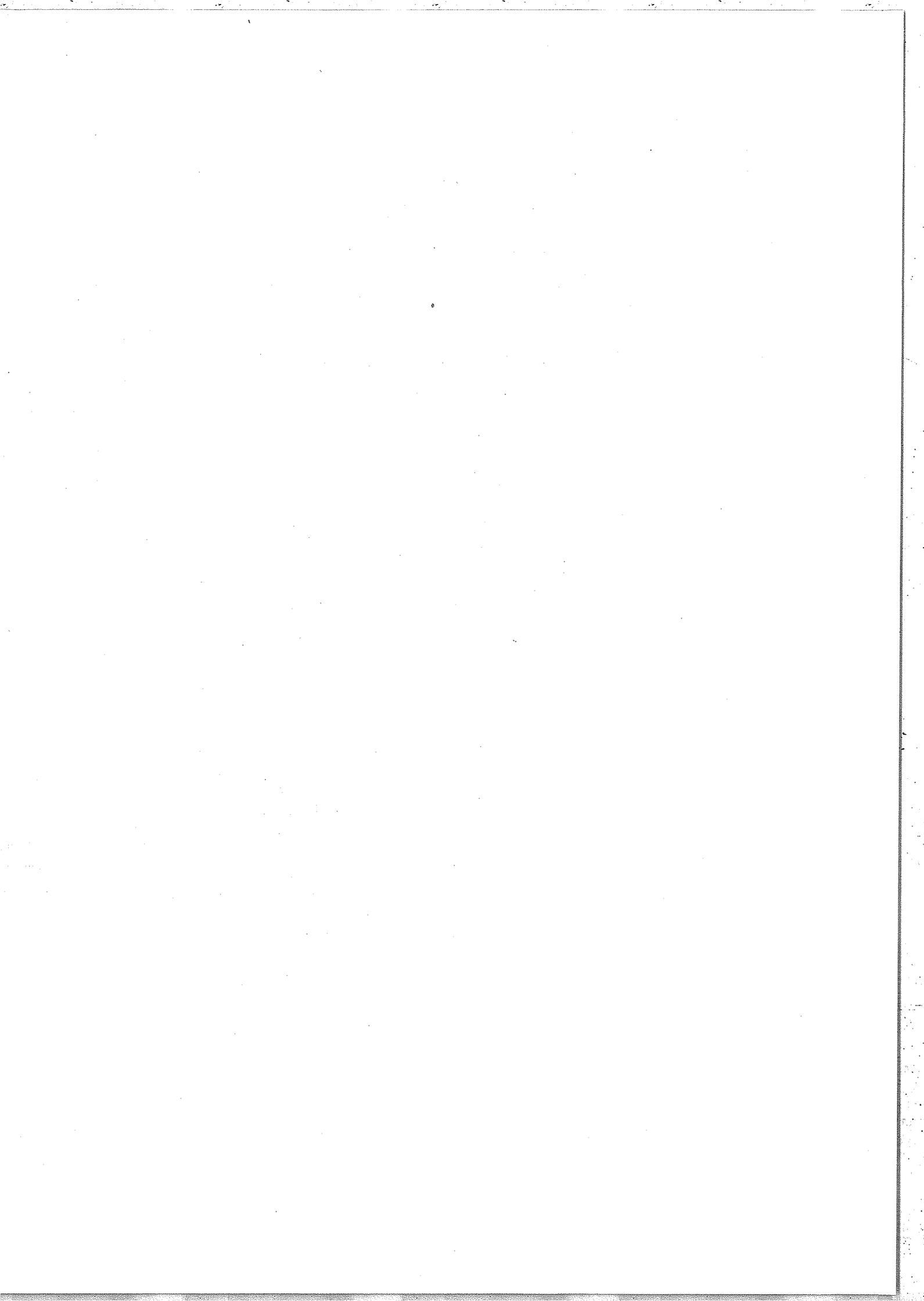
Nous avons également calculé l'écart-type de la distribution des raies regroupées dans la structure H, qui se compose des sous-faisceaux dérivés de la transition $3d^{10}-(3d_{3/2}^3 3d_{5/2}^6 4p_{1/2}, J=1)$ par addition d'un électron spectateur $4s_{1/2}$, $4p_{1/2}$ ou $4p_{3/2}$. La valeur calculée de $\langle \sigma^2 \rangle^{1/2}$ est de 19818 cm^{-1} . Cette valeur est en accord qualitatif avec l'expérience.

Les structures de la figure 6 qui correspondent aux transitions dans l'ion Au^{+49} (séquence du zinc) sont plus larges que les structures qui correspondent à l'ion Au^{+50} (séquence du cuivre) : les pics f, j et I sont respectivement plus larges que les pics e, i et H. Cela est dû au fait que les interactions électrostatiques $4s-4p$ et $4p-4p$ contribuent ici aux quantités σ^2 .

1.2. Densités volumiques des différents ions

1.2.1. Relation indépendante de la température et de la densité électronique

Nous avons établi dans le chapitre II de la première partie la relation (I.10) permettant d'exprimer les densités volumiques des ions présents dans le plasma en fonction des densités volumiques d'ions appartenant à trois séquences consécutives :



$$V(r,s), \frac{n_{s-1}^*}{n_s^*} \cdot \frac{n_{s+1}^*}{n_s^*} = \left(\frac{n_{r-1}^*}{n_s^*} \cdot \frac{n_{r+1}^*}{n_s^*} \right)^{\frac{\chi_s - \chi_{s-1}}{\chi_r - \chi_{r-1}}} \quad (\text{I.10})$$

où r et s désignent deux degrés d'ionisation, les quantités n^* les quotients des densités volumiques des ions se trouvant dans leur niveau fondamental par la dégénérescence de ce niveau, les quantités χ les potentiels d'ionisation. Nous allons montrer que cette relation permet d'évaluer le rapport des densités volumiques des ions Au^{+50} et Au^{+49} . Considérons le cas particulier où r et s s'identifient respectivement aux ions Au^{+51} (séquence du nickel) et Au^{+50} (séquence du cuivre). La relation (I.10) s'écrit alors :

$$\frac{n_{\text{Zn}}^*}{n_{\text{Cu}}^*} \cdot \frac{n_{\text{Ni}}^*}{n_{\text{Cu}}^*} = \left(\frac{n_{\text{Cu}}^*}{n_{\text{Ni}}^*} \cdot \frac{n_{\text{Co}}^*}{n_{\text{Ni}}^*} \right)^{\frac{\chi_{\text{Cu}} - \chi_{\text{Zn}}}{\chi_{\text{Ni}} - \chi_{\text{Cu}}}} \quad (\text{II.11})$$

Les valeurs des potentiels d'ionisation, calculées par le programme RELAC, sont rassemblées dans le tableau XV.

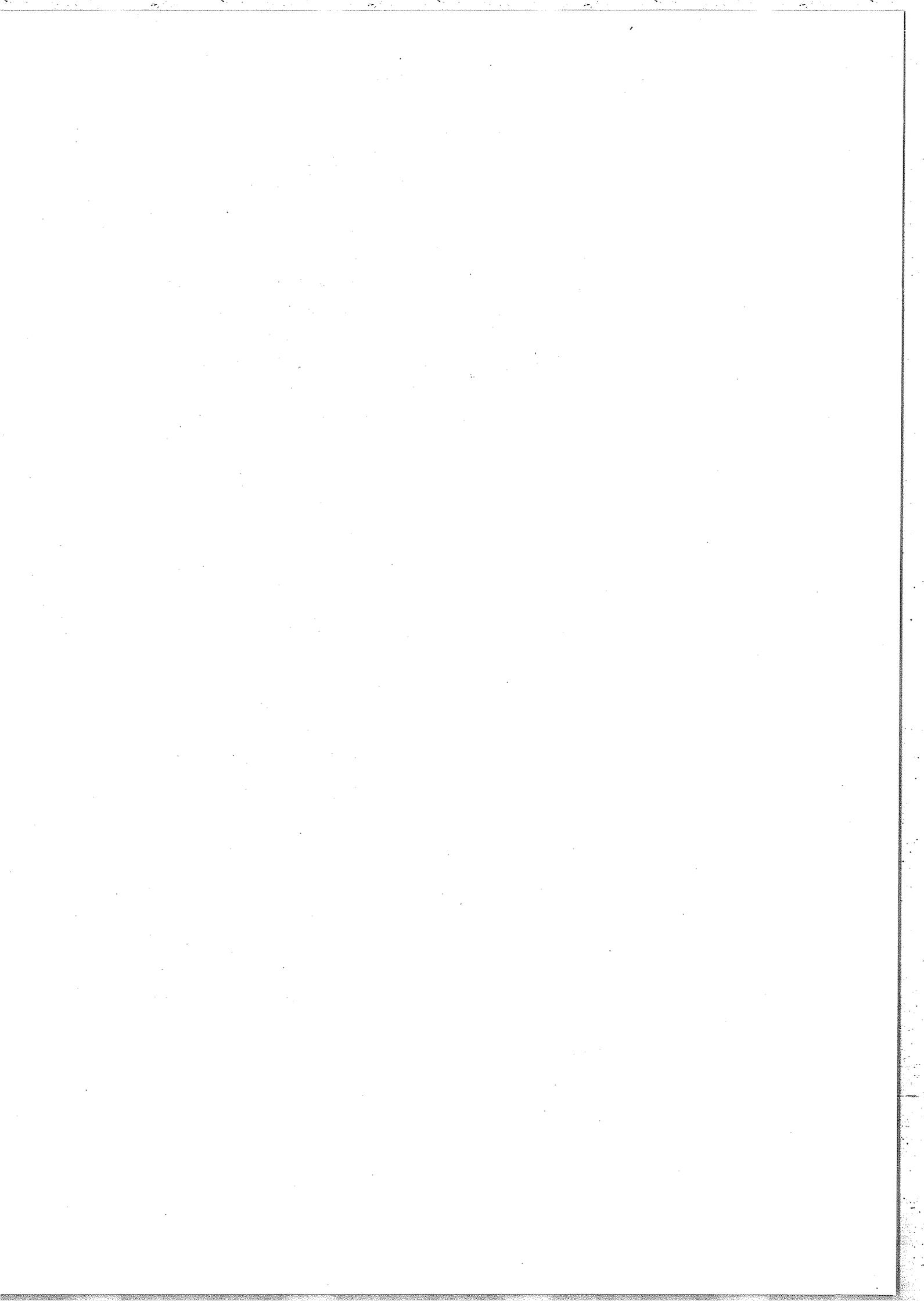
Séquence de l'ion	Co	Ni	Cu	Zn	Ga
Potentiel d'ionisation (u.a)	184,46	179,38	108,07	105,49	99,44

TABLEAU XV

On en déduit :

$$\frac{n_{\text{Zn}}^*}{n_{\text{Cu}}^*} = \frac{n_{\text{Cu}}^*}{n_{\text{Ni}}^*} \cdot \left(\frac{n_{\text{Cu}}^*}{n_{\text{Ni}}^*} \cdot \frac{n_{\text{Co}}^*}{n_{\text{Ni}}^*} \right)^{0,036} \quad (\text{II.12})$$

Posons $x = \left(\frac{n_{\text{Cu}}^*}{n_{\text{Ni}}^*} \cdot \frac{n_{\text{Co}}^*}{n_{\text{Ni}}^*} \right)$. L'expression (II.12) ne dépend que très faiblement de la valeur de x. En effet, pour x variant entre 10^{-27} et 10^{+27} , $x^{0,036}$ varie entre 0,1 et 10. Nous aurons



donc une évaluation correcte du rapport $\frac{n_{Zn}^*}{n_{Cu}^*}$ si nous pouvons évaluer le rapport $\frac{n_{Cu}^*}{n_{Ni}^*}$.

1.2.2. Densité volumique des ions Au⁺⁵⁰

Les structures e, i et H du spectre sont exclusivement dues, dans le cadre de nos calculs, aux transitions dans l'ion Au⁺⁵⁰, et correspondent respectivement aux raies d, h et G émises par les ions Au⁺⁵¹, dont la configuration fondamentale (3d¹⁰) ne contient que des sous-couches complètes. Nous pouvons donc utiliser la méthode proposée dans le paragraphe I.3.3 de la première partie.

Les structures e, i et H regroupent plusieurs raies non résolues. La structure e, par exemple, regroupe les sous-faisceaux (3d¹⁰4ℓ_j, J=j) - (3d_{3/2}³3d_{5/2}⁶4f_{5/2}⁴ℓ_j, J') avec ℓ = 0, 1, 2 et 3.

L'intensité d'un sous-faisceau est donnée par la relation suivante :

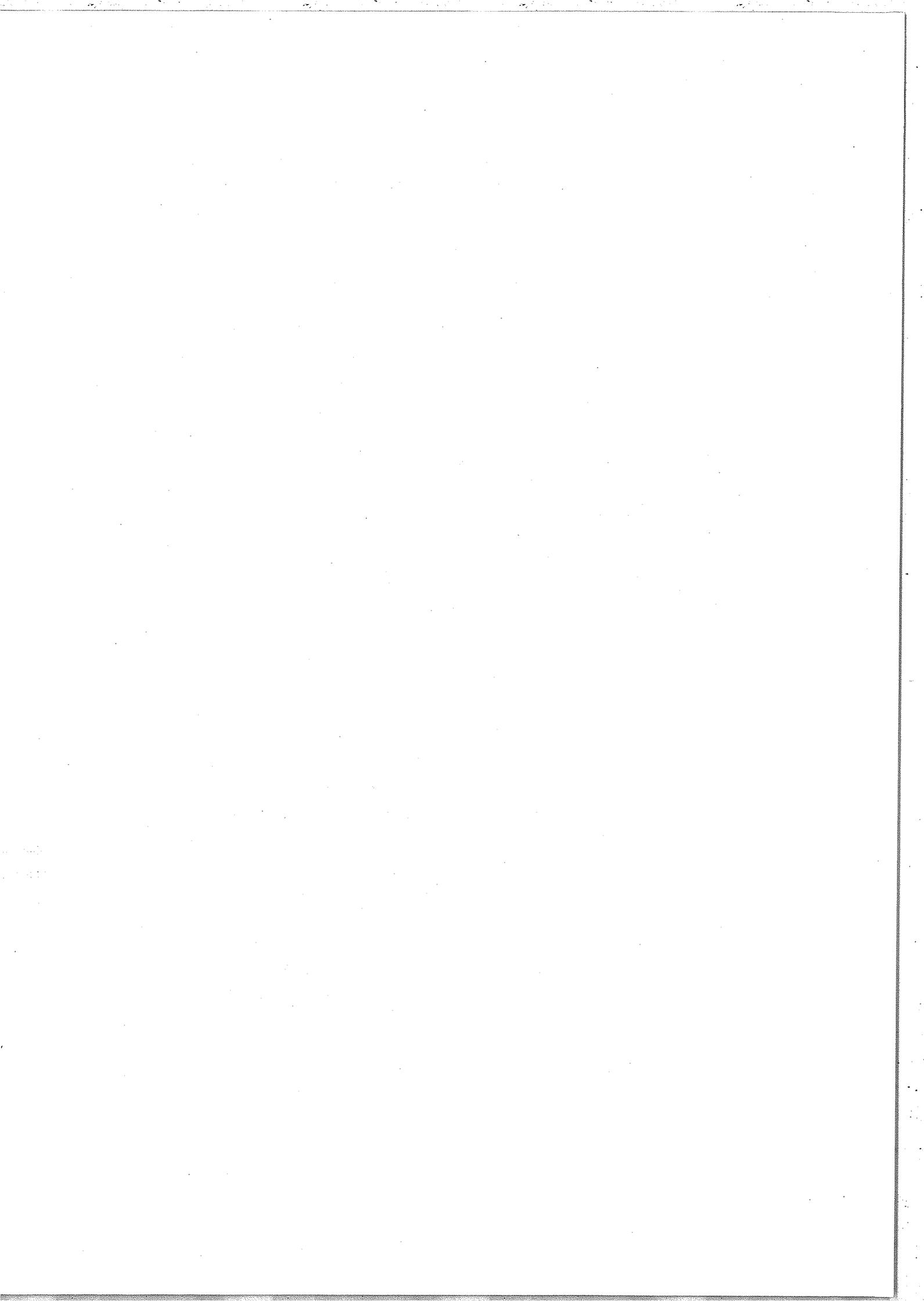
$$I_{SF} = \alpha v^4 n_u^* K \quad (II.13)$$

où α est la constante intervenant dans la relation (I.11), v est la fréquence moyenne du sous-faisceau, n_u^{*} est la population d'un état de la sous-configuration supérieure u et K est la force totale du sous-faisceau. K est ici égal au produit de la force S_{Cu} de la raie 3d_{3/2}⁻⁴f_{5/2} par la dégénérescence γ_u des sous-couches passives 3d_{5/2}⁶4ℓ_j.

Le tableau I montre que les trois sous-faisceaux correspondant aux électrons spectateurs 4s_{1/2}, 4p_{1/2} et 4p_{3/2} ont des longueurs d'onde moyennes identiques, à la précision des calculs près. Nous pouvons supposer qu'il en est de même pour tout électron spectateur 4ℓ_j.

L'intensité I_{Cu} de la structure e peut donc s'écrire :

$$I_{Cu} = \alpha v^4 S_{Cu} \sum_u \gamma_u n_u^* \quad (II.14)$$



Soit n_{Cu}^{*sup} la population d'un état de la sous-configuration $3d_{3/2}^3 3d_{5/2}^6 4f_{5/2}^4 s_{1/2}$ d'énergie moyenne E_{sup} . Le saut électronique étudié ici relie cette sous-configuration à la sous-configuration fondamentale $3d^{10} 4s$, dont la population des états est n_{Cu}^* . Soit E_u l'énergie moyenne d'une sous-configuration excitée u . Nous pouvons appliquer la loi de Boltzmann aux sous-configurations u et réécrire la relation (II.14) de la façon suivante :

$$I_{Cu} = \alpha \nu^4 S_{Cu} n_{Cu}^{*sup} \sum_u \gamma_u e^{-\frac{E_u - E_{sup}}{kT}} = \alpha \nu^4 S_{Cu} n_{Cu}^{*sup} g_{Cu} \quad (II.15)$$

en notant $g_{Cu} = \sum_u \gamma_u e^{-\frac{E_u - E_{sup}}{kT}} \quad (II.16)$

Intéressons-nous maintenant à l'intensité I_{Ni} de la raie d , que nous pouvons obtenir au moyen de la relation (I.11) :

$$I_{Ni} = \alpha \nu^4 S_{Ni} n_{Ni}^{*sup} \quad (II.17)$$

où la fréquence ν peut être pratiquement identifiée à celle apparaissant dans (II.15) et où n_{Ni}^{*sup} est la population d'un état de la sous-configuration $3d_{3/2}^3 3d_{5/2}^6 4f_{5/2}$.

Les relations (II.15) et (II.17) permettent d'écrire* :

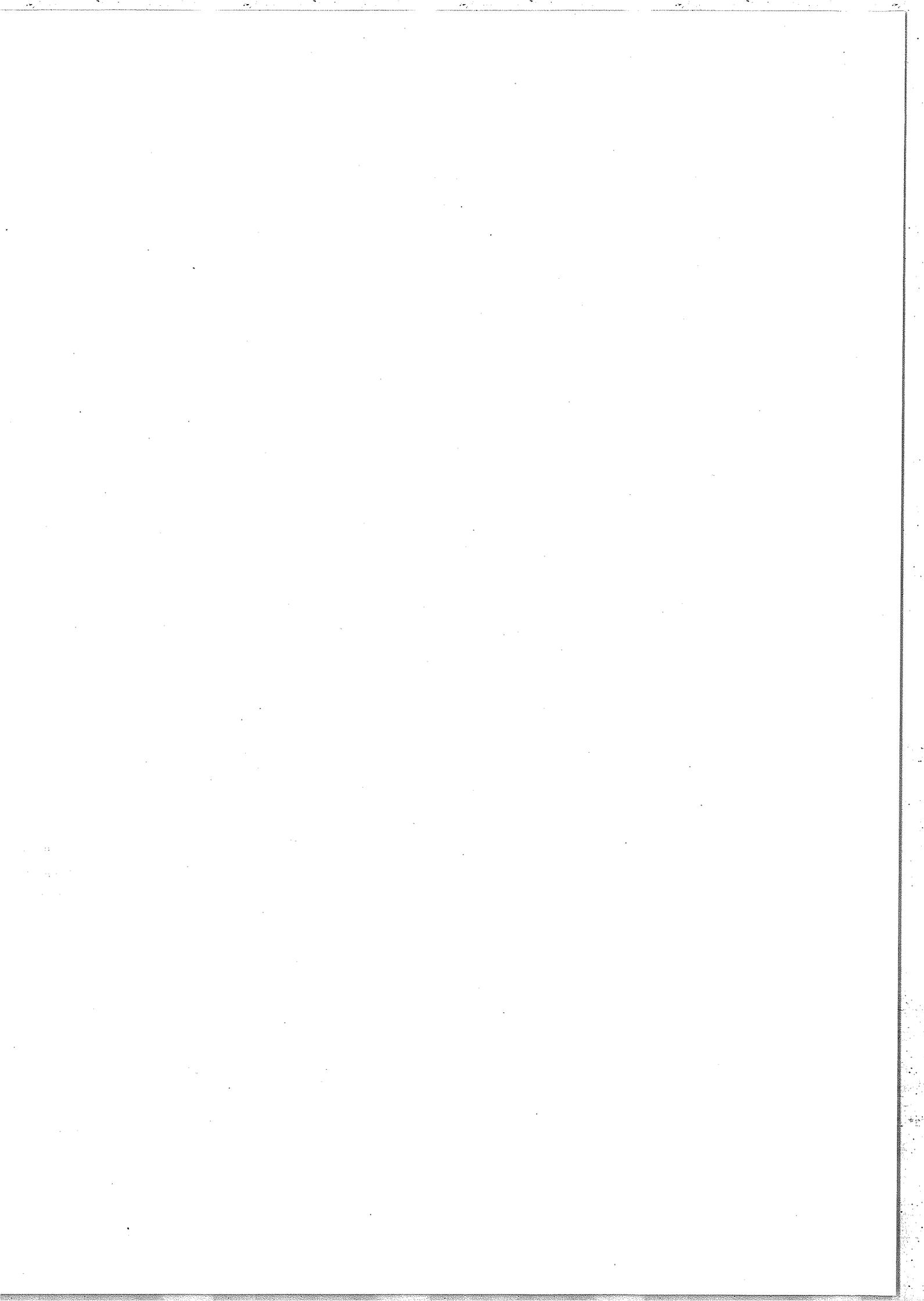
$$\frac{I_{Cu}}{I_{Ni}} \approx g_{Cu} \frac{n_{Cu}^{*sup}}{n_{Ni}^{*sup}} \quad (II.18)$$

Appliquons la relation (I.12). Nous obtenons :

$$\frac{n_{Cu}^{*sup}}{n_{Ni}^{*sup}} = \frac{n_{Cu}^*}{n_{Ni}^*} \quad (II.19)$$

d'où $\frac{n_{Cu}^*}{n_{Ni}^*} \approx \frac{1}{g_{Cu}} \cdot \frac{I_{Cu}}{I_{Ni}} \quad (II.20)$

*Les calculs montrent que S_{Ni} et S_{Cu} sont égaux à 5 % près.



Evaluons le rapport $\frac{I_{Cu}}{I_{Ni}}$ à partir de l'enregistrement du spectre. Les structures d et e ayant des surfaces approximativement égales, nous pouvons écrire $I_{Cu} \approx I_{Ni}$ (II.21). Notons N_{Ni} et N_{Cu} les densités volumiques totales des ions Au^{+51} et Au^{+50} et évaluons ces deux quantités en faisant l'hypothèse que l'essentiel de ces ions se trouvent dans des états pas ou peu excités.

Le cas de l'ion Au^{+51} est le plus simple. La configuration fondamentale ($3d^{10}$) a une dégénérescence égale à 1. La première sous-configuration excitée a une énergie de 15.10^6 cm^{-1} plus haute (voir figure 9), soit un écart énergétique de près de 2000 eV, alors que la température du plasma est comprise entre 200 et 400 eV [35]. Nous pouvons donc écrire $N_{Ni} \approx n_{Ni}^*$ (II.22).

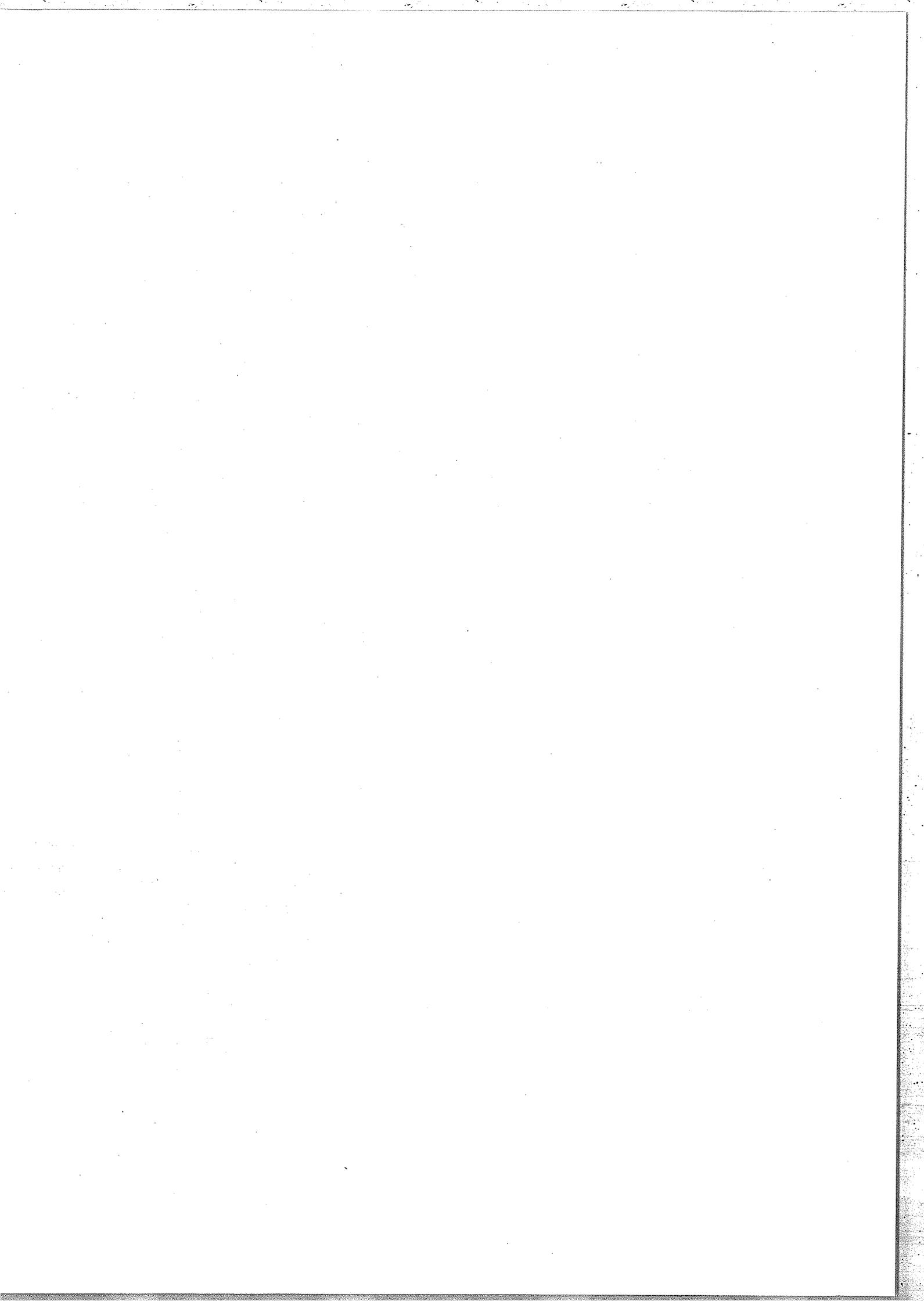
Le cas de l'ion Au^{+50} est plus complexe. Si nous nous restreignons aux sous-configurations $3d^{10}4l_j$ d'énergies moyennes E_i , de dégénérescence g_i , nous pouvons écrire :

$$\frac{N_{Cu}}{n_{Cu}^*} \approx \sum_i g_i e^{-\frac{E_i - E_0}{kT}} \quad (II.23)$$

où E_0 est l'énergie de la sous-configuration fondamentale $3d^{10}4s$.

Le membre de droite de la relation (II.23) est identifiable à la quantité g_{Cu} donnée par la relation (II.16) en remarquant que les écarts énergétiques ($E_i - E_0$) et ($E_u - E_{sup}$) sont identiques en très bonne approximation lorsque i et u désignent les sous-configurations supérieure et inférieure impliquées dans le saut électronique $3d_{3/2} - 4f_{5/2}$. Il y a aussi identité entre γ_u et g_i . Nous pouvons donc réécrire la relation (II.23) de la façon suivante :

$$N_{Cu} \approx g_{Cu} n_{Cu}^* \quad (II.24)$$



Nous déduisons finalement des relations (II.20), (II.21), (II.22) et (II.24) celle qui lie les populations totales des ions Au⁺⁵⁰ et Au⁺⁵¹ :

$$N_{\text{Cu}} \approx N_{\text{Ni}} \quad (\text{II.25})$$

1.2.3. Densité volumique des ions Au⁺⁴⁹

Réécrivons la relation (II.12) :

$$\frac{n_{\text{Zn}}^*}{n_{\text{Cu}}^*} = \frac{n_{\text{Cu}}^*}{n_{\text{Ni}}^*} \cdot \left(\frac{n_{\text{Cu}}^*}{n_{\text{Ni}}^*} \cdot \frac{n_{\text{Co}}^*}{n_{\text{Ni}}^*} \right)^{0,036}$$

Supposons la température T du plasma connue. Nous avons, d'après la relation (I.8) :

$$\frac{n_{\text{Cu}}^*}{n_{\text{Ni}}^*} \cdot \frac{n_{\text{Co}}^*}{n_{\text{Ni}}^*} = e^{-\frac{\chi_{\text{Ni}} - \chi_{\text{Cu}}}{kT}} = e^{-\frac{71,31}{kT}} \quad (\text{II.26})$$

où kT est exprimé en unités atomiques.

Les relations (II.12), (II.20), (II.21) et (II.26) permettent d'écrire :

$$\frac{n_{\text{Zn}}^*}{n_{\text{Cu}}^*} \approx \frac{1}{g_{\text{Cu}}} e^{-\frac{2,58}{kT}} \quad (\text{II.27})$$

Notons N_{Zn} la densité volumique totale des ions Au⁺⁴⁹, et $g_{\text{Zn}} \cdot n_{\text{Zn}}^*$ la densité volumique totale de ses sous-configurations pas ou peu excitées. Nous avons :

$$N_{\text{Zn}} \approx g_{\text{Zn}} \cdot n_{\text{Zn}}^* \quad (\text{II.28})$$

Nous pouvons déduire des relations (II.24), (II.27) et (II.28) une valeur approchée de l'abondance relative de l'ion Au⁺⁴⁹ par rapport à l'ion Au⁺⁵⁰ :

$$\frac{N_{\text{Zn}}}{N_{\text{Cu}}} \approx \frac{g_{\text{Zn}}}{2} \cdot \frac{1}{g_{\text{Cu}}} \cdot e^{-\frac{2,58}{kT}} \quad (\text{II.29})$$

FIGURE 10

ss- conf.	g	ΔE ($E = -17200 + \Delta E$)
<u>3d¹⁰ 4f</u>	8	75,60
<u>3d¹⁰ 4f*</u>	6	75,30
<u>3d¹⁰ 4d</u>	6	68,77
<u>3d¹⁰ 4d*</u>	4	67,65
<u>3d¹⁰ 4p</u>	4	61,50
<u>3d¹⁰ 4p*</u>	2	56,24
<u>3d¹⁰ 4s</u>	2	52,15

Dégénérescences (g) et énergies (E, u.a.) des sous-configurations de Au⁺⁵⁰

Le détail des sous-configurations prises en compte dans les calculs de g_{Cu} et g_{Zn} est indiqué sur les figures 10 et 11. Trois hypothèses de températures ont été retenues : 200 eV, 300 eV et 400 eV.

Le tableau XVI rassemble les résultats obtenus et les valeurs de $\frac{N_{Zn}}{N_{Cu}}$ qui en ont été déduites au moyen de la relation (II.29).

T	200 eV	300 eV	400 eV
g_{Cu}	5,97	9,09	11,83
g_{Zn}	16,46	39,47	67,39
$\frac{N_{Zn}}{N_{Cu}}$	0,33	0,38	0,40

TABLEAU XVI

Nous constatons que le rapport des abondances des ions Au^{+49} et Au^{+50} dépend peu de l'hypothèse de température retenue : le doublement de la température n'entraîne qu'une augmentation de 20 % de ce rapport.

2. IONS MOINS CHARGES QUE L'ION Au^{+49}

Aucun auteur ne s'est intéressé jusqu'ici à la présence dans les plasmas produits par impact laser d'ions appartenant aux séries isoélectroniques d'atomes plus lourds que le zinc. L'enregistrement du spectre de l'or reproduit sur la figure 6, fait apparaître les structures g, k et J situées respectivement à des longueurs d'onde moyennes légèrement supérieures à celles des structures f, j et I constituées de raies émises par l'ion Au^{+49} (voir paragraphe 1). Il est naturel de chercher à les interpréter par des transitions dans des ions moins chargés que Au^{+49} .

FIGURE 11

ss - conf.	g	$\Delta E (E = -17300 + \Delta E)$
$3d^{10} 4f^2$	28	93,71
$3d^{10} 4f^* 4f$	48	93,44
$3d^{10} 4f^{*2}$	15	93,11
$3d^{10} 4d 4f$	48	86,64
$3d^{10} 4d 4f^*$	36	86,42
$3d^{10} 4d^* 4f$	32	85,63
$3d^{10} 4d^* 4f^*$	24	85,22
$3d^{10} 4d^2$	15	79,76
$3d^{10} 4p 4f$	32	79,38
$3d^{10} 4p 4f^*$	24	79,11
$3d^{10} 4d^* 4d$	24	78,67
$3d^{10} 4d^{*2}$	6	77,55
$3d^{10} 4p^* 4f$	16	74,23
$3d^{10} 4p^* 4f^*$	12	73,87
$3d^{10} 4p 4d$	24	72,34
$3d^{10} 4p 4d^*$	16	71,33
$3d^{10} 4s 4f$	16	70,11
$3d^{10} 4s 4f^*$	12	69,82
$3d^{10} 4p^* 4d$	12	67,25
$3d^{10} 4p^* 4d^*$	8	65,96
$3d^{10} 4p^2$	6	65,17
$3d^{10} 4s 4d$	12	63,10
$3d^{10} 4s 4d^*$	8	62,00
$3d^{10} 4p^* 4p$	8	59,92
$3d^{10} 4s 4p$	8	56,17
$3d^{10} 4p^{*2}$	1	54,85
$3d^{10} 4s 4p^*$	4	50,51
$3d^{10} 4s^2$	1	46,66

2.1. Densités volumiques

Intéressons-nous d'abord aux ions Au^{+48} . Ces ions appartiennent à la série isoélectronique du gallium ($N = 31$ électrons). La relation (I.10) permet d'évaluer l'ordre de grandeur de leur densité volumique. On peut en effet écrire :

$$\frac{n_{Ga}^*}{n_{Zn}^*} \cdot \frac{n_{Cu}^*}{n_{Zn}^*} = \left[\frac{n_{Cu}^*}{n_{Ni}^*} \cdot \frac{n_{Co}^*}{n_{Ni}^*} \right]^{\frac{x_{Zn} - x_{Ga}}{x_{Ni} - x_{Cu}}} = x^{0,085} \quad (II.30)$$

La valeur de l'expression $\frac{n_{Ga}^*}{n_{Zn}^*} \cdot \frac{n_{Cu}^*}{n_{Zn}^*}$ dépend peu de la valeur de x : si x est compris entre 10^{-12} et 10^{+12} , $\frac{n_{Ga}^*}{n_{Zn}^*} \cdot \frac{n_{Cu}^*}{n_{Zn}^*}$ est compris entre 0,1 et 10.

Faisons maintenant intervenir le paramètre température. Nous déduisons des relations (II.26) et (II.30) :

$$\frac{n_{Ga}^*}{n_{Zn}^*} = \frac{n_{Zn}^*}{n_{Cu}^*} \cdot e^{-\frac{6,05}{kT}} \quad (II.31)$$

Soit N_{Ga} la densité volumique totale de l'ion Au^{+48} et $g_{Ga} \cdot n_{Ga}^*$ la densité volumique de ses sous-configurations pas ou peu excitées. Nous avons :

$$N_{Ga} \approx g_{Ga} \cdot n_{Ga}^* \quad (II.32)$$

Les relations (II.27), (II.28), (II.31) et (II.32) permettent d'écrire :

$$\frac{N_{Ga}}{N_{Zn}} \approx \frac{g_{Ga}}{g_{Zn} \cdot g_{Cu}} \cdot e^{-\frac{8,62}{kT}} \quad (II.33)$$

Le détail des configurations (et non des sous-configurations, par souci de simplicité) prises en compte dans le calcul de g_{Ga} est indiqué sur la figure 12. Le tableau XVII rassemble les résultats obtenus pour les trois températures.

FIGURE 12

Configuration	g	ΔE ($E = -17400 + \Delta E$)
_____ $3d^{10} 4f^3$	364	112,9
_____ $3d^{10} 4d 4f^2$	910	105,8
_____ $3d^{10} 4d^2 4f$	630	98,7
_____ $3d^{10} 4p 4f^2$	546	97,2
_____ $3d^{10} 4d^3$	120	91,6
_____ $3d^{10} 4p 4d 4f$	840	90,1
_____ $3d^{10} 4s 4f^2$	182	89,6
_____ $3d^{10} 4p 4d^2$	270	83,0
_____ $3d^{10} 4s 4d 4f$	280	82,5
_____ $3d^{10} 4p^2 4f$	210	81,5
_____ $3d^{10} 4s 4d^2$	90	75,4
_____ $3d^{10} 4p^2 4d$	150	74,4
_____ $3d^{10} 4s 4p 4f$	168	73,9
_____ $3d^{10} 4s 4p 4d$	120	66,8
_____ $3d^{10} 4s^2 4f$	14	66,3
_____ $3d^{10} 4p^3$	20	65,8
_____ $3d^{10} 4s^2 4d$	10	59,2
_____ $3d^{10} 4s 4p^2$	30	58,2
_____ $3d^{10} 4s^2 4p$	6	50,6

Dégénérescences (g) et énergies (E, en u.a.) des configurations de Au^{+48}

T	200 eV	300 eV	400 eV
g_{Cu}	5,97	9,09	11,83
g_{Zn}	16,46	39,47	67,39
g_{Ga}	71,06	206,43	400,57
$\frac{N_{Ga}}{N_{Zn}}$	0,22	0,26	0,28

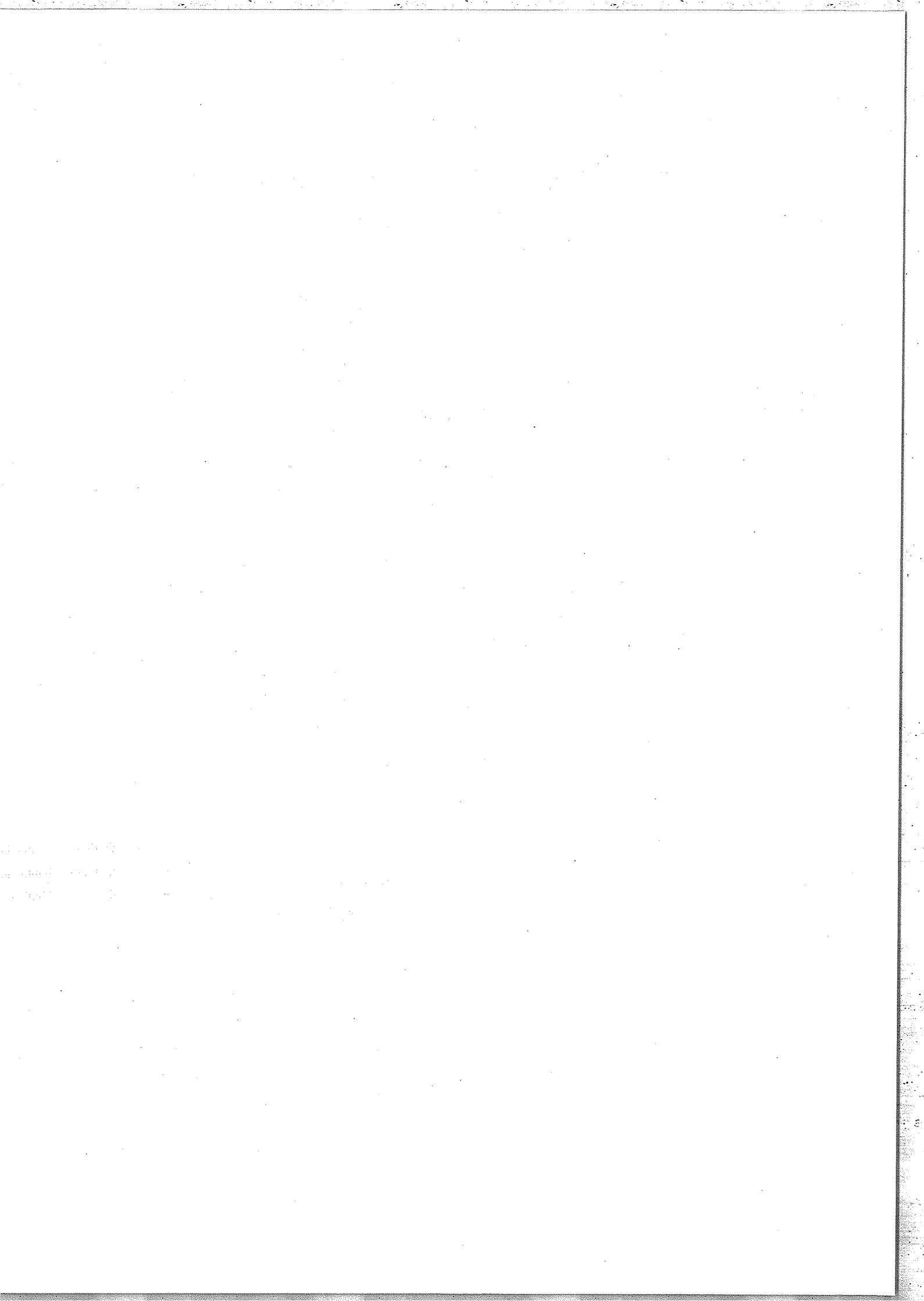
TABLEAU XVII

On remarque que l'abondance relative des ions Au^{+48} par rapport aux ions Au^{+49} dépend peu de l'hypothèse de température retenue.

Examinons brièvement le cas des ions moins chargés que Au^{+48} . La relation (I.10) permettrait encore de comparer leurs densités volumiques et de leur attribuer des valeurs voisines, tant que leurs potentiels d'ionisation restent voisins. C'est par exemple le cas de l'ion Au^{+47} appartenant à la série isoélectronique du germanium, dont le potentiel d'ionisation $\chi_{Ge} = 97$ u.a est voisin du potentiel d'ionisation χ_{Ga} de l'ion Au^{+48} .

2.2. Transitions dans l'ion Au^{+48}

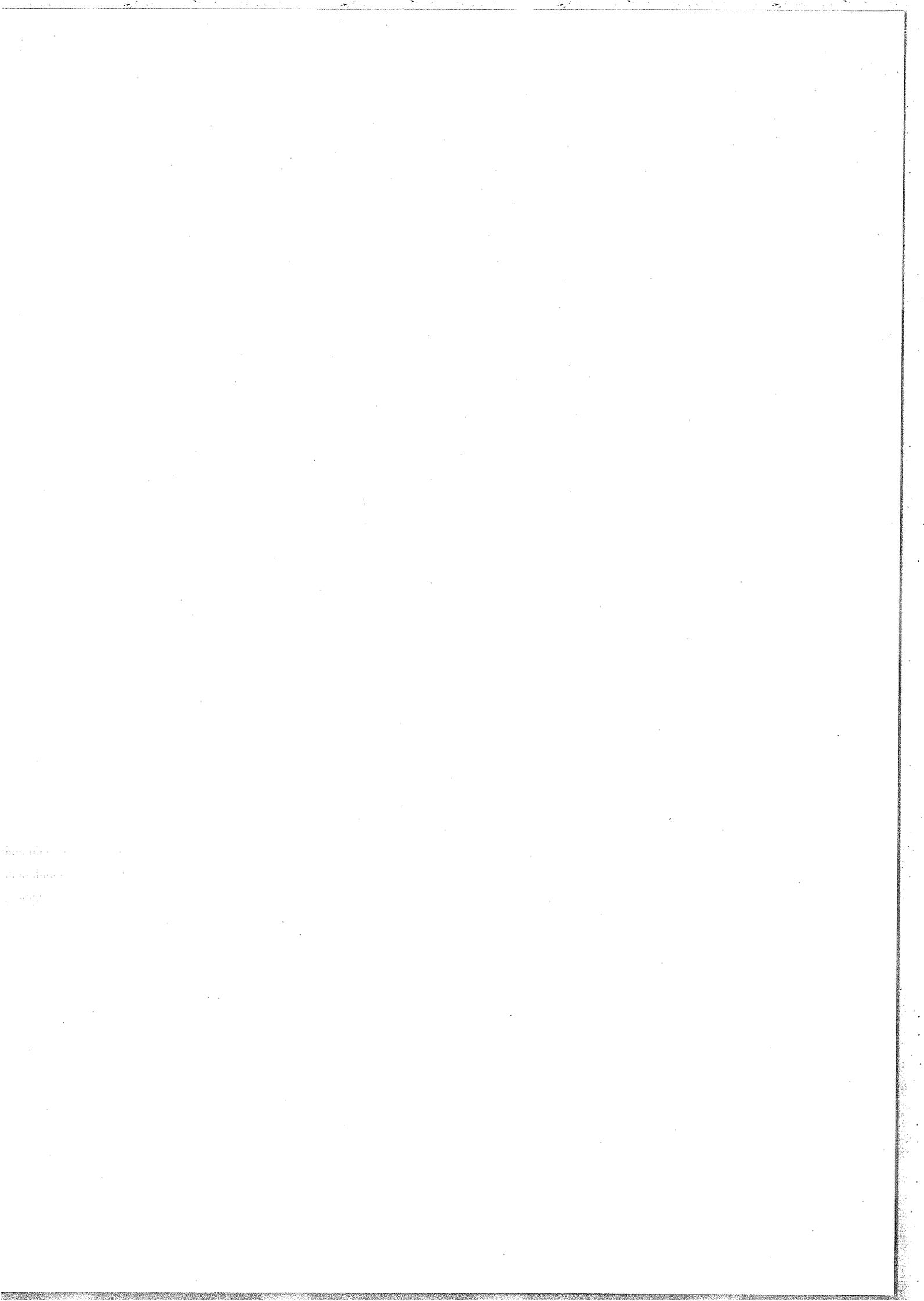
En raison des limites de complexité imposées par le programme GRANT, nous avons restreint nos calculs aux transitions suivantes : $3d^{10}4s^24p-3d^94s^24p4f$ et $3d^{10}4s^24p-3d^94s^24p^2$. Les raies correspondantes sont désignées par la notation Ga dans le tableau I. Les électrons spectateurs sont ici deux électrons $4s_{1/2}$ et un électron $4p_{1/2}$ ou $4p_{3/2}$. Les résultats des calculs permettent d'interpréter les structures g, k et J du spectre. La dernière colonne du tableau I montre que chacune d'elles regroupe des raies correspondant toutes au même saut électronique, ce que résume le tableau XVIII qui rappelle également les résultats obtenus pour l'ion Au^{+51} .



Saut électronique	Raies émises par Au ⁺⁵¹		Structure regroupant des raies émises par Au ⁺⁴⁹	
	désignation	long. d'onde (Å)	désignation	long. d'onde moyenne (Å)
$3d_{3/2} - 4f_{5/2}$	d	4,76	g	4,84
$3d_{5/2} - 4f_{7/2}$	h	4,93	k	5,02
$3d_{5/2} - 4p_{3/2}$	D	5,86	non observée	(de 6,03 à 6,06 Å)
$3d_{3/2} - 4p_{1/2}$	G	6,01	J	6,20

TABLEAU XVIII

Nous n'avons pas calculé d'autres transitions en raison de la taille trop élevée de la matrice du hamiltonien à diagonaliser. On peut par ailleurs penser que la structure du spectre située à une longueur d'onde moyenne immédiatement supérieure à celle de la structure J aurait pu être interprétée par des calculs de transitions dans l'ion Au⁺⁴⁷.



III. CONTRIBUTION DES IONS PLUS CHARGES QUE Au⁺⁵¹

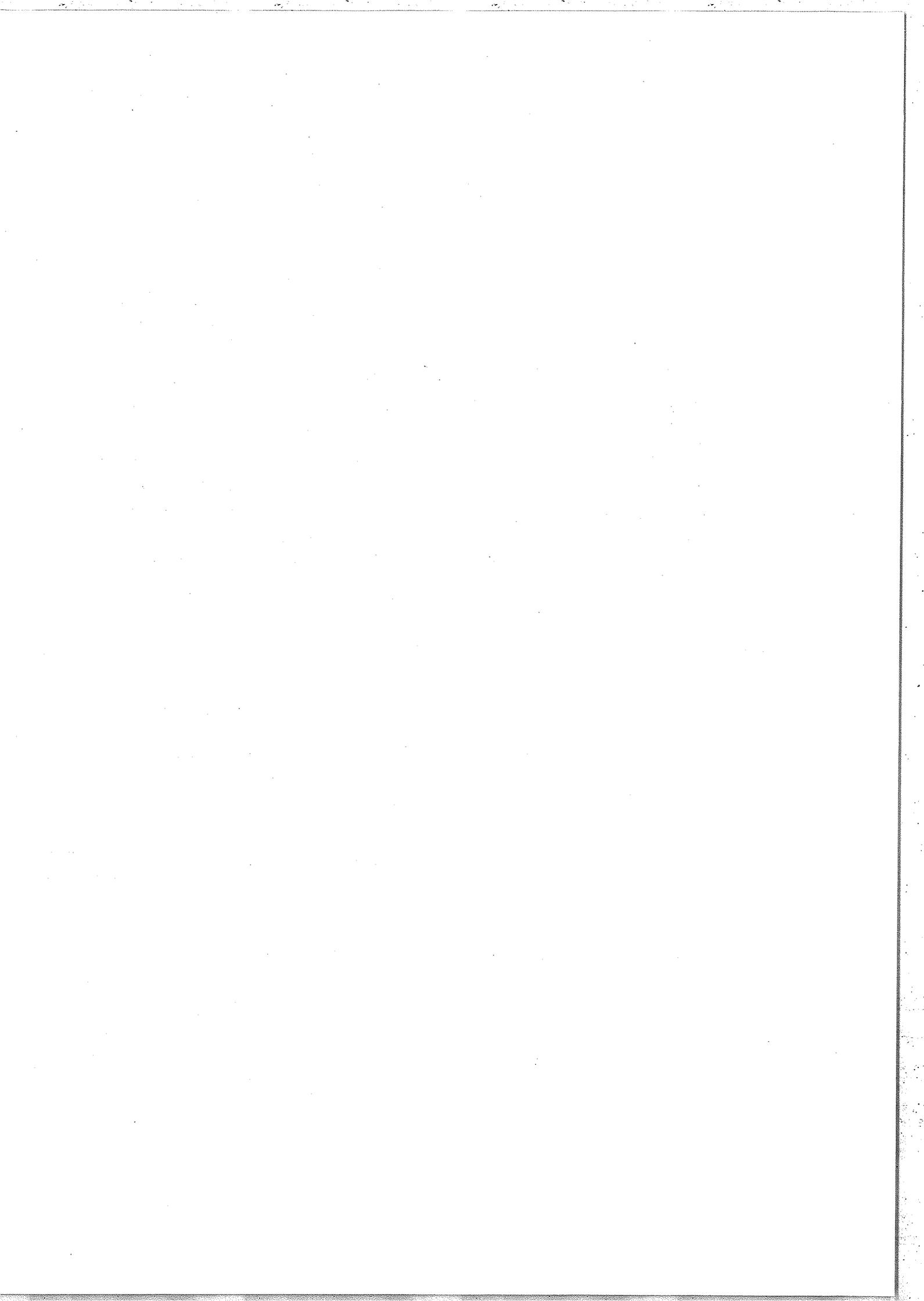
BURKHALTER et al. [11] ont signalé dans les plasmas qu'ils ont étudiés la présence d'ions appartenant à la série isoélectronique du cobalt (27 électrons). La configuration fondamentale de ces ions est $3d^9$. MANDELBAUM et al. [6] ont calculé pour plusieurs éléments à l'aide du programme RELAC la transition $3d^9-3d^84p$, ce qui leur a permis d'interpréter certaines structures de leurs spectres. Dans le plasma que nous étudions, l'ion appartenant à la série isoélectronique du cobalt est l'ion Au⁺⁵². Dans un premier paragraphe, nous étudions les transitions entre les différents niveaux d'énergie de cet ion. Le second paragraphe traite des densités volumiques dans le plasma des ions plus chargés que Au⁺⁵¹.

1. TRANSITIONS DANS L'ION Au⁺⁵²

Seules les transitions dipolaires électriques de longueurs d'onde voisines de $4,5 \text{ \AA}$ sont présentes sur l'enregistrement du spectre. L'interprétation complète nécessite néanmoins, comme nous allons le montrer, l'étude des raies émises non seulement vers les niveaux de $3p^63d^9$, mais aussi vers ceux de $3p^53d^{10}$. Nous avons alors étendu notre étude aux transitions entre ces configurations ainsi qu'aux transitions "interdites" à l'intérieur de ces configurations.

1.1. Identification de raies du spectre

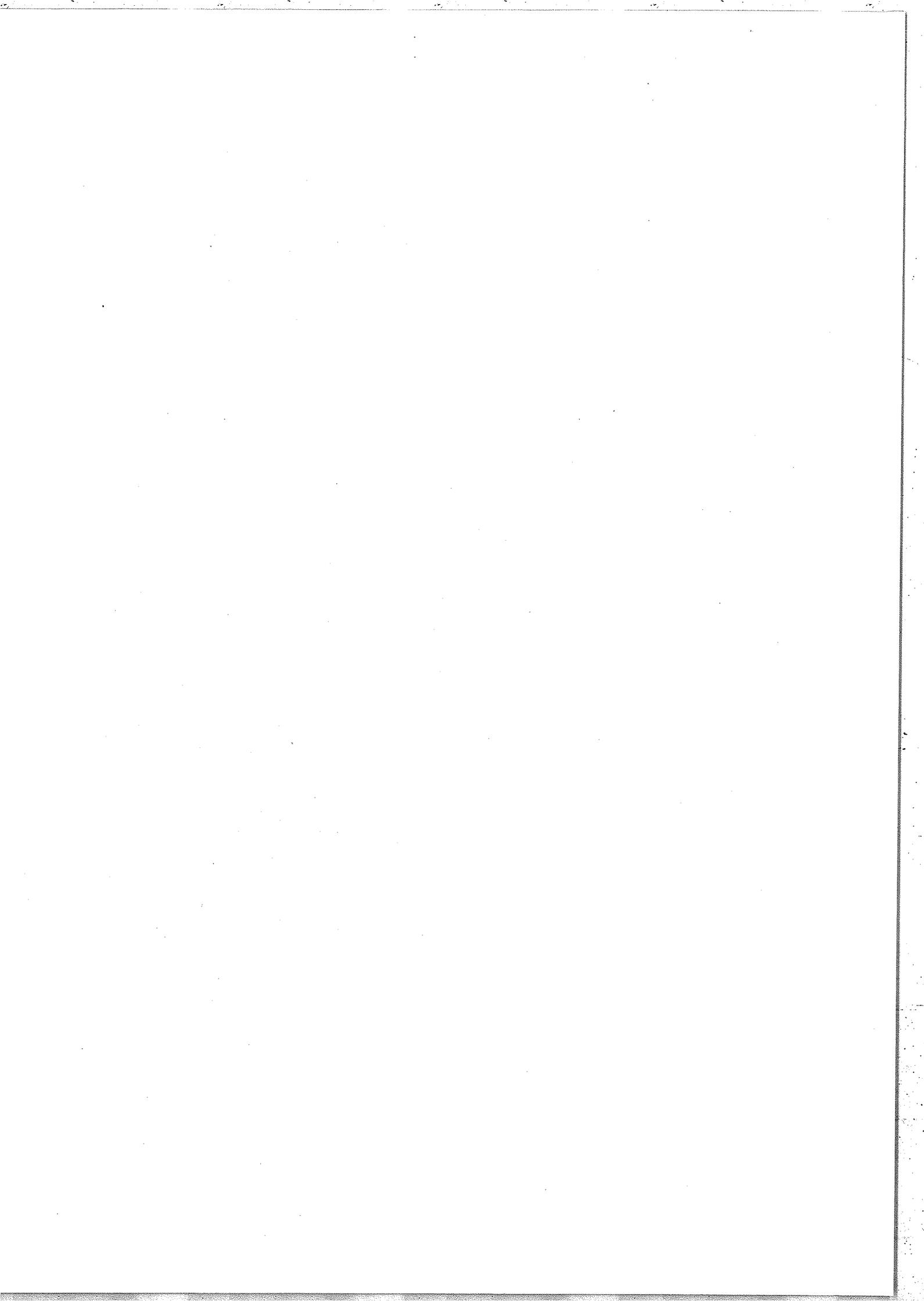
Nous avons commencé par calculer les transitions suivantes : $3d^9-3d^84f$, $3p^63d^9-3p^53d^94s$ et $3d^9-3d^84p$. Les raies correspondantes sont désignées par la notation Co(1) dans le tableau I. Certaines structures du spectre, telles les structures b et c, reçoivent par ces calculs une interprétation, qui se révèle être néanmoins incomplète : les facteurs gf des raies qu'elles regroupent ne permettent pas de leur attribuer



des intensités comparables, contrairement à ce que l'on peut observer sur l'enregistrement du spectre. Nous avons donc envisagé un autre type de transitions pour lesquelles la configuration basse, $3p^5 3d^{10}$, appartient au même complexe de Layzer (3^{17}) que $3p^6 3d^9$. Nous avons alors calculé la transition $3p^5 3d^{10} - 3p^5 3d^9 4f$, dans le but d'achever l'interprétation des structures b et c, puis la transition $3p^5 3d^{10} - 3p^5 3d^9 4p$. Les raies correspondantes sont désignées par Co(2) dans le tableau I. Les deux groupes de raies Co(1) et Co(2) permettent une bonne interprétation des structures b, c, B et C du spectre. Ces structures ont toutes des surfaces assez nettement inférieures à celles des autres structures précédemment identifiées. Elles ne sont visibles que parce qu'elles ont une longueur d'onde moyenne telle qu'aucune des autres structures, dues à des transitions dans les ions plus chargés, ne se trouve dans leur voisinage. Comme nous l'avons observé précédemment, les raies émises par les ions Au^{+52} se groupent dans des domaines restreints de longueur d'onde dont chacun rassemble les raies correspondant à un même saut électronique, à l'exception de quelques raies pour lesquelles le couplage réel est très éloigné du couplage jj. Ce fait est mis en évidence dans le tableau XIX.

Saut électronique	Raies émises par Au^{+51}		Raies émises par Au^{+52}	
	désignation	long. d'onde	structure éventuelle	long. d'onde
$3d_{3/2} - 4f_{5/2}$	d	4,76	b et c	4,67 et 4,69
$3d_{5/2} - 4f_{7/2}$	h	4,93	-	4,84 à 4,87
$3d_{5/2} - 4p_{3/2}$	D	5,86	B et C	5,69 et 5,72
$3d_{3/2} - 4p_{1/2}$	G	6,01	-	5,84 à 5,90

TABLEAU XIX



1.2. Autres transitions

Les configurations basses étudiées dans le paragraphe précédent, dont $3p^6 3d^9$ et $3p^5 3d^{10}$, contiennent respectivement des niveaux du type 2D_J et 2P_J . CURTIS [36] a étudié le développement en puissances de (αZ) de l'énergie de Dirac d'un atome à un seul électron. Nous appliquons sa méthode à l'ion Au^{+52} . Il a introduit de façon effective les corrections relativistes, la substitution à Z des charges effectives Z^* permettant de tenir compte des corrélations.

1.2.1. La transition 3p-3d

La transition dipolaire électrique $3p^6 3d^9 - 3p^5 3d^{10}$ a été étudiée par de nombreux auteurs pour des ions appartenant à la série isoélectronique du cobalt et situés entre le strontium ($Z = 38$) et l'ytterbium ($Z = 70$) dans la classification périodique [37,38,39,40]. Le nombre d'onde σ d'une raie $^2D_J - ^2P_{J'}$, émise par un atome de charge Z , peut être développé de la façon suivante :

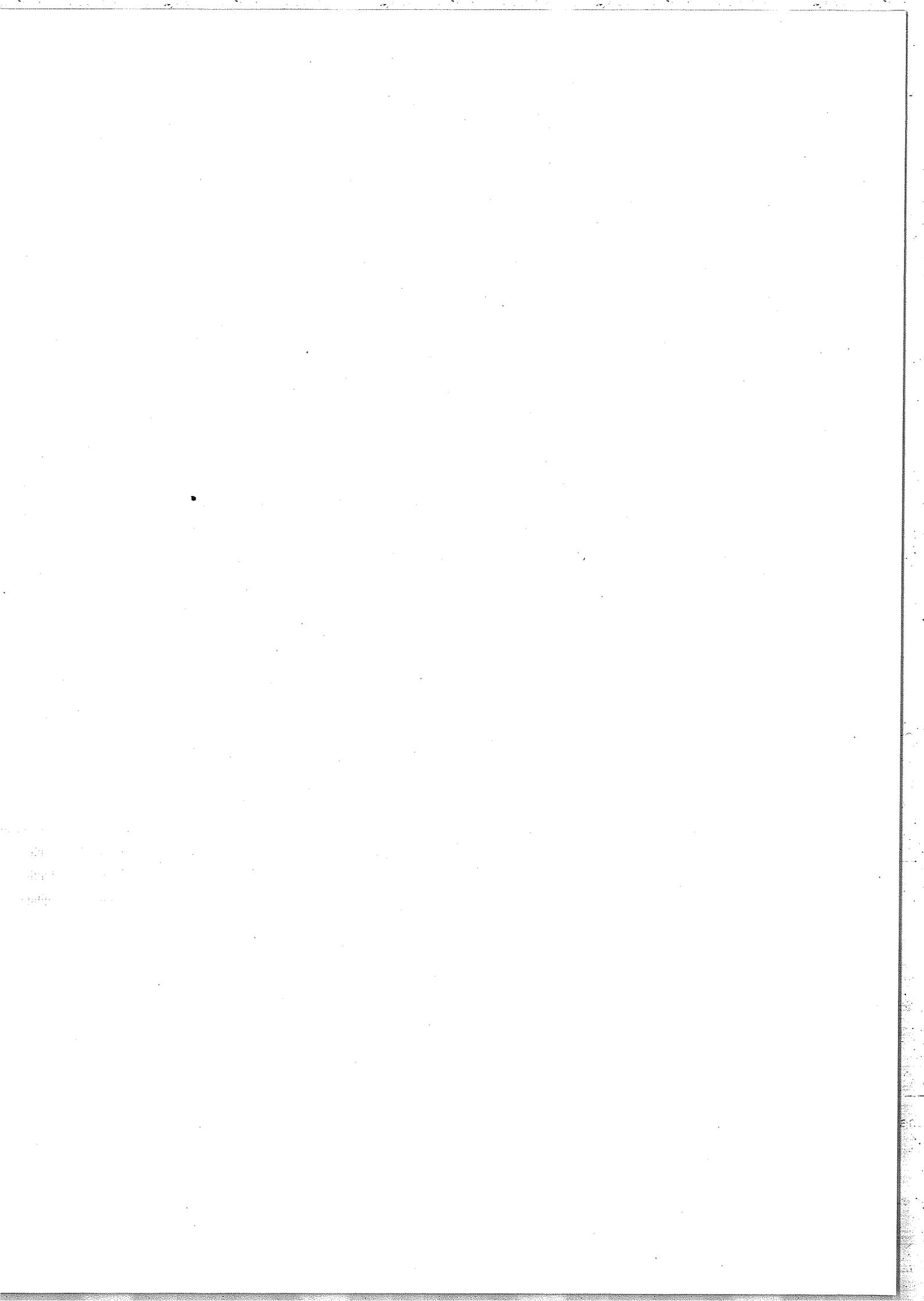
$$\sigma(^2D_J - ^2P_{J'}) = A(Z - S_o) + E_{D_J}^o (Z - S_D)^4 - E_{P_{J'}}^o (Z - S_P)^4 \quad (\text{II.34})$$

où S_o , S_D et S_P sont les différents facteurs d'écran et où $E_{D_J}^o$ et $E_{P_{J'}}^o$ sont déduits des formules de CURTIS [36].

Le premier terme de l'expression (II.34) prend en compte les corrélations électroniques tandis que les deux derniers termes introduisent les effets de spin-orbite sur les énergies des niveaux 2D_J et $^2P_{J'}$.

Les quatre paramètres A , S_o , S_D et S_P sont obtenus par une optimisation sur toutes les raies $^2D_J - ^2P_{J'}$. Le tableau XX donne les valeurs de ces paramètres, les valeurs des longueurs d'onde correspondant à l'atome d'or, extrapolées à l'aide de la formule (II.34), et les valeurs calculées par le programme RELAC.

L'écart relatif entre ces valeurs est de l'ordre de 1 % pour les deux dernières raies et de 4 % pour la première raie.



	${}^2D_{3/2} - {}^2P_{1/2}$	${}^2D_{5/2} - {}^2P_{3/2}$	${}^2D_{3/2} - {}^2P_{3/2}$
A (cm ⁻¹)	53783	55033	54244
S ₀	17,946	18,43	18,23
S _D	11,455	17,22	25,82
S _P	47,026	43,92	27,55
λ _{ext} (Å)	15,15	24,42	29,83
λ _{RELAC} (Å)	14,611	24,206	29,447

TABLEAU XX

1.2.2. Raies intraconfigurationnelles

Nous nous intéressons ici aux raies interdites $3d^9 J = \frac{5}{2} - J' = \frac{3}{2}$ et $3p^5 J = \frac{3}{2} - J' = \frac{1}{2}$. De nombreux auteurs ont étudié ces raies [37,41] pour des atomes situés dans le cobalt (Z = 27) et le tungstène (Z = 74) dans la classification périodique. Pour chacun de ces doublets, l'écart énergétique peut être exprimé, à la manière de CURTIS [42], selon la fonction suivante de la charge Z, déduite du terme de structure fine de l'hamiltonien de Dirac pour un atome hydrogénoïde.

$$\sigma_{(n\ell, Z)} = \frac{R_\infty \alpha^2 Z^{*4}}{\ell(\ell+1)n^3} \left\{ \left[1 + \sum_{\beta=1}^{\infty} (\alpha Z)^{2\beta} A_\beta(n, \ell) \right] / \left[\left(1 + \frac{m}{M_Z} \right) + (g_e - 2) \left(1 - \frac{m}{M_Z} \right)^2 \right] \right\} \quad (\text{II.35})$$

R_∞ et α sont les constantes de Rydberg et de structure fine, g_e est le facteur gyromagnétique de l'électron, m et M_Z sont les masses de l'électron et du noyau, et Z^* la charge effective. Les expressions des coefficients $A_\beta(n, \ell)$ sont dans la référence [42]. Dans son article, SNYDER [43] utilise une expression identique au premier terme de l'équation (II.35) et donne à Z^* la forme suivante :

$$Z^* = Z - \left(S_0 + \frac{S_1}{Z-C} \right) \quad (\text{II.36})$$



Il a optimisé les valeurs des paramètres S_0 , S_1 et C sur l'ensemble des informations qu'il possédait et qui correspondaient à des atomes dont la charge n'excédait pas $Z = 47$. Nous avons repris cette optimisation entre $Z = 27$ et $Z = 74$ pour le doublet $3d^9$, et entre $Z = 35$ et $Z = 66$ pour le doublet $3p^5$. Nous avons utilisé l'expression (II.35) avec $\beta \leq 4$ et l'expression (II.36). Le tableau XXI donne les valeurs obtenues pour les paramètres S_0 , S_1 et C ainsi que les longueurs d'onde extrapolées suivant la formule (II.35) et les longueurs d'onde calculées à l'aide du programme RELAC pour l'or.

	2_P	2_D
S_0	7,715	12,101
S_1	5,630	13,032
C	30,928	19,936
$\lambda_{\text{ext}} \text{ (Å)}$	29,8	134,2
$\lambda_{\text{RELAC}} \text{ (Å)}$	19,0	136,0

TABLEAU XXI

L'écart relatif des valeurs des longueurs d'onde obtenues pour chaque doublet est inférieur à 3 %.

2. DENSITES VOLUMIQUES DES IONS PLUS CHARGES QUE Au⁺⁵¹

2.1. Densité des ions Au⁺⁵²

Nous utilisons ici les résultats du chapitre II pour évaluer l'abondance des ions Au⁺⁵².

FIGURE 13

ss-conf.	g	ΔE ($E = -16900 + \Delta E$)
<hr/> $3p^* 3p^4 3d^{10}$	2	74,15
 <hr/> $3p^{*2} 3p^5 3d^{10}$	4	58,43
 <hr/> $3p^6 3d^{*3} 3d^6$	4	42,95
<hr/> $3p^6 3d^{*4} 3d^5$	6	39,60

Dégénérescences (g) et énergies (E, en u.a.) des sous-configurations de Au⁺⁵²

La relation (II.26) permet d'écrire :

$$\frac{n_{Co}^*}{n_{Ni}^*} = \frac{n_{Ni}^*}{n_{Cu}^*} \cdot e^{-\frac{71,31}{kT}} \quad (II.37)$$

La valeur approchée du rapport $\frac{n_{Ni}^*}{n_{Cu}^*}$ se déduit des relations (II.24) et (II.25) :

$$\frac{n_{Ni}^*}{n_{Cu}^*} \approx g_{Cu} \quad (II.38)$$

Notons $g_{Co} \cdot n_{Co}^*$ la population totale des sous-configurations pas ou peu excitées de l'ion Au^{+52} . Nous avons :

$$N_{Co} \approx g_{Co} \cdot n_{Co}^* \quad (II.39)$$

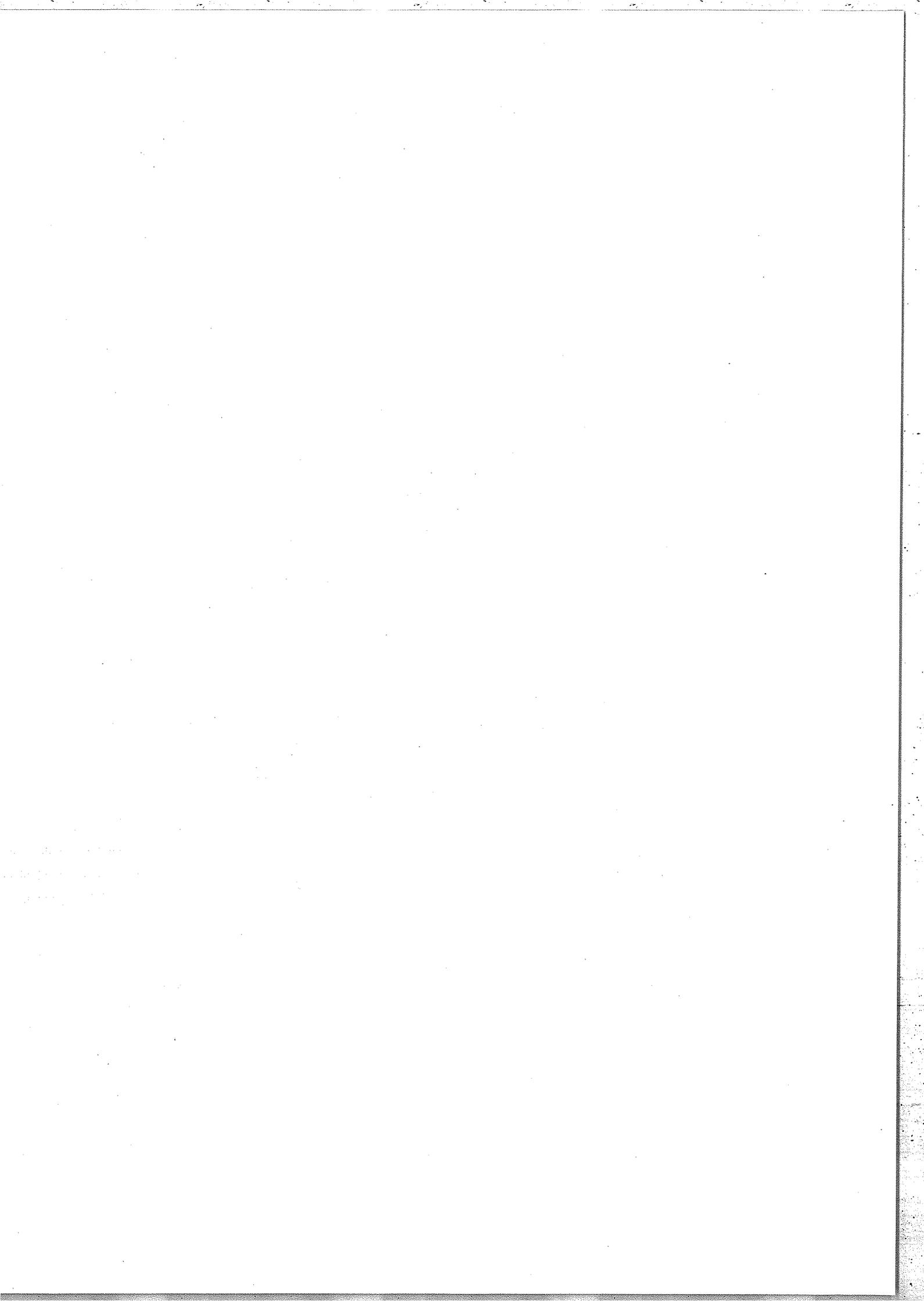
Nous déduisons des relations (II.37), (II.38) et (II.39) :

$$\frac{N_{Co}}{N_{Ni}} \approx g_{Co} \cdot g_{Cu} \cdot e^{-\frac{71,31}{kT}} \quad (II.40)$$

Les sous-configurations prises en compte pour le calcul de g_{Co} sont indiquées sur la figure 13, ainsi que leurs énergies moyennes et leurs dégénérescences. Le tableau XXII rassemble les valeurs du rapport $\frac{N_{Co}}{N_{Ni}}$ obtenues pour les trois hypothèses de température retenues dans le chapitre II.

T	200 eV	300 eV	400 eV
g_{Cu}	5,97	9,09	11,83
g_{Co}	8,86	9,76	10,49
$\frac{N_{Co}}{N_{Ni}}$	0,003	0,14	0,97

TABLEAU XXII



L'hypothèse de température a ici une grande importance pour l'évaluation de l'abondance relative des ions Au^{+52} par rapport aux ions Au^{+51} . Compte tenu du fait que les raies dans l'ion Au^{+52} donnent lieu à des structures d'intensité moyenne sur l'enregistrement du spectre, nous pouvons évaluer la température à 300 eV.

2.2. Densité des ions plus chargés que Au^{+52}

Examinons le cas de l'ion Au^{+53} qui appartient à la série isoélectronique du fer. La relation (I.10) permet d'écrire :

$$\frac{n_{Co}^*}{n_{Fe}^*} \cdot \frac{n_{Ni}^*}{n_{Co}^*} = \left[\frac{n_{Cu}^*}{n_{Ni}^*} \cdot \frac{n_{Co}^*}{n_{Ni}^*} \right]^{\frac{\chi_{Co} - \chi_{Ni}}{\chi_{Ni} - \chi_{Cu}}} = x^{0,071} \quad (II.41)$$

La valeur de $\frac{n_{Fe}^*}{n_{Co}^*} \cdot \frac{n_{Ni}^*}{n_{Co}^*}$ dépend peu de la valeur de x : si x est compris entre 10^{-14} et 10^{+14} , $\frac{n_{Fe}^*}{n_{Co}^*} \cdot \frac{n_{Ni}^*}{n_{Co}^*}$ est compris entre 0,1 et 10. Si nous supposons maintenant la température T connue, nous pouvons déduire des relations (II.37) et (II.41) la relation suivante :

$$\frac{n_{Fe}^*}{n_{Co}^*} = \frac{n_{Co}^*}{n_{Ni}^*} \cdot e^{-\frac{5,08}{kT}} \quad (II.42)$$

Soit N_{Fe} la population totale de l'ion Au^{+53} et $g_{Fe} \cdot n_{Fe}^*$ la population de ses sous-configurations pas ou peu excitées. Nous avons :

$$N_{Fe} \approx g_{Fe} \cdot n_{Fe}^* \quad (II.43)$$

Les relations (II.39), (II.40), (II.42) et (II.43) permettent d'écrire :

$$\frac{N_{Fe}}{N_{Co}} = \frac{g_{Fe} \cdot g_{Cu}}{g_{Co}} \cdot e^{-\frac{76,39}{kT}} \quad (II.44)$$

FIGURE 14

ss. conf.	g	$\Delta E (E = -16700 + \Delta E)$
$3p^4 3d^{*4} 3d^6$	1	93,15
$3p^* 3p^3 3d^{*4} 3d^6$	8	76,98
$3p^* 3p^4 3d^{*3} 3d^6$	8	61,56
$3p^{*2} 3p^2 3d^{*4} 3d^6$	6	61,18
$3p^* 3p^4 3d^{*4} 3d^5$	12	58,51
$3p^{*2} 3p^3 3d^{*3} 3d^6$	16	45,96
$3p^{*2} 3p^3 3d^{*4} 3d^5$	24	42,41
$3p^6 3d^{*2} 3d^6$	6	30,90
$3p^6 3d^{*3} 3d^5$	24	27,54
$3p^6 3d^{*4} 3d^4$	15	24,06

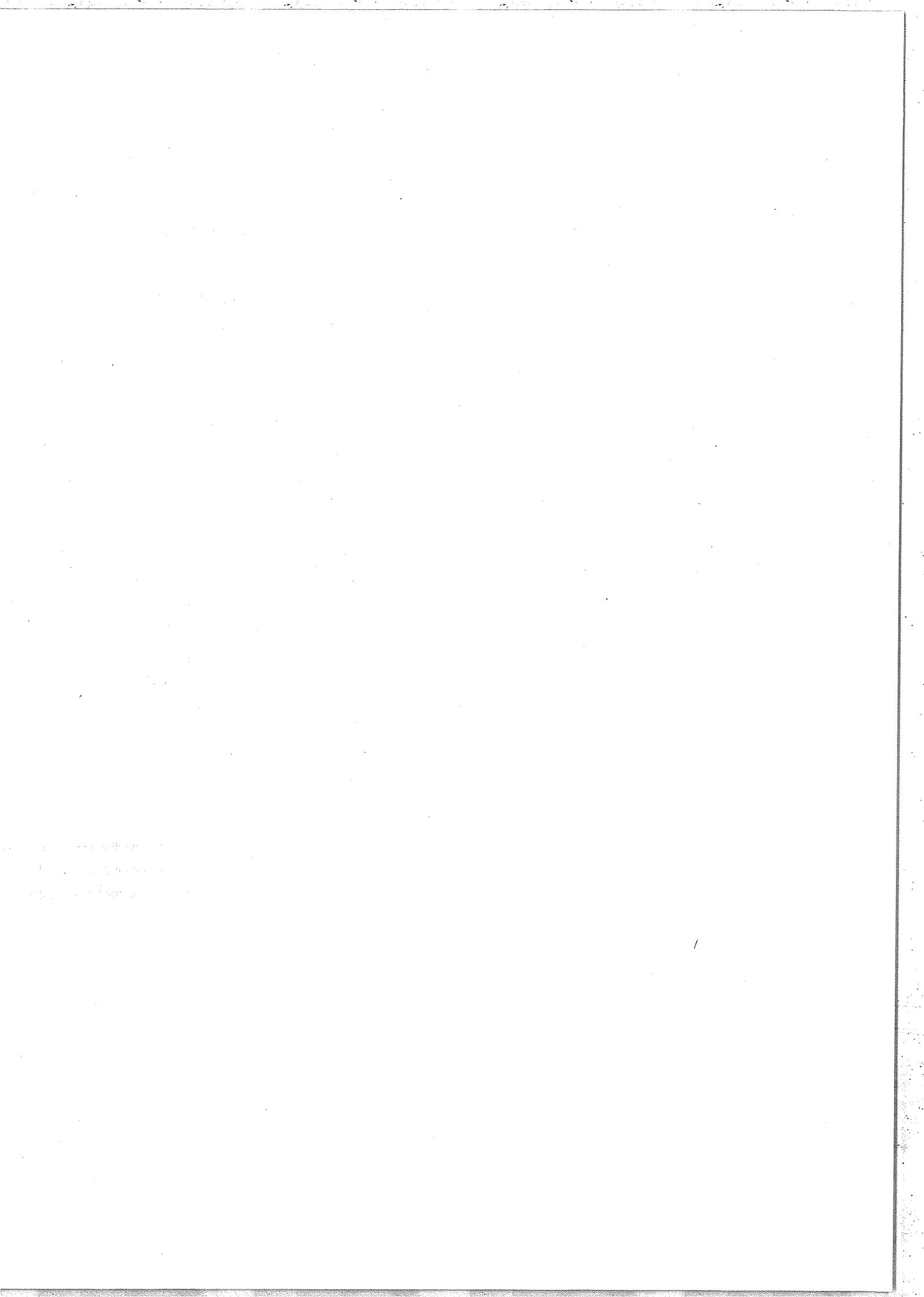
Dégénérescences (g) et energies (E, u.a.) des sous-configurations de Au^{+53}

Le détail des sous-configurations intervenant dans le calcul de g_{Fe} est indiqué sur la figure 14. Le tableau XXIII rassemble les résultats obtenus avec les trois hypothèses de température.

T	200 eV	300 eV	400 eV
g_{Fe}	35,31	43,55	50,70
g_{Co}	8,86	9,76	10,49
g_{Cu}	5,97	9,09	11,83
$\frac{N_{Fe}}{N_{Co}}$	$7 \cdot 10^{-4}$	0,04	0,32

TABLEAU XXIII

Le tableau XXIII montre d'une part que la valeur calculée de l'abondance relative des ions Au^{+53} dépend fortement de l'hypothèse de température retenue, et d'autre part que les transitions dans ces ions ne peuvent donner lieu à des structures d'intensités non négligeables sur l'enregistrement du spectre que si la température du plasma n'excède pas 300 eV.



CONCLUSION

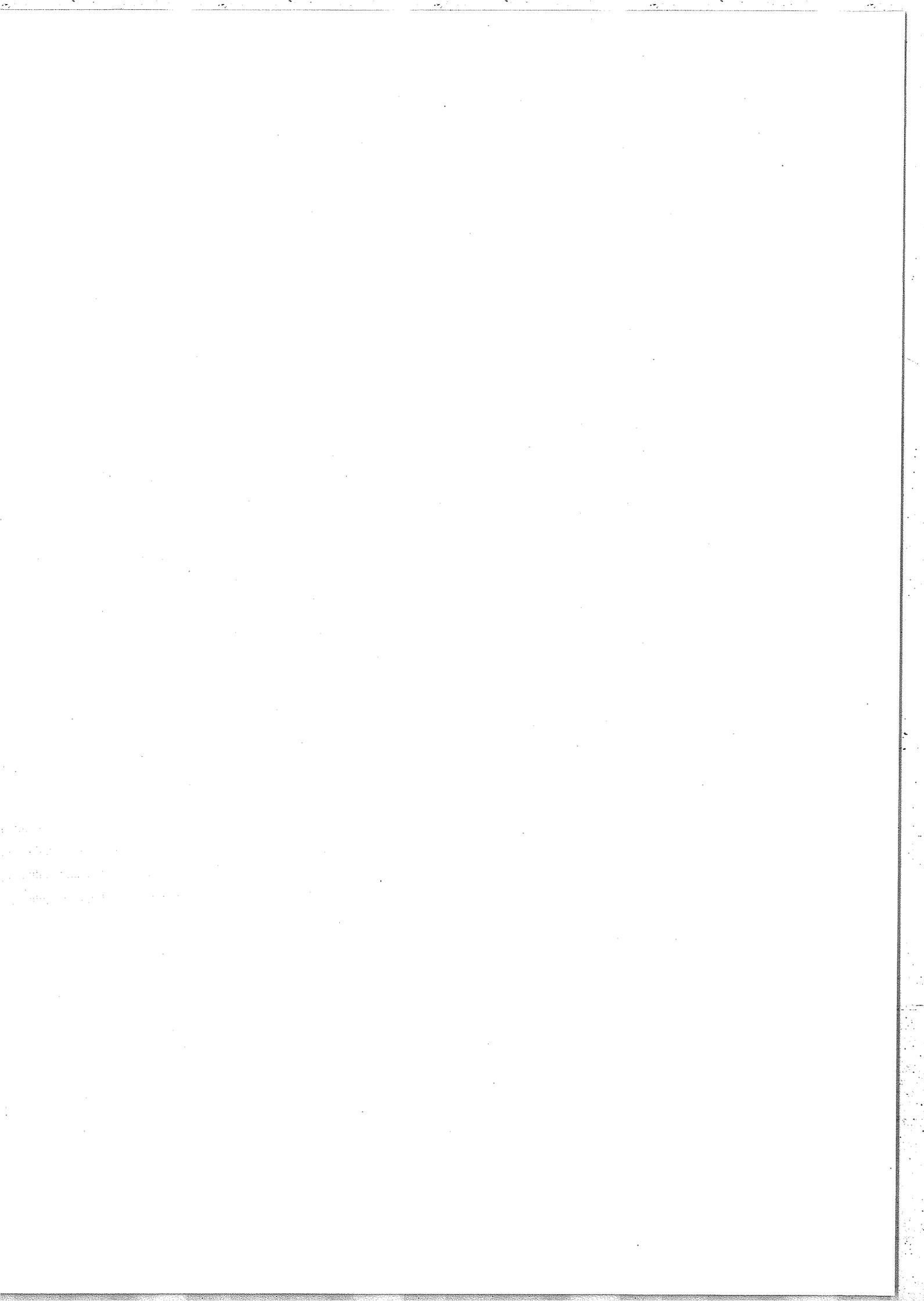
L'étude du spectre de l'or que nous venons de présenter a été menée au moyen de techniques diverses, dont nous pensons qu'elles sont applicables à tout spectre de plasma dense d'élément suffisamment lourd ($Z > 60$) enregistré dans le domaine des rayons X.

Le point de départ de l'analyse est le repérage de quelques raies résolues d'une séquence isoélectronique à spectre très simple, dont on puisse trouver les raies équivalentes dans des spectres déjà analysés.

Outre les raies émises par ces ions, les enregistrements des spectres présentent plusieurs groupes de raies non résolues émises par les ions appartenant aux séquences isoélectroniques voisines. Une analyse globale peut en être faite au moyen de la méthode des sous-faisceaux non résolus. Cette méthode, adaptée aux états en couplage jj pur, permet d'identifier, avec assez peu de calculs, les transitions qui sont à l'origine des structures du spectre.

Quels sont les ions à prendre en compte dans ces calculs ? Le modèle de l'équilibre thermodynamique local permet d'interpréter assez simplement la répartition des ions du plasma selon les différents degrés d'ionisation. Ce modèle est bien adapté aux plasmas très denses dans lesquels les collisions sont nombreuses. Les plasmas produits par impact laser sont de ce type. Nous sommes cependant conscients de la supériorité théorique des modèles collisionnel-radiatifs, en dépit de leur plus grande difficulté de mise en oeuvre. Dans le cas de l'or, nous avons commencé l'analyse par les deux étapes suivantes :

- Comparaison des intensités expérimentales des raies émises par les ions des séries isoélectroniques du nickel (sous-couches complètes dans l'état fondamental) et du cuivre



(un électron spectateur en sus), en faisant l'hypothèse que le rapport entre la population d'un état supérieur et celle de l'état inférieur correspondant n'est pas modifié par la présence d'un électron spectateur. La difficulté principale réside dans l'évaluation des intensités expérimentales.

- Application de la loi de Saha-Eggert aux ions des séquences voisines. Il est pour cela nécessaire de faire une hypothèse sur la température afin de pouvoir appliquer la loi. Il faut aussi évaluer la fonction de partition de chaque ion. Nous n'avons pris en compte, dans nos calculs, que les électrons spectateurs de la couche $n = 4$. Une étude plus détaillée devrait faire intervenir le "microchamp" électrique régnant dans le plasma, qui a pour effet d'abaisser les potentiels d'ionisation.

Nous avons constaté que l'hypothèse de température retenue influe assez peu sur les densités volumiques calculées des atomes moins ionisés (ion de la série isoélectronique du nickel), alors qu'elle influe beaucoup sur les densités volumiques des atomes plus ionisés. La confrontation entre les valeurs calculées et l'allure du spectre permet d'obtenir un diagnostic de température relativement précis, ici 300 eV. Les valeurs de la température et des densités volumiques relatives conduisent à l'évaluation, au moyen de la loi de Saha-Eggert, de la densité électronique du plasma. Nous pouvons l'évaluer ici à $1,9 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$. Nous constatons que les valeurs de la température et de la densité électronique obtenues par l'utilisation du modèle de l'équilibre thermodynamique local sont "raisonnables", en dépit des approximations qui ont été faites.

L'interprétation préliminaire du spectre peut donc être menée au moyen de techniques de calcul assez légères.

La troisième étape est l'interprétation détaillée des structures des spectres au moyen de calculs a priori et raie

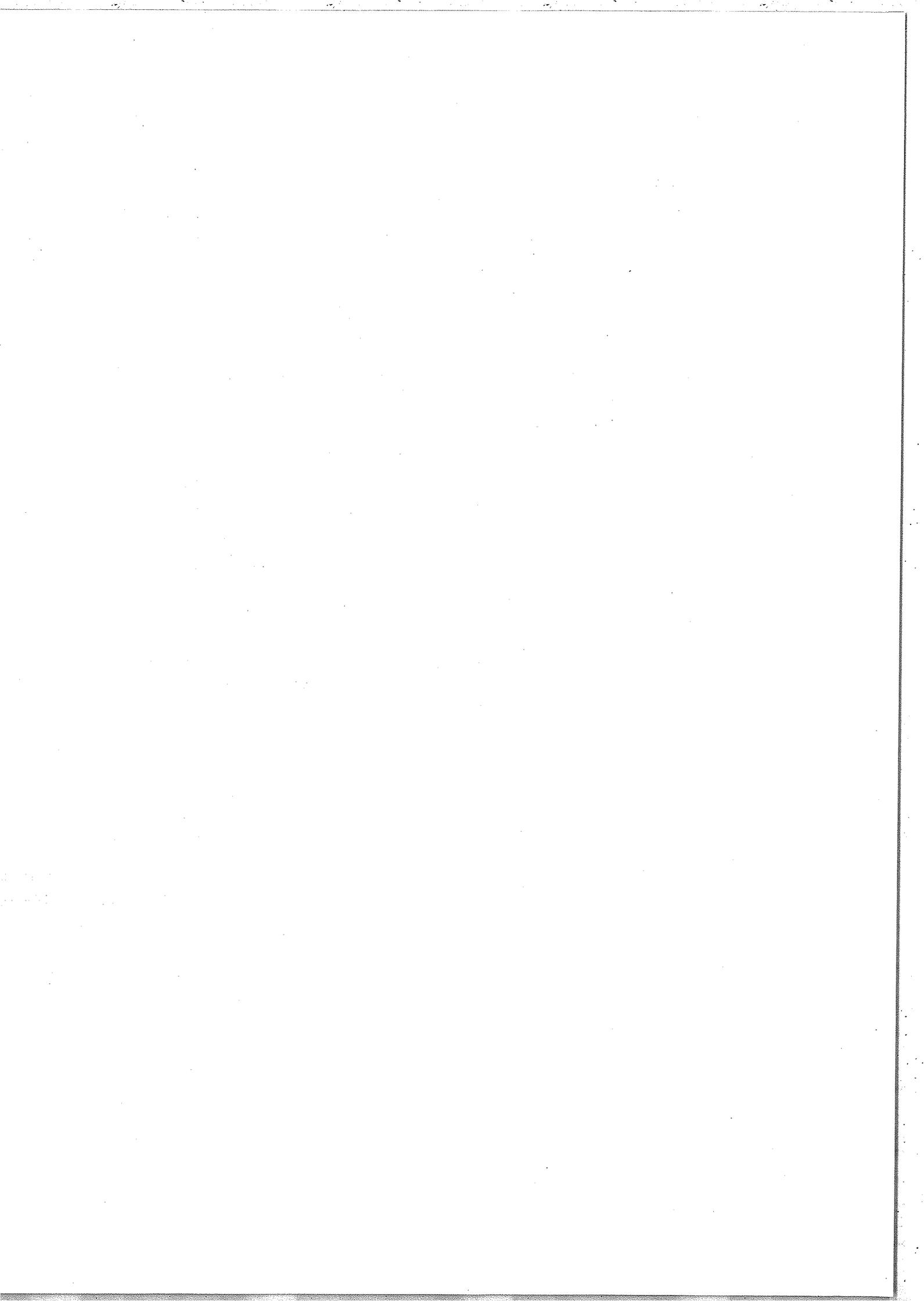
10/10/10
10/10/10
10/10/10

par raie des transitions dans les différents ions envisagés. Notre étude a montré que le programme RELAC est un outil parfaitement adapté à ce problème. En effet, les valeurs des longueurs d'onde calculées a priori correspondent remarquablement bien aux valeurs expérimentales. La raison en est que d'une part, le modèle du champ central rend bien compte de la structure des atomes très ionisés, et que d'autre part, le programme RELAC permet de décrire intégralement les effets relativistes importants dans le cas des éléments lourds tels que l'or pour les énergies des niveaux et les forces de raie. Nous avons mis ce fait en évidence lors du calcul des intensités de certaines raies émises par l'ion isoélectronique du nickel.

Sur l'enregistrement de l'or que nous avons étudié, nous avons pu identifier des raies ou des sous-faisceaux dus aux transitions 3p-4s, 3d-4p et 3d-4f dans cinq types d'ions de degrés d'ionisation consécutifs, Au^{+52} à Au^{+48} , appartenant aux séries isoélectroniques du cobalt, du nickel, du cuivre, du zinc et du gallium, cette dernière séquence étant pour la première fois mise en évidence dans ce type de spectre.

Seules les raies émises par l'ion Au^{+51} , de la série isoélectronique du nickel, sont résolues. A chacune de ces raies correspondent, à des longueurs d'onde plus grandes, les raies émises par les ions moins chargés, à partir des sous-configurations construites par addition d'électron(s) spectateur(s) à l'une des sous-configurations excitées de l'ion Au^{+51} .

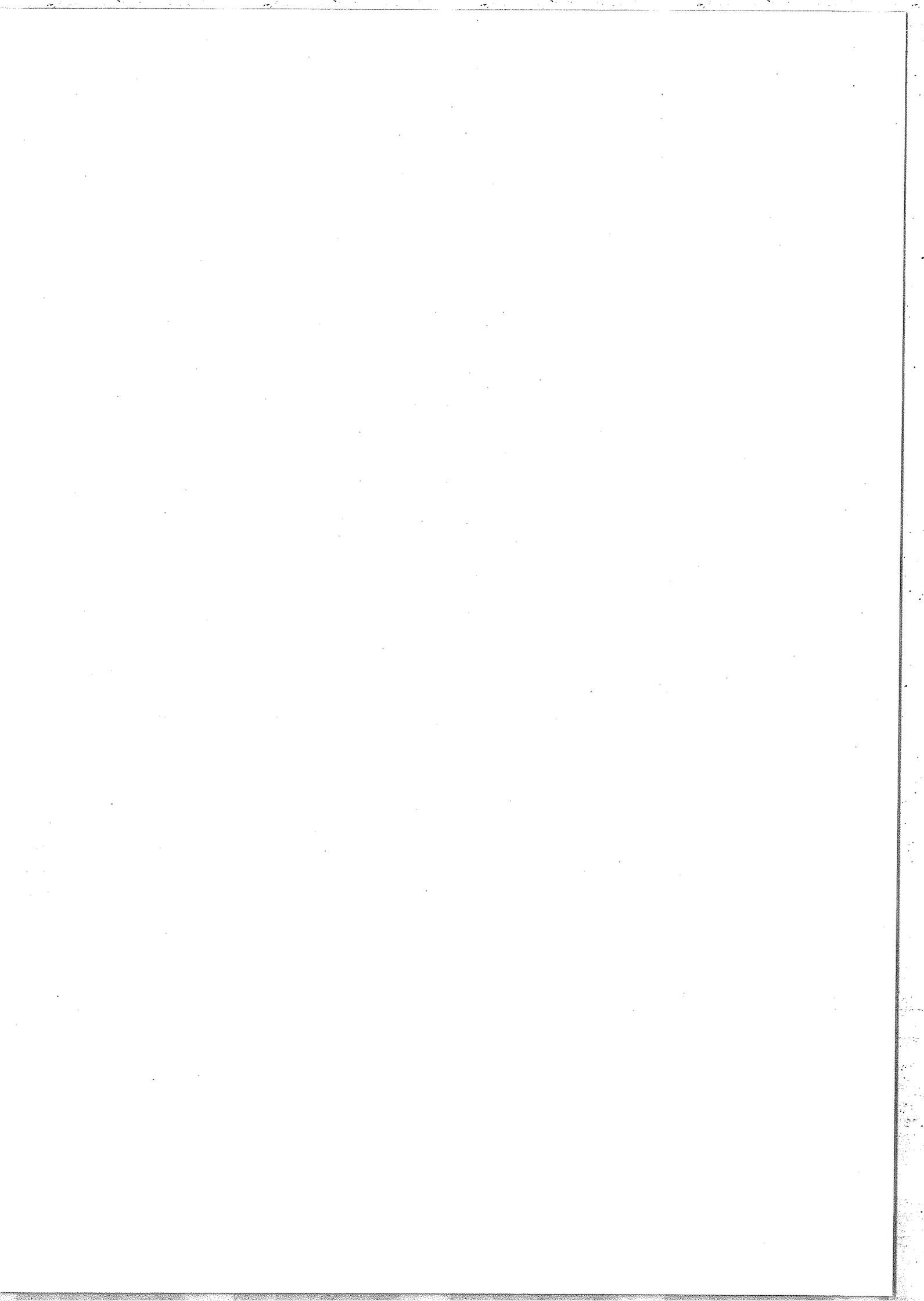
A des longueurs d'onde plus courtes apparaissent des raies dues à des transitions dans l'ion Au^{+52} , de la série isoélectronique du cobalt, qui font intervenir des configurations basses comprenant une lacune 3p ou 3d. Nous avons montré qu'il était important de prendre en considération la possibilité d'une lacune 3p pour bien rendre compte du spectre.



La partie du spectre correspondant au saut électronique 3d-4f, qui n'avait jusqu'à ce jour jamais fait l'objet d'études aussi détaillées qu'ici, est particulièrement intéressante. Elle consiste en pics étroits surmontant un "fond" intense, large d'environ 0,8 Å et non identifié, les intensités relatives de ces pics et du fond dépendant fortement des paramètres du plasma. Une piste de recherche s'est ouverte très récemment : sur des spectres du tantale ($Z = 73$), enregistrés par le GRECO I.L.M. de l'Ecole Polytechnique, il semble que l'intensité du fond soit corrélée à celles des transitions 3d-5f, transitions dont les niveaux supérieurs sont situés au-dessus du niveau d'ionisation dans chacun des ions possédant au moins 29 électrons. Ce fond pourrait donc résulter de l'émission à partir de niveaux du même type, dits autoionisants.

Il sera intéressant de confronter l'ensemble des résultats présentés dans ce travail avec les analyses de spectres d'atomes lourds ($Z > 70$) produits par impact laser, notamment en Israël (SOREQ Centre, à Yavne) et en France (GRECO I.L.M. de l'Ecole Polytechnique). Il serait souhaitable d'explorer, avec une résolution encore meilleure, un domaine de longueur d'onde plus vaste. Cela pourrait notamment permettre la mise en évidence, en-deçà et au-delà des raies 3d-4f et 3d-4p, de raies émises par les ions de la série isoélectronique du nickel, et d'observer expérimentalement les effets des mélanges de configuration sur les intensités des raies. Il convient aussi de rechercher le meilleur choix des éléments à introduire dans les cibles pour permettre un étalonnage en longueur d'onde très précis des spectres.

Un pas décisif vers l'obtention de diagnostics de température et de densité électronique sera franchi lorsque seront mises en évidence expérimentalement les raies "interdites" émises par les ions de la série isoélectronique du cobalt (27 électrons). La prédiction que nous avons faite de leurs longueurs d'onde dans le cas de l'or devrait permettre de les observer prochainement.

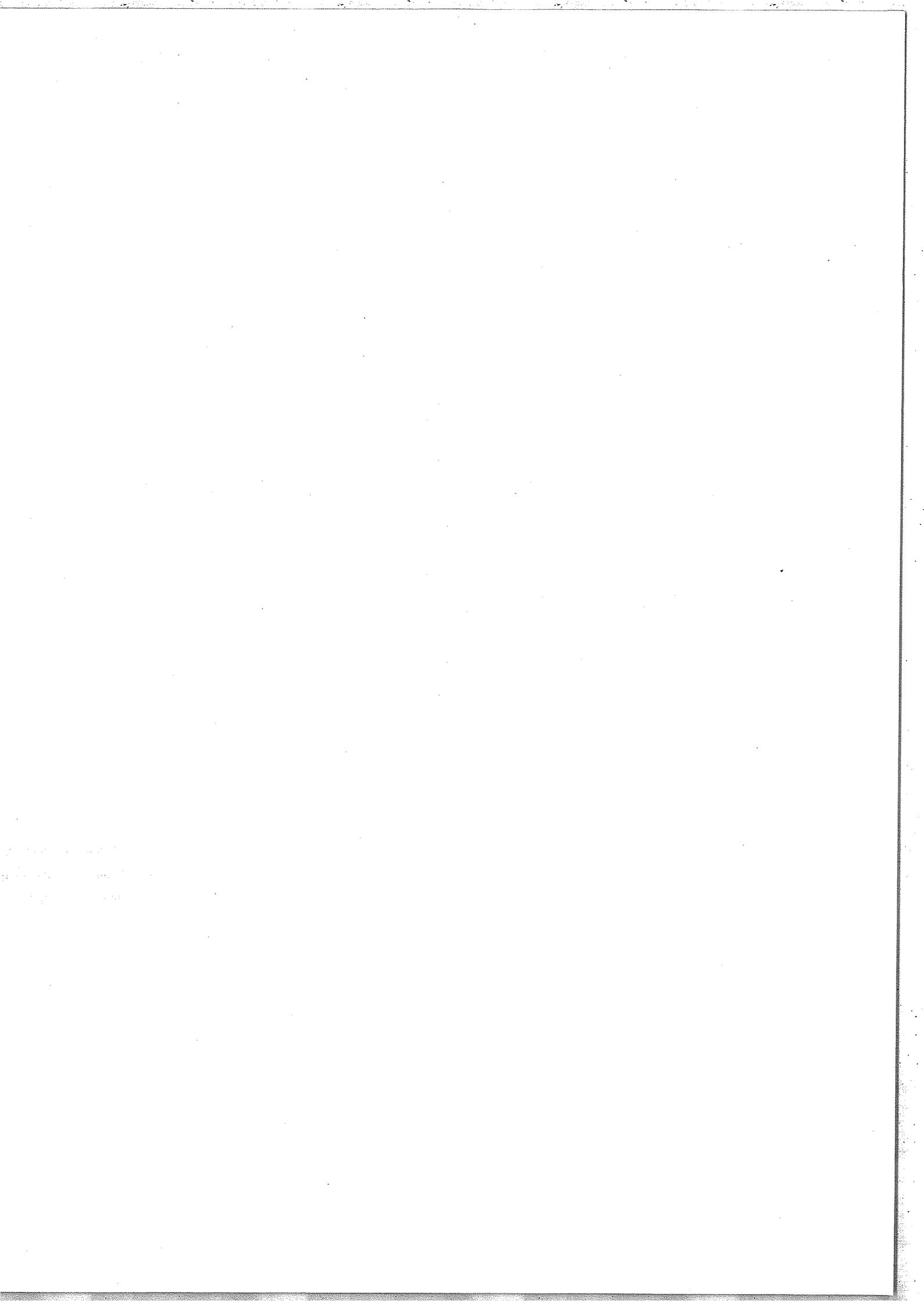


BIBLIOGRAPHIE

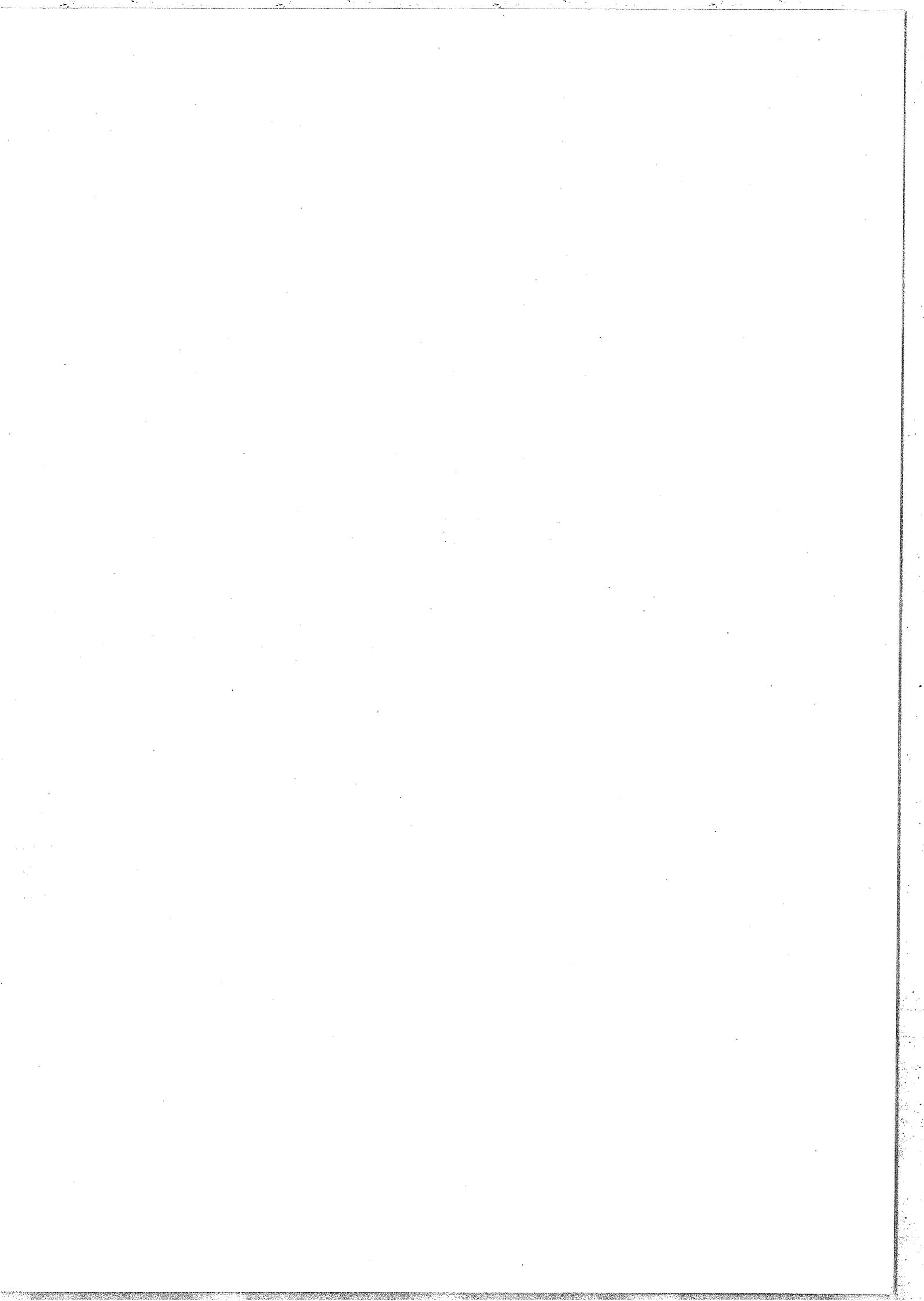
- [1] A.H. GABRIEL, Mon. Nat. R. Astronom. Soc. 160, 99 (1972).
- [2] S. SUKHEWER, Physica Scripta 23, 72 (1981).
- [3] Exploding Wires, édité par W.G. Chace et H.K. Moore, Plenum (New York).
- [4] M. BUSQUET, D. PAIN, J. BAUCHE, E. LUC-KOENIG, article soumis à Physica Scripta.
- [5] A. FUNAHASHI et S. YAMAMOTO, Physica Scripta 23, 87 (1981).
- [6] P. MANDELBAUM, M. KLAPISCH, A. BAR-SHALOM, J.L. SCHWOB et A. ZIGLER, Physica Scripta 27, 39 (1983).
- [7] P. MANDELBAUM, M. KLAPISCH, A. BAR-SHALOM, J.L. SCHWOB et A. ZIGLER, Phys. Lett. 99A, 84 (1983).
- [8] A. ZIGLER, H. ZMORA, H.M. LOEBENSTEIN et J.L. SCHWOB, J. Appl. Phys. 50, 165 (1979).
- [9] A. UNSÖLD, ZS. Astrophys. 24, 355 (1949).
- [10] H.W. DRAWIN, High Pressures-High Temperatures, Vol. 2, pp. 359-409, A Pion Publication (1970).
- [11] P.G. BURKHALTER, D.J. NAGEL et R.R. WHITLOCK, Phys. Rev. A9, 2331 (1974).
- [12] P.A.M. DIRAC, Proc. Roy. Soc. A117, 610 et A118, 351 (1928).
- [13] G. BREIT, Phys. Rev. 34, 553 (1929).
- [14] J.C. SLATER, Phys. Rev. 34, 1293 (1929).
- [15] E.U. CONDON et G.H. SHORTLEY, The Theory of Atomic Spectra, Cambridge (1935).



- [16] H.A. BETHE et E.E. SALPETER, Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms, Springer Verlag (1957).
- [17] M. KLAPISCH, J.L. SCHWOB, B.S. FRAENKEL et J. OREG, J. Opt. Soc. Am. 67, 148 (1977).
- [18] E. KOENIG, Physica 62, 393 (1972).
- [19] M. KLAPISCH, Comput. Phys. Comm. 2, 239 (1971).
- [20] M. KLAPISCH, E. LUC-KOENIG, A. BAR-SHALOM et A. CARLIER, Comput. Phys. Comm., to be published.
- [21] J.P. DESCLAUX, D.F. MAYERS et F. O'BRIEN, J. Phys. B4, 631 (1971).
- [22] J.A. NELDER et R. MEAD, Comput. J. 7, 308 (1965).
- [23] J.P. GRANT, Comput. Phys. Comm. 11, 397 (1976) ; 13, 429 (1978) ; 14, 312 (1979).
- [24] A. KRASNITZ et M. KLAPISCH, programme NJSYM, à paraître.
- [25] D.R. HARTREE, The Calculation of Atomic Structures, Wiley (1957).
- [26] I.P. GRANT, Adv. Phys. 19, 747 (1970).
- [27] J.P. DESCLAUX, Comput. Phys. Comm. 9, 31 (1975).
- [28] C. BAUCHE-ARNOULT, J. BAUCHE et M. KLAPISCH, Phys. Rev. A20, 2424 (1979).
- [29] C. BAUCHE-ARNOULT, J. BAUCHE et M. KLAPISCH, Phys. Rev. A25, 2641 (1982).
- [30] C. BAUCHE-ARNOULT, J. BAUCHE et M. KLAPISCH, en cours de publication.
- [31] A. ZIGLER, H. ZMORA, N. SPECTOR, M. KLAPISCH, J.L. SCHWOB et A. BAR-SHALOM, J. Opt. Soc. Am. 70, 129 (1980).



- [32] M. KLAPISCH, P. MANDELBAUM, A. BAR-SHALOM, J.L. SCHWOB, A. ZIGLER et S. JACKEL, JOSA Lett. 71, 1276 (1981).
- [33] D. LIBERMAN, J.T. WABER et D.T. CROMER, Phys. Rev. 137, A27 (1965).
- [34] I.P. GRANT, J. Phys. B : Atom. Molec. Phys. 7, 1458 (1974).
- [35] M. BUSQUET, Communication personnelle.
- [36] L.J. CURTIS, J. Phys. B : Atom. Molec. Phys. 10, L641 (1977).
- [37] E. ALEXANDER, M. EVEN-ZOHAR, B.S. FRAENKEL et S. GOLDSMITH, J. Opt. Soc. Am. 61, 508 (1971).
- [38] P.G. BURKHALTER, J. READER et R.D. CORVAN, J. Opt. Soc. Am. 70, 917 (1980).
- [39] N. ACQUISTA et J. READER, J. Opt. Soc. Am. 71, 572 (1981).
- [40] J. READER, J. Opt. Soc. Am. 73, 65 (1983).
- [41] C. MOORE, Atomic Energy Levels, Vol. II, NSRDS-NBS 35 (1957).
- [42] L.J. CURTIS, Phys. Lett. 64A, 43 (1977).
- [43] R. SNYDER, Phys. Lett. 75A, 340 (1980).
- [44] P.G. BURKHALTER, C.M. DOZIER et D.J. NAGEL, Phys. Rev. A15, 700 (1977)



Ce travail a été effectué au Laboratoire Aimé Cotton.

Je remercie Monsieur LIBERMAN, son Directeur, de m'y avoir accueilli avec bienveillance.

Je tiens à exprimer ma profonde reconnaissance à Jacques BAUCHE, qui m'a proposé ce sujet de thèse de troisième cycle, et qui a dirigé ce travail avec beaucoup de disponibilité et de gentillesse. Son enseignement, dont j'ai bénéficié dans le cadre de la Maîtrise de Physique et du DEA de Physique Atomique et Moléculaire, est à l'origine de l'intérêt que je porte à cette discipline.

Je voudrais exprimer toute ma gratitude à Eliane LUC, qui m'a initié à la méthode du potentiel paramétrique relativiste, et qui a bien voulu me conseiller pour l'amélioration de ce manuscrit.

Je remercie Messieurs E. BERTHIER et J.C. GAUTHIER pour l'intérêt qu'ils ont porté à ce travail en acceptant de participer au jury. Les résultats expérimentaux qui sont à l'origine de cette étude ont été obtenus par Michel BUSQUET. Je lui sais gré de sa collaboration efficace.

Claire BAUCHE m'a permis d'utiliser ses programmes de calculs de largeurs de sous-faisceaux non résolus. Je lui en suis reconnaissant.

Je n'oublie pas les autres membres du Laboratoire Aimé Cotton qui m'ont fait bénéficier de leur expérience, que ce soit dans le cadre du DEA ou pendant ces deux années de recherche, ainsi que Monsieur CALVIGNAC qui s'est chargé de l'illustration de ce mémoire.

Je remercie également les techniciens du centre de calcul de la Faculté d'Orsay sans qui ce travail n'aurait pu être mené à bien.

RESUME:

Cette thèse présente l'étude des raies émises autour de 5\AA par un plasma d'or produit par impact laser. L'analyse du spectre montre que les ions émetteurs appartiennent aux séries voisines de la série isoélectronique du nickel, à laquelle appartient l'ion Au^{+51} . Seules les raies émises par cet ion sont résolues. Les autres raies d'émission sont regroupées en pics assez étroits, chaque pic correspondant à un seul saut électronique. La largeur expérimentale de ces pics a pu être comparée, dans quelques cas simples, aux résultats de la théorie des sous-faisceaux non résolus.

Les longueurs d'onde et les intensités théoriques des raies ont été déterminées au moyen de la méthode du potentiel paramétrique relativiste. Les calculs effectués ont conduit à une identification détaillée du spectre.

L'application du modèle de l'équilibre thermodynamique local au plasma a permis d'utiliser les intensités expérimentales pour la détermination des ordres de grandeur de sa température et de sa densité électroniques.

MOTS CLES:

Plasma chaud, série isoélectronique, température et densités (électronique et ioniques), sous-faisceau de transitions non résolu (raies non résolues), calculs relativistes a priori, classification des raies.

