

Table des matières

Préface	1
Jean-Marc BIZAU	
Avant-propos	5
Introduction	9
Partie 1. Généralités sur la photo-ionisation	17
Introduction de la partie 1	19
Chapitre 1. Différents processus de photo-ionisation, série de Rydberg	21
1.1. Processus de photo-ionisation	21
1.1.1. Photo-ionisation directe, photo-ionisation résonante	21
1.1.2. Photo-ionisation multiple	24
1.1.3. Illustration du phénomène d'auto-ionisation dans le cas des systèmes atomiques à deux électrons	25
1.1.4. Illustration des processus de photo-ionisation dans le cas de l'ion carbone C^+	27
1.2. Série de Rydberg.	28
1.2.1. Définition, notation	28
1.2.2. Énergie et largeur naturelle de résonance	33

Chapitre 2. Méthodes expérimentales et théoriques de photo-ionisation résonante.	39
2.1. Méthodes expérimentales	39
2.1.1. Montages de spectroscopie ionique en faisceaux colinéaires	39
2.1.2. Nouveaux montages de rayonnement synchrotron	40
2.2. Méthodes théoriques	40
2.2.1. Généralités	40
2.2.2. Méthodes de photo-ionisation résonante	42
2.3. Section efficace de photo-ionisation	42
2.4. Analyse des énergies de résonance, défaut quantique	46
2.4.1. Notion de défaut quantique	46
2.4.2. Formule standard du défaut quantique.	47
Chapitre 3. Formalisme général de la méthode de la constante d'écran par unité de charge nucléaire appliqué à la photo-ionisation.	51
3.1. Genèse de la méthode de la constante d'écran par unité de charge nucléaire	51
3.1.1. Introduction de la constante d'écran par unité de charge nucléaire	51
3.1.2. Expression générale des énergies totales des états auto-ionisants des systèmes héliumoïdes	57
3.1.3. Procédures de détermination de la constante d'écran par unité de charge nucléaire	58
3.1.3.1. Procédure variationnelle.	58
3.1.3.2. Procédure semi-empirique	60
3.2. Expression de l'énergie totale des systèmes atomiques à trois électrons	62
3.2.1. Modèle d'interaction	62
3.2.2. Expression de l'énergie de l'état fondamental	63
3.2.3. Expression de l'énergie des états auto-ionisants	65
3.3. Expressions générales des énergies et largeurs de résonance des séries de Rydberg des systèmes atomiques à plusieurs électrons	66
3.3.1. Expression des énergies de résonance	66
3.3.2. Expression des largeurs de résonance	69
3.3.3. Analyse des énergies de résonance.	70
3.3.4. Principe de détermination des erreurs absolues	71

Partie 2. Applications aux calculs des énergies et largeurs naturelles des états de résonance des systèmes atomiques à plusieurs électrons	73
Introduction de la partie 2.	75
Chapitre 4. Application au calcul des énergies des systèmes atomiques à deux électrons (systèmes héliumoïdes)	77
4.1. Énergie de l'état fondamental des systèmes héliumoïdes	77
4.2. Énergie des états excités $1s n s \ ^1S^e$ des systèmes héliumoïdes	79
4.3. Énergie des états symétriques doublement excités $n s^2$ et $n p^2$ des systèmes héliumoïdes	83
4.4. Calcul des énergies de résonance et des largeurs naturelles des séries de Rydberg $2(1,0)_n^+ \ ^1S^e$ de l'atome d'hélium	86
4.5. Effet du noyau sur la précision des calculs semi-empiriques	89
4.6. Énergie de résonance des séries de Rydberg $2(0,1)_n^\pm \ ^1,3P^o$ et $2(1,0)_n^- \ ^1P^o$ de l'ion héliumoïde Li^+	90
4.7. Énergies de résonance des séries de Rydberg $1,3S^e$ de l'ion héliumoïde Li^+ convergeant vers le seuil d'excitation $n = 2$	97
4.8. Calcul des énergies des états de Rydberg $3(1,1)_n^+ \ ^1P^o$ des systèmes héliumoïdes	100
4.9. Interprétation physique du nombre quantique de corrélation angulaire K	101
4.10. Solutions des exercices	104
Chapitre 5. Application au calcul des énergies des systèmes atomiques à trois électrons (systèmes lithumoïdes)	137
5.1. Énergie de l'état fondamental des systèmes lithumoïdes	137
5.2. Énergie des états doublement excités $1s 2s n l \ ^2L$ des systèmes lithumoïdes	138
5.3. Énergie des états excités $1s^2 n s \ ^2S$ des systèmes lithumoïdes	143
5.3.1. Solutions des exercices.	144
5.4. Énergies des états de simple excitation excités $1s^2 n l \ ^2L^\pi (1 \leq l \leq 3)$ des systèmes lithumoïdes	152

5.4.1. Énergies des états excités ($1s^2np$; $^2P^\circ$)	153
5.4.2. Énergies des états excités ($1s^2nd$; $^2D^\circ$) et ($1s^2nf$; $^2F^\circ$)	155
5.4.3. Résultats	157

Chapitre 6. Application à la photo-ionisation résonante des systèmes atomiques à plus de trois électrons 169

6.1. Énergies de résonance des séries de Rydberg ($2pns$ $^1P^\circ$) et ($2pnd$ $^1P^\circ$) du béryllium	169
6.1.1. Texte préliminaire	169
6.1.2. Énergies de résonance des séries de Rydberg $2pns$ et $2pnd$ du béryllium	172
6.2. Énergies de résonance des états excités $1s2p^{4,2,4}L$ des systèmes atomiques à cinq électrons (systèmes boroides).	174
6.2.1. Solutions des exercices.	178
6.3. Énergies et largeurs des séries de Rydberg $2pns$ $^1,3P^\circ$ et $2pnd$ $^1,3P^\circ$ de l'ion bérylliumoïde B^+	186
6.3.1. Expressions des énergies de résonance	187
6.3.2. Expressions des largeurs naturelles	189
6.3.3. Résultats et discussion	190
6.4. Énergies et largeurs des séries de Rydberg $2pnl$ $^1,3 P^\circ$ des ions bérylliumoïdes C^{2+} , N^{3+} , ..., et Ar^{14+}	204
6.4.1. Expressions des énergies de résonance	206
6.4.2. Expressions des largeurs naturelles	207
6.4.3. Résultats et discussion	208
6.5. Énergies de résonance des séries de Rydberg $2s^22p^4$ (1D_2) ns , nd , $2s^22p^4$ (1S_0) ns , nd et $2s2p^5$ (3P_2) np de l'ion Ne^+	232
6.5.1. Expressions des énergies de résonance	233
6.5.2. Résultats et discussion	235
6.6. Énergies des séries de Rydberg $2s^22p^2$ (1D) nd (2L), $2s^22p^2$ (1S) nd (2L), $2s2p^3$ ($^3S^0$) np (4P) et $2s^22p^3$ (3D) np de l'ion F^{2+}	252
6.6.1. Expressions des énergies de résonance	252
6.6.2. Résultats et discussion	254
6.7. Énergies et largeurs des séries de Rydberg $3pns$ 1,3P , $3pnd$ 1,3P et $3pnd$ 3D du magnésium Mg	262
6.7.1. Expressions des énergies de résonance	263
6.7.2. Expressions des largeurs de résonance	265
6.7.3. Résultats et discussion	267

6.8. Énergies et largeurs de quelques états de résonance issus de la photo-excitation $1s \rightarrow 2p$ des ions N^{3+} et N^{4+}	278
6.8.1. Expressions des énergies de résonance	279
6.8.2. Expressions des largeurs de résonance	280
6.8.3. Résultats et discussion	282

Chapitre 7. Photo-ionisation résonante du soufre S

et des ions Kr^+, Ar^+, Se^+, Se^{2+} et Se^{3+}	287
7.1. Photo-ionisation du soufre	287
7.1.1. Expressions des énergies de résonance	288
7.1.2. Résultats	289
7.1.2.1. Charge de l'ion résiduel	289
7.1.2.2. Signe du défaut quantique.	290
7.1.2.3. Nécessité de stabiliser les expressions semi-empiriques des énergies de résonance.	291
7.2. Photo-ionisation de l'ion krypton Kr^+	297
7.2.1. Expressions des énergies de résonance	298
7.2.2. Résultats	298
7.2.2.1. Charge de l'ion résiduel	298
7.2.2.2. Signe du défaut quantique.	299
7.2.2.3. Présentation des résultats	300
7.3. Photo-ionisation de l'ion argon Ar^+	303
7.3.1. Expressions des énergies de résonance	304
7.3.2. Expression des largeurs naturelles	305
7.3.3. Résultats	305
7.3.3.1. Charge de l'ion résiduel	305
7.3.3.2. Signe du défaut quantique.	306
7.3.3.3. Présentation des résultats	307
7.4. Photo-ionisation résonante des ions sélénium Se^+ , Se^{2+} et Se^{3+}	316
7.4.1. Photo-ionisation de l'ion sélénium Se^+	317
7.4.1.1. Expressions des énergies de résonance	317
7.4.1.2. Résultats	318
7.4.2. Photo-ionisation de l'ion sélénium Se^{2+}	336
7.4.2.1. Expressions des énergies de résonance	336
7.4.2.2. Résultats	337
7.4.3. Photo-ionisation de l'ion sélénium Se^{3+}	344
7.4.3.1. Expressions des énergies de résonance	344
7.4.3.2. Résultats	345

Conclusion. Avantages et limites du formalisme de la CEUCN. . .	355
Annexe 1. Calcul détaillé de la constante d'écran par unité de charge nucléaire relative à l'état fondamental des systèmes atomiques à deux électrons	361
Annexe 2. Formalisme de la théorie des orbitales atomiques de Slater	369
Annexe 3. Formalisme modifié de la théorie des orbitales atomiques	375
Bibliographie	387
Index	405