



National Library
of Canada

Acquisitions and
Bibliographic Services Branch

395 Wellington Street
Ottawa, Ontario
K1A 0N4

Bibliothèque nationale
du Canada

Direction des acquisitions et
des services bibliographiques

395, rue Wellington
Ottawa (Ontario)
K1A 0N4

Your file *Votre référence*

Our file *Notre référence*

NOTICE

The quality of this microform is heavily dependent upon the quality of the original thesis submitted for microfilming. Every effort has been made to ensure the highest quality of reproduction possible.

If pages are missing, contact the university which granted the degree.

Some pages may have indistinct print especially if the original pages were typed with a poor typewriter ribbon or if the university sent us an inferior photocopy.

Reproduction in full or in part of this microform is governed by the Canadian Copyright Act, R.S.C. 1970, c. C-30, and subsequent amendments.

AVIS

La qualité de cette microforme dépend grandement de la qualité de la thèse soumise au microfilmage. Nous avons tout fait pour assurer une qualité supérieure de reproduction.

S'il manque des pages, veuillez communiquer avec l'université qui a conféré le grade.

La qualité d'impression de certaines pages peut laisser à désirer, surtout si les pages originales ont été dactylographiées à l'aide d'un ruban usé ou si l'université nous a fait parvenir une photocopie de qualité inférieure.

La reproduction, même partielle, de cette microforme est soumise à la Loi canadienne sur le droit d'auteur, SRC 1970, c. C-30, et ses amendements subséquents.

Canada

Investigation spectroscopique du néon entre 42 et 44.5 eV

Par
Charles-É. Nadeau

Thèse soumise à
L'École des gradués
comme exigence partielle
pour le grade de
Maître ès Science (Physique)

Département de Physique
Faculté des Sciences
Université d'Ottawa
Ottawa, Ontario

© Charles-É. Nadeau, Ottawa, Ontario, Canada, 1994



National Library
of Canada

Acquisitions and
Bibliographic Services Branch

395 Wellington Street
Ottawa, Ontario
K1A 0N4

Bibliothèque nationale
du Canada

Direction des acquisitions et
des services bibliographiques

395, rue Wellington
Ottawa (Ontario)
K1A 0N4

Your file *Votre référence*

Our file *Notre référence*

THE AUTHOR HAS GRANTED AN IRREVOCABLE NON-EXCLUSIVE LICENCE ALLOWING THE NATIONAL LIBRARY OF CANADA TO REPRODUCE, LOAN, DISTRIBUTE OR SELL COPIES OF HIS/HER THESIS BY ANY MEANS AND IN ANY FORM OR FORMAT, MAKING THIS THESIS AVAILABLE TO INTERESTED PERSONS.

L'AUTEUR A ACCORDE UNE LICENCE IRREVOCABLE ET NON EXCLUSIVE PERMETTANT A LA BIBLIOTHEQUE NATIONALE DU CANADA DE REPRODUIRE, PRETER, DISTRIBUER OU VENDRE DES COPIES DE SA THESE DE QUELQUE MANIERE ET SOUS QUELQUE FORME QUE CE SOIT POUR METTRE DES EXEMPLAIRES DE CETTE THESE A LA DISPOSITION DES PERSONNE INTERESSEES.

THE AUTHOR RETAINS OWNERSHIP OF THE COPYRIGHT IN HIS/HER THESIS. NEITHER THE THESIS NOR SUBSTANTIAL EXTRACTS FROM IT MAY BE PRINTED OR OTHERWISE REPRODUCED WITHOUT HIS/HER PERMISSION.

L'AUTEUR CONSERVE LA PROPRIETE DU DROIT D'AUTEUR QUI PROTEGE SA THESE. NI LA THESE NI DES EXTRAITS SUBSTANTIELS DE CELLE-CI NE DOIVENT ETRE IMPRIMES OU AUTREMENT REPRODUITS SANS SON AUTORISATION.

ISBN 0-612-00546-1

Canada



UNIVERSITÉ D'OTTAWA
UNIVERSITY OF OTTAWA

Résumé

Cette thèse porte sur la prise de données nouvelles, à l'aide d'une méthode spectroscopique par impact électronique, pour l'étude des niveaux électroniques du néon dans les intervalles compris entre 42 eV et 43.1 eV et entre 43.2 eV et 44.5 eV. En plus, des prédictions basées sur les éléments iso-électroniques et sur l'extrapolation de séries de structures électroniques similaires à celles du néon ont été obtenues et ont conduit à l'interprétation des nouveaux spectres obtenus.

Une interprétation est proposée aux structures qui étaient préalablement totalement inconnues entre 42 eV et 43.1 eV. Une étude détaillée de nos spectres de la zone comprise entre 43.2 eV et 44.5 eV nous a permis de confirmer certaines interprétations et d'en avancer de nouvelles.

Table des matières

Résumé.....	2
Table des matières	3
Remerciements	5
Introduction.....	6
Chapitre 1 Dispositif expérimental et méthodes de traitement.....	7
Section 1: Introduction générale à l'appareil.....	7
Section 2: Source	9
Section 3: Filtrage des ions.....	15
Section 4: Système à vide	15
Section 5: Collection et acquisition des données	18
Section 6: Méthode de traitement des courbes.....	19
I. Redressement par lissage	19
II. Ajustement des profils de Fano	24
i) Ions négatifs.....	24
ii) États discrets et continuum neutre.....	28
Section 7: Phénomène de compétition:	30
Chapitre 2: Prédiction des niveaux	33
Section 1: Méthode de comparaison avec des séries iso-électroniques, des éléments voisins et des éléments de même famille.....	33
Section 2: Les niveaux en $1s^2 2s(2S) 2p^6 nl$	35
Section 3: Les niveaux en $1s^2 2s(2S) 2p^6 nl^2$	36
Section 4: Les niveaux en $1s^2 2s^2 2p^4[3P, 1D, 1S] nl^2$	36
I. Prédiction par les éléments voisins	36
II. Prédiction par les défauts quantiques	44
Section 5: Les niveaux en $1s^2 2s^2 2p^4 [3P, 1D, 1S] nl n'l$	51
Section 6: Les niveaux en $1s^2 2s^2 2p^4[3P, 1D, 1S] nl^2 n'l$	57

Section 7: Récapitulation des prédictions de ce chapitre.....	59
Chapitre 3: Analyses des spectres obtenus.....	60
Section 1: Région de 42.00 eV à 43.10 eV	60
I. Rappel des résultats dans la littérature.....	66
i) Niveau neutre.....	66
ii) Ions négatifs.....	69
III. Analyse de nos résultats expérimentaux.....	70
Section 2: Régions de 43.2 eV à 44.5 eV.....	86
I. Rappel des résultats dans la littérature:.....	87
i) Les niveaux neutres.....	87
ii) Les ions négatifs.....	91
II. Analyse de nos résultats expérimentaux.....	95
Conclusion.....	105
Appendice A.....	106
Appendice B.....	108
Références.....	109
Index.....	112
Index des figures.....	114
Index des tableaux.....	116

Remerciements

Toute ma gratitude va premièrement au Professeur Marmet qui a accepté de diriger ma thèse. Sans la constance de son support tout azimut et sa patience légendaire, jamais cette thèse n'aurait pu voir le jour.

J'aimerais aussi remercier mes autres collaborateurs au sein du laboratoire du Professeur Marmet: Paul Cheatley, pour sa compétence technique et sa patience à me montrer les principes de base du fonctionnement du spectromètre; Luc Gauthier pour son support moral et pour nos stimulantes conversations, Marie Buy pour sa délicate présence et enfin au Docteur Moussa Mousselman qui m'a initié à l'art subtil de l'interprétation spectrale et qui n'a jamais ménagé ses conseils bienfaisants.

J'aimerais aussi remercier, mes copains d'Ottawa qui m'ont enduré avec mes sautes d'humeur aussi sinueuses qu'un spectre de néon, tout au long de ce long périple dans le monde fascinant de la spectroscopie et je nomme: Florent A., Laure H., Daniel A., Laurent A., Armelle G., Marie-Alexandrine B., Florence N., Xavier B., Steeve C., Ignacio L.-C., Pierre S., Thomas H., Thierry R., Anna B., Bernard D., Sophie G.. J'aimerais aussi remercier les gens de ma promotion qui sont restés "Internetement" présents: Stéphane D., Stephan G.-G., Yvan D., Luc T., Denis M., Daniel B. et Yves L. Un merci tout spécial est aussi adressé à Luc T. et Cettina R. pour leur collaboration dans l'impression et la mise en page de ce "volumineux" ouvrage.

Introduction

Cette thèse a pour objet l'étude des configurations électroniques des atomes. Nous examinons en particulier certains états doublement excités et des niveaux simplement excités du néon ainsi que des ions négatifs simplement chargés du Ne^- .

Ces états sont produits par l'impact d'électrons mono-énergétiques sur un jet atomique de néon. Nous les détectons en mesurant le courant d'ions en fonction de l'énergie des électrons incidents [1]. Cette méthode, quoique classique, est extrêmement performante tant au niveau de sa stabilité qu'au niveau de son rapport signal sur bruit. Cette méthode sera décrite plus en détail au chapitre 1, tout comme notre dispositif expérimental.

De plus, comme nous utilisons des électrons dont le spin est $\pm 1/2$ comme projectile, plutôt que des photons de spin 0, nous avons aussi accès aux niveaux optiquement interdits qui représentent 95% [1] des états possibles pour la double excitation. Cet accès aux niveaux optiquement interdits est dû au fait que l'électron garde son identité après avoir produit la transition.

La découverte la plus importante de cette thèse consiste en l'observation de 5 structures nouvelles entre 42.4 et 43 eV ainsi que de leurs interprétations. Cette découverte sera expliquée plus en détail au chapitre 3, section I.

Toutefois, avant d'en arriver là, nous devons, par diverses méthodes, tenter de prédire à quelle énergie seront les niveaux et nous assurer que les approximations utilisées sont valables. Cet aspect de notre recherche est exposé au chapitre 2.

Chapitre 1 Dispositif expérimental et méthodes de traitement.

Section 1: Introduction générale à l'appareil

La partie expérimentale de ce travail fut accomplie à l'aide d'un spectromètre de masse quadripolaire électrique [1-5] . Dans la zone de la source, les électrons incidents sont émis par le filament et sont ensuite rendus mono-énergétiques par le sélecteur d'électrons.

Par la suite, ils entrent en collision avec les atomes de néon qu'ils excitent et ionisent. Ces ions sont alors dirigés vers le filtre de masse quadripolaire.

Celui-ci a pour fonction de discriminer les ions en fonction de leur rapport charge-sur-masse. Ainsi, on s'assure que seuls les ions ayant le rapport charge-sur-masse désiré pourront traverser le quadripôle.

À la sortie du quadripôle, les ions frappent la première dynode d'un multiplicateur d'électrons. Les impulsions générées à la sortie du multiplicateur sont ensuite traitées par l'électronique et finalement acheminées à un ordinateur où elles sont comptées. Ces comptes sont ensuite assemblés afin de constituer un spectre. Tout ceci est schématiquement représenté dans le diagramme suivant:

DIAGRAMME GLOBAL DE LA TECHNIQUE UTILISEE

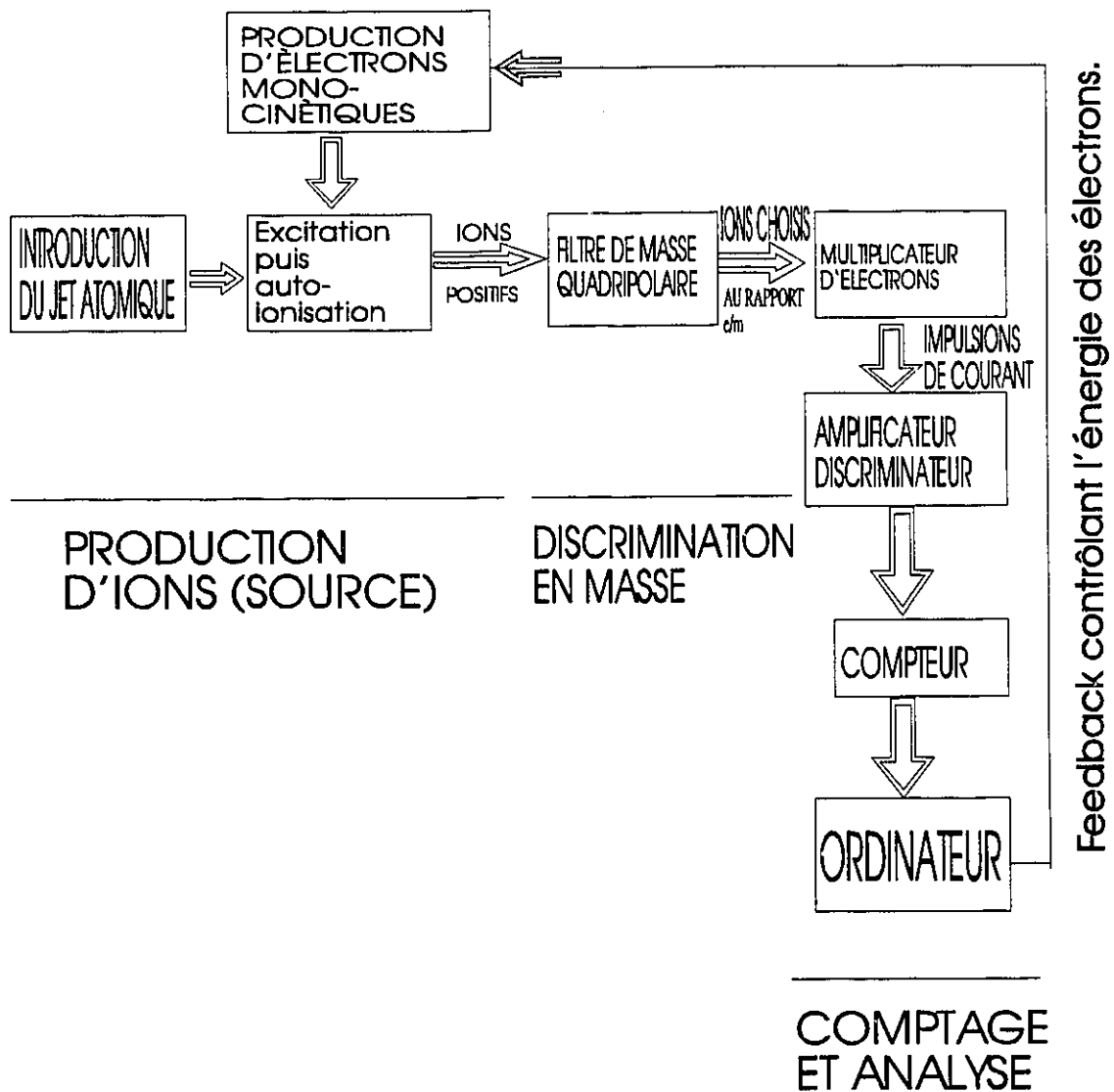


Figure 1: Schéma global des différentes étapes de notre expérience.

La description générale de l'appareil est divisée en quatre sous-sections:

- Source [1, 3]

- Filtrage
- Collection et acquisition informatisée [5]
- Système à vide

Cet appareil est représenté dans le schéma de la page suivante:

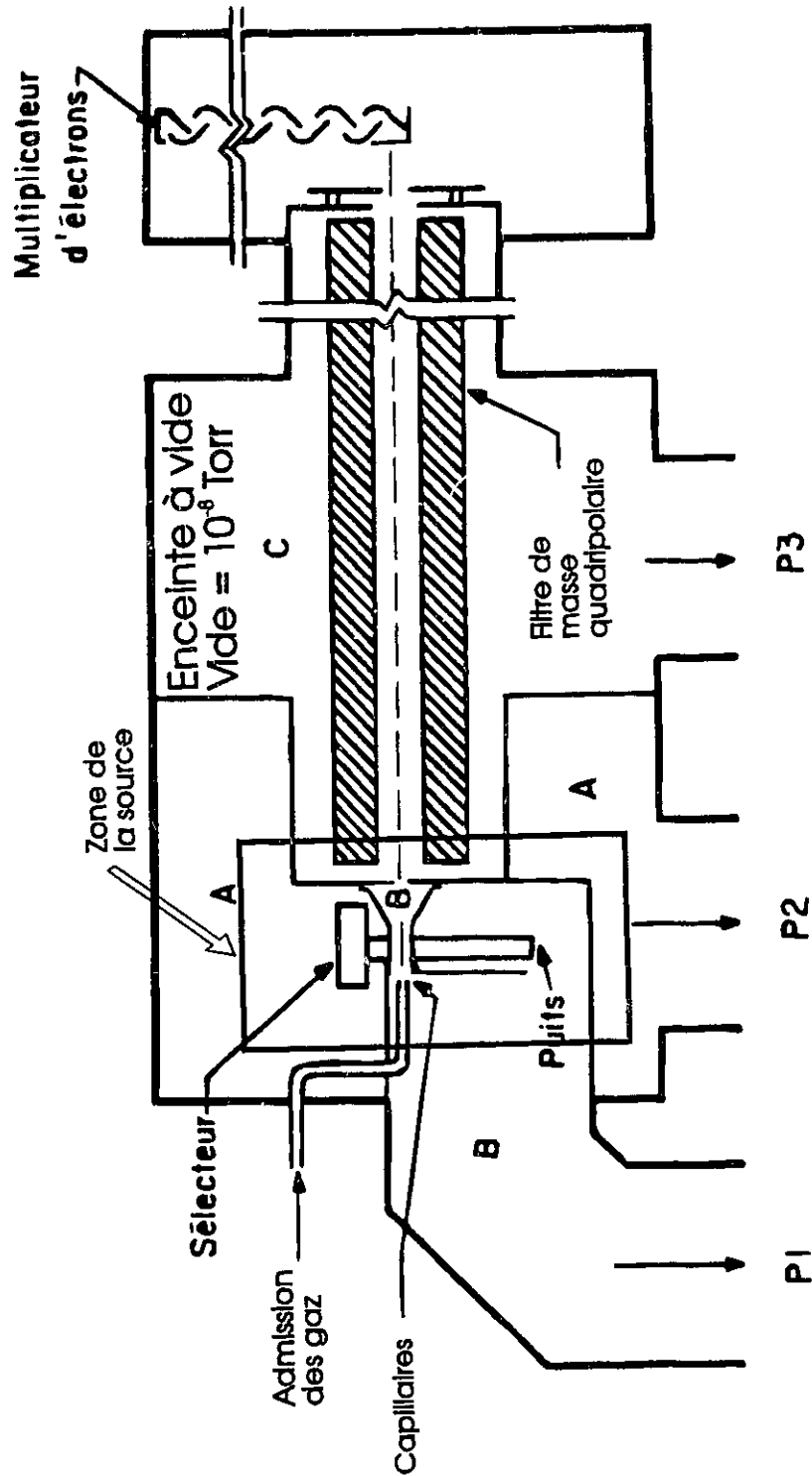
Dans la dernière section, on décrira aussi la méthode de traitement général que l'on a utilisée dans le traitement des courbes expérimentales.

Section 2: Source

Les électrons sont produits au moyen d'un filament de tungstène qu'on chauffe à l'aide d'un courant pulsé. Le courant d'environ 20 ampères passe dans le filament durant 20 μ s puis le courant est coupé durant le reste du temps jusqu'à la prochaine impulsion. Ce procédé est répété 2000 fois par seconde. La chaleur spécifique du métal du filament permet de maintenir la température élevée du filament durant chaque impulsion.

Cette manière de faire nous assure d'un courant d'électrons élevé. Toutefois on ne doit pas chercher un courant élevé à tout prix. On doit trouver un équilibre entre l'intensité du faisceau électronique et la largeur de la distribution du faisceau. En fait, on doit maximiser l'intensité du courant tout en gardant la largeur du faisceau la plus faible possible.

COUPE DU MONTAGE



P1, P2 et P3: 3 pompes à diffusion
 Les lettres A, B et C désignent les
 zones pompées par les pompes P1,
 P2 et P3.

Figure 2: Schéma global de notre dispositif expérimental [5].

La raison pour laquelle on désire une largeur de faisceau la plus étroite possible est que la convolution d'une courbe par une distribution d'énergie trop large fait disparaître les structures du spectre. Quant à l'intensité, on doit la maximiser afin d'avoir le plus d'électrons possible pour entrer en collision avec les atomes de néon. Plus on produira d'ions, moins ça prendra de temps pour faire l'acquisition d'un nombre raisonnable de comptes.

Normalement, vu le courant intense qui passe dans le filament, un champ magnétique énorme se crée et retient les électrons qui viennent d'être émis. La méthode du courant pulsé ne possède pas ce désavantage car durant le temps¹ où aucun courant ne passe au travers du filament, on peut maximiser le nombre d'électrons extraits de la source.

Après avoir été émis du filament, les électrons atteignent le sélecteur. Celui-ci doit fournir un courant maximal d'électrons pour une distribution d'énergie ayant une largeur à mi-hauteur la plus faible possible². De ces performances dépendront en grande partie celles des autres stades de la partie expérimentale.

Le sélecteur présent au sein de notre montage est composé de deux sélecteurs électrostatiques cylindriques à 127 degrés, du type Marmet [6, 7], placés bout à bout (voir figure 3) produisant un faisceau d'électrons mono-énergétiques. On a utilisé deux sélecteurs³ en série afin de diminuer la largeur de la distribution en énergie du faisceau électronique [8, 9]. Dans nos expériences, l'intensité de ce faisceau était de 10 nA et la largeur à mi-hauteur de la distribution était de l'ordre de 20meV.

¹ Car c'est le champ magnétique causé par ce courant qui retient les électrons.

² Voir page 9.

³ Le premier faisant une sélection que l'on peut qualifier de "primaire", le second en faisant une dite "secondaire".

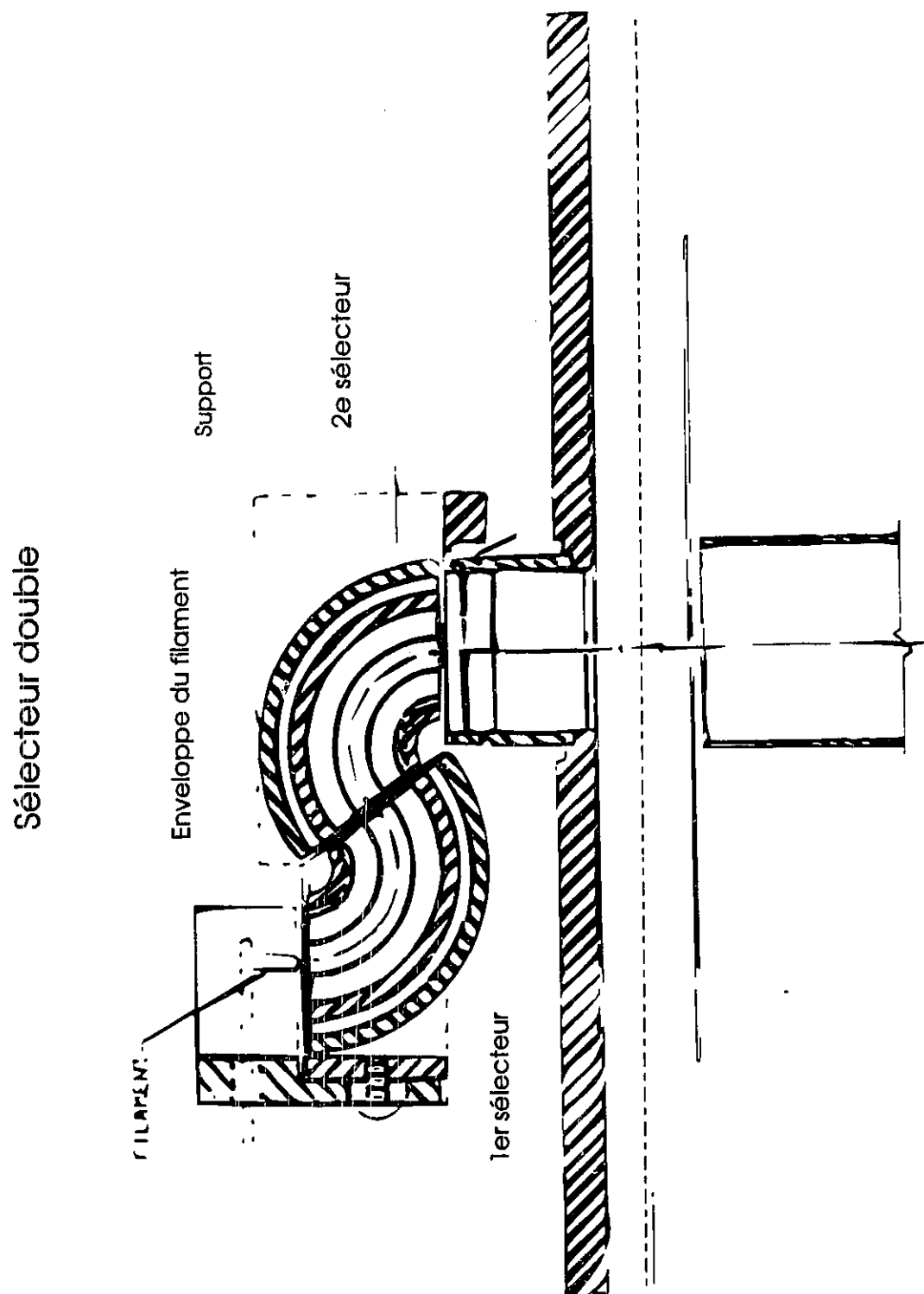


Figure 3: Schéma du sélecteur double d'électrons vu de face [3]

Les bonnes performances du sélecteur d'électrons sont principalement dues:

- À la petite dimension du sélecteur d'électrons. En effet, celui-ci a un rayon intérieur de 1 cm et un rayon extérieur de 1.5 cm. Ces petites dimensions réduisent le temps au cours duquel les électrons peuvent interagir entre eux, et donc elles réduisent "l'éclatement" du faisceau d'électrons au sein du sélecteur.
- Au fait que le support de grilles, les plaques de même que l'enveloppe du sélecteur soient faits avec de l'acier inoxydable 310, qui ne se magnétise pas facilement.
- À ce que le sélecteur d'électrons soit placé dans une zone où le champ magnétique a été annulé⁴. Ceci est obtenu grâce aux trois bobines d'Helmholtz⁵ couplées à des circuits actifs qui servent à annuler le champ magnétique autour de la source d'ions.
- Au fait que les grilles intérieures du sélecteur d'électrons soient très transparentes aux électrons car elles sont faites d'un fin grillage de tungstène dont la surface est transparente à 90%. Ceci veut dire qu'il y a un potentiel entre les grilles et les plaques permettant aux électrons d'accélérer et de passer "au travers" du potentiel de surface de la plaque et donc d'être absorbés par la plaque en tant qu'électrons de conduction.

Ces grilles contribuent surtout à réduire les charges d'espace en prévenant la formation d'un nuage d'électrons qui repousserait hors du sélecteur le flux d'électrons, en provenance du filament détruisant ainsi la distribution étroite requise du faisceau d'électrons.

⁴ Inférieur à 1 mG.

⁵ Une selon chacun des axes x, y et z

Ce nuage d'électrons est en partie créé par la réflexion des ions sur la surface interne du sélecteur [7]

Une fois que les électrons sont sortis du sélecteur, ils sont accélérés par un potentiel fixe superposé à une tension variable qui est contrôlée par l'ordinateur du système d'acquisition des données. Il est crucial que ces deux tensions soient extrêmement stables car elles pourraient, soit déplacer les structures de leur position réelle, soit en créer de fausses si des irrégularités surviennent au même moment de balayage en balayage. Elles doivent être aussi très fiables afin de permettre l'acquisition des données sur une longue période de temps.

Une fois accéléré et focalisé, le faisceau d'électrons traverse le jet atomique venant d'un ensemble de 150 000 capillaires ayant une longueur de 2 mm et un diamètre de 10 microns. Cette structure dont la surface est de 4mm par 8mm a une transmission de 60% [1]. Cette configuration minimise le nombre de collisions néon-néon, diminue la dispersion angulaire [9] et assure un long parcours (le long du côté de 8mm) des électrons au sein du jet atomique. Ainsi, les collisions électron-néon se font presque toutes à angle droit.

Cet ensemble de capillaires a deux avantages principaux sur le bec d'injection de gaz traditionnel: [1]

- Ce système permet d'avoir une source d'ions plus intense en évitant les collisions ion-atome dans l'appareil. Les collisions ions-atomes forment des réactions secondaires qui font apparaître des structures dans les courbes.

Section 3: Filtrage des ions.

Une fois que les ions ont été produits dans la zone d'interaction, on les fait pénétrer au travers du filtre de masse quadripolaire afin de s'assurer que seuls les ions du gaz à l'étude puissent être transmis. Le filtre sélectionne les ions en fonction de leur rapport e/m et assure le balayage en énergie des ions. On accomplit cette sélection suite au choix de certaines valeurs des composantes alternatives et continues des différences de potentiel aux bornes des électrodes du quadripôle [4]. On applique une tension continue V et une tension sinusoïdale U sur une des deux paires d'électrodes et une tension égale, mais de signe opposée sur l'autre paire [4]. Les électrodes, de forme hyperbolique, ont 1.10 mètres de longueur et l'entrée du quadripôle a un rayon de 2 centimètres [9]. Ces électrodes hyperboliques uniques au monde⁶ nous permettent d'avoir des performances exceptionnelles et inégalées. Ces dimensions, l'électronique et surtout la forme hyperbolique, nous permettent d'avoir une transmission de près de 100% et ainsi une très grande luminosité.

Section 4: Système à vide

Tout le système décrit précédemment est placé sous vide. Celui-ci est assuré par trois pompes à diffusion utilisant de l'huile au carbone de marque Santovac-5. L'usage des huiles "au silicone" doit être évité car elles créent un film isolant de silice sur les surfaces internes du système à vide. Lorsqu'on a une surface isolante, les électrons qui s'y déposent créent des charges de surface qui modifient le potentiel, comme par exemple, sur la surface des électrodes du quadripôle. Ce potentiel peut dévier les ions de leur trajectoire, changer les potentiels et ainsi fausser les résultats. Si la couche qui se forme est

⁶ Nous sommes le seul laboratoire au monde à en avoir.

conductrice, les charges peuvent être alors assimilées comme des électrons de conduction au sein de la couche, et ne créeront pas ainsi de charges de surface.

Les pompes ont été montées de manière à avoir un pompage différentiel entre les différentes parties de l'appareil. Ainsi la pompe 1 évacue la région A, la pompe 2 la région B et la pompe 3 la région C⁷.

Afin d'éliminer les retours d'huile, deux systèmes de pièges ont été placés sur les pompes. Le premier piège est refroidi par de l'eau à 4 degrés Celcius et consiste en une chicane visant à empêcher les remontées d'huile provenant de la pompe.

Le second piège, illustré à la figure 4, vise principalement à empêcher les vapeurs d'huile, ayant réussies à franchir le premier piège, de se rendre dans l'appareil. Ce second piège est constitué de chevrons soudés à un tuyau dans lequel circule du fréon à une température de -130 degrés Celcius. Le fréon est refroidi par un réfrigérateur du type Polycold-500 qui fonctionne 24 heures sur 24, nous permettant ainsi de maintenir le vide en permanence.

⁷ Voir figure 2.

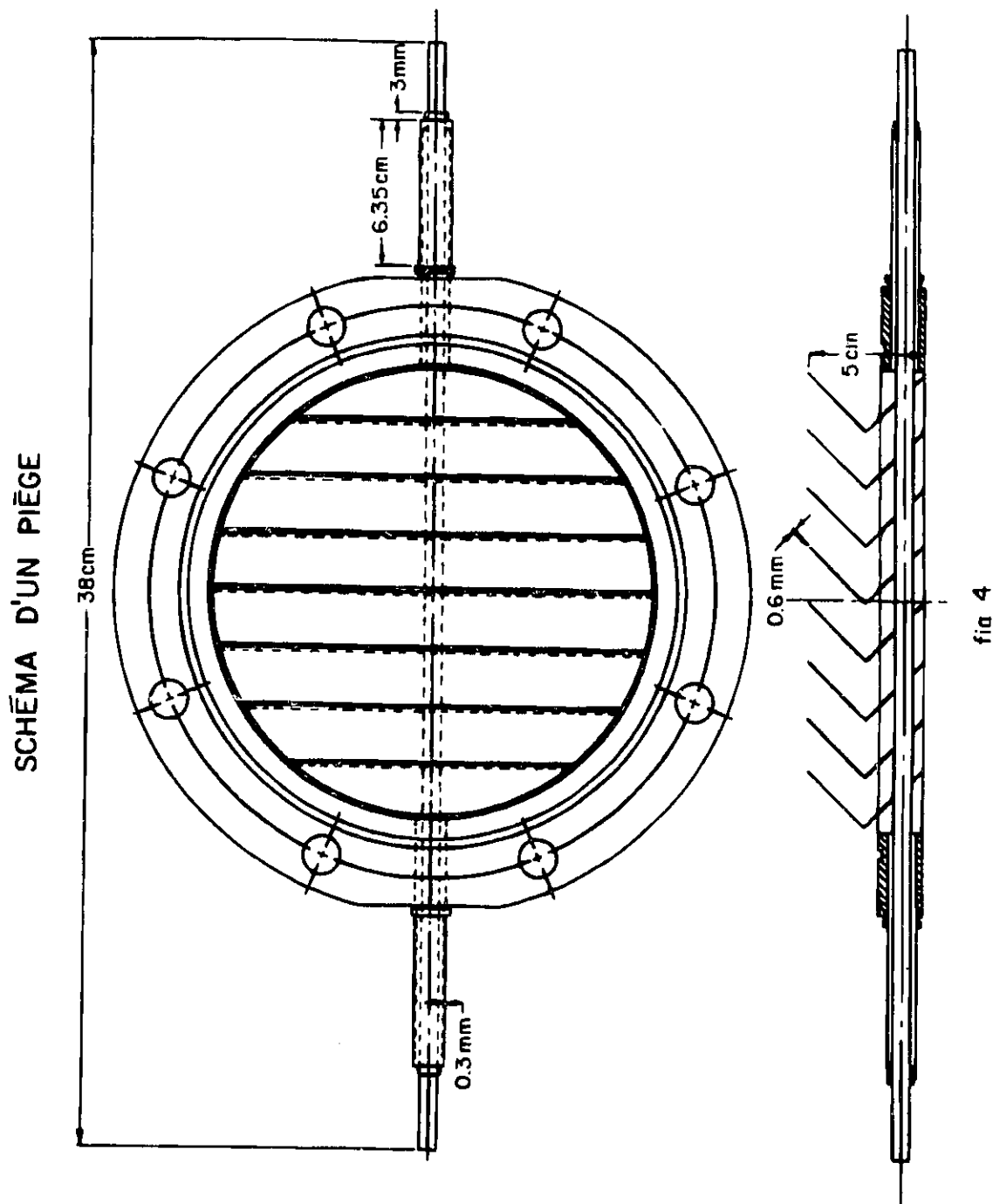


Figure 4: Schéma d'un des pièges, refroidi au fréon, qui est monté sur les pompes à diffusion. [3]

Section 5: Collection et acquisition des données

À leur sortie du quadripôle, les ions entrent dans la zone de collection constituée du multiplicateur, du préamplificateur, de l'amplificateur, du discriminateur QUAD [3], du discriminateur-compteur POCATEC et du système informatisé d'acquisition.

Le multiplicateur réalisé par Marchand, Paquet et Marmet [10-12], du type Allen [13] est constitué de 14 étages d'amplification ayant des dynodes faites d'un alliage d'argent. Celles-ci nous permettent de maintenir un taux de comptage constant de 10^6 impulsions par seconde pendant plusieurs mois. [1]

La différence de potentiel entre la première et la dernière dynode nous permet de varier le taux de transmission des ions à l'entrée du multiplicateur. Au cours de nos expériences, celle-ci fut maintenue à 4000 Volts. Cette tension s'est avérée suffisante pour recueillir pratiquement tous les ions sortant du quadripôle.

Chaque ion détecté par le multiplicateur d'électrons génère à sa sortie une impulsion de 100 mV d'amplitude et de 10 ns de largeur [1, 3]. Cette impulsion est par la suite transmise au préamplificateur qui l'amplifie en une impulsion de 200mV d'amplitude et de 40ns de largeur [3].

À leur sortie du préamplificateur, ces impulsions sont transmises à un amplificateur qui amplifie les signaux négatifs. Suite à cette amplification, les impulsions sont transmises à un discriminateur QUAD 704B 300Mhz. Les impulsions qui sortent du QUAD n'ont cependant pas toutes une amplitude et une largeur très constantes.

Ces impulsions au profil irrégulier sont ensuite uniformisées par un discriminateur-compteur de marque POCATEC. Celui-ci nous assure que chaque impulsion, peu importe sa hauteur et sa largeur, ne contribuera qu'à un seul et unique compte. Ceci est important car si une impulsion large pouvait causer deux comptes, il s'en suivrait une augmentation considérable du bruit qui réduirait la qualité de notre spectre.

À la sortie du POCATEC, on a à notre disposition dans des mémoires le nombre de compte accumulé par période de lecture.

Une carte d'acquisition de données a été construite pour que le micro-ordinateur compatible-IBM puisse lire, à intervalles réguliers, les données de chaque mémoire du POCATEC et les transférer à un programme d'acquisition qui se charge d'additionner les lectures successives afin "d'assembler" le spectre complet de la région étudiée. C'est ce même programme qui se charge de faire varier la tension variable d'accélération⁸ des électrons⁹. Ce programme permet également le traitement des données¹⁰.

Section 6: Méthode de traitement des courbes.

I. Redressement par lissage

Afin de traiter nos courbes, une méthode mathématique fut développée [1]. Comme certaines structures ont une amplitude de l'ordre de 10^{-5} fois l'amplitude du continuum d'ionisation, on doit traiter nos spectres dans le but de faire ressortir ces structures superposées au continuum d'ionisation.

⁸ Constituant ainsi le système de feed-back dont il est question à la figure 1.

⁹ Voir section 2 du présent chapitre.

¹⁰ Voir la section 6 du présent chapitre.

Précisons tout d'abord que, comme l'amplitude relative de nos structures peut être aussi petite que de 10^{-5} fois l'amplitude du continuum, on doit avoir un nombre minimal de comptes. Ce minimum est défini par le fait que l'on exige que l'amplitude de nos structures soit supérieure au bruit statistique. Prenons, par exemple, ce cas où l'amplitude est de 10^{-5} fois celle du continuum d'ionisation. On aura donc que:

$$10^{-5} > \frac{1}{\sqrt{N}} \quad (1)$$

En isolant N, on obtient le nombre minimal de comptes par canal que nous devons accumuler¹¹. On trouve:

$$N > 10^{10} \text{ ions par canal} \quad (2)$$

Par contre si on a une courbe ne présentant pas le nombre désiré de comptes par canal, on peut augmenter le nombre de comptes par canal en additionnant les canaux entre eux n par n. Cet accroissement du nombre de comptes par canal se fait au détriment de la résolution en énergie. On devra toutefois prendre soin de ne pas grouper les canaux de

¹¹ La relation précédente peut facilement être généralisée. Soit A l'amplitude relative à celle du continuum de la plus faible structure du spectre, on aura:

$$A > \frac{1}{\sqrt{N}} \quad (1a)$$

Isolant N:

$$N > \frac{1}{A^2} \quad (1b)$$

On devra donc avoir un nombre de comptes par canal supérieur à A^{-2} .

manière à ce que la largeur résultante d'un canal soit supérieure à celle de la largeur de la structure que l'on veut observer. Comme les données prises au cours de cette expérience le furent à $5 \text{ mV}/\text{canal}$, il ne faudra pas, à la limite, additionner les canaux plus de 3 par 3, si l'on veut observer une structure de 18 mV de large. Autrement, on aurait une forte distorsion de la structure.

Une fois que l'on a une courbe qui comporte un nombre suffisant de comptes, on peut appliquer une méthode qui consiste à redresser nos courbes afin de pouvoir reconnaître nos structures de faible amplitude. Le redressement de la courbe correspond donc à éliminer les pentes importantes des basses composantes de fréquence du continuum d'ionisation. Ainsi nos structures apparaîtront sur un fond horizontal.

Pour obtenir cette courbe, on partira de notre courbe expérimentale elle-même. En lissant une copie de notre courbe originale, on en fait disparaître les composantes de hautes fréquences pour ne garder que celles de basses fréquences. Donc, en soustrayant cette copie lissée de notre courbe originale, la courbe résultante ne gardera que les composantes de hautes fréquences superposées à un fond à peu près horizontal. Cette opération équivaut donc à un filtre passe-haut. Elle est nécessaire car ce sont les composantes de basses fréquences qui causent le fond distordu de notre courbe expérimentale [14] et empêchent de choisir une échelle de sensibilité de façon à pouvoir observer les structures étroites. En les faisant disparaître, on ramènera la courbe sur un fond presque horizontal comme désiré.

Le lissage de la courbe originale se fait de la façon suivante: Pour tous les canaux du spectre, excepté le premier et le dernier que l'on gardera fixes, on remplace sa valeur par une moyenne pondérée, avec ses voisins. Cette moyenne est définie comme: [1]

$$\chi'_n = \frac{1}{4}(\chi_{n-1} + 2\chi_n + \chi_{n+1}) \quad (3)$$

où:

- χ'_n est le canal une fois lissé
- χ_{n-1} est le canal juste à gauche du canal que l'on lisse.
- χ_n est le canal qui est lissé
- χ_{n+1} est le canal juste à droite du canal que l'on lisse.

Cette opération est répétée "S" fois, jusqu'à ce que la courbe lissée atteigne la proportion désirée de composantes de hautes fréquences par rapport à celles de basses fréquences. L'effet du filtrage apparaît graduellement, la valeur de chaque canal est de plus en plus influencée par des canaux plus éloignés. Si l'on répétait ce lissage un nombre infini de fois, on obtiendrait une droite de pente égale au dernier canal moins le premier divisé par le nombre de canaux car les premier et dernier canaux sont fixes [15].

Diverses analyses faites par Marchand et Veillette [16], ainsi qu'Arsenault et Marmet [17] démontrent que cette opération équivaut à un filtrage de Fourier dont la fonction de filtrage transmise est la suivante [9]:

$$T_{m,S} = 1 - \left[\cos\left(\frac{\pi m}{N}\right) \right]^{2S} \quad (4)$$

où:

- $T_{m,S}$ est la transmission de la composante de fréquence m.
- S est le paramètre correspondant au nombre de lissages.

–N est le nombre total de canaux

Ceci signifie que lorsque le nombre de lissages est petit, seules les hautes fréquences d'une période de quelques canaux sont transmises. Si, par contre, on augmente le nombre "S" de lissages, les plus basses fréquences peuvent aussi être transmises. Ce filtrage en est un de type passe-haut à bande passante variable et ajustable [9].

Une autre façon de réaliser ce filtre consiste à prendre la transformée de Fourier de la courbe originale que l'on multiplie par la fonction de transmission ci-haut énoncée (équation 4). Enfin en prenant la transformée de Fourier inverse de ce produit, on a notre courbe "redressée". Cette autre façon de procéder est absolument équivalente à celle décrite plus haut mais plus lente dans de nombreux cas pratiques¹². C'est pour cette raison que l'on procède par le "straightening through smoothing" plutôt que par la transformée de Fourier.

Il a aussi été démontré que [18,19]:

$$\mathcal{F}^{-1}\left(\mathcal{F}(d(E)) * T_{m,1}\right) = -\frac{d^2}{dE^2} d(E) \quad (5)$$

où:

- \mathcal{F} et \mathcal{F}^{-1} désignent respectivement la transformée de Fourier et la transformée de Fourier inverse.
- $d(E)$ désigne la courbe originale en fonction de l'énergie.
- $T_{m,S}$ désigne la fonction de filtrage transmise.

¹² Comme une faible valeur de S.

¹³ Voir appendice A.

Il a aussi été démontré que [9, 18 ,19]:

$$\mathcal{F}^{-1}\left(\mathcal{F}(d(E)) * T_{m,S \leq 100}\right) \approx \frac{d^2}{dE^2} d(E) \quad (6)$$

où les termes de l'équation ont la même signification que pour l'équation précédente.

II. Ajustement des profils de Fano

i) Ions négatifs

Une fois que les spectres ont été traités et que les structures ont été interprétées sur ceux-ci, on ajuste à chacune des structures précédemment identifiées un profil de Fano. Cet ajustement de profil nous permettra de trouver avec précision la position de la structure, sa largeur propre et son facteur de forme. Commençons par décrire la théorie derrière ces profils de Fano:

Quand on a à la même énergie un état discret φ et un continuum d'états $\psi_{E'}$, tous deux non-dégénérés, l'état stationnaire réel ψ_E peut être représenté par une superposition des états du continuum et de l'état discret φ : [1]

$$\psi_E = a_E \varphi + \int dE' b_E \psi_{E'} \quad (7)$$

ψ_E est alors un vecteur propre de la matrice: [20]

$$\langle \varphi | H | \varphi \rangle = E_\varphi \quad (8a)$$

$$\langle \varphi_{E'} | H | \varphi \rangle = V_{E'} \quad (8b)$$

$$\langle \psi_{E''} | H | \psi_{E'} \rangle = E' \delta(E'' - E') \quad (8c)$$

On notera aussi dans les expressions (équations 8a, 8b, 8c) que a_E et b_E sont fonctions de l'énergie E . Toutefois, ceci ne sera valide qu'à deux conditions.

- Que l'état φ et le continuum $\psi_{E'}$ existent à la même énergie.
- Qu'ils aient les mêmes L , S , J , parité et charge.

Un cas répondant aux critères ci-haut est illustré à la figure 5 par un schéma d'un atome hypothétique que l'on désigne par la lettre A . Si les deux conditions ci-haut sont respectées, les niveaux discrets neutres au voisinage de A_3^* peuvent être décrits comme une superposition de A_3^* et de $A^+ + e^-$. La dissociation de A_3^* se fera par:



L'énergie de l'électron sera donnée par:

$$E_{e^-} = E_{A_3^*} - E_{A^+} \quad (10)$$

Et la largeur de cet état par:

$$\Gamma = 2\pi \left| \langle \psi_E | H | A_3^* \rangle \right|^2 \quad (11)$$

Comme a_E et b_E sont fonctions de E^{14} , le profil d'absorption du continuum près de l'état A_3^* suit les variations définies par:

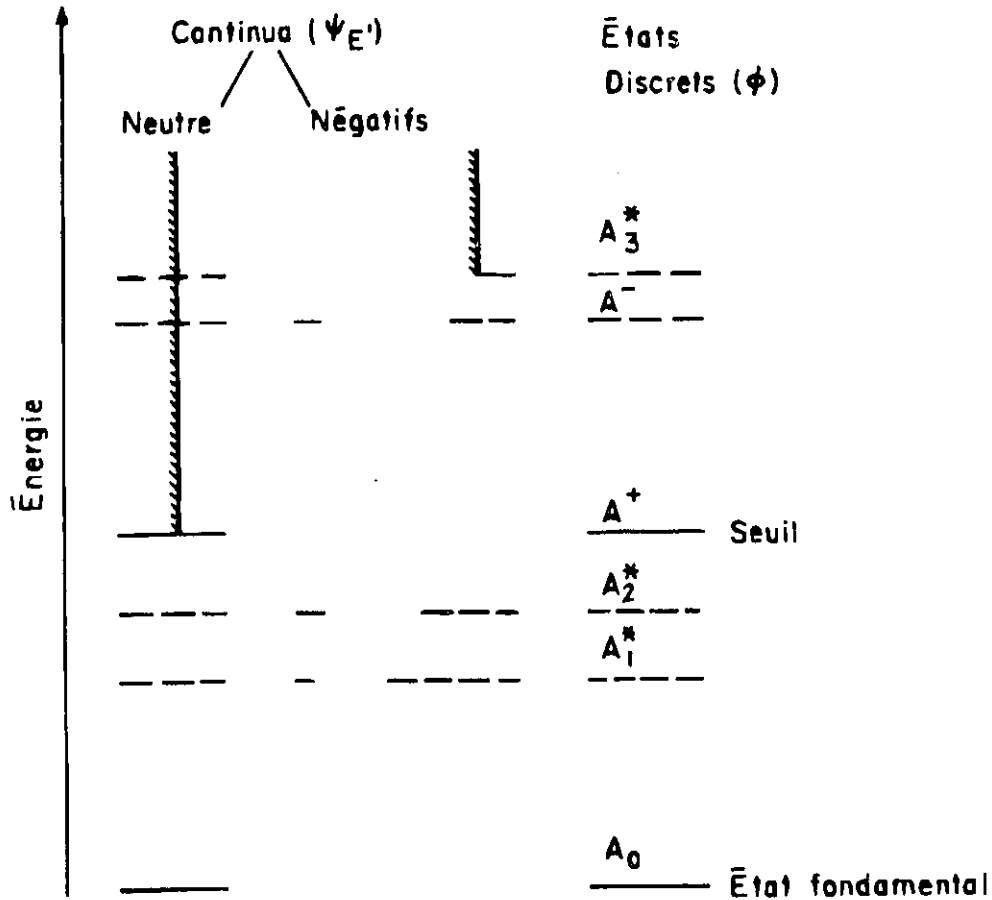


Figure numéro 5: Diagramme des niveaux d'énergie d'un atome hypothétique utilisé pour illustrer les différents types de continua. Quatre états neutres discrets, A_0 , A_1^* , A_2^* , A_3^* , un état discret négatif A^- et un état existant au-delà de la limite d'ionisation peuvent interagir avec l'état neutre A_3^* pendant que les continua négatifs, créés par la présence d'un électron incident, peuvent interagir avec l'état négatif.[3]

¹⁴ Tel que spécifié à l'équation (7)

$$\sigma(\varepsilon) = \sigma_A \left[\frac{(q + \varepsilon)^2}{1 + \varepsilon^2} \right] + \sigma_B \quad (12a)$$

où:

- ε est défini par $\frac{(E - E_r)}{\Gamma/2}$ (12b)
- E est l'énergie
- E_r est l'énergie de la résonance
- q est le facteur de forme
- Γ est la largeur¹⁵ du niveau
- σ_A est la section efficace correspondant à des transitions vers des états du continuum qui interagissent avec l'état discret.
- σ_B est la section efficace correspondant à des transitions vers des états du continuum qui n'interagissent pas avec l'état discret¹⁶.

On peut relier l'équation précédente à un rapport de la norme d'un opérateur de transition sur les fonctions d'ondes par:

$$\frac{(q + \varepsilon)^2}{1 + \varepsilon^2} = \frac{|\langle \Psi | T | i \rangle|^2}{|\langle \psi | T | i \rangle|^2} \quad (13)$$

où:

¹⁵ En énergie.

¹⁶ C'est-à-dire le continuum lui-même.

- T est l'opérateur de transition
- i est l'état initial qui est toujours, dans notre cas, le niveau fondamental de l'atome.
- Ψ est la fonction d'onde du niveau final.

On peut aussi relier le facteur de forme à $\sigma(\varepsilon) = \sigma_A \left[\frac{(q + \varepsilon)^2}{1 + \varepsilon^2} \right] + \sigma_B$ par la

relation suivante:

$$q = \frac{\langle \Phi | T | i \rangle}{\pi V_E^* \langle \Psi_E | T | i \rangle} \quad (14)$$

ii) États discrets et continuum neutre.

Maintenant que l'on a bien décrit ce qui se passait dans le cas des ions négatifs, attardons-nous sur le cas des interactions entre un état discret et un continuum neutre.

Quand nous bombardons un atome avec un jet d'électrons dont l'énergie varie, on obtient la superposition de profils résultant de la collision des atomes avec des électrons ayant toutes les énergies comprises dans notre intervalle de balayage.

L'expression de la section efficace mesurée sur les courbes d'électro-ionisations sera l'intégrale du profil d'absorption du continuum de l'état A_3 ^{*17}. On aura donc:

¹⁷ Cf. éq. 12a

$$\sigma_I(\varepsilon) = \int_{\varepsilon_{A^+}}^{\varepsilon} \left[\sigma_A \frac{(q + \varepsilon)^2}{1 + \varepsilon^2} + \sigma_B \right] d\varepsilon \quad (15)$$

$$\text{avec } \varepsilon_{A^+} = \frac{E_{A^+} - E_R}{\frac{\Gamma}{2}} \quad (15a).$$

Intégrant, il vient

$$\sigma_I(\varepsilon) = \sigma_A \left[\varepsilon + (q^2 - 1) \tan^{-1} \varepsilon + q \ln(\varepsilon^2 + 1) \right] + \sigma_B \varepsilon + C \quad (16)$$

Comme C , $\sigma_A \varepsilon$ et $\sigma_B \varepsilon$ sont des paramètres dont la valeur est éliminée lors du traitement que nous faisons subir aux courbes¹⁸, on retrouve finalement que: [i, 21]

$$\sigma(\varepsilon) = \sigma_A \left[(q^2 - 1) \tan^{-1} \varepsilon + q \ln(\varepsilon^2 + 1) \right] \quad (17)$$

Les termes de cette équation ont la même signification que ceux de l'équation (12a)

On mesurera donc, à travers les variations du taux de comptage des ions positifs en fonction de l'énergie des électrons incidents, l'intégrale de la section efficace de

¹⁸ Voir section 6.I du chapitre 1.

productions des états du continuum. Ces états sont produits par des collisions inélastiques¹⁹ et par des collisions parfaitement inélastiques²⁰.

De ces observations, nous pouvons tirer deux conditions [1]:

- L'énergie de la particule incidente doit pouvoir être partiellement absorbée (comme on a à la fois des collisions partiellement inélastiques et complètement inélastiques).
- L'on doit faire varier l'énergie de la particule (ce qui va de soi dans notre expérience car on bombarde le néon avec des électrons d'énergie variable.)

Section 7: Phénomène de compétition:

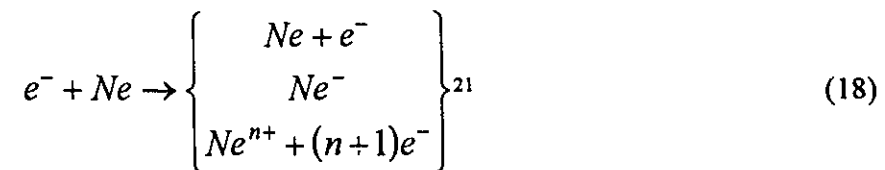
Les structures que nous voyons sur la courbe d'électro-ionisation sont en réalité la résultante des perturbations de la section efficace de production du Ne^- , conduisant à Ne^+ , en fonction de l'énergie des électrons incidents. En effet, lors d'une collision entre un atome de néon et un électron, trois différentes voies de sortie, résultant de cette collision, peuvent être observées:

- Collision laissant l'atome neutre.
- Collision inélastique produisant un ion positif simplement ou multiples fois chargé.
- Collision parfaitement inélastique produisant un ion négatif.

Ceci peut être représenté comme:

¹⁹ Une collision inélastique est une collision au cours de laquelle seule la quantité de mouvement est conservée; l'énergie cinétique n'est pas conservée. [57]

²⁰ Une collision parfaitement inélastique est une collision inélastique à la suite de laquelle les deux corps demeurent en contact entre eux. [57]



Toutefois une explication plus détaillée doit être donnée. Initialement, on a un électron incident se dirigeant vers un atome de néon au niveau fondamental. Durant la transition²², plusieurs types de processus peuvent survenir. Tant que l'électron a une énergie au-dessous du premier niveau d'excitation, seule la collision élastique est possible.

À ce stade de la description de l'interaction, on doit préciser que lorsqu'un électron passe au voisinage de l'atome et ce, peu importe la valeur du paramètre d'impact, il polarise l'atome. On peut donc considérer cette polarisation comme une interaction d'un électron, par le biais du champ qu'il induit, sur l'atome. Peu importe la valeur du paramètre d'impact, tout électron induira un champ sur l'atome. Donc la section efficace, définie ainsi sera infinie²³ [22]. On doit cependant spécifier que l'expression "section efficace" ici utilisée correspond à une définition différente de celle souvent utilisée.

Par la suite, au fur et à mesure que l'énergie de l'électron incident augmente, des voies d'excitation inélastiques apparaissent. On verra alors la formation d'atomes neutres excités, d'ions positifs ionisés une ou plusieurs fois ainsi que des ions négatifs lorsqu'une énergie de résonance est atteinte. Comme on a dit auparavant que quelque soit ce

²¹ où n est un entier positif.

²² Qui durera environ 10^{-17} secondes.

²³ Comme tout électron interagit avec l'atome peu importe la distance, on peut dire qu'un nombre extrêmement grand d'électrons sera responsable d'une section efficace que l'on peut considérer comme infinie.

paramètre d'impact, tous les électrons produisent une sorte d'interaction, il faut conclure que lorsque de nouvelles sortes d'interactions apparaissent, elles doivent se faire aux dépens de celles qui existaient déjà, puisque tous les électrons interagissent déjà. Ces nouvelles interactions qui se font aux dépens de celles qui agissaient déjà, sont ce que l'on appelle la compétition.

Comme on mesure les variations de la section efficace²⁴ de formation de Ne^+ en fonction de l'énergie des électrons incidents, il est clair que les sections efficaces de formation de Ne^- (σ_{Ne^-}) et celle de collision élastique (σ_{Ne+e^-}) perturbent celle de Ne^+ ($\sigma_{Ne^++e^-}$). En effet, on peut représenter cela comme²⁵:

$$\sigma_T = \sigma_{Ne+e^-} + \sigma_{Ne^-} + \sigma_{Ne^++e^-} \quad (19)$$

De cette équation on voit évidemment que si σ_{Ne^-} ou σ_{Ne+e^-} change, alors $\sigma_{Ne^++e^-}$ changera aussi. De cela, il découle que même si on ne peut détecter directement une voie, on peut toujours la détecter indirectement par les perturbations qu'elle induit sur celle que l'on détecte.

²⁴ On notera cependant que les ions Ne^{*+} ne sont qu'une partie des ions positifs qui peuvent être créés (Ne^+ , Ne^{++} , Ne^{+++} , etc)

²⁵ Pour être rigoureux, on pourrait réécrire (19) comme:

$$\sigma_T = \sigma_{Ne+e^-} + \sigma_{Ne^-} + \sum_{n=1}^{10} \sigma_{Ne^{n+}+(n+1)e^-} = \infty \quad (18a)$$

et (18a) comme:

$$\sigma_{Ne+e^-} = \sigma_T - \sigma_{Ne^-} - \sum_{n=2}^{10} \sigma_{Ne^{n+}+(n+1)e^-} \quad (18a)$$

Chapitre 2: Prédiction des niveaux

En se basant sur la méthode d'extrapolation à l'aide des éléments iso-électroniques et des éléments voisins, et sur les résultats existant en littérature, on peut prédire la nature de l'état et la position en énergie des niveaux neutres excités. Ceci nous permettra dans le chapitre suivant de parvenir à une interprétation de nos résultats expérimentaux.

Avant de commencer, on doit préciser que certains niveaux ont été exclus de nos calculs car leur énergie était trop basse par rapport à la région étudiée. Ici, j'exclus les niveaux simplement excités du type $1s^2 2s^2 2p^5 ({}^2P)nl$ car leur limite d'ionisation est trop basse. Elle est de 21.559 eV [23], alors que nous travaillons entre 42 eV et 44.5 eV.

Section 1: Méthode de comparaison avec des séries iso-électroniques, des éléments voisins et des éléments de même famille.

Tout au long des autres sections de ce chapitre, on utilisera des éléments voisins du néon, des éléments ayant le même nombre d'électrons que le néon ou des éléments de la même famille que le néon.

L'utilisation de ces éléments iso-électroniques nous permet de faire des comparaisons entre ceux-ci et l'élément que l'on étudie qui est le néon. Ceci est justifié par le fait que le "comportement" des atomes varie en fonction du nombre d'électrons et très peu en fonction du noyau lorsqu'il est blindé. Par exemple, on peut dire que l'ordre des multiplicités d'un niveau en $2p^4$ sera le même dans le OI, FII, NeIII, NaIV, MgV, etc.

Même si ces atomes sont différents de par la structure de leur noyau et de leur masse, certaines "propriétés" d'ordre des niveaux restent inchangées car tous ces atomes ont huit électrons.

Également, on peut acquérir certaines connaissances par comparaison avec les éléments voisins mais qui n'ont pas le même nombre d'électrons. Par exemple on peut comparer le niveau $1s^2 2s^2 2p^4 3s 3p$ du Na avec le niveau $1s^2 2s^2 2p^6 3s 3p$ du Mg car le couplage entre les deux électrons extérieurs est beaucoup plus fort que celui entre la couche 2p et les deux électrons extérieurs. C'est le modèle du coeur "gelé". De plus, comme dans les deux cas, on a un nombre d'électrons qui est pair, ce qui fait que dans les deux cas, les charges sont réparties symétriquement.

Un autre type de comparaison qui peut être utilisée est la comparaison "par colonne". On compare alors tous les atomes qui ont une couche électronique semblable mais avec le nombre quantique "n" différent. Cette possibilité de comparaison est attribuable au fait qu'au sein d'une même famille, tous les atomes ont la même structure, seulement le nombre quantique principal de la couche extérieure et le nombre de couches internes changent. On peut donc comparer, par exemple, la variation de l'énergie de liaison d'un électron en fonction de n.

C'est à l'aide de ces trois méthodes que l'on prédira les niveaux d'énergie qui nous intéressent.

Nous n'utiliserons pas ici de méthode mathématique "ab initio" étant donné que cela représenterait un problème à onze corps qui permet de conduire seulement à des

résultats très imprécis et fort laborieux. Les méthodes mentionnées se sont avérées beaucoup plus efficaces et plus précises.

Section 2: Les niveaux en $1s^2 2s(2S) 2p^6 nl$

Le premier niveau neutre considéré est le $1s^2 2s(2S) 2p^6 3s(2S)$. Pour calculer son énergie, on est parti de l'énergie de l'ion $1s^2 2s(2S) 2p^6$ du néon. Moore [23] rapporte une valeur calculée de 48.46 eV. On sait que l'ion positif $1s^2 2s(2S) 2p^6$ aura une énergie plus élevée que celle du neutre $1s^2 2s(2S) 2p^6 3s(2S)$. On peut donc en première approximation soustraire du niveau du Ne^+ l'énergie de liaison de l'électron $3s(2S)$. Toutefois, comme l'énergie de cette configuration n'est pas disponible pour le néon, on prendra donc celle du sodium en guise d'approximation. Cette approximation est valable, car dans le cas de ce niveau et de celui du sodium, l'électron 3s est couplé à une couche p complète, soit la couche $2p^6$. Aussi, dans les deux cas, on a la même charge qui est exercée sur l'électron $3s(2S)$. Cette énergie de liaison est de 5.138 eV [23]. Donc, soustrayant l'énergie de liaison du Na de l'énergie du niveau $1s^2 2s(2S) 2p^6$, on trouve que l'énergie du niveau $1s^2 2s(2S) 2p^6 3s(2S)$ sera d'approximativement 43.33 eV en vertu des approximations faites sur l'énergie de liaison de l'électron $3s(2S)$.

Section 3: Les niveaux en $1s^2 2s(2S) 2p^6 nl^2$

Connaissant maintenant approximativement la position du niveau $1s^2 2s(2S) 2p^6 3s(2S)$, on peut connaître la position de $1s^2 2s(2S) 2p^6 3s^2$ ²⁶ en soustrayant la valeur de l'affinité électronique du sodium, de la position du niveau $1s^2 2s(2S) 2p^6 3s(2S)$. Toutefois cela ne représente encore qu'une approximation car le niveau auquel on s'intéresse n'a qu'un électron dans la couche 2s alors que le sodium en a deux. Toutefois il est improbable qu'un électron interne (2s) produise une grande perturbation. On peut s'attendre à ce que l'affinité électronique réelle soit plus faible que celle du sodium car l'électron de la couche 2s exerce lui aussi une attraction sur l'électron que l'on ajoute dans la couche 3s²⁷. La valeur de l'affinité électronique du sodium, obtenue par Fung et Matese [53], est de 0.536 eV. La position de $1s^2 2s(2S) 2p^6 3s^2$ sera de:

$$43.33 \text{ eV} - 0.536 \text{ eV} = 42.80 \text{ eV} \quad (20)$$

Section 4: Les niveaux en $1s^2 2s^2 2p^4[3P, 1D, 1S] nl^2$

I. Prédiction par les éléments voisins

Pour prédire l'énergie de niveau en $1s^2 2s^2 [2p^4(3P) 3s^2(1S)](3P)$, nous ferons un parallèle avec le magnésium. Cela est justifié par le fait que dans les deux cas pour les

²⁶ Qui est le seul niveau possible avec cette configuration.

²⁷ On doit cependant ajouter que l'électron 3s du sodium voit un noyau Na^+ (C'est-à-dire ayant une charge), tandis que le second électron 3s du Ne voit un noyau en Ne^{++} (C'est-à-dire ayant deux charges).

deux électrons extérieurs dans la couche 3s, le couplage dominant est celui entre ces deux électrons de la couche 3s.

Toutefois, dans le cas qui nous intéresse, un problème subtil survient: le néon a un coeur en $2p^4$ tandis que le magnésium a un coeur en $2p^6$. On devra donc apporter une correction. [14].

Regardons pour commencer les différences d'énergie de l'électron 3s entre les niveaux les plus bas ayant les configurations:

- $[1s^2 2s^2 2p^6] 3s(^2S)$ et $[1s^2 2s^2 2p^6](^1S)$ pour le sodium
- et entre les niveaux $[1s^2 2s^2 2p^4(^3P)] 3s(^2S)$ et $[1s^2 2s^2 2p^4](^3P_{0,1,2})$ du fluor,

qui sont les deux éléments voisins du néon. On utilise ces deux éléments car on a, tout comme dans les cas du néon et du magnésium, des coeurs se terminant en $2p^4$ (pour le fluor) et en $2p^6$ (pour le sodium). Dans les deux cas, on a un électron 3s lié à ceux-ci. Ces différents niveaux sont résumés dans le tableau 1 pour le fluor et dans le tableau 2 pour le sodium.

Tableau 1

$1s^2 2s^2 2p^4 \dots$	E_{absolue} (eV)	ΔE^{28} (eV)
$[(^3P)3s(^2S)](^4P_{5/2})$	12.70	4.78 [23]
$[(^3P)3s(^2S)](^4P_{3/2})$	12.73	7.75
$[(^3P)3s(^2S)](^4P_{1/2})$	12.75	4.73
$[(^3P)3s(^2S)](^2P_{3/2})$	12.99	4.49
$[(^3P)3s(^2S)](^2P_{1/2})$	13.03	4.45
$(^3P_2)$	17.42	0.06
$(^3P_1)$	17.46	0.02
$(^3P_0)$	17.48	0.00

Tableau des énergies des différents niveaux du fluor du type $2p^4(^3P)3s(^2S)$, et des niveaux qui sont leur limite d'ionisation.

²⁸ Ici le ΔE représente la différence d'énergie entre le niveau sis dans la première colonne du tableau, et le niveau $1s^2 2s^2 2p^4(^3P_0)$ qui est la limite d'ionisation qu'on utilise. On peut donc dire que:

$$\Delta E = E_{\text{niveau}} - E_{(1s^2 2s^2 2p^4(^3P_0))} \quad (20')$$

Tableau 2

$1s^2 2s^2 2p^6$	E_{absolue} (eV)	ΔE^{29} (eV)
$3s(^2S)$	0.000	5.138 [23]
(^1S)	5.138	0.000

Tableau des énergies des différents niveaux du sodium du type $2p^6(^1S)3s(^2S)$, et des niveaux qui sont leur limite d'ionisation.

De ces données, on constate qu'il est plus facile d'arracher un électron couplé avec un niveau $2p^4(^3P)^{30}$ qu'avec un électron couplé avec un niveau $2p^6(^1S)$ car ΔE est plus petit pour F que pour Na³¹. Donc la comparaison que Bolduc, Quéméner *et al.* [14] ont faite entre le néon et le magnésium, pour prédire leurs niveaux du néon, n'est pas

²⁹ Voir note précédente.

³⁰ Avec une charge nucléaire moindre.

³¹ Cette généralisation est appuyée par le fait que si on regarde tous les éléments voisins des autres gaz rares, le même comportement est observé.

Tableau numéro 2a

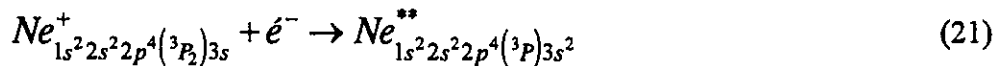
n	$np^4(n+1)s$	$np^6(n+1)s$
3 (argon)	3.809	4.341
4 (krypton)	3.766	4.176
5 (xénon)	3.420	3.893

Tableau de l'énergie nécessaire pour arracher l'électron (n+1)s des atomes voisins des autres gaz rares (argon, krypton, xénon)

Note: Toutes les énergies nécessaires ont été prises dans Moore [23] sauf celles pour le niveau $3p^4(^3P)4s$ du chlore d'où les données viennent de Radziemski et Kaufman [54]

complètement valide. Elle doit être corrigée pour tenir compte du fait qu'il est plus facile d'arracher un électron couplé à un niveau en $2p^4(^3P)$ qu'à un niveau en $2p^6(^1S)$.

L'autre point qui soulève des questions est relié au choix du niveau du fluor que l'on choisira afin de calculer la différence approximative d'énergie. Pour répondre à cette question, regardons un mécanisme possible par lequel le niveau $2p^4(^3P)3s^2$ pourrait être formé³².



On a premièrement un niveau de NeII dans l'état $1s^2 2s^2 2p^4(^3P) 3s(^2S)$ qui est frappé par un électron incident. Cet électron, en vue de créer le niveau $2p^4(^3P) 3s^2$, doit briser le lien, c'est-à-dire rompre le couplage entre la couche $2p^4(^3P)$ et l'électron $3s(^2S)$. Toutefois, briser ce lien requiert de l'énergie. Comme l'électron devra fournir une certaine quantité d'énergie pour briser le lien, on prendra le niveau où ce lien est le plus faible, soit le niveau $2p^4(^3P_2)$. Le lien présenté dans la relation précédente (22) est celui qui requiert le moins d'énergie à briser car ce niveau est le plus près de la limite d'ionisation, donc le plus faiblement lié.

On peut donc calculer approximativement la différence d'énergie nécessaire pour arracher un électron d'un niveau en $2p^4(^3P)$ d'un niveau en $2p^6(^1S)$. Cette énergie sera

³² Ceci n'est qu'une hypothèse de travail et n'est pas nécessairement représentatif de ce qui se passe réellement dans l'appareil.

l'énergie de la correction, $E_{\text{correction}}$, que l'on apportera à l'énergie de liaison du Mg que l'on utilisera. On aura:

$$E_{\text{correction}} = \Delta E(\text{Na}[2p^6 3s](^2S)) - \Delta E(F[[2p^4(^3P)3s(^2S)](^2P_{3/2})]) \quad (22)$$

$$E_{\text{correction}} = 5.138 - 4.45 = 0.69 \text{ eV}$$

Conséquemment, cette valeur doit être soustraite de la valeur de l'énergie de liaison du second électron du niveau $2p^6(^1S)3s^2$ du magnésium. On aura donc:

$$\Delta E_{\text{corrigé}}(\text{Mg}) = E_l(\text{Mg}[2p^6(^1S)3s^2(^1S)]) - E_{\text{correction}} \quad (23)$$

$$\Delta E_{\text{corrigé}}(\text{Mg}) = 7.644 - 0.69 = 6.95 \text{ eV}$$

On sait que le niveau $2p^4(^3P)3s^2$ du néon I aura une énergie inférieure à celle du niveau $2p^4(^3P)3s(^2S)$ du néon II. On doit donc soustraire $\Delta E_{\text{corrigé}}(\text{Mg})$ de l'énergie du niveau $2p^4(^3P)3s(^2S)$ du NéonII. Les énergies du NéonII dont on a besoin pour prédire les niveaux en $3s^2$ du NeI sont contenues dans le tableau 3.

Tableau 3

$1s^2 2s^2 [2p^4(^3P)] 3s$	Énergie (eV)
$(^2S)](^4P_{3/2})$	48.73
$(^2S)](^4P_{3/2})$	48.79
$(^2S)](^4P_{1/2})$	48.83
$(^2S)](^2P_{3/2})$	49.34
$(^2S)](^2P_{1/2})$	49.42

Tableau des énergies [23] des différents niveaux du NéonII du type $2p^4(^3P)3s(^2S)$

Une fois encore, face à ces niveaux, on est porté à se demander quel niveau on choisira afin de calculer $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)3s^2$. Afin d'être cohérent avec ce que l'on a dit plus haut pour le fluor, on devra choisir nécessairement le niveau en $1s^2 2s^2 [2p^4(^3P)3s(^2S)](^2P_{1/2})$ parce que ce niveau est le plus bas pouvant conduire à $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)3s^2$.

Soustrayant de l'énergie de ce niveau celle de $E_{correction}$ on a:

$$E(\text{Ne}[2p^4(^3P)3s^2(^1S)]) = E(\text{Ne}[[2p^4(^3P)3s(^2S)](^2P_{1/2})]) - \Delta E_{corrigé}(Mg) \quad (24)$$

$$E\left(\text{Ne}\left[2p^4\left({}^3P\right)3s^2\left({}^1S\right)\right]\right) = 49.42 - 6.95 = 42.47\text{eV}$$

En appliquant le même raisonnement, on peut trouver la position des niveaux en $2p^4\left\{{}^1S, {}^1D\right\}3s^2\left({}^1S\right)$

Pour le $2p^4\left({}^1D\right)3s^2\left({}^1D\right)$:

$$E_{\text{correction}} = \Delta E\left(\text{Na}\left[2p^63s\right]\left({}^2S\right)\right) - \Delta E\left(\text{F}\left[\left[2p^4\left({}^1D\right)3s\left({}^2S\right)\right]\left({}^2D_{3/2}\right)\right]\right)^{33} \quad (25)$$

$$E_{\text{correction}} = 5.138 - 4.65 = 0.488\text{eV}$$

$$\Delta E_{\text{corrigé}}(\text{Mg}) = E_i\left(\text{Mg}\left[2p^6\left({}^1S\right)3s^2\left({}^1S\right)\right]\right) - E_{\text{correction}} \quad (26)$$

$$\Delta E_{\text{corrigé}}(\text{Mg}) = 7.644 - 0.488 = 7.156\text{eV}$$

$$E\left(\text{Ne}\left[2p^4\left({}^1D\right)3s^2\left({}^1S\right)\right]\right) = E\left(\text{Ne}\left[\left[2p^4\left({}^1D\right)3s\left({}^2S\right)\right]\left({}^2D_{3/2}\right)\right]\right) - \Delta E_{\text{corrigé}}(\text{Mg}) \quad (27)$$

$$E\left(\text{Ne}\left[2p^4\left({}^3P\right)3s^2\left({}^1S\right)\right]\right) = 54.34 - 7.156 = 44.95\text{eV}$$

Pour le $2p^4\left({}^1S\right)3s^2\left({}^1S\right)$:

$$E_{\text{correction}} = \Delta E\left(\text{Na}\left[2p^63s\right]\left({}^2S\right)\right) - \Delta E\left(\text{F}\left[\left[2p^4\left({}^1S\right)3s\left({}^2S\right)\right]\left({}^2S_{1/2}\right)\right]\right)^{34} \quad (28)$$

$$E_{\text{correction}} = 5.138 - 4.78 = 0.358\text{eV}$$

³³ Ici la valeur de $1s^22s^2\left[2p^4\left({}^1D\right)3s\left({}^2S\right)\right]\left({}^2D_{3/2}\right)$ a été prise dans Bashkin [55].

³⁴ Ici la valeur de $1s^22s^2\left[2p^4\left({}^1D\right)3s\left({}^2S\right)\right]\left({}^2D_{3/2}\right)$ a été tirée de Ruscic, Greene *et al.* [56].

$$\Delta E_{\text{corrigé}}(Mg) = E_l(Mg[2p^6(^1S)3s^2(^1S)]) - E_{\text{correction}} \quad (29)$$

$$\Delta E_{\text{corrigé}}(Mg) = 7.644 - 0.358 = 7.286eV$$

$$E(Ne[[2p^4(^1S)3s^2(^1S)](^2S_{1/2})]) = E(Ne[[2p^4(^1D)3s(^2S)](^2D_{1/2})]) - \Delta E_{\text{corrigé}}(Mg) \quad (30)$$

$$E(Ne[2p^4(^3P)3s^2(^1S)]) = 55.863 - 7.286 = 48.577eV$$

Il est à noter que ce niveau devrait être celui le plus près de l'expérience car, dans ce cas, le magnésium et le néon ont tous deux des noyaux en (^1S) [14].

II. Prédiction par les défauts quantiques

Une autre manière s'offre à nous pour prédire la position de ces niveaux, il s'agit d'utiliser les défauts quantiques. Cependant, les résultats que nous obtiendrons avec cette méthode seront plus ou moins fiables car la méthode des défauts quantiques est surtout valable à n élevé. Selon Read [24], on peut prédire la valeur d'un niveau en $ns^2(^1S)$ à partir du défaut quantique du niveau en $ns(^2S)$. L'énergie du niveau en $ns^2(^1S)$ est donnée par:

$$E(ns^2(^1S)) \approx I - \frac{2R(Z - 1/4)^2}{\left(n - \delta_{ns(^2S)}\right)^2} \quad (31)$$

où:

- I est l'énergie qu'il faut pour arracher les deux électrons s.
- R est la constante de Rydberg égale à 13.605 eV pour le néon.
- Z est la charge effective du niveau en $ns(^2S)$.
- n est le nombre quantique principal.
- δ_{ns} est le défaut quantique du niveau en $ns(^2S)$.

³⁵ La formule originale utilisée par Read est $E(ns^2(^1S)) \approx I - 2R \frac{(Z - \sigma)^2}{\left(n - \delta_{ns(^2S)}\right)^2}$.

Comme la valeur moyenne de σ est de 0.25 pour les niveaux en $ns^2(^1S)$, il substitue par la suite 0.25 à σ qui est la constante de blindage ("screening constant") qui est définie par:

$$\sigma = \int_{r_1=0}^{\infty} \int_{\Omega_1} \left(\int_{r_2=0}^{\eta} \int_{\Omega_2} |\phi(\vec{r}_2)|^2 d\vec{r}_2 \right) |\phi(\vec{r}_1)|^2 d\vec{r}_1 \quad (30a)$$

C'est pourquoi on utilise $(Z - 1/4)^2$ au numérateur de notre expression de $E(ns^2(^1S))$.

Avant de calculer cette énergie, on a calculé les défauts quantiques des niveaux en $ns(^2S)$. Les résultats de ces calculs sont résumés dans le tableau 4.

Tableau 4

$1s^2 2s^2 [2p^4]$	Énergie (eV)	Défaut quantique
$(^3P)3s(^2S)](^4P_{5/2})$	48.73	1.028
$(^3P)3s(^2S)](^4P_{3/2})$	48.79	1.023
$(^3P)3s(^2S)](^4P_{1/2})$	48.83	1.020
$(^3P)3s(^2S)](^2P_{3/2})$	49.34	0.983
$(^3P)3s(^2S)](^2P_{1/2})$	49.42	0.977
$(^3P)_{36}$	62.712	-

Tableau de l'énergie et des défauts quantiques des différents niveaux du NéonII du type $2p^4(^3P)3s(^2S)$ et de l'énergie [23] de leur limite de série.

Les défauts quantiques du tableau ci-haut, ont été calculés avec la relation suivante [24]:

³⁶ Ici pour calculer la valeur du niveau $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)$, on a pris la moyenne des valeurs d'énergie de 3P_0 , 3P_1 et 3P_2 .

$$E_{nl} = I - \frac{RZ^2}{(n - \delta_{nl})^2} \quad (32)$$

où les variables de cette expression ont la même signification que dans l'expression précédente.

Maintenant que l'on connaît les défauts quantiques et la limite de série des niveaux en $2p^4(^3P)3s(^2S)$, on peut calculer l'énergie de $1s^2 2s^2 2p^4 3s^2(^1S)$. On aura:

$$E(3s^2(^1S)) \approx I - \frac{2R(Z - 1/4)^2}{\left(n - \delta_{3s(^2P_{1/2})}\right)^2} \quad (33)$$

$$E(3s^2(^1S)) \approx 62.712 - \frac{2 \times 13.601 \times (2 - 1/4)^2}{(3 - 0.977)^2} = (42.356 \pm 0.847) eV \quad (33a)$$

Pour calculer l'énergie de ce niveau, on a choisi d'utiliser le défaut quantique du niveau $1s^2 2s^2 [2p^4(^3P)3s(^2S)](^2P_{1/2})$ afin de rester cohérent avec le choix que l'on a fait dans la sous-section précédente. Comme on peut le constater, cette valeur est relativement près de ce que l'on avait prédit précédemment³⁸. Toutefois, pour valider cette

³⁷ Read [24] estime dans son article que pour les niveaux en $3s^2(^1S)$, l'incertitude des énergies calculées est généralement inférieure à 2%. On prendra donc cette limite extrême comme notre valeur d'incertitude.

³⁸ On avait prédit une énergie de 42.47 eV à la sous-section précédente.

constatation, on peut calculer le défaut quantique de ce niveau pour chacune des deux valeurs d'énergie et comparer les deux valeurs trouvées.

Pour la valeur d'énergie trouvée dans la sous-section I:

$$E_{3s^2_{\text{section I}}} = 62.712 - \frac{13.601 \times 1^2}{\left(3 - \delta_{3s^2_{\text{section I}}}\right)^2} = 42.47 \quad (34)$$

$$\delta_{3s^2_{\text{section I}}} = 2.180 \quad (34a)$$

Pour la valeur d'énergie trouvée dans la sous-section II:

$$E_{3s^2_{\text{section II}}} = 62.712 - \frac{13.601 \times 1^2}{\left(3 - \delta_{3s^2_{\text{section II}}}\right)^2} = 42.356 \quad (35)$$

$$\delta_{3s^2_{\text{section II}}} = 2.183 \quad (35a)$$

Comme on le voit, les deux valeurs des défauts quantiques sont très près l'une de l'autre. On peut donc conclure que nos deux prédictions sont cohérentes l'une avec l'autre dans la limite de ce que l'on a énoncé au début de la section concernant le fait que les défauts quantiques sont surtout valables aux n élevés.

Par la même procédure, on peut prédire les valeurs d'énergie des niveaux en $2p^4\{1S, 1D\}3s^2(1S)$.

Pour le niveau $1s^2 2s^2 2p^4(1D)3s^2(1D)$:

$$E(2p^4(1D)3s^2(1S)) \approx I - \frac{2R(Z - \frac{1}{4})^2}{\left(n - \delta_{(1D)3s(2D_{3/2})}\right)^2} \quad (36)$$

$$E(2p^4(1D)3s^2(1S)) \approx 65.833 - \frac{2 \times 13.601 \times (2 - \frac{1}{4})^2}{(3 - 4.991)^2} \approx (44.818 \pm 0.896)^{39} \text{ eV} \quad (36a)$$

Pour $1s^2 2s^2 2p^4(1S)3s^2(1S)$:

$$E(2p^4(1S)3s^2(1S)) \approx I - \frac{2R(Z - \frac{1}{4})^2}{\left(n - \delta_{(1S)3s(2S_{1/2})}\right)^2} \quad (37)$$

$$E(2p^4(1S)3s^2(1S)) \approx 69.541 - \frac{2 \times 13.601 \times (2 - \frac{1}{4})^2}{(3 - 4.994)^2} = (48.489 \pm 0.971) \text{ eV} \quad (37a)$$

Les valeurs trouvées par les deux méthodes sont résumées dans le tableau suivant:

³⁹ Pour la valeur de l'incertitude, prière de se rapporter à la note 37.

Tableau 5

Niveaux	Prédictions d'énergie (en eV) faites avec les éléments voisins (Précédente section)	Prédictions d'énergie (en eV) faites avec les défauts quantiques. (Cette section) ⁴⁰
$1s^2 2s^2 2p^4 ({}^3P) 3s^2 ({}^1S)$	42.47	42.356 ± 0.847
$1s^2 2s^2 2p^4 ({}^1D) 3s^2 ({}^1S)$	44.95	44.818 ± 0.896
$1s^2 2s^2 2p^4 ({}^1S) 3s^2 ({}^1S)$	48.577	48.489 ± 0.971

Tableau récapitulatif des diverses prédictions faites pour les niveaux en $3s^2 ({}^1S)$ à l'aide
des deux méthodes utilisées.

Si on compare les deux colonnes du tableau précédent, on constate que les valeurs trouvées par les deux méthodes sont cohérentes l'une avec l'autre. La différence moyenne est d'environ 0.088 eV, ce qui est acceptable vu que nos deux méthodes représentent des approximations. Elles nous donnent une bonne idée où sont les niveaux en $2p^4 \{ {}^3P, {}^1S, {}^1D \} 3s^2$ d'une manière assez efficace et précise par comparaison avec les calculs de Hibbert, Le Dourneuf *et al.* [25] qui estiment une différence d'énergie de 20000 cm^{-1} (≈ 2.5 eV) entre 3 différentes méthodes de calculs. Notre méthode doit donc être considérée comme satisfaisante.

⁴⁰ Pour la valeur de l'incertitude, prière de se rapporter à la note 37.

Section 5: Les niveaux en $1s^2 2s^2 2p^4 [^3P, ^1D, ^1S] nl n'l'$

Passons maintenant aux niveaux du type $1s^2 2s^2 2p^4 \{^3P, ^1S, ^1D\} [3s3p \{^{1,3}P\}]$.

On commencera par considérer le niveau $1s^2 2s^2 2p^4 \{^3P, ^1D, ^1S\} 3s(^2S)$ du Ne^+ , dont les différentes énergies sont données dans le tableau 6. Les données sont tirées de Moore [23].

Tableau 6:

$1s^2 2s^2 2p^4 (^1S) 3s$	55.87 eV
$1s^2 2s^2 2p^4 (^1D) 3s$	52.11 eV
$1s^2 2s^2 2p^4 (^3P) 3s$	49.83 eV

Tableau de l'énergie de différents niveaux du Ne^+ qui sont des limites d'ionisation des niveaux du type $3s3p \{^{1,3}P\}$ du Ne^{**} .

Ces niveaux sont les limites d'ionisation des niveaux $3s3p \{^{1,3}P\}$. Comme l'interaction est beaucoup plus forte entre les électrons $3s$ et $3p$ qu'entre ces électrons et les électrons $2p^4 \{^3P, ^1D, ^1S\}$ [14, 26], on peut utiliser un niveau particulier du magnésium pour évaluer les séparations relatives entre les niveaux. La position relative à $1s^2 2s^2 2p^6 3s(^2S)$, des niveaux du magnésium que nous utiliserons, est donnée dans le tableau ci-dessous. Les données sont tirées de Moore [23].

Tableau 7:

$1s^2 2s^2 2p^6 3s(^2S)$	0 eV
$1s^2 2s^2 2p^6 3s3p(^1P)$	-3.298 eV
$1s^2 2s^2 2p^6 3s3p(^3P)$	-4.932 eV

Tableau des positions relatives à $1s^2 2s^2 2p^6 3s(^2S)$ des différents niveaux du Mg et du Mg^\pm utilisées dans la détermination des positions des niveaux du type $[3s3p]\{^1,^3P\}$ du Ne^{**} .

En additionnant ces valeurs de positions relatives aux valeurs des niveaux en 3s du Ne^{+41} , on peut prédire la position des niveaux de Ne du type $[3s3p]\{^1,^3P\}$ dont les valeurs moyennes sont résumées dans le tableau 8. Les données sont tirées de Moore [23].

⁴¹ Voir tableau 6.

Tableau 8:

$1s^2 2s^2 2p^4$	$[3s3p(^1P)]$	$[3s3p(^3P)]$
(^3P)	45.53 eV	43.90 eV
(^1D)	48.81 eV	47.18 eV
(^1S)	52.57 eV	50.94 eV

Tableau des différentes valeurs d'énergie prédites pour les niveaux du type $[3s3p]\{^{1,3}P\}$.

Les valeurs indiquées dans ce tableau indiquent la valeur moyenne de l'énergie du niveau car la multiplicité n'est pas considérée. Une autre étape peut être ajoutée afin de raffiner notre approximation. Langlois [27] a déjà calculé la position des différentes multiplicités des niveaux en $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)[3s3p(^3P)]$. Même si la position absolue des niveaux n'est pas extrêmement fiable⁴², on peut quand même considérer que l'ordre des niveaux, ainsi que l'écart entre chacun d'eux, est donné avec un bon niveau de fiabilité. On se servira donc de ces écarts et de la position moyenne que nous avons calculées pour ce niveau afin de trouver une approximation de la position en énergie de chacune des multiplicités du niveau $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)[3s3p(^3P)]$. Les positions des niveaux prédites par Langlois [27] sont données dans le tableau suivant:

⁴² Dû aux nombreuses approximations faites en cours de calculs.

Tableau 9

Multiplicité de la configuration	Position calculée par Langlois [27]	Position relative à $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)[3s3p(^3P)](^5P)$
$1s^2 2s^2 2p^4(^3P)[3s3p(^3P)]$	± 0.1 eV	± 0.2 eV
(^5P)	43.69	0.00
(^5D)	43.95	0.26
(^5S)	44.28	0.59
(^3P)	44.35	0.66
(^3D)	44.54	0.85
(^3S)	44.57	0.88
(^1P)	44.59	0.90
(^1D)	44.77	1.08
(^1S)	44.94	1.25

Tableaux des énergies prédites par Langlois [27] pour les niveaux en

$1s^2 2s^2 2p^4(^3P)[3s3p(^3P)]$, et des positions en énergie relatives à

$$1s^2 2s^2 2p^4(^3P)[3s3p(^3P)](^5P)$$

Avec ces différences et utilisant le fait que l'énergie moyenne de ce type de niveau devra être égale à 43.90 eV, on peut calculer l'énergie de ces neuf niveaux à l'aide d'un système de neuf équations à neuf inconnues. On aura:

$$\begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \\ E_4 \\ E_5 \\ E_6 \\ E_7 \\ E_8 \\ E_9 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.26 \\ 0.33 \\ 0.07 \\ 0.19 \\ 0.03 \\ 0.02 \\ 0.18 \\ 0.17 \\ 9 \times 43.90 \end{pmatrix}$$

(38)

où les énergies désignées par $E_1 \dots E_9$ sont celles correspondant aux énergies du précédent tableau, en ordre croissant⁴³.

Les énergies ainsi trouvées sont:

⁴³ C'est-à-dire que E_1 correspond à $1s^2 2s^2 2p^4 ({}^3P) [3s 3p ({}^3P)] ({}^5P)$ et E_9 correspond à $1s^2 2s^2 2p^4 ({}^3P) [3s 3p ({}^3P)] ({}^1S)$.

Tableau 10

Multiplicité de la configuration	Positions prédites par le précédent calcul $\pm 0.2 \text{ eV}^{44}$
$1s^2 2s^2 2p^4(^3P)[3s3p(^3P)]$	
(^5P)	43.18
(^5D)	43.44
(^5S)	43.77
(^3P)	43.84
(^3D)	44.03
(^3S)	44.06
(^1P)	44.08
(^1D)	44.26
(^1S)	44.43

Tableaux des énergies prédites par notre méthode approximative pour les niveaux en

$$1s^2 2s^2 2p^4(^3P)[3s3p(^3P)]$$

On a donc trouvé un moyen relativement fiable d'avoir les positions approximatives de nos niveaux en $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)[3s3p(^3P)]$. Cette méthode pourrait aussi être

⁴⁴ Cette erreur est due au fait que l'on a pris les différences entre les niveaux de Langlois qui sont tous précis à $\pm 0.1 \text{ eV}$.

appliquée aux autres types de niveaux en $1s^2 2s^2 2p^4 ({}^3P, {}^1D, {}^1S) [3s3p ({}^{1,3}P)]$ mais comme ceux-ci sont plus hauts en énergie que la zone que nous étudierons au Chapitre 3, section 2, nous ne les avons pas calculés pour l'instant⁴⁵.

Section 6: Les niveaux en $1s^2 2s^2 2p^4 [{}^3P, {}^1D, {}^1S] n l^2 n l'$

Toujours à partir du $3s3p \{ {}^{1,3}P \}$, on peut calculer l'énergie du $3s3p^2 \{ {}^{2,4}S, P, D \}$ en se servant encore de l'affinité électronique du magnésium, mais cette fois-ci pour le niveau $3s3p^2$. Si on regarde dans la littérature, on trouve trois auteurs qui ont calculé ou mesuré cette valeur [28-30]⁴⁶. Deux points seront à noter au sujet de ces valeurs:

- Les trois auteurs ont obtenu des valeurs différentes.
- Les auteurs ont trouvé cette valeur que pour la configuration $[3s3p^2] ({}^4P)$

Avec ces valeurs, on ne peut que calculer la position de l'état $1s^2 2s^2 2p^4 \{ {}^3P, {}^1D, {}^1S \} [3s3p^2 ({}^4P)]$ et ce, sans pouvoir considérer le couplage entre $\{ {}^3P, {}^1D, {}^1S \}$ et $({}^4P)$ car il n'y a pas d'informations disponibles dans la littérature à ce sujet.

Comme valeur de l'affinité électronique, on prendra celle donnée par Beck [28] car elle est récente et parce qu'elle est presque à mi-chemin de celle trouvée par Weiss [29] et par Bunge, Galán *et al.* [30]. Cette valeur est de 0.36 eV.

⁴⁵ Voir note de bas de page du Chapitre 3, Section 2.II.

⁴⁶ Beck; Weiss; Bunge, Galán *et al.*

Il reste cependant un problème. Le parent neutre peut avoir deux types de couplage entre l'électron 3s et l'électron 3p, c'est-à-dire qu'on peut avoir un couplage en (3P) ou en (1P). On se doit donc d'établir sous lequel de ces deux niveaux, chacun étant défini par un couplage différent, sera notre ion négatif. Comme le couplage en (1P) est plus haut en énergie que celui en (3P), on calculera l'affinité électronique à partir du (3P). Cette conclusion est en accord avec celle de Bunge, Galàn *et al.* [30] et avec celle de Weiss [29]. On aura comme valeurs d'énergie pour les niveaux $3s3p^2(^4P)$:

Tableau 11

$1s^2 2s^2 2p^4$	$[3s3p^2(^4P)]$
(1S)	50.80 eV
(1D)	46.82 eV
(3P)	43.54 eV

Tableau des différentes valeurs d'énergie prédites pour les niveaux du type

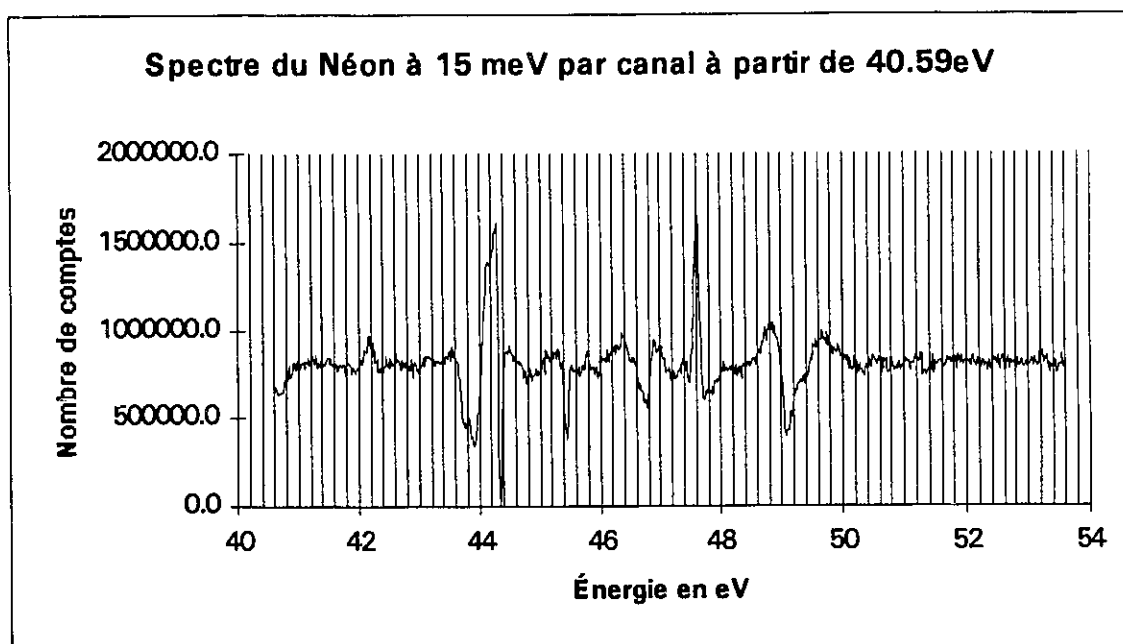
$$(^3P, ^1D, ^1S)[3s3p^2(^4P)].$$

Chapitre 3: Analyses des spectres obtenus

Section 1: Région de 42.00 eV à 43.10 eV

La figure suivante montre une courbe d'électro-ionisation du néon à des énergies comprises entre 42 et 43.2 eV. Celle-ci a été calibrée par rapport à une courbe de Réjean Dutil dans le même domaine d'énergie. La courbe α montre clairement que l'on a accumulé entre 38 et 40 milliards d'ions par canal. Il faut noter que comme le nombre de compte est très grand, la grosseur des points est de beaucoup supérieure à l'erreur statistique.

Figure 6



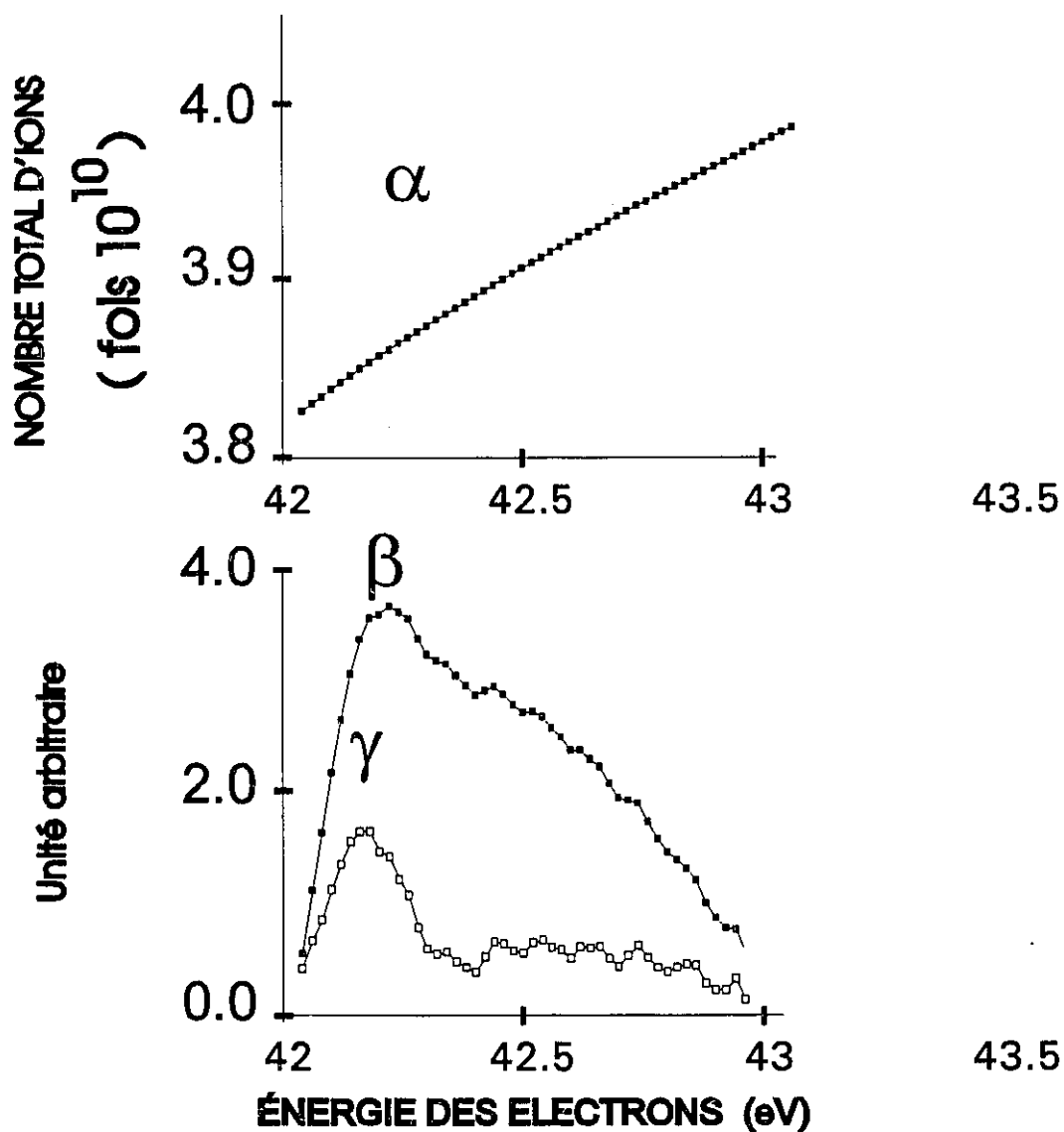
Courbe acquise par Réjean Dutil ayant servies de référence lors de la calibration de nos courbes. [58]

Le nombre total de comptes pour toute la courbe est de l'ordre de deux mille milliards (2×10^{12}). Il nous a fallu près de quatre mois pour accumuler ce seul spectre.

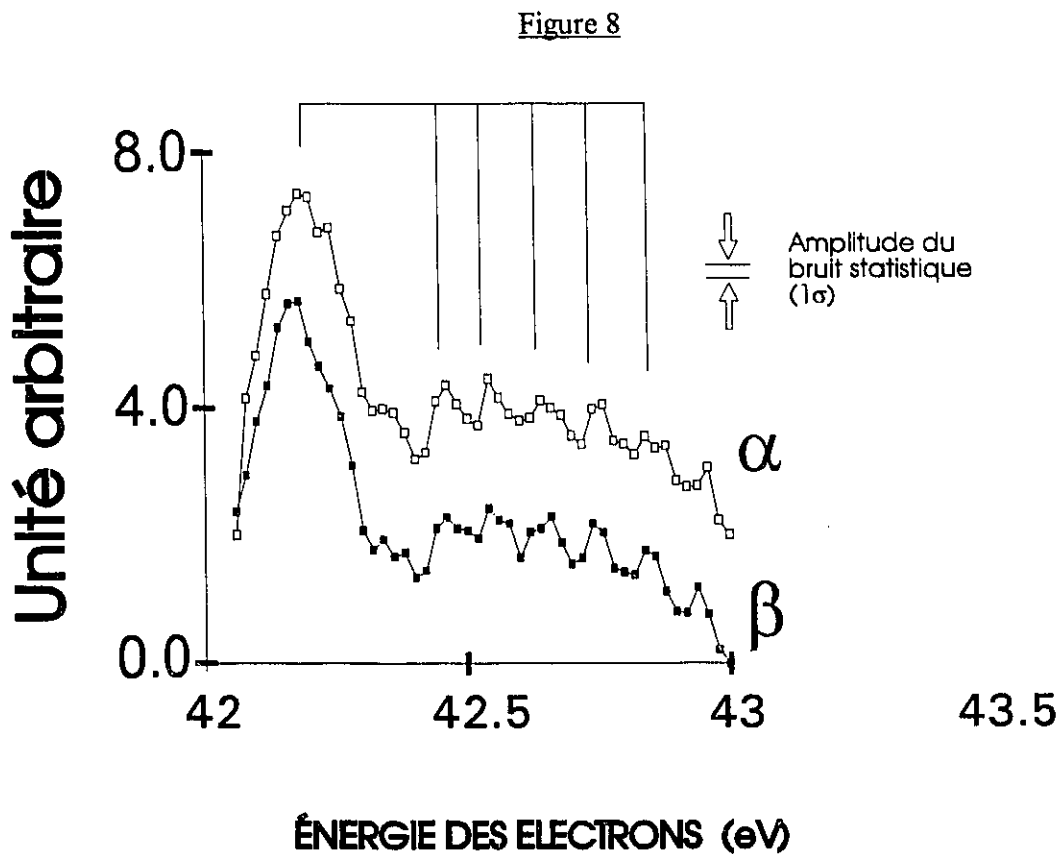
La courbe β représente la courbe α filtrée par 50 redressements par lissage, et la courbe γ représente la courbe α filtrée par 500 redressements par lissage⁴⁷.

⁴⁷ Ici la différence entre la position du pic des courbes β et γ est due au nombre de lissages choisis pour chacune des deux courbes.

Figure 7



Graphique des structures observées entre 42 et 43 eV dans la courbe d'électro-ionisation
du néon filtré par 500 redressements par lissage pour la courbe β et filtré par 50
redressements par lissage pour la courbe γ .



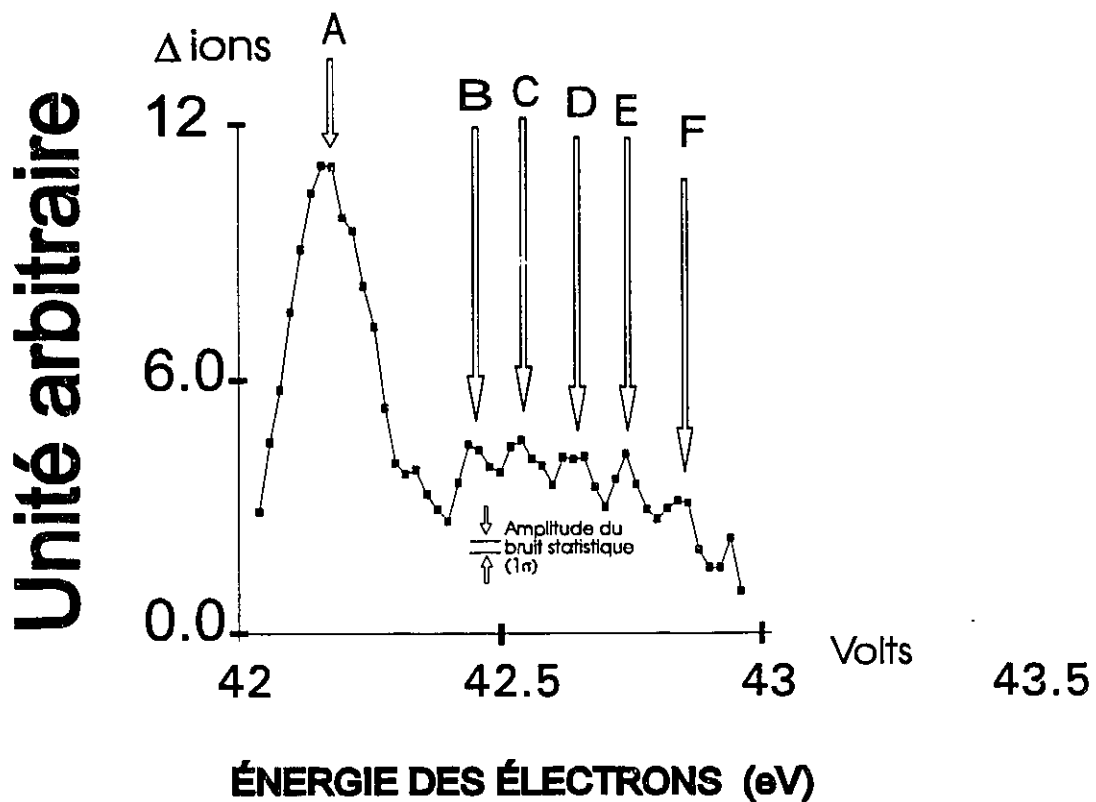
Graphique des structures observées entre 42 et 43 eV dans la courbe d'électro-ionisation (à 20 meV/canal) du néon filtré par 50 redressements par lissage pour deux intervalles d'acquisition de données différents. Cela illustre la reproductibilité de nos données expérimentales.

On doit aussi insister ici sur le fait que les deux spectres illustrés à la figure 8 (α et β) sont le résultat de deux séries de mesures complètement indépendantes correspondant chacune à deux mois d'accumulation. Donc les structures vues ne sont nullement le résultat du bruit ou de circonstances fortuites dans nos expériences. Les spectres ont été pris avec des voltages de bases différents auxquels on a superposé une rampe. Comme les structures apparaissent à la même énergie absolue malgré ce changement de voltage de

base, on en conclut que les structures sont bel et bien là et indépendamment des conditions de la prise de mesure. Comme le nombre de compte moyen par canal est d'environ 39 milliards d'ions, le bruit statistique sera égal à $\sqrt{39 \times 10^9} \approx 2 \times 10^5$ ions par canal. Comme les structures présentées sur la figure 7 ont une amplitude moyenne de l'ordre de 5 millions d'ions par canal, on en conclura qu'elles ne sont pas le résultat du bruit statistique.

Sur la figure suivante, six structures désignées par les lettres A à F sont observées clairement sur la courbe d'électro-ionisation redressée 20 fois, c'est-à-dire avec $S=20$. On a dessiné sur la figure l'amplitude du bruit statistique (1σ)

Figure 9:



Graphique des structures observéesTableau 13

Désignation de la structure	Position en énergie de son maximum (en eV)
A	42.195
B	42.475
C	42.555
D	42.665
E	42.755
F	42.855

Tableau des positions des maxima des différentes structures observées dans le spectre ci-haut.

On observe (Figure 7) six structures dont les maxima sont situés à 42.195, 42.475, 42.555, 42.665, 42.755, 42.855 eV respectivement et ont environ comme largeur 180, 40, 30, 60, 40, 40 meV respectivement. L'intensité de la première est beaucoup plus forte que celle des 5 autres. On a dessiné sur la figure précédente l'amplitude du bruit statistique (1σ).

I. Rappel des résultats dans la littérature.

i) Niveau neutre

On trouve dans la littérature que plusieurs auteurs (Tableau 14) ont étudié cet intervalle d'énergie. Bolduc et Marmet [21] ont observé, avec une méthode de spectroscopie par impact électronique, une structure à 42.2 eV qu'ils ont interprétée comme étant le neutre auto-ionisant $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)3s^2(^3P)$. Ce résultat est en accord avec celui de Sanche et Schultz [31] qui identifient eux aussi le neutre auto-ionisant $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)3s^2(^3P)$. Bolduc, Quéméner *et al.* [14], par le biais de la même méthode ont mesuré une structure bien définie, dans la courbe d'électro-ionisation, à 42.04 eV. Après comparaison avec la position relative des niveaux du MgI et avec l'expérience de Grissom, Garrett *et al.* [32], ils ont attribué la structure au neutre auto-ionisé de configuration électronique $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)3s^2(^3P)$.

En utilisant la technique des électrons piégés, Grissom, Garrett *et al.* [32] ont interprété, à l'aide des calculs de Weiss, la structure qu'ils ont observée à 42.10 ± 0.10 eV comme étant $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)3s^2(^3P)$. Østgaard Olsen et Andersen [33], par une méthode collisionnelle avec des ions⁴⁸ lourds, ont observé une structure à 41.94 eV qui est en bon accord avec les résultats de Bolduc, Quéméner *et al.* [14] et avec ceux de Gerber et Niehaus [34]. Ils ont attribué cette structure au niveau neutre $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)3s^2(^3P)$. En utilisant la spectroscopie par transmission d'électrons, Sanche et Schultz [31] ont interprété, en se basant sur les calculs de Weiss [32] et sur les observations de Bolduc *et al.* [14], une structure sise à 42 eV comme étant un état neutre

⁴⁸ Dans ce cas-ci du He.

de configuration $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)3s^2(^3P)$. Toutefois leurs résultats restent incertains. Spence [35], au moyen de la méthode des électrons piégés, interpréta la structure sise à 41.9 eV comme l'état excité neutre $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)3s^2(^3P)$. Veillette et Marchand [36], avec une méthode basée sur la détection du rayonnement visible et proche ultraviolet, ont situé une structure à 42.2 eV comme étant $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)3s^2(^3P)$, en se basant sur des extrapolations faites à l'aide du MgI. Le MgI a pu être utilisé car ses deux électrons extérieurs ont la même configuration que les électrons extérieurs des niveaux du Ne* étudiés⁴⁹. En utilisant la spectroscopie par impact électronique, Wilden, Hicks *et al.* [37] ont observé, en examinant le spectre des électrons éjectés des états auto-ionisants, une structure à 41.9 eV qu'ils interprètent comme l'atome de configuration $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)3s^2(^3P)$. Cette attribution est confirmée par les calculs de Weiss [32], par les résultats de Bolduc *et al.* [14, 21] et par ceux de Grissom et Garrett [32].

Les calculs de Langlois et Sichel [38] effectués selon le modèle du coeur gelé avec superposition de configuration sont en relativement bon accord avec les diverses expériences effectuées. Ils ont calculé le niveau $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)3s^2(^3P)$ à une énergie de (42.171 ± 0.969) eV. Toutefois, on remarquera que l'incertitude d'à peu près 1 Volt est considérable.

⁴⁹ Aussi, dans les deux cas, la couche inférieure, qui est celle en 2p est "fermée". Dans les deux cas, on a un nombre pair d'électrons: quatre pour le néon et six pour le magnésium [14].

Tableau 14

Auteurs	Position de la structure $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)3s^2(^3P)$ obtenue expérimentalement	Position de la structure $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)3s^2(^3P)$ obtenue théoriquement
Bolduc et Marmet (1973) [21]	42.22 eV	
Bolduc, Quéméner <i>et al.</i> (1972) [14]	42.040 eV	
Grissom, Garrett <i>et al.</i> (1969) [32]	42.10 ± 0.10 eV	
Langlois et Sichel (1980) [38]		42.171±0.969 eV
Østgaard Olsen et Andersen (1977) [33]	41.94 eV	
Sanche et Schultz (1972) [31]	42.000 eV	
Spence (1981) [35]	41.900 eV	
Veillette et Marchand (1976) [36]	42.200 eV	
Wilden, Hicks <i>et al.</i> (1977) [37]	41.9 eV	

Tableau des différentes valeurs d'énergie obtenues pour le niveau

$1s^2 2s^2 2p^4(^3P)3s^2(^3P)$ dans la littérature.

ii) Ions négatifs

D'autres auteurs⁵⁰ [26, 39] ont identifié des ions négatifs du type $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)[3s^2 3p(^2P)]$ dans la zone où est la première structure observée.

À l'aide de spectroscopie par détection de métastables, Dassen, Gomez *et al.* [26] ont interprété, après comparaisons avec les résultats de Spence [39], l'ion négatif doublement excité de configuration $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)[3s^2 3p(^2P)]$. Spence [39] utilisant une nouvelle technique afin de mettre en évidence les profils d'ions négatifs provenant de spectres obtenus par impact électronique, a vu l'état $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)[3s^2 3p(^2P)]$ du Ne^- . Toutefois, les désignations de ces auteurs sont incomplètes car ils n'ont pas tenu compte du couplage entre le coeur en $2p^4(^3P)$ et l'électron extérieur $3p(^2P)$.

⁵⁰ Dassen, Gomez *et al.*, ainsi que Spence.

Tableau 15

Auteurs	Position de la structure $1s^2 2s^2 2p^4 (^3P) [3s^2 3p (^2P)]$
Dassen, Gomez <i>et al.</i> (1983) [26]	42.110
Spence (1980) [39]	42.080

Tableau des différentes valeurs d'énergie pour le niveau $1s^2 2s^2 2p^4 (^3P) [3s^2 3p (^2P)]$

dans la littérature.

III. Analyse de nos résultats expérimentaux.

Notre première hypothèse est que ces six structures⁵¹ représentent six ions négatifs $(1s^2 2s^2 2p^4 (^3P) [3s^2 3p (^2P)] (^{2,4}S, P, D))$ associés au neutre $1s^2 2s^2 2p^4 (^3P) 3s^2$. Pour vérifier cette hypothèse, comparons l'écart entre les différents niveaux en $1s^2 2s^2 2p^4 (^3P) [3p (^2P)] (^{2,4}S, P, D)$ de la série isoélectronique du NeII et leur limite de série en $1s^2 2s^2 2p^4 (^3P)$ dans le cas du F, Ne⁺, Na⁺⁺ et Mg⁺⁺⁺. L'énergie mesurée⁵²

⁵¹ Voir la Figure 8 et le tableau 13.

⁵² C'est-à-dire:

$$El_{3p} = E_{2p^4(^3P)} - E_{2p^4 3p(^nL)} \quad (38a)$$

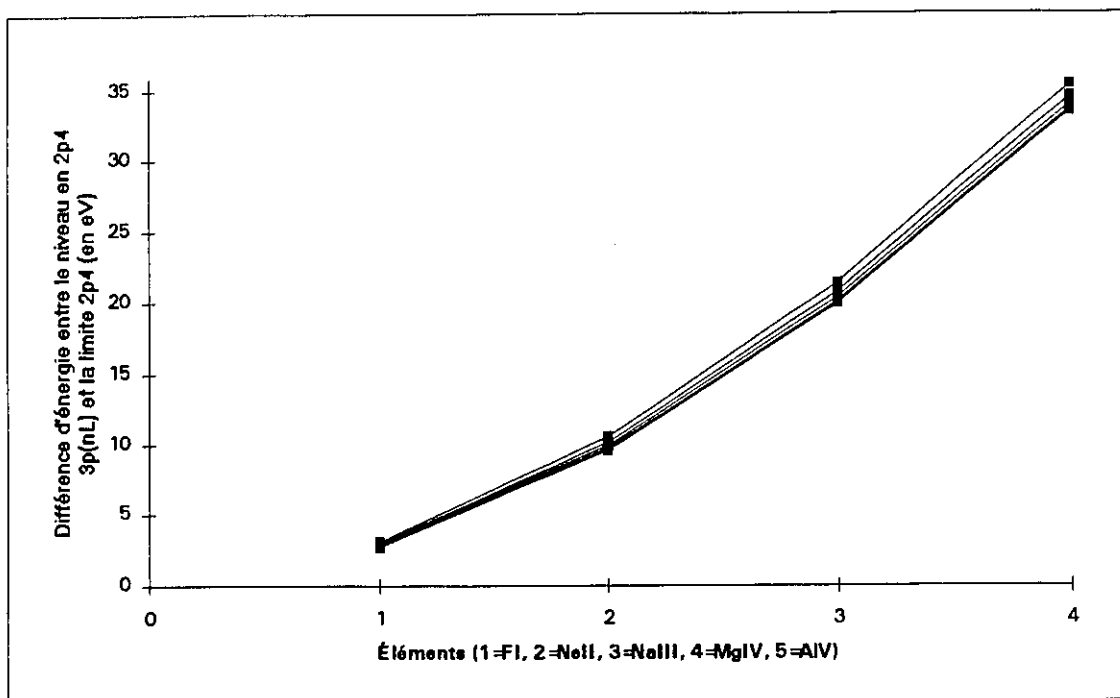
pour chaque configuration du $1s^2 2s^2 2p^4 ({}^3P)[3p]$ est obtenue à partir des données spectroscopiques et conduisent aux valeurs suivantes:

Tableau 16

$[3p]$	FI (en eV)	NeII (en eV)	NaIII (en eV)	MgIV (en eV)
4P	3.066	10.532	21.327	35.417
4D	2.920	10.145	20.691	34.531
2D	2.854	9.929	20.311	33.986
4S	2.773	9.739	19.979	33.536
2S	2.770	9.719	20.041	33.691
2P	2.698	9.561	19.845	33.502

Tableau de l'énergie de liaison (en eV) de l'électron 3p des éléments voisins du néon dans la série isoélectronique du FI.

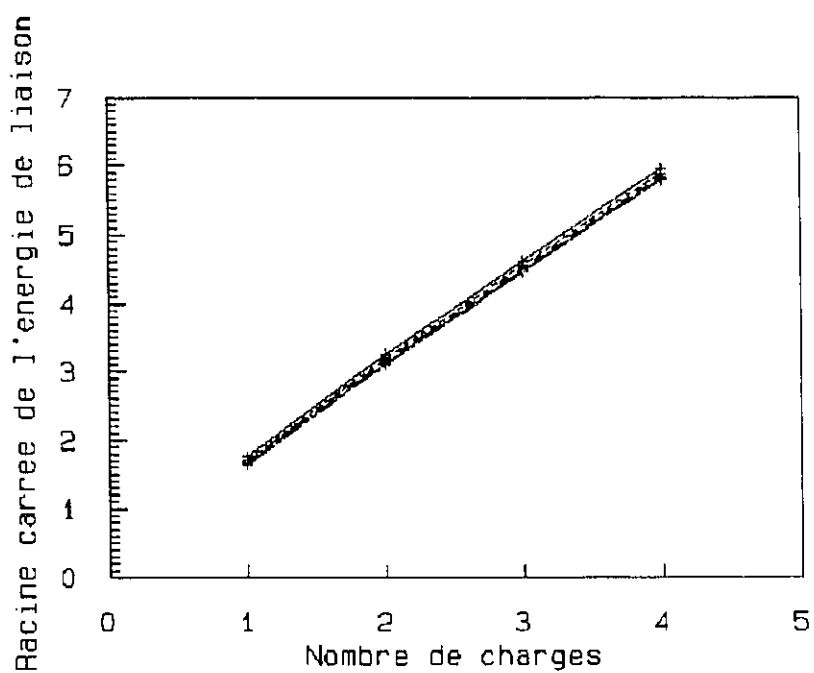
Les valeurs du tableau précédent peuvent être mises en graphique (figure suivante) afin de montrer les régularités en fonction de la charge électrique.

Figure 10⁵³

Graphique de la différence d'énergie entre le niveau en $2p^4 3p(^nL)$ et la limite en $2p^4$ (en eV) en fonction des éléments iso-électroniques de la série du FI.

Le graphique 9 présente les valeurs des énergies du tableau 15 en fonction de la charge de la particule considérée. Nous trouvons des écarts d'énergie formant approximativement une fonction quadratique en fonction de la charge. Pour faciliter l'extrapolation de cette courbe pour le cas du zéro charge qui nous intéresse, nous traçons le graphique 10 présentant la racine carrée de l'écart en fonction de la charge.

⁵³ L'aspect multiple de la droite de ce graphique vient du fait qu'elle est en fait la superposition de 6 relations, une par multiplicité possible.

Figure 11⁵⁴

Graphique de la racine carrée de l'énergie de liaison en fonction du nombre de charges vues par l'électron 3p.

Si on extrapole mathématiquement ce graphique pour obtenir les valeurs pour un atome neutre⁵⁵ que voit l'électron 3p, on obtient les valeurs suivantes:

⁵⁴ Les lignes multiples sur ce graphique viennent de la superposition des 6 configurations possibles.

⁵⁵ Comme dans le cas du Ne⁻.

Tableau 17

$[3p]$	Affinité électronique des différentes multiplicités du Ne^- . ⁵⁶ (en eV) $\pm 0.06\%$ ⁵⁷
4P	0.158
4D	0.132
2D	0.123
4S	0.114
2S	0.103
2P	0.087

Tableau des valeurs extrapolées pour zéro charge pour trouver les différentes affinités électroniques des différentes configurations du Ne^- .

Nous voyons sur la figure précédente que l'extrapolation vers la charge zéro qui nous intéresse ici est beaucoup plus facile puisque les valeurs expérimentales disponibles se trouvent situées sur une ligne droite. On constate alors que les valeurs que l'on peut prédire par extrapolation pour une charge zéro est près de zéro, c'est-à-dire ≈ 0.1 eV. Puisque la valeur mesurée est incompatible avec l'hypothèse présentée, on en conclut que l'hypothèse n'est pas valable.

⁵⁶ Il est à noter qu'ici le signe positif des valeurs obtenues veut dire que l'ion négatif est situé sous son parent neutre. Ceci est dû au fait que la différence prise au tableau 15 a été calculée comme suit:

$$EI_{3p} = E_{2p^4(3P)} - E_{2p^43p(nL)} \quad (38a)$$

⁵⁷ Cette erreur vient de l'extrapolation que l'on a faite afin d'obtenir ces valeurs.

Toutefois, si on regarde l'aspect du premier pic de notre spectre, on constate que sa largeur à mi-hauteur est *grosso modo* d'environ 0.14 eV. On peut donc croire que ce pic de forte largeur et amplitude pourrait être causé par ces six ions négatifs: $1s^2 2s^2 2p^4 (^3P)[3s^2 3p(^2P)](^2,4S, P, D)$. Ceci est d'autant plus plausible que l'amplitude des ions négatifs est toujours dominante [1] avec l'utilisation de notre technique. Enfin les six niveaux semblent à peu près superposés suite à notre extrapolation.

Par comparaison avec les divers résultats rapportés, on croit que le pic ayant la plus haute intensité, dont le maximum est situé à 42.195 eV, est principalement dû à l'ion négatif $1s^2 2s^2 2p^4 (^3P)[3s^2 3p]$ étant donné que les structures produites par les ions négatifs sont normalement beaucoup plus intenses que les neutres. Mais alors, comment expliquer les cinq pics à la droite de notre spectre? Si le pic A est l'ion négatif, alors les cinq pics de droite ne peuvent pas représenter des ions négatifs puisque les ions négatifs prédits sont au dessous du niveau $1s^2 2s^2 2p^4 (^3P)3s^2$.

On est toujours sans explication concernant les cinq structures observées à la droite de notre spectre. Cependant, on rapporte dans la littérature [40-43] qu'il existe des résultats expérimentaux qui ont peut-être une équivalence avec les structures appelées "shape resonance". Les "shape resonance" n'ont jamais reçu d'interprétation précise sur les mécanismes physiques mis en jeu. Ils résultent uniquement de considérations mathématiques, ce qui a conduit à les appeler par une expression vague de "niveaux virtuels". Face à une situation aussi vague, nous proposons que les niveaux d'énergie au-dessus de l'atome-parent excité soient causés par une structure bien définie, et ayant une

origine classique. Comme ces interactions n'ont jamais été interprétées préalablement comme responsables des structures observées, nous allons les rappeler brièvement.

Nous allons montrer que d'une façon semi-classique, nous pouvons démontrer que les électrons faisant des collisions avec des atomes peuvent avoir un séjour prolongé à certaines énergies spécifiques et ainsi être responsables des structures multiples observées au-dessus de 42.2 eV⁵⁸.

Nous savons que les atomes, comme le néon, sont entourés d'un nuage d'électrons dont la densité diminue en s'éloignant du noyau central. Dans le néon neutre, la charge du noyau central⁵⁹ est complètement neutralisée lorsqu'observée à grande distance, ce qui fait qu'il n'y a pas de champ électrique à grande distance. On pourrait dire que la charge du noyau central est complètement blindée par les électrons. En considérant des distances de plus en plus petites par rapport au noyau, l'on peut comprendre que l'on progresse à l'intérieur de ce nuage électronique décrit par la fonction d'onde des électrons de l'atome. Ainsi le champ électrique efficace autour d'un atome de néon passe progressivement de zéro à une grande distance, jusqu'à un champ équivalent aux dix charges électriques tout près du noyau du néon. Étant donné que la distribution du nuage électronique autour de l'atome de néon est continue, tel qu'observée et calculée en mécanique quantique, la charge électronique efficace dans l'atome de néon passera progressivement de dix charges électroniques jusqu'à zéro lorsque le point considéré est à une distance du noyau de l'atome passant de zéro vers l'infini. L'on trouve donc, qu'à cause de la distribution continue du nuage électronique autour du noyau nucléaire, nous n'avons plus le cas classique d'un champ électrique diminuant en $\frac{1}{r^2}$ entourant une charge concentrée en un

⁵⁸ C'est-à-dire les structures B à F de la figure.7.

⁵⁹ Ici on parle du noyau nucléaire.

point. Au contraire, dû à la distribution continue de la charge contenue dans le nuage électronique, le champ électrique autour du noyau diminuera avec un exposant variant de façon continue.

Une telle situation est rarement calculée semi-classiquement et conduit à des solutions classiques nouvelles. Évidemment, ces états sont en plus quantifiés mais nous n'en tiendrons pas compte immédiatement. C'est cette situation que nous allons présenter de façon semi-classique étant donné son analogie avec l'expérience de collisions d'électrons sur le néon de cette thèse.

Considérons la collision entre un électron et un atome dans le référentiel du centre de masse. L'électron est incident à grande distance et a une vitesse initiale v_0 de la droite vers la gauche.:

Figure 12

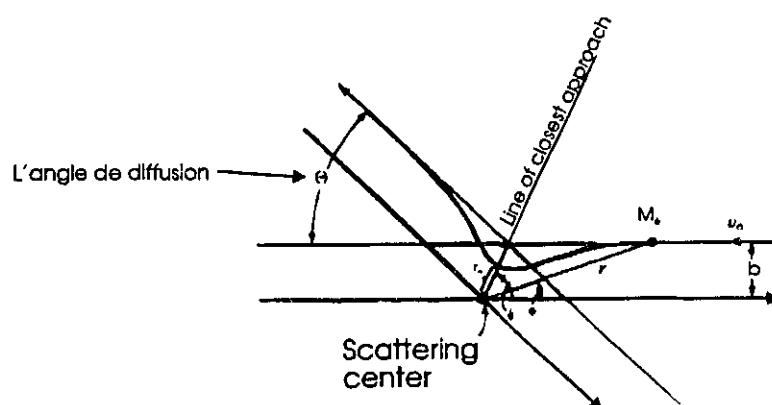


Schéma d'une collision entre un électron et un atome, dans le référentiel du centre de masse. [44]

Comme l'énergie et le moment angulaire sont conservés, on peut écrire:

$$\frac{1}{2} m_e v_{0e}^2 = \frac{1}{2} m_e (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\phi}^2) + V(r) \quad (39)$$

$$J = m_e b v_{0e} = m_e r^2 \dot{\phi} \quad (40)$$

où:

- m_e est la masse de l'électron.
- v_{0e} est la vitesse initiale de l'électron.
- \dot{r} est la vitesse radiale de l'électron.
- r est la coordonnée radiale de l'électron.
- $\dot{\phi}$ est la vitesse angulaire de l'électron.
- J est le moment angulaire total du système.
- b est le paramètre d'impact.

On peut cependant simplifier ce problème si nous substituons la valeur de la vitesse angulaire de l'équation (41), dans l'équation (40), nous trouvons une expression donnant la valeur de r en fonction du temps.

$$\frac{1}{2} m_e v_{0e}^2 = \frac{1}{2} m_e \dot{r}^2 + V_{eff}(r) \quad (41)$$

dans lequel $V_{eff}(r)$ est le potentiel efficace défini par:

$$V_{eff}(r) = V(r) + \frac{m_e v_e^2 b^2}{2r^2} \quad (42)$$

L'équation numéro (42) ne contient pas explicitement le terme donnant l'angle entre l'atome et l'électron. Il peut être gardé comme décrivant le mouvement dans une dimension le long des axes de r d'un électron de masse m_e avec une énergie totale $\frac{1}{2}m_e v_{0e}^2$. Dans le champ de potentiel efficace décrit par l'expression $V_{\text{eff}}(r)$, le second

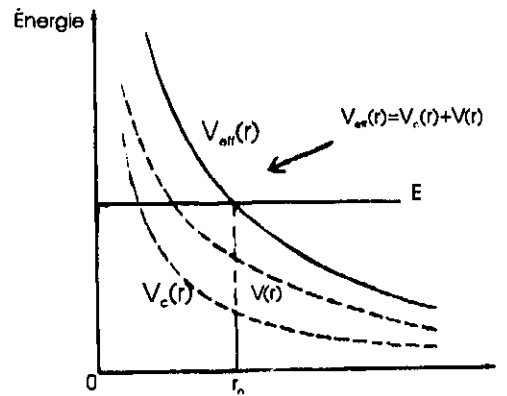
terme à droite de l'expression (43) est égal à $\frac{J^2}{2m_e r^2}$ et représente l'énergie cinétique de

rotation du système. Notons que ce terme décroît d'une façon positive et monotone en fonction de r . Il peut alors être considéré comme la source d'une force fictive dirigée vers l'extérieur, c'est-à-dire une sorte de force centrifuge et c'est pour cette raison que le second terme à droite est appelé "potentiel centrifuge" et est représenté par le symbole V_c ,

$$\text{donc } V_c = \frac{M_e v_{0e}^2 b^2}{2r^2} \quad [44].$$

La solution de l'équation (42) existe toujours lorsque nous avons une force répulsive, mais la solution n'existe pas toujours pour un potentiel attractif de la forme $V(r)$ approximativement égal à $-\frac{1}{r^n}$ si n est égal ou plus grand que 2. Ce cas ressemble à celui considéré ici alors qu'un électron pénètre plus ou moins dans les couches électroniques de l'atome. Cet énoncé est facilement compris en terme de mouvement efficace à une dimension et du potentiel centrifuge. Considérons le mouvement dans un champ de potentiel répulsif typique tel que décrit par la fonction de potentiel $V(r)$ dans la figure 12.

Figure 13



Fonctions de potentiels: Centrifuge, effectif et en $1/r$. [44]

Si nous désirons analyser le problème de dispersion dans une seule dimension r , nous devons ajouter à un potentiel réel $V(r)$, un potentiel fictif centrifuge $V_c(r)$ donné en terme de moment angulaire J du système par l'équation:

$$V_c(r) = \frac{J^2}{2m_e r^2} \quad (43)$$

Ce potentiel est mis en graphique à la figure précédente (figure 12) pour une valeur arbitraire de J différente de 0. Le potentiel efficace total $V_{\text{eff}}(r)$ égale $V(r) + V_c(r)$ est également montré sur la même figure. Il est évident dans ce cas que l'influence significative du potentiel centrifuge sera tout simplement d'augmenter le potentiel réel. Si

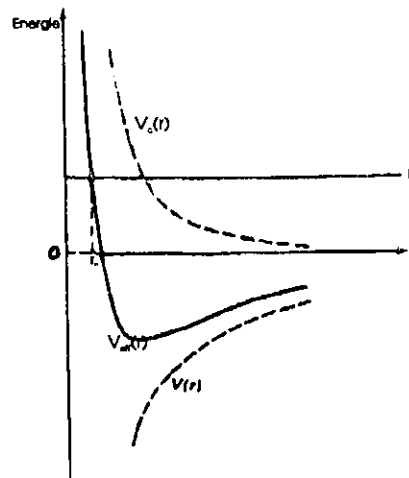
⁶⁰ Car $J = m_e b V_0$ (42a)

et $V_c(r) = \frac{m_e V_0^2 b^2}{2r^2}$ (42b)

$V(r)$ diminue d'une façon monotone en augmentant r , le potentiel efficace le fera de la même façon indépendamment de la valeur du moment angulaire. Ainsi, dans cette formulation à une dimension du problème de dispersion d'un électron d'énergie totale E , elle approchera du centre de dispersion et sera réfléchi à une distance minimum r_a donnée par l'intersection de la ligne horizontale à la hauteur E et de la courbe $V_{eff}(r)$. La vitesse radiale $\frac{dr}{dt}$ en toute partie de la trajectoire est donnée par l'équation:

$$E = \frac{1}{2} m_e \dot{r}^2 + V_{eff}(r) \quad (44)$$

Figure 14

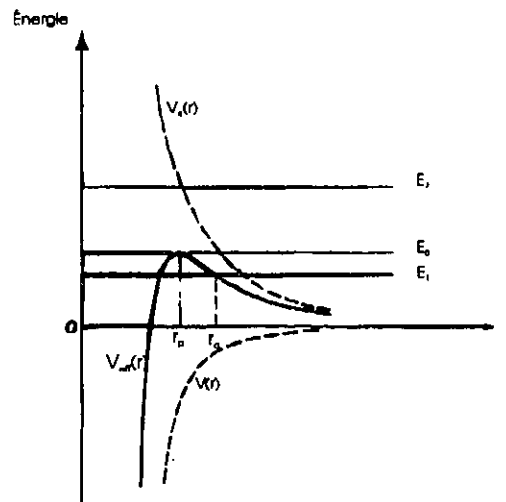


Graphique du potentiel efficace résultant de la superposition du potentiel centrifuge et d'un potentiel en $1/r$. [44]

Dans cette dernière équation, le mouvement angulaire doit évidemment être tel que la quantité de mouvement angulaire est conservée lors de la dispersion.

La forme de la courbe du potentiel efficace est tout à fait différente si un potentiel attractif est utilisé. Toutefois si $V(r)$ est approximativement égal à $-\frac{1}{r^n}$ avec n plus petit que 2, le potentiel efficace décroît encore d'une façon monotone en augmentant la valeur de r pour une valeur de r suffisamment petite et le mouvement dans une dimension est semblable à celui dans un cas répulsif par rapport à la déflexion le long de l'axe r à une distance finie de l'approche minimum. Cette situation est illustrée dans la figure 13, où on a supposé un potentiel d'attraction variant comme l'inverse de la première puissance. Des orbites stables sont possibles seulement si n est plus petit ou égal à 2 et pour des valeurs E situées dans le puits.

Figure 15



Graphique du potentiel efficace résultant de la superposition du potentiel centrifuge et d'un potentiel en $1/r^3$. [44]

Si, d'autre part, le potentiel attractif diminue avec un exposant plus petit que 2^{61} , le potentiel d'attraction doit dominer le potentiel centrifuge pour des petites valeurs de r et le potentiel efficace a la forme indiquée sur la figure 14 (c'est-à-dire a des valeurs négatives si r est petit).

Sur la figure 14 page précédente, nous avons un potentiel d'attraction comme l'inverse de la troisième puissance. Considérons le mouvement pour différentes valeurs de l'énergie totale. Un électron ayant une énergie E_1 plus petite que E_0 provenant d'une distance r très grande et se déplaçant vers le centre d'attraction sera évidemment réfléchi à une distance $r = r_a$ par la barrière de potentiel.

Si toutefois l'énergie totale est E_2 plus grande que E_0 , l'électron sera capable de passer au-delà de la barrière de potentiel virtuelle que constitue $V_{\text{eff}}(r)$ et pourra ainsi effectuer quelques orbites avant de pouvoir s'échapper par la suite. Il sera alors influencé par une force de répulsion seulement pour r plus grand que r_p et par la suite sentira une force d'attraction alors que sa distance radiale du centre diminuera. Si enfin E est plus grand que E_0 , l'électron en réalité passera à travers le centre d'attraction qui est supposé être un point infiniment petit dans le modèle ici considéré.

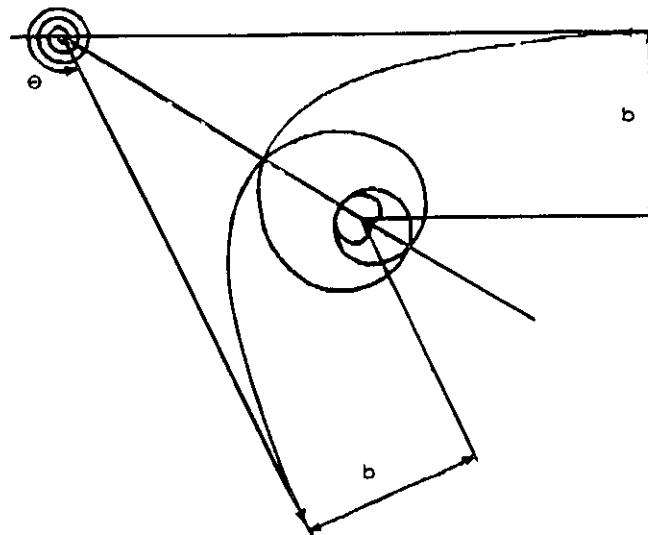
Une situation particulièrement intéressante se présente lorsque l'énergie dépasse tout juste E_0 qui est la valeur de l'énergie maximum sur la courbe de potentiel. Dans ce cas, l'électron passera un temps considérable à une distance radiale près de ce pic dans laquelle la vitesse radiale est petite par hypothèse tout en décrivant des spirales autour de l'atome vers l'intérieur du champ de force. L'électron est alors dit en orbite autour du

⁶¹ C'est-à-dire si l'on a un potentiel en $-\frac{1}{r^{n-2}}$.

centre de dispersion. Le mouvement angulaire alors augmente pendant que la valeur de r diminue dans le but de conserver la quantité de mouvement angulaire. Dans ce cas, un très grand nombre de révolutions peuvent être décrites. Cette orbite est toutefois instable contrairement à celle obtenue lorsque n est plus petit que 2. Dans certaines conditions, l'angle de dispersion peut s'approcher de l'infini [45] et l'électron passera un temps considérable dans le champ de la particule.

La figure 15, illustre une telle trajectoire dans laquelle la valeur de la distance minimum intervient lorsque l'angle de rotation est entre 6π et 7π .

Figure 16



Trajectoire dans laquelle la valeur de la distance minimum intervient lorsque l'angle de rotation est entre 6π et 7π . [44]

Dans la figure 15, on a supposé un potentiel d'attraction à grande distance de la forme $1/r^n$ avec $n < 2$. Lorsque r devient plus petit, on suppose que l'on a alors une force effective de répulsion (avec $n \geq 2$). Le calcul de la trajectoire de l'électron montre un point d'inflexion à une valeur petite de r lorsque l'électron pénètre dans la région répulsive. On s'aperçoit alors que l'électron séjourne durant un temps considérable autour du champ de force. Ce séjour prolongé est équivalent à celui que l'on retrouve dans le cas des états discrets ayant une courte vie moyenne.

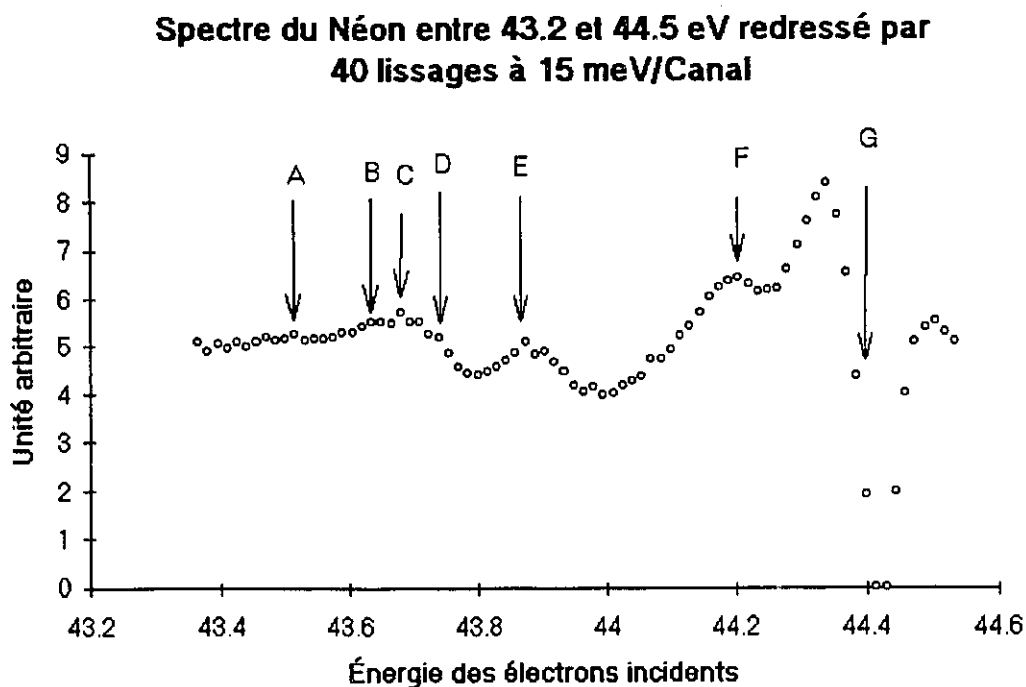
Ces dernières considérations nous laissent la possibilité de formation de complexes instables. En effet, il existe des états formés lors de collisions et la nature de ces particules est extrêmement variée et nous montre des états électroniques qui ne semblent pas être nécessairement liés aux énergies quantiques telles que trouvées d'une façon conventionnelle. On peut donc conclure que les cinq états observés au-dessus de l'état $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)3s^2$ sont causés par des interactions semi-classiques avec de très grands angles de diffusion permettant un séjour prolongé⁶² des électrons dans l'atome. De telles interactions prolongées produisent les faibles structures au-dessus de l'état $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)3s^2$ qui sont formées par la diffusion à grand angle d'un électron dans l'atome de Néon.

⁶² De l'ordre de 10^{-12} secondes

Section 2: Régions de 43.2 eV à 44.5 eV

La figure suivante montre une courbe d'électro-ionisation du néon à des énergies comprises entre 43.2 et 44.5 eV. Celle-ci a été calibrée par rapport à une courbe de Réjean Dutil dans le même domaine d'énergie. Sept structures désignées par les lettres A à G sont observées clairement sur la courbe d'électro-ionisation que l'on a redressée par 40 lissages à une échelle de 15 meV/Canal.

Figure 17



Graphique des structures observées entre 43.2 et 44.5 eV dans la courbe d'électro-ionisation du néon après 40 redressements par lissage. Le nombre d'ions par canal est de 40 milliards.

I. Rappel des résultats dans la littérature:

Contrairement à la zone que nous avons précédemment étudiée, cette zone contient plusieurs différents types de niveaux, tels que l'ont rapportés différents auteurs dans la littérature [14, 26, 31, 33, 35, 37, 38, 46, 47, 48] (voir tableaux 14 et 15).

Nous diviserons la revue de ces niveaux en deux grandes catégories:

- Les niveaux neutres
- Les ions négatifs

i) Les niveaux neutres

Huard, Marmet *et al.* [47] ont observé par une méthode de spectroscopie électronique une structure à 43.6 eV qu'ils interprètent comme étant le niveau métastable $1s^2 2s 2p^6 3s(^1S)$. Ce résultat est en accord avec ceux de Veillette et Marchand [36] qui observent cet état à 43.7 eV. Il est aussi en accord avec les observations de Edwards et Rudd [49] et Bergmark, Spohr *et al.* [50] à moins de 120 meV près.

Sanche et Schultz [31] ont eux aussi observé cet état à 43.64 eV par une méthode de transmission. Ce résultat est en assez bon accord avec les calculs théoriques de Langlois [27] qui prédit ce niveau à 43.87 eV. Ils ont aussi observé dans ce même voisinage une structure sise à 43.28 eV qu'ils interprètent comme étant $1s^2 2s 2p^6 3s(^3S)$. Ceci est aussi en assez bon accord avec les calculs théoriques de Langlois [27] qui prédit cet état à 43.51 eV. Si on examine l'écart entre les prédictions de Langlois [27] et les

observations de Sanche et Schultz [31], on constate que dans les deux cas⁶³ il est de 0.23 eV. Il est donc possible que l'échelle d'énergie de Langlois [27] soit décalée de 0.23 eV par rapport aux observations.

Bolduc, Quéméner *et al.* [14] ont observé une structure à 43.95 eV qu'ils ont par la suite interprétée comme étant le neutre $1s^2 2s^2 2p(^3P)[3s3p(^3P)](^3P)$. Ils ont basé leur prédiction sur une approximation, basée sur le magnésium, de la position en énergie du niveau qui le situe à 43.90 eV. Toutefois, comme nous l'avons mentionnée auparavant⁶⁴, cette extrapolation n'est pas toujours précise.

Cette énergie à laquelle ils ont assigné l'état $1s^2 2s^2 2p(^3P)[3s3p(^3P)](^3P)$ est relativement élevée comparativement aux résultats de Østgaard Olsen, Andersen *et al.* [33] ainsi qu'à ceux de Spence [35, 39]. Ces derniers⁶⁵ observent cette structure respectivement à 44.49 eV et 44.45 eV. On doit cependant ajouter que Spence [35, 39] n'est pas sûr de l'interprétation de cette structure. Il se pourrait aussi qu'elle corresponde à $1s^2 2s^2 2p(^3P)[3s3p(^3P)](^3D)$.

On peut aussi noter que le niveau $1s^2 2s^2 2p(^3P)[3s3p(^3P)](^5D)$ observé par Bolduc, Quéméner *et al.* [14] est en parfait accord avec ce qui a été prédit par Langlois [27]. Toutefois, comme les calculs de Langlois [27] sont précis à ± 0.1 eV, on ne peut conclure formellement que l'interprétation de Bolduc, Quéméner *et al.* [14] est définitive.

⁶³ (^1S) et (^3S)

⁶⁴ Chapitre 2, Section 3.I.

⁶⁵ Ostgaard Olsen et Spence.

Tableau numéro 19:

	Bergmark, Spohr <i>et al.</i> (1969) [50]	Hibbert, Le Dourneuf <i>et al.</i> ⁶⁷ (1993) [25]	Huard (1978) [47]	Langlois ⁶⁸ (1978) [27]	Sanche, Schultz (1972) [31]	Veillette, Marchand (1976) [36]
* = $1s^2 2s 2p^6$						
** = $1s^2 2s^2 2p^4 ({}^3P)$		44.717		43.51±0.1	43.28	
$3s({}^3S)$						
* $3s({}^1S)$	43.65	44.676	43.6 ±0.1	43.87±0.1	43.64	43.7
** [$3s3p({}^3P)$](5P)				43.69±0.1		
** [$3s3p({}^3P)$](5D)				43.95±0.1		
** [$3s3p({}^3P)$](5S)				44.28±0.1		
** $3s3p$					44.3	
** [$3s3p({}^3P)$](3D)			44.4 ± 0.1			44.35

Tableau des énergies des différents niveaux du Ne** rapportées dans la littérature pour l'intervalle d'énergie compris entre 43.3 eV et

44.5 eV

⁶⁷ Calculs théoriques.

⁶⁸ Calculs théoriques.

Si l'on compare les résultats des deux auteurs ayant prédit théoriquement [25, 27] la valeur des niveaux $1s^2 2s^2 2p^6 3s(1,3S)$, on trouve que leurs calculs sont complètement divergents et incompatibles. En effet, Langlois [27] trouve que $1s^2 2s^2 2p^6 3s(3S)$ est à 43.51 ± 0.1 eV (voir le tableau 15) alors que Hibbert, Le Dourneuf *et al.* [25] trouvent que ce niveau est à 44.717 eV. La différence entre les deux calculs est de 1.207 eV. Pour ce qui est du niveau $1s^2 2s^2 2p^6 3s(1S)$, Langlois [27] le prédit à 43.87 ± 0.1 eV. et Hibbert, Le Dourneuf *et al.* [25] le prédisent à 44.676 eV. Ce qui fait une différence de 0.806 eV. Outre le fait que les différences d'énergie entre ces deux interprétations soient énormes, on s'étonne qu'ils aient donné une multiplicité $(1,3S)$ différente. Comme la règle de Hund⁶⁹ prédit [52] que le $(3S)$ sera plus bas en énergie que le $(1S)$, on pourrait croire que les résultats de Hibbert, Le Dourneuf *et al.* [25] sont douteux. Un autre élément appuyant ce jugement est le fait qu'aucun résultat expérimental, à notre connaissance, ne vient confirmer leurs résultats. Tous les résultats que nous avons [31, 47] viennent plutôt appuyer les calculs de Langlois [27].

ii) Les ions négatifs

Trois différents types d'ions négatifs sont rapportés dans la littérature dans cet intervalle d'énergie:

- $1s^2 2s^2 2p^6(2S)3s3p$
- $1s^2 2s^2 2p^4(3P)3s3p^2$
- $1s^2 2s^2 2p^4(1D)3s^2 3p$

⁶⁹ La règle de Hund précise que le niveau d'énergie minimal d'une configuration donnée possède la plus grande valeur de S possible; et pour cette valeur de S la plus grande valeur de L possible.

L'ion négatif $1s^2 2s^2 2p^4 (^3P) 3s 3p^2$ a été rapporté par 5 équipes⁷⁰. Bolduc, Quéméner *et al.* [14] ont assigné cet état à une structure qu'ils observent à 43.72 eV.

Dassen, Gomez *et al.* [26], quant à eux, ont observé cet ion négatif à 43.67 eV. Cette mesure est cohérente avec ce que Bolduc, Quéméner *et al.* [14] et avec ce que Wilden, Hicks *et al.* [37] ont observé. Dans leurs communications originales, Dassen, Gomez *et al.* [26] comparent leurs données avec celles de Huard, Marmet *et al.* [47] et avec celles de Veillette et Marchand. Ils tirent deux conclusions de cette comparaison:

- La résolution qu'ils [26] mentionnent est de beaucoup supérieure à celle du travail de précurseur de Huard, Marmet *et al.* [47]. Cependant, il existe une bonne correspondance entre leurs données et celles de Huard, Marmet *et al.* [47] même si ils voient la structure plus basse que Dassen, Gomez *et al.* [26]. Ceci peut être attribué au manque de résolution de Huard, Marmet *et al.* [47].
- Il existe, en énergie, une correspondance d'un à un, au niveau des structures, qu'eux [26] et Veillette et Marchand [36] observent. De cela, ils [26] concluent que Veillette et Marchand [36] ont sous-estimé le nombre d'ions négatifs présents dans leur spectre.

Spence [25, 39] a observé une structure à 44.05 eV qu'il interprète lui aussi comme étant $1s^2 2s^2 2p^4 (^3P) 3s 3p^2$. Cette interprétation, est compatible avec les observations de Roy, Delage *et al.* [51] et celles de Veillette et Marchand [36].

⁷⁰ Voir tableau 14.

Le niveau négatif $1s^2 2s^2 2p^4(^1D)3s^2 3p$ a été observé par deux équipes. Bolduc, Quéméner *et al.* [14], à l'aide de l'impact électronique, l'ont observé à 45.41 eV tandis que Dassen, Gomez *et al.* [26] l'ont observé à 44.36 eV. On constate aisément que ces résultats divergent de plus d'un Volt.

Cependant, nous considérons ces résultats comme douteux pour la raison suivante: L'écart entre les niveaux en $2p^4(^3P)$, $2p^4(^1D)$ et $2p^4(^1S)$ est à peu près constant au fur et à mesure que l'on ajoute des électrons [2, 3, 14]⁷¹. Donc l'écart entre $2p^4(^3P)3s^2 3p$ et $2p^4(^1D)3s^2 3p$ devrait être le même⁷² que celui entre $2p^4(^3P)$ et

⁷¹ Si on compare les écarts en énergie entre $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)$ et $1s^2 2s^2 2p^4(^1D)$, on trouve 3.20 eV et entre $1s^2 2s^2 2p^4(^1D)$ et $1s^2 2s^2 2p^4(^1S)$, on trouve 3.71 eV. Ajoutons maintenant un électron 3s. L'écart entre $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)3s$ et $1s^2 2s^2 2p^4(^1D)3s$ sera de 3.28 eV et celui entre $1s^2 2s^2 2p^4(^1D)$ et $1s^2 2s^2 2p^4(^1S)$ sera de 3.75 eV.

On constate donc que la différence entre les configurations en (^3P) et celles en (^1D) et la différence entre la configuration en (^1D) et celle en (^1S) est à peu près constante

De plus, Bolduc, Quéméner *et al.* [14] ont trouvé que cela était encore valide si on ajoute un second électron 3s. En effet, l'écart entre $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)3s^2$ et $1s^2 2s^2 2p^4(^1D)3s^2$ est de 3.47 eV et celui entre $1s^2 2s^2 2p^4(^1D)3s^2$ et $1s^2 2s^2 2p^4(^1S)3s^2$ est de 3.63 eV.

Considérant ceci, on a fait l'hypothèse que cette régularité tenait encore après l'ajout d'un électron 3p.

⁷² Ici on prendra la valeur moyenne de l'énergie du niveau (^3P) afin de tenir compte du fait qu'il existe plusieurs multiplicités possibles pour chaque niveau.

$2p^4(^1D)$. Si on calcule l'écart entre la valeur moyenne de l'énergie de $2p^4(^3P)3s^23p$ et la valeur moyenne trouvée par les auteurs [14, 26]⁷³, on a:

$$\bar{E}_{(1D)3s^23p} - \bar{E}_{(^3P)[3s^23p(^2P)]} = \Delta E_{(1D)3s^23p-(^3P)3s^23p} \quad (45)$$

$$\Delta E_{(1D)3s^23p-(^3P)3s^23p} = 44.885 - 42.583 = 2.302 \text{ eV} \quad (45a)$$

Cette valeur est bien inférieure à celle d'environ 3.20 eV [14] que l'on s'attendait à avoir. Même en examinant les différences des deux auteurs, individuellement, on trouve:

$$\Delta E_{3s^23p} (\text{Bolduc, Quéméner } et al.) = 2.827 \text{ eV} \quad (46)$$

$$\Delta E_{3s^23p} (\text{Dassen, Gomez } et al.) = 1.777 \text{ eV} \quad (46a)$$

Les écarts trouvés par ces deux auteurs sont bien trop bas. En vertu de ce que l'on a établi à la section 1.III du chapitre 3 de cette thèse, on devrait avoir pour le niveau $1s^22s^22p^4(^1D)[3s^23p(^2P)]$:

$$\bar{E}_{(1D)[3s^23p(^2P)]} \approx \bar{E}_{(^3P)[3s^23p(^2P)]} + \Delta E_{(1D)3s^2-(^3P)3s^2} \quad (47)$$

$$\bar{E}_{(1D)[3s^23p(^2P)]} \approx 42.583\text{eV} + 3.20\text{eV} \quad (47a)$$

$$\bar{E}_{(1D)[3s^23p(^2P)]} \approx 45.783 \text{ eV} \quad (47b)$$

⁷³ Bolduc, Quéméner *et al.* ainsi que Dassen, Gomez *et al.*

Le dernier ion négatif à l'étude dans cette section, soit $1s^2 2s 2p^6 ({}^2S) 3s 3p$, a été observé par trois équipes. Roy, Delage *et al.* [51] l'ont observé par le biais de la "differential excitation spectroscopy" à 43.67 eV. L'existence de cette structure a par la suite été confirmée par l'expérience de Wilden, Hicks *et al.* [37] qui l'ont observée à 43.68 eV et par celle de Spence [35] qui a détecté une structure à 43.69 eV.

Il est à noter que jusqu'ici, dû à la complexité des configurations électroniques aucun calcul théorique n'est disponible permettant de prédire la position des niveaux négatifs.

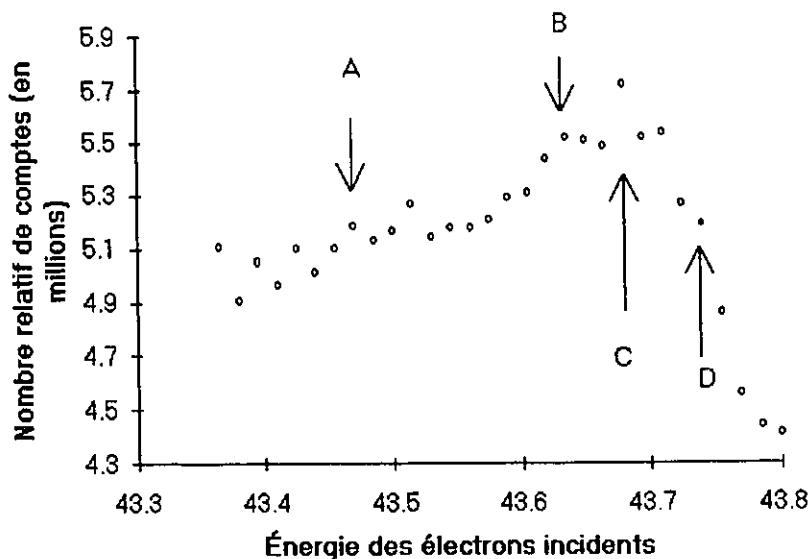
II. Analyse de nos résultats expérimentaux.

Nous avons attribué la première structure (A), observée à 43.50 eV, à l'état $1s^2 [2s ({}^2S) 2p^6 3s] ({}^3S)$. Ceci est justifié, d'une part par son aspect que l'on peut considérer comme similaire à un profil de niveau neutre avec $q \approx -1^{74}$, et d'autre part par le fait que sa position coïncide très bien avec celle prédite par Langlois [27].

⁷⁴ Voir Chapitre 1, section 6.II

Figure 18

**Spectre du Néon entre 43.2 et 44.5 eV
redressé par 40 lissages à 15meV/Canal**



Agrandissement pour l'intervalle d'énergie s'étendant entre 43.2 eV et 44.5, de la seconde zone.

La structure dénotée par (B) quant à elle, de par sa position, nous porte à croire que l'on fait face à un état neutre. Comme le neutre $1s^2[2s(^2S)2p^63s](^3S)$ a déjà été assigné et que la forme de (B) n'est pas similaire à celle de (A), on peut exclure que (B) peut être $1s^2[2s(^2S)2p^63s](^1S)$. Conséquemment, le plus bas neutre disponible est du type $1s^22s^22p^4(^3P)[3s3p(^3P)]$.

Si on regarde les calculs de Langlois [27] afin de connaître l'ordre des niveaux, on trouve que la multiplicité conduisant à l'énergie la plus basse est (^5P) . Le niveau (B) serait donc interprété comme étant $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)[3s3p(^3P)](^5P)$. Par contre, si on regarde les prédictions de position que l'on a faites au chapitre II⁷⁵, on suggérerait plutôt que cette structure serait le neutre $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)[3s3p(^3P)](^5S)$.

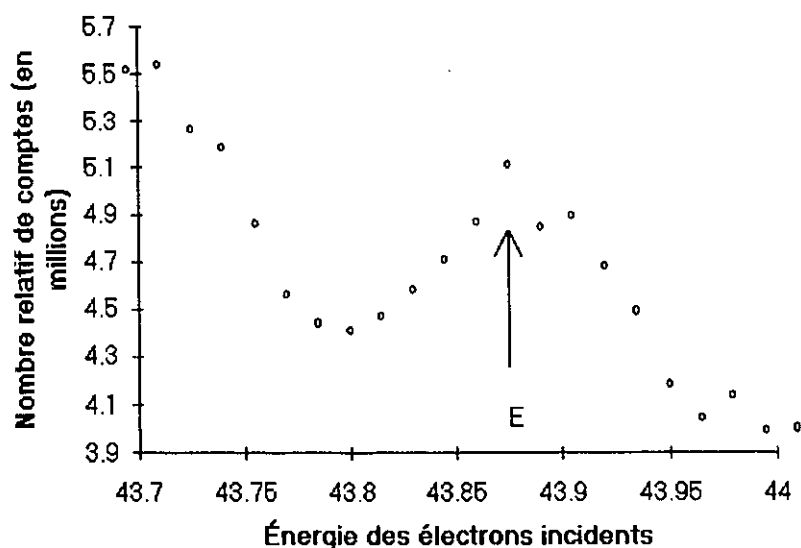
Vu que nos deux calculs de références comportent des erreurs appréciables, on conclura que cette structure peut être interprétée provisoirement comme $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)[3s3p(^3P)](^5S), (^5P) \text{ ou } (^5D)$ car dans les deux calculs examinés, l'hypothèse d'un état quintuplet est la plus plausible.

La structure suivante, dénotée par (C) dont le maximum est situé à 43.65 eV, correspond assez bien, tant au niveau de la forme que de l'énergie, avec le niveau $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)[3s3p(^3P)]$ observé par Dassen, Gomez *et al.* [26], Roy, Delage *et al.* [51], Spence [48] et Wilden, Hicks *et al.* [37]. Cette interprétation est justifiée par le fait que nous avons observé le neutre-parent $1s^2[2s(^2S)2p^6 3s](^3S)$ à 43.50 eV, c'est-à-dire plus haut que cet ion négatif. Comme cet ion négatif est le plus bas de ce type que nous observions, nous pouvons dire, à l'aide de la règle de Hund, que sa multiplicité sera (^4P) . La désignation complète de cet état sera donc $1s^2 2s(^2S)2p^6[3s3p(^3P)](^4P)$. À ce stade, on peut aussi affirmer que cet ion négatif a une affinité électronique de (0.24 ± 0.03) eV.

⁷⁵ À la section 4.

Figure 19

**Spectre du Néon entre 43.7 et 44.0 eV
redressé par 40 lissages à 15 meV/Canal**



Agrandissement, pour l'intervalle d'énergie s'étendant entre 43.7 eV et 44 eV, de la
seconde zone.

La structure située à 43.74 eV, dénotée par la lettre (D) est observée juste dans le flanc droit de la structure (C). Si on reporte cette structure sur un fond horizontal, on s'aperçoit que celle-ci a l'aspect d'un niveau neutre avec un facteur de forme faible. Si on regarde dans le tableau de nos prédictions⁷⁶ pour les niveaux du type $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)[3s3p(^3P)]$, on trouve que le niveau $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)[3s3p(^3P)](^5S)$ est en bon accord avec la position du maximum de la structure observée. Ceci tend aussi à confirmer l'hypothèse émise pour la structure (B) à l'effet que celle-ci soit un quintuplet.

⁷⁶ Voir tableau 12, Chapitre 2, section 6.

De plus, si l'on pose que la structure (D) est un (^5S) , on devra avoir que la structure (B) est un niveau en (^5D) qui est celui situé juste plus bas que le (^5S) . Nous interprétons la structure (B) comme étant la formation du Ne^{**} dans l'état $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)[3s3p(^3P)](^5D)$ et la structure (D) comme la formation de l'état neutre $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)[3s3p(^3P)](^5S)$.

La structure (E), figure précédente, sise à 43.86 eV semble être un ion négatif de par sa forme. Cette hypothèse n'est pas impossible parce que la zone que nous étudions comporte de très nombreux états neutres⁷⁷ et parce que notre expérience a comme caractéristique de rendre possible l'observation de niveaux négatifs.

⁷⁷ Auxquels seront conséquemment reliés nos ions négatifs.

Dans la zone que nous étudions, deux possibilités d'ions négatifs peuvent être attribuées à cette structure: $1s^2 2s(2S) 2p^6 3s^2(2S)$ et $1s^2 2s^2 2p^4(3P)[3s 3p^2(2,4S, P, D)](2,4,6,8P, D, F)$. Nous avons vu⁷⁸ que le sodium, que nous avons utilisé pour faire une comparaison, avait une affinité électronique de - 0.536 eV [53]. Si on considère que cet ion est associé au neutre $1s^2 2s(2S) 2p^6 3s(1S)$,⁷⁹ on aurait que son énergie serait à 43.354 eV, ce qui est évidemment beaucoup plus bas que la position de (E) qui est de 43.86 eV. Ceci nous laisse donc avec une seule possibilité, soit celle de l'ion négatif $1s^2 2s^2 2p^4(3P)[3s 3p^2(2,4S, P, D)](2,4,6,8P, D, F)$. Cette désignation est en fait la "forme générale" de l'ion. Il nous reste à spécifier le couplage exact entre les électrons $3s$ et $3p^2$ et entre le coeur en $(3P)$ et la couche extérieure en $[3s 3p^2(2S, 2,4P, 2D)]$.

Comme il s'agit du premier ion négatif de ce type que l'on observe dans cette région, il est évident que pour le couplage entre $3s$ et $3p^2$ on prendra la plus basse multiplicité possible. En se fiant à la règle de Hund, on trouve que c'est le $(4P)$ qui est la multiplicité la plus basse en énergie. Pour ce qui est maintenant du couplage entre le coeur en $2p^4(3P)$ et les électrons de la couche supérieure en $(4P)$, on ne peut vraiment se prononcer parce qu'on ne connaît pas la largeur de chacun des états possibles et si l'affinité électronique est positive ou négative⁸⁰. En se fiant encore à la règle de Hund, on sait que les niveaux octuplets seront les plus bas. On peut donc avancer, en vertu de ce que l'on vient d'énoncer, que le couplage entre le coeur en $2p^4(3P)$ et les électrons extérieurs en

⁷⁸ À la section 2 du chapitre 2.

⁷⁹ Désigné par (E) sur notre figure 16

⁸⁰ C'est-à-dire que l'on ne peut prévoir si le niveau peut être répulsif ou non.

$[3s3p^2(^4P)]$ donnera un niveau octuplet. On conclura en interprétant la structure (E) comme étant $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)[3s3p^2(^4F)](^8\gamma)$.

Figure 20

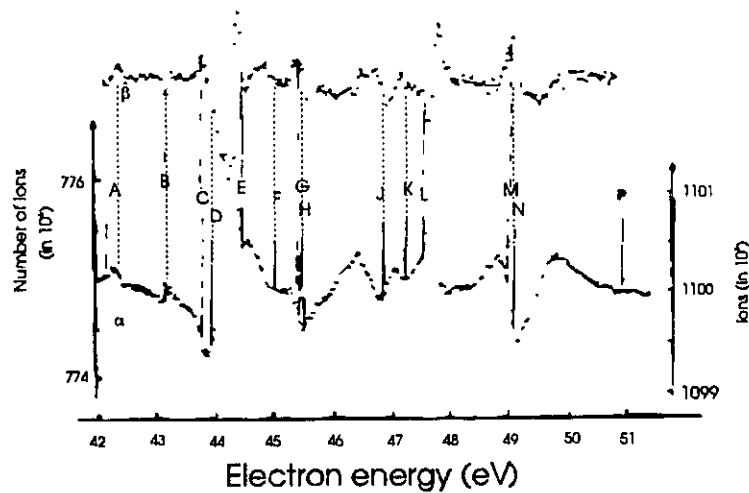
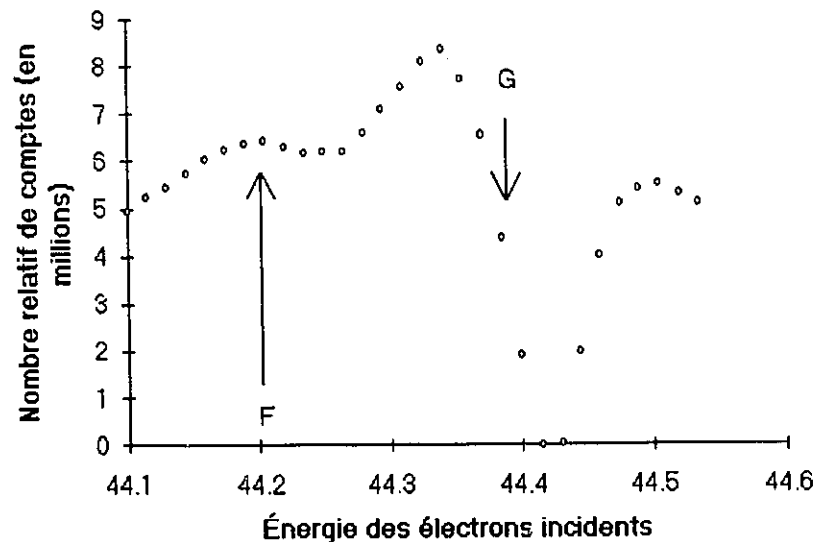


Figure 20: Reproduction de la figure 2 de l'article de Bolduc, Quéméner *et al.* [14] La courbe α représente la courbe redressée par lissage à 24 meV/Canal et la courbe β la dérivée première de α multipliée par -1 .

Si on compare l'aspect de la zone contenant les structures (F) et (G) avec la même zone dans le spectre de Bolduc, Quéméner *et al.* [14], on remarque que nos structures ont une allure similaire. Ceci nous amène à conclure que les structures que nous désignons par (F) et (G) seraient les mêmes que celles que Bolduc, Quéméner *et al.* [14] désignent par (D) et (E) sur leurs spectres. Outre cette similitude des formes, les interprétations de ces structures que Bolduc, Quéméner *et al.* [14] ont faites cadrent bien avec celles que nous avons faites pour les précédentes structures de notre spectre.

Figure 21

**Spectre du Néon entre 44.1 et 44.55
redressé par 40 lissages à 15meV/Canal**



Agrandissement, pour l'intervalle d'énergie s'étendant entre 44.1 eV et 44.6 eV, de la
seconde zone.

Bolduc, Quéméner *et al.* [14] identifient leur structure (D), (voir la figure dix-neuf, page précédente), comme étant $1s^2 2s^2 2p^4 ({}^3P) [3s3p ({}^3P)] ({}^3P)$ et leur structure (E) comme étant $1s^2 2s^2 2p^4 ({}^3P) [3s3p ({}^1P)]$. Leur interprétation de leur structure (D) est tout à fait raisonnable compte tenu du fait que nous avons attribué notre structure (D) comme étant $1s^2 2s^2 2p^4 ({}^3P) [3s3p ({}^3P)] ({}^5S)$. De plus l'énergie où ils observent leur structure (D), 43.95 eV, est relativement compatible avec nos prédictions qui la situent à 43.84 ± 0.2 eV. Sur la base de ces considérations, nous appuyons l'interprétation de

Bolduc, Quéméner *et al.* [14] et concluons que notre structure (F) est interprétée comme $1s^2 2s^2 2p^4 ({}^3P) [3s 3p ({}^3P)] ({}^3P)$

Pour ce qui est de leur structure (E), Bolduc, Quéméner *et al.* [14] l'interprètent comme étant le neutre $1s^2 2s^2 2p^4 ({}^3P) [3s 3p ({}^?P)]$. Considérant le fait que notre structure (G) a la forme d'un profil de Fano, nous sommes forcés de conclure que cette structure est un ion négatif et que l'interprétation de Bolduc, Quéméner *et al.* [14] n'est pas exacte.

Le seul ion négatif qu'il est possible d'observer dans cette région de notre spectre est du type $1s^2 2s^2 2p^4 ({}^3P) [3s 3p^2 ({}^2S, {}^2D, {}^{2,4}P)] ({}^{2,4,6,8}S, P, D, F)$. Les ions du type $1s^2 2s^2 2p^4 ({}^3P) [3s^2 3p]$ et $1s^2 2s 2p^6 3s^2$ sont à exclure car ils sont plus bas.

On doit maintenant trouver le couplage entre $3s$ et $3p^2$. On a déjà interprété la structure (E) comme étant $1s^2 2s^2 2p^4 ({}^3P) [3s 3p^2 ({}^4P)] ({}^8\gamma)$. Comme ce $({}^4P)$ est le seul quadruplet possible, on doit donc conclure que le couplage entre $3s$ $3p^2$ se fera selon un état doublet.

Pour ce qui est du couplage entre ce doublet et le $({}^3P)$ du coeur, on ne peut se prononcer car on observe aucune autre structures qui pourrait nous aider. On conclut en interprétant (G) comme étant $1s^2 2s^2 2p^4 ({}^3P) [3s 3p^2 ({}^2\gamma)] ({}^{2,4}\gamma)$.

Avant de poursuivre, il serait bon de dire que la position en énergie que Bolduc, Quéméner *et al.* [14] ont suggérée pour cet état est celle donnée par un ajustement du

profil de Fano, alors que dans notre cas, on considère la position du centre de la structure. Ces deux valeurs, quoique légèrement différentes, désignent la même structure car le maximum de la structure observée par Bolduc, Quémener *et al.* [14] est pratiquement au même endroit que notre maximum.

On peut donc résumer les structures rencontrées dans cette section dans le tableau suivant:

Tableau numéro 20:

Désignation de la structure:	Position en énergie du maximum de la structure:	Configuration
A	43.50	$1s^2[2s(^2S)2p^63s](^3S)$
B	43.62	$1s^22s^22p^4(^3P)[3s3p(^3P)](^5D)$
C	43.65	$1s^22s(^2S)2p^6[3s3p(^3P)](^4P)$
D	43.74	$1s^22s^22p^4(^3P)[3s3p(^3P)](^5S)$
E	43.86	$1s^22s^22p^4(^3P)[3s3p^2(^4D)](^8\gamma)$
F	44.175	$1s^22s^22p^4(^3P)[3s3p(^3P)](^3P)$
G	44.325	$1s^22s^22p^4(^3P)[3s3p^2(^2\gamma)](^{2,4}\gamma)$

Tableau récapitulatif des structures identifiées dans la deuxième partie du spectre

Conclusion

Des données spectroscopiques nouvelles ont été prises dans deux intervalles d'énergie différents, soit entre 42 eV et 43.1 eV et entre 43.2 eV et 44.5 eV. Ces données ont été interprétées à la lumière de prédictions basées sur les éléments iso-électroniques et sur l'extrapolation de séries de structures électroniques similaires à celle du néon. Ces données nous ont permis de déterminer avec précision la position de structures déjà détectées auparavant, ainsi que d'en trouver de nouvelles.

Ces résultats trouveront une application directe en physique des plasmas et en physique des processus physiques de la haute atmosphère. Le domaine de la physique des plasmas est toujours avide d'outils de diagnostics afin, entre autres, de savoir où sont les pertes d'énergie qui surviennent au cours des réactions pouvant mener à la fusion. La connaissance des positions de nouvelles raies spectrales permettra de quantifier les pertes d'énergie dues à la formation d'ions négatifs dans les plasmas.

Nos résultats sont aussi applicables en physique de la haute atmosphère où de nombreux phénomènes collisionnels, impliquant des atomes et des électrons, surviennent. Les mécanismes décrits dans ce travail permettront de mieux comprendre, en partie, ces phénomènes d'importance pour les sciences environnementales.

Appendice A

Il existe une manière plus simple de démontrer cette propriété.

Soit trois points expérimentaux x_{n-1} , x_n , x_{n+1} . Si on lisse une fois le point expérimental x_n , on aura:

$$x_n^{\text{lissé}} = \frac{1}{4}(x_{n-1} + 2x_n + x_{n+1}) \quad (48)$$

Soustrayant ce point lissé du point expérimental, on obtient:

$$x_n - x_n^{\text{lissé}} = x_n - \frac{1}{4}(x_{n-1} + 2x_n + x_{n+1}) \quad (49)$$

$$= -\frac{1}{4}(x_{n-1} - 2x_n + x_{n+1}) \quad (50)$$

Prenons maintenant la dérivée première de chacun de nos trois points expérimentaux: (On prendra la dérivée par la droite).

$$x'_{n-1} = x_n - x_{n-1} \quad (51)$$

$$x'_n = x_{n+1} - x_n \quad (52)$$

$$x'_{n+1} = x_{n+2} - x_{n+1} \quad (53)$$

Puis, prenant la dérivée seconde de x_n : (Cette fois-ci on prendra la dérivée par la gauche afin d'éviter un décalage des canaux d'un côté ou de l'autre.)

$$x''_n = x'_n - x'_{n-1} \quad (54)$$

$$= (x_{n+1} - x_n) - (x_n - x_{n-1}) \quad (55)$$

$$= x_{n+1} - 2x_n + x_{n-1} \quad (56)$$

Multipliant par -1, on trouve:

$$-x''_n = -x_{n+1} + 2x_n - x_{n-1} \quad (57)$$

Cette expression a la même forme que celle venant du redressement par un seul lissage, à la constante numérique près. Cette constante n'ayant rien à voir avec la forme de la courbe, on peut donc à cet égard, la négliger.

Appendice B

Figure 22

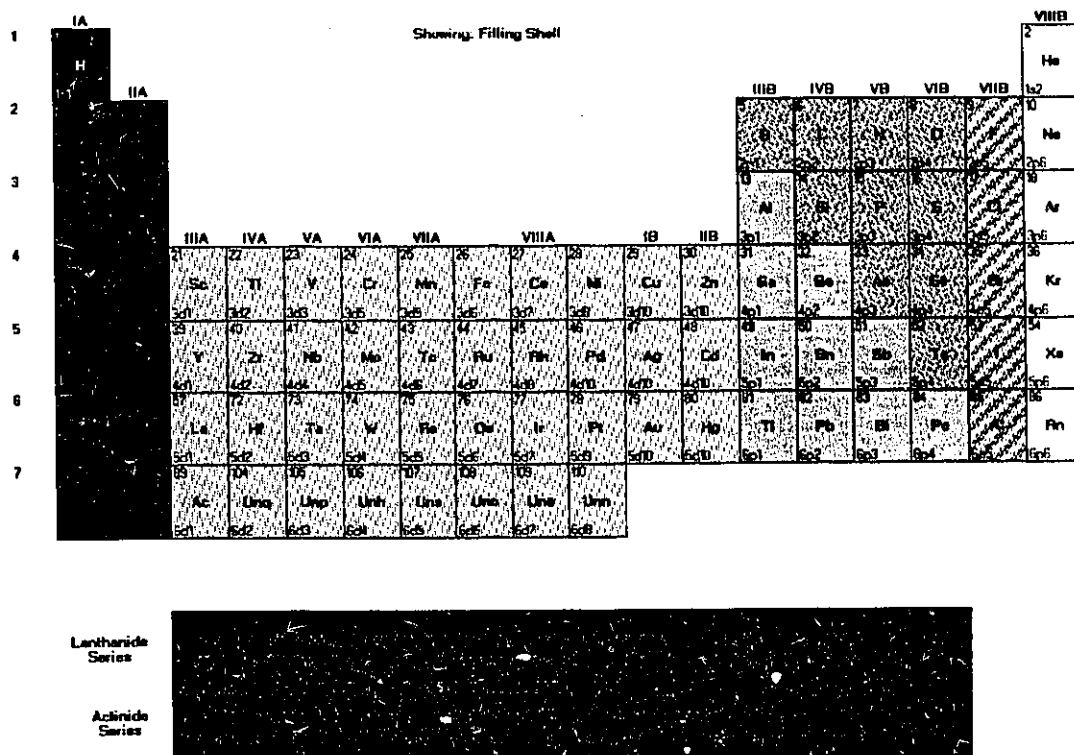


Tableau périodique des éléments

Références

- [1] E. Bolduc, Thèse de doctorat, Université Laval, (1973)
- [2] J.J. Quéméner, Thèse de doctorat, Université de Rennes (1971)
- [3] E. Bolduc, Thèse de maîtrise, Université Laval, (1971)
- [4] R. Carbonneau, Thèse de maîtrise, Université Laval, (1972)
- [5] D. Vigneux, Thèse de maîtrise, Université Laval, (1979)
- [6] P. Marmet, Thèse de doctorat, Université Laval, (1960)
- [7] P. Marmet, L. Kerwin, *Can. J. Phys.*, **38**, 787 (1960)
- [8] M. Proulx, P. Marmet, R. Dutil, *Rev. Sci. Instrum.*, **53**, 778, (1982)
- [9] P. Plessis, Thèse de doctorat, Université Laval, (1985)
- [10] P. Marchand, Thèse de doctorat, Université Laval (1969)
- [11] P. Marchand, C. Paquet, P. Marmet, *Rev. Sci. Instr.*, **37**, 1702, (1966)
- [12] C. Paquet, Thèse de doctorat, Université Laval, (1971)
- [13] J.S. Allen, *Rev. Sci. Instr.*, **18**, 739, (1947)
- [14] E. Bolduc, J.J. Quéméner, P. Marmet, *J. Chem. Phys.*, **57**, 1957, (1972)
- [15] P. Marmet, *Rev. Sci. Instrum.*, **50**, 79, (1979)
- [16] H.H. Arsenault, P. Marmet, *Rev. Sci. Instrum.*, **48**, 512, (1977)
- [17] P. Marchand, P. Veillette, *Can. J. Phys.*, **54**, 1309, (1976)
- [18] M. Proulx, P. Marmet, **50**, 129, (1983)
- [19] M. Proulx, Thèse de maîtrise, Université Laval, (1979)
- [20] U. Fano, *Phys. Rev.*, **124**, 1866, (1961)
- [21] E. Bolduc, P. Marmet, *Can. J. Phys.*, **51**, 2108, (1973)
- [22] P. Marmet, *J. Chem. Phys.*, **63**, 249, (1975)
- [23] C.E. Moore, *Atomic Energy Levels*, Nat. Bur. Stand. (U.S.) Circ No 467, Vol. 1, (1949)
- [24] F.H. Read, *J. Phys. B.: Atom. Molec. Phys.*, **10**, 449, (1977)
- [25] A. Hibbert, M. Le Dourneuf, M. Mohen, *At. Dat. and Nucl. Dat. Tab.*, **53**, 23, (1993)

- [26] H.W. Dassen, R. Gomez, G.C. King, J.W. McConkey, *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.*, **16**, 1481, (1983)
- [27] J. Langlois, Thèse de Doctorat, Université Laval, (1978)
- [28] D.R. Beck, *Phys. Rev. A*, **30**, 3305, (1984)
- [29] A.W. Weiss, *Phys. Rev.*, **166**, 70, (1968)
- [30] C.F. Bunge, M. Galán, R. Jáuregui, A.V. Bunge, *Nucl. Instr. Meth.*, **202**, 299, (1982)
- [31] L. Sanche, G.J. Schultz, *Phys. Rev. A*, **5**, 1672, (1972)
- [32] J.T. Grissom, W.R. Garrett, R.N. Compton, *Phys. Rev. Letters*, **23**, 1011, (1969)
- [33] J. Østgaard Olsen, N. Andersen, *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.*, **10**, 101, (1977)
- [34] G. Gerber, A. Niehaus, *Phys. Rev. Lett.*, **31**, 1231, (1973)
- [35] D. Spence, *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.*, **14**, 129, (1981)
- [36] P. Veillette, P. Marchand, *Can J. Phys.*, **54**, 1208, (1976)
- [37] D.G. Wilden, P.J. Hicks, J. Comer, *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.*, **10**, 1477, (1977)
- [38] J. Langlois, J.M. Sichel, *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.*, **13**, 3109, (1980)
- [39] D. Spence, *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.*, **13**, 1611, (1980)
- [40] I. Cadez, M. Tronc, R.I. Hall, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, **7**, L132, (1974)
- [41] D. Dill, J. Welch, J.L. Dehmer, J. Siegel, *Phys. Rev. Lett.*, **43**, 1236, (1979)
- [42] G.J. Schultz, *Rev. Mod. Phys.*, **45**, 378, (1973)
- [43] M. Tronc, R. Azria, R. Paineau, *Journ. de Phys.*, **40**, L323, (1979)
- [44] P. Marmet, Communication privée (1994)
- [45] M.A. Eliason, D.E. Storgryn, J.O. Hirschfelder, *Proc. Nat. Acad. Sci (U.S.A.)*, **42**, 546, (1956)
- [46] K. Codling, R.P. Madden, D.L. Ederer, *Phys. Rev.*, **155**, 26, (1967)
- [47] D. Huard, P. Marmet, E. Bolduc, *Can. J. Phys.*, **56**, 82, (1978)
- [48] D. Spence, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, **14**, 129, (1981)
- [49] A.K. Edwards, M.E. Rudd, *Phys. Rev.*, **170**, 140, (1968)

- [50] T. Bergmark, R. Spohr, N. Magnusson, L.O. Werme, C. Nordling, K. Siegbahn, Institute of Physics, Uppsala University, Rept. No. 589, (1969)
- [51] D. Roy, A. Delage, J.-D. Carette, Phys. Rev. A, *12*, 45, (1975)
- [52] G. Herzberg, "Atomic spectra and atomic structure", Dover publication, New-York, p.21, (1974)
- [53] A.C. Fung, J.J. Matese, Phys. Rev. A, *5*, 22, (1972)
- [54] L.J. Radziemski, V. Kaufman, J. Opt. Soc. Am., *59*, 424, (1969)
- [55] S. Bashkin, J.O. Stoner jr., "Atomic Energy Levels and Grotrian diagram I: hydrogen I - Phosphorus XV", North-Holland / American Elsevier, Amsterdam / New-York, (1975)
- [56] B. Ruscic, J.P. Greene, J. Berkowitz, J. Phys. B.: Atom. Molec. Phys, *17*, L79, (1984)
- [57] R. Serway, "Physique I: Mécanique", Les Éditions HRW Ltée, p. 217, (1985)
- [58 R. Dutil, Communication privée (1982)]

Index

---A---

Affinité électronique
Sodium, 36
Allen, 18
Amplificateur, 18
Andersen, 66; 68; 87; 88
Arsenault, 22
Azria, 75

---B---

Bashkin, 43
Beck, 57
Bergmark, 87; 90
Berkowitz, 111
Bobine d'Helmholtz, 13
Bolduc, 6; 7; 8; 12; 14; 17;
18; 19; 21; 24; 26; 29; 30;
37; 39; 44; 51; 66; 67; 68;
75; 87; 88; 89; 92; 93; 94;
101; 102; 103; 104
Bunge, 57; 58; 110

---C---

Cadez, 75
Calculs
Modèle du coeur gelé
avec superposition de
configuration, 67
Carbonneau, 7; 15
Champ magnétique, 13
Charges d'espace, 13; 15
Charges de surface, 16
Codling, 87
Collection et acquisition
automatisée des données, 18
Collection et acquisition
informatisée des données, 9;
14
Comer, 110
Compton, 110
Couplage
Entre les électrons 3s et
3p, et les électrons
2p₄(3P, 1D, 1S) du coeur
dans le NeI, 51

---D---

Dassen, 51; 69; 70; 87; 89;
92; 93; 97
Défauts quantiques, 44

Dehmer, 110
Delage, 92; 95; 97
Dill, 75
Discriminateur, 18
Dutil, 109

---E---

Ederer, 110
Edwards, 87
Eliason, 84

---É---

Énergie de liaison
Sodium, 35

---F---

Facteur de forme, 24
Fano, 24
Filament, 9
Filtrage, 9; 15
Filtrage de Fourier, 22
Filtre de masse
quadripolaire, 15
Fung, 36; 100

---G---

Galán, 57; 58
Garrett, 66; 67; 68
Gerber, 66
Gomez, 51; 69; 70; 87; 89;
92; 93; 97
Grilles intérieures, 13
Grissom, 66; 67; 68

---H---

Hall, 110
Hel, 66
Herzberg, 91
Hibbert, 50; 90; 91
Hicks, 67; 68; 87; 89; 95; 97
Hirschelder, 110
Huard, 87; 89; 90; 91; 92
Huile

au carbone, 15
au silicone, 15

---J---

Jáuregui, 110
Jet atomique, 14

---K---

Kaufman, 39
Kerwin, 11; 14
King, 110

---L---

Langlois, 53; 54; 67; 68; 87;
88; 90; 91; 95; 97
Le Dourneuf, 50; 90; 91

---M---

Madden, 87
Magnusson, 111
Marchand, 18; 22; 67; 68;
87; 89; 90; 92
Marmet, 11; 14; 18; 22; 23;
24; 29; 31; 66; 68; 77; 79;
80; 81; 82; 84; 87; 92; 109
Matese, 36; 100
McConkey, 110
Méthode de traitement, 9
MgI, 67
Moore, 33; 35; 38; 39; 42;
46; 51; 52
Multiplicateur, 18

---N---

Niehaus, 66
Nordling, 111

---O---

Østgaard Olsen, 66; 68; 87;
88

---P---

Paineau, 110
Paquet, 18
Pièges, 16
Plessis, 11; 14; 15; 22; 23;
24
Polycold-500, 16
Pompes à diffusion, 15; 16
Préamplificateur, 18
Profils de Fano, 24
Proulx, 11; 23; 24

---Q---

Quéméner, 7; 21; 39; 44; 51;
66; 68; 87; 88; 89; 92; 93;
94; 101; 102; 103; 104

---R---

Radziemski, 39
Rapport e/m, 15
Read, 44; 46; 47
Roy, 92; 95; 97
Rudd, 87
Ruscic, 43

---S---

Sanche, 66; 68; 87; 88; 90;
91

Schéma global de notre
dispositif expérimental, 10

Schultz, 66; 68; 75; 87; 88;
90; 91

Sélecteur d'électrons
(schéma), 12

Sélecteur électrostatique
cylindrique à 127 degrés de
type Marmet, 11; 13; 14

Serway, 30

Sichel, 67; 68; 87

Siegbahn, 111

Siegel, 110

Source, 8; 9

Spectroscopie

par collisions avec des
ions lourds, 66

par détection de
métastables, 69

par impact électronique,
66; 69

par la détection du
rayonnement visible et
proche ultraviolet, 67

par la méthode des
électrons piégés, 66; 67

par transmission
d'électrons, 66

Spence, 67; 68; 69; 70; 87;
88; 89; 92; 95; 97

Spohr, 87; 90

Stoner jr., 43

Storgryn, 84

Système à vide, 9; 15

Système informatisé
d'acquisition, 18

---T---

Transmission du quadripôle,
15

Tronc, 75

---V---

Veillette, 22; 67; 68; 87; 89;
90; 92

Vigneux, 7; 9; 10

---W---

Weiss, 57; 58; 66; 67

Welch, 75

Werme, 111

Wilden, 57; 68; 87; 89; 95;
97

---Z---

Zone d'interaction, 15

Index des figures

Figure 1: Schéma global des différentes étapes de notre expérience	8
Figure 2: Schéma global de notre dispositif expérimental [5]	10
Figure 3: Schéma du sélecteur double d'électron vu de face [3]	12
Figure 4: Schéma d'un des pièges, refroidi au fréon, qui est monté sur les pompes à diffusion.....	17
Figure 5: Diagramme des niveaux d'énergie d'un atome hypothétique utilisé pour illustré les différents types de continua. Quatre états neutres discrets, A_0 , A_1^* , A_2^* , A_3^* , un état discret négatif A^- et un état existant au-delà de la limite d'ionisation p_e	26
Figure 6: Courbe acquise par Réjean Dutil ayant servies de référence lors de la calibration de nos courbes.....	60
Figure 7: Graphique des structures observées entre 42 et 43 eV dans la courbe d'électro-ionisation du Néon après 500 redressements par lissage pour la courbe et 50 redressements par lissage pour la courbe	62
Figure 8: Graphique des structures observées entre 42 et 43 eV dans la courbe d'électro-ionisation (à 20 meV/canal) du Néon après 20 redressements par lissage pour deux intervalles d'acquisition de données différents. Cela illustre la reproductibilité de.....	63
Figure 9: Graphique des structures observées.....	65
Figure 10: Graphique de la différence d'énergie entre le niveau en $2p^4 3p^{(nL)}$ et la limite en $2p^4$ (en eV) en fonction des éléments iso-électronique de la série du FI.	72
Figure 11: Graphique de la racine carré de l'énergie de liaison en fonction du nombre de charges vues par l'électron $3p$	73

Figure 12: Schéma d'une collision entre un électron et un atome, dans le référentiel du centre de masse	77
Figure 13: Fonctions de potentiels: Centrifuge, effectif et en $1/r$	80
Figure 14: Graphique du potentiel efficace résultant de la superposition du potentiel centrifuge et d'un potentiel en $1/r$	81
Figure 15: Graphique du potentiel efficace résultant de la superposition du potentiel centrifuge et d'un potentiel en $1/r^3$	82
Figure 16: Trajectoire dans laquelle la valeur de la distance minimum intervient lorsque l'angle de rotation est entre 6 et 7.	84
Figure 17: Graphique des structures observées entre 42 et 43 eV dans la courbe d'électro-ionisation du Néon après 40 redressements par lissage. Le nombre d'ions par canal est de 40 milliards.	86
Figure 18: Agrandissement pour l'intervalle d'énergie s'étendant entre 43.2 eV et 44.5, de la seconde zone.	96
Figure 19: Agrandissement pour l'intervalle d'énergie s'étendant entre 43.7 eV et 44 eV, de la seconde zone.....	98
Figure 20: Reproduction de la figure 2 de l'article de Bolduc, Quéméner et al. [14] La courbe représente la courbe redressée par lissage à 24 meV/Canal et la courbe la dérivée première de multipliée par -1.	101
Figure 21: Agrandissement, pour l'intervalle d'énergie s'étendant entre 44.1 eV et 44.6 eV, de la seconde zone.....	102

Index des tableaux

Tableau 1: Tableau des énergies des différents niveaux du Fluor du type $2p^4(^3P) 3s(^2S)$, et des niveaux qui sont leur limite d'ionisation.	38
Tableau 2: Tableau des énergies des différents niveaux du Sodium du type $2p^6(^1S) 3s(^2S)$, et des niveaux qui sont leur limite d'ionisation.....	39
Tableau 3: Tableau des énergies [23] des différents niveaux du NéonII du type $2p^4(^3P) 3s(^2S)$	42
Tableau 4: Tableau de l'énergie [23] et des défauts quantiques des différents niveaux du NéonII du type $2p^4(^3P) 3s(^2S)$ et de l'énergie de leur limite de série.	46
Tableau 5: Tableau récapitulatif des diverses prédictions faites pour les niveaux en $3s^2(^1S)$ à l'aide des deux méthodes utilisées.	50
Tableau 6: Tableau de l'énergie de différents niveaux du Ne^+ qui sont des limites d'ionisation des niveaux du type $3s 3p (^1P, ^3P)$ du Ne^{**}	51
Tableau 7: Tableau des positions des différents niveaux du Mg et du Mg^+ utilisés dans la détermination des positions des niveaux du type $[3s 3p] (^1P, ^3P)$ du Ne^{**}	52
Tableau 8: Tableau des différentes valeurs d'énergie prédites pour les niveaux du type $[3s 3p] (^1P, ^3P)$	53
Tableau 9: Tableau des énergies prédites par Langlois [27] pour les niveaux en $1s^2 2s^2 2p^4(^3P) [3s 3p (^3P)]$ et des positions en énergie relatives à $1s^2 2s^2 2p^4(^3P) [3s 3p (^3P)] (^5P)$	54
Tableau 10: Tableau des énergies prédites par notre méthode approximative pour les niveaux en $1s^2 2s^2 2p^4(^3P) [3s 3p (^3P)]$	56
Tableau 11: Tableau des différentes valeurs d'énergie prédites pour les niveaux du type $(^3P, ^1D, ^1S)[3s 3p^2 (^4P)]$	58

Tableau 12: Représentation graphique des prédictions de niveaux faites dans cette thèse.....	59
Tableau 13: Tableau des positions des maximas des différentes structures observées dans le spectre ci-haut.....	65
Tableau 14: Tableau des différentes valeurs d'énergie pour le niveau $1s^2 2s^2 2p^4(^3P) 3s^2(^3P)$ dans la littérature.....	68
Tableau 15: Tableau des différentes valeurs d'énergie pour le niveau $1s^2 2s^2 2p^4(^3P) [3s^2 3p(^2P)]$ dans la littérature.....	70
Tableau 16: Tableau de l'énergie de liaison (en eV) de l'électron 3p des éléments voisins du néon dans la série iso-électronique du FI.....	71
Tableau 17: Tableau des valeurs extrapolées pour zéro charge pour trouver les différentes affinités électroniques des différentes configurations du Ne^-	74
Tableau 18: Tableau des différents niveaux du Ne^* rapportés dans la littérature pour l'intervalle d'énergie compris entre 43.2. eV et 44.5 eV.....	89
Tableau 19: Tableau des énergies des différents niveaux du Ne^* rapportés dans la littérature pour l'intervalle d'énergie compris entre 43.3. eV et 44.5 eV.....	90
Tableau 20: Tableau récapitulatif des structures identifiées dans la deuxième partie du spectre.....	104
Tableau 22: Tableau périodique des éléments.....	108