



**HAL**  
open science

# Excitations nucléaires dans les plasmas : le cas du $^{84}\text{mRb}$

David Denis-Petit

► **To cite this version:**

David Denis-Petit. Excitations nucléaires dans les plasmas : le cas du  $^{84}\text{mRb}$ . Physique des plasmas [physics.plasm-ph]. Université de Bordeaux, 2014. Français. NNT : 2014BORD0220 . tel-01164214

**HAL Id: tel-01164214**

**<https://theses.hal.science/tel-01164214>**

Submitted on 16 Jun 2015

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE PRÉSENTÉE  
POUR OBTENIR LE GRADE DE

DOCTEUR DE  
L'UNIVERSITÉ DE BORDEAUX

ÉCOLE DOCTORALE DES  
SCIENCES PHYSIQUES ET DE L'INGÉNIEUR  
Spécialité : Astrophysique, Plasmas, Nucléaire

Par **David Denis-Petit**

# Excitations nucléaires dans les plasmas : le cas du $^{84m}\text{Rb}$

Thèse dirigée par Mme Fazia HANNACHI et M. Medhi TARISIEN

Préparée au  
Centre d'Études Nucléaires de Bordeaux Gradignan

Soutenue le 28 novembre 2014

Devant la commission d'examen formée de :

<i>Président :</i>	Patrick AUDEBERT	- Directeur de Recherche - LULI - Palaiseau
<i>Rapporteurs :</i>	Christophe BLANCARD	- Ingénieur-Chercheur - CEA/DAM/DIF - Arpajon
	Araceli LOPEZ-MARTENS	- Directrice de Recherche - CSNSM - Orsay
<i>Examineurs :</i>	Bertram BLANK	- Directeur de Recherche - CENBG - Bordeaux
	Gilbert GOSSELIN	- Ingénieur-Chercheur - CEA/DAM/DIF - Arpajon
	Florin NEGOITA	- Chargé de Recherche - IFIN-HH - Magurele
<i>Directrice :</i>	Fazia HANNACHI	- Directrice de Recherche - CENBG - Bordeaux



**Titre :** Excitations nucléaires dans les plasmas : le cas du  $^{84m}\text{Rb}$

**Résumé :**

Ce travail, à la fois expérimental et théorique, présente l'étude d'un processus d'excitation nucléaire, appelé NEET (Nuclear Excitation by Electron Transition), faisant intervenir un couplage entre le noyau et le cortège électronique. Dans celui-ci, une désexcitation électronique peut induire une excitation nucléaire si les transitions nucléaire et atomique sont résonantes et ont la même multipolarité. Le noyau de  $^{84}\text{Rb}$  est un bon candidat pour mettre en évidence ce processus dans un plasma créé par laser car il possède une transition de basse énergie (environ 3 keV) entre l'état isomérique ( $J^\pi = 6^-$ ,  $T_{1/2} = 20,26$  min) et l'état  $J^\pi = 5^-$  ( $T_{1/2} = 9$  ns). Afin d'évaluer un taux d'excitation par effet NEET, il est nécessaire de décrire les états atomiques dans un plasma et de caractériser précisément la transition nucléaire.

Afin d'obtenir une description précise des états atomiques dans un plasma, une méthode de calcul de structure atomique a été développée. Cette méthode est basée sur le code de physique atomique MCDF (Multi-Configuration Dirac-Fock) et emploie une technique de sélection des configurations électroniques les plus probables en tenant compte des propriétés du plasma. Cette méthode de calcul a été validée par l'interprétation d'un spectre X émis par un plasma de Rb produit avec le laser PHELIX du GSI à une intensité de  $6 \times 10^{14}$  W/cm<sup>2</sup>.

L'énergie de la transition nucléaire entre les états  $6^-$  et  $5^-$  n'était pas connue avec une précision suffisante ( $\sim 200$  eV) pour une évaluation précise du taux d'excitation par effet NEET. Deux expériences de spectroscopie  $\gamma$  ont alors été réalisées auprès des accélérateurs ELSA du CEA/DAM/DIF et Tandem de l'IPN d'Orsay. Elles ont permis d'améliorer de plus d'un ordre de grandeur la précision sur l'énergie de cette transition.

A l'issue de ce travail, une évaluation du taux d'excitation par effet NEET dans un plasma a été réalisée afin de dimensionner une expérience. D'après celle-ci, le plasma doit avoir une température suffisamment élevée (de l'ordre de 400 eV) afin d'obtenir un nombre d'isomères excités suffisant pour être détectés.

**Mots clés :** NEET,  $^{84}\text{Rb}$  couplage noyau-cortège électronique, excitation nucléaire, plasma

---

**Title :** Nuclear excitations in plasmas : the case of  $^{84m}\text{Rb}$

**Abstract :**

This experimental and theoretical work deals with the Nuclear Excitation by Electron Transition (NEET) process which involves a coupling between the nucleus and its electron cloud. In this process, an electron de-excitation can induce a nuclear excitation if the atomic and nuclear transitions are resonant and have the same multipolarity. This process could be observed in a laser created plasma of  $^{84}\text{Rb}$  because this nucleus has a low energy transition (around 3 keV) between the isomeric state ( $J^\pi = 6^-$ ,  $T_{1/2} = 20,26$  m) and the  $J^\pi = 5^-$  ( $T_{1/2} = 9$  ns) state. To evaluate a NEET excitation rate, the atomic states in plasma must be described and the nuclear transition must be precisely characterised.

To describe the atomic states in plasma, a method based on a MCDF (Multi-Configuration Dirac-Fock) code was developed. This one uses a procedure to select the most probable atomic configurations according to the plasma properties. This method was checked by the interpretation of a X-rays spectrum emitted by a Rb plasma. This plasma was produced by the PHELIX laser of the GSI laboratory at an intensity of  $6 \times 10^{14}$  W/cm<sup>2</sup>.

The energy of the nuclear transition between the states  $6^-$  and  $5^-$  was not accurate enough for the NEET rate evaluation. Two  $\gamma$ -rays spectroscopy experiments were conducted at the ELSA accelerator from CEA/DAM/DIF and at the Tandem accelerator from the Orsay laboratory. The accuracy of the nuclear transition energy was improved of more than one order of magnitude.

In this work, the NEET rate was evaluated to predict an experiment. The Rb plasma must have a high temperature (around 400 eV) to obtain a sufficient number of excited isomers and therefore to make possible the detection.

**Keywords :** NEET,  $^{84}\text{Rb}$  nucleus-electron cloud coupling, nuclear excitation, plasma



# Remerciements

Tout d'abord, je tiens à remercier le directeur du CENBG, Philippe Moretto, pour m'avoir accueilli au sein de son laboratoire. Plus largement, mes remerciements vont à l'ensemble du personnel du CENBG avec lequel j'ai pu interagir durant ces trois années de thèse. Le contact avec les personnes des groupes de recherche, des services administratif, informatique, électronique et mécanique a toujours été excellent.

Merci aux membres du jury qui ont accepté d'évaluer ce travail de thèse. Merci tout d'abord au président du jury, Patrick Audebert et aux rapporteurs, Araceli Lopez-Martens et Christophe Blancard. Je remercie également les autres membres de ce jury : Bertram Blank, Florin Negoita et Gilbert Gosselin. Les différentes remarques et questions que j'ai pu recevoir de la part du jury ont permis d'améliorer le présent manuscrit.

Cette thèse a été effectuée au sein du groupe Excitations Nucléaires par Laser, groupe que j'ai rejoint dans le cadre de mon stage de Master 2. Aussi, je remercie Fazia de m'avoir accueilli à cette occasion et d'être devenue par la suite ma directrice de thèse. Je la remercie pour les nombreux conseils, pas seulement dans le domaine scientifiques qu'elle a su me donner au cours de ces trois années. Les discussions scientifiques, parfois animées, que nous avons pu avoir ont toujours été enrichissantes. Je la remercie également pour les relectures de ce manuscrit et les corrections qu'elle y a apportées. Merci aussi pour sa gentillesse qui a contribué à ce que ENL devienne ma seconde famille.

Je remercie mon co-directeur de thèse, Medhi, qui m'a énormément appris sur le plan technique et instrumental : utilisation des différents modules électroniques, système d'acquisition... Grâce à lui, je n'oublierai plus de mettre un bouchon 50  $\Omega$  ! Merci également pour les relectures du manuscrit ainsi que les questions et remarques qui l'ont rendu plus pédagogique. Plus personnellement, merci à Medhi pour sa bonne humeur, ses nombreux calembours et avec qui il est possible de partager des phrases du type "le chef y veut du à l'ail !"

Je remercie Franck, qui a toujours se rendre disponible pour discuter et m'orienter dans le cadre d'une analyse ou d'une présentation. Les discussions que nous avons pu avoir ont toujours été enrichissantes et ont souvent permis de résoudre certains problèmes. Nous sommes, en effet, arrivés à la conclusion qu'un Apfelstrudel est meilleur avec de la crème chantilly et de la glace qu'avec de la crème anglaise.

Pour finir avec les permanents du groupe, je remercie Maud pour sa gentillesse, son aide, que ce soit sur une analyse, de la grammaire anglaise ou pour remplir un dossier de qualification. Je la remercie, de plus, pour ses explications, notamment en astrophysique nucléaire, son domaine de prédilection... Je la remercie plus particulièrement pour m'avoir accueilli au sein de l'équipe pédagogique de RPP et de m'avoir confié la responsabilité d'un groupe d'étudiants pendant ces trois années de thèse. Les discussions concernant l'enseignement (sujet de DS, correction d'examen, fascicule de cours, ...) ont toujours été enrichissantes et m'ont permis de progresser dans ce domaine qu'il m'était inconnu.

J'en viens maintenant aux non-permanents du groupe, avec lesquelles j'ai eu le plaisir de partager le bureau, quelques black pepper et l'amitié. Je remercie tout d'abord Thomas, pour sa sympathie, son aide en matière de programmation (ROOT et Geant4 notamment) et ses conseils concernant l'analyse des IPs, dont il est un spécialiste. Malheureusement, je n'ai pas pu bénéficier de son autre domaine d'expertise : le whisky (quelle idée de boire de la limonade!).

J'en viens maintenant à Maxime, que j'ai eu le plaisir de côtoyer pendant trois ans (et des brouettes). Merci pour sa gentillesse et son éternel bon humour. Merci également pour les très nombreuses discussions scientifiques (ou pas) que nous avons eu ou qu'il a parfois eu tout seul...

Nous avons pu ainsi nous aider mutuellement à résoudre nos problèmes respectifs.

Bien qu'il ne soit resté que peu de temps chez ENL, merci à Igor pour sa gentillesse et sa bonne humeur. Je le remercie aussi pour avoir encaissé, sans trop broncher, nos différentes moqueries, que ce soit sur les "Parisiens" ou son usage intensif de plomb.

Bien que Nadine ne fasse pas officiellement partie du groupe ENL, elle est indispensable à son bon fonctionnement. Je la remercie pour son aide dans les différentes démarches administratives auxquelles j'ai été confrontée, l'organisation du pot de thèse et plus largement pour sa gentillesse. Merci à Catherine et Isabelle pour leur aide au niveau de l'utilisation du cluster de calcul. Merci aussi à Tina et Jérôme pour leur gentillesse.

Je me dois de remercier les différents collaborateurs qui ont participé à ce travail de thèse. La partie théorique de ce travail n'aurait pas pu être réalisée sans l'aide du "trinôme de choc" du CEA/DAM/DIF : Vincent Méot, Gilbert Gosselin et Pascal Morel. Je les remercie pour les nombreuses explications et conseils qu'ils ont pu me donner. Merci également pour la pléthore de fichiers (courbes NEET, spectres radiatifs, programmes divers,...) qu'ils ont dû extraire péniblement du bocal et sans lesquels le dernier chapitre de cette thèse n'aurait pas pu voir le jour.

Du point de vue théorique, merci également à Jean-Christophe Pain, Franck Gilleron et Olivier Peyrusse pour l'aide qu'il m'ont apportée dans l'interprétation des spectres X et leurs explications sur les mécanismes d'émission d'un plasma. Un petit merci à M. Dzublik pour la fameuse solution des  $2L + 1$ ...

Merci à Fabien Dorchies pour l'aide et les conseils qu'il m'a apportés sur l'analyse des spectres X et l'utilisation des cristaux de Bragg.

Concernant les différentes expériences auxquelles j'ai pu participer, je tiens tout d'abord à remercier Vincent Bagnoud et Alexander Frank ainsi que tout le personnel du laser PHELIX du GSI pour m'avoir permis de réaliser deux campagnes expérimentales auprès de ce laser et pour leur aide précieuse durant celles-ci. Merci également à Alain Binet et Jean-Paul Nègre de l'accélérateur ELSA du CEA/DAM/DIF. Je remercie aussi Iolanda Matea pour son aide durant l'expérience réalisée sur le Tandem d'Orsay. Mes remerciements vont aussi à tout le personnel de cette installation.

Bien qu'elle ne soit pas décrite dans ce manuscrit, je me dois de remercier les "infortunés" ayant participé, comme moi, à l'expérience  $^{57}\text{Fe}$  : Fabien Dorchies, Claude Fourment, Sébastien Hulin, Dasha Uryupina et Konstantin Ivanov.

J'en viens maintenant à tous ceux qui sont étrangers à la physique nucléaire et atomique. Je remercie les membres de Jalle Astronomie, de m'avoir donné la liberté de créer des ateliers et de présenter différents sujets même s'ils se sont avérés parfois trop complexes. Je les remercie aussi pour l'ambiance excellente qu'il règne dans ce club.

Pour terminer, je remercie mes proches et notamment les amis qui m'ont soutenu, voire supporté et pour qui, il est inconcevable qu'un docteur soit incapable de soigner un rhume. Merci à Thibault, Perrine, Guillaume, Florent, Barthélémy (même s'il me hait), et j'en oublie. Merci à Gégé de m'avoir appris le ciel, le Klod de m'avoir appris le provençal et "la marmite". Merci à Jean de m'avoir montré qu'il est possible de démonter et remonter entièrement une 4L et de m'avoir donné quelques notions de mécanique (non quantique). Merci à Elisabeth, pour sa gentillesse et ses talents de cuisinière (ceux ayant assistés au pot de thèse peuvent le confirmer).

Enfin, je remercie mes parents pour leur soutien et l'aide qu'il m'ont apporté. Sans eux, je n'en serai pas là. Je remercie aussi ma sœur pour son affection.

# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>9</b>
<b>1 Excitations nucléaires dans les plasmas : contexte</b>	<b>11</b>
1.1 Les plasmas créés par laser : un nouvel environnement pour l'étude des propriétés nucléaires . . . . .	11
1.1.1 Modification de la durée de vie d'un niveau nucléaire par la fermeture ou l'ouverture d'une voie de désexcitation . . . . .	12
1.2 Processus d'excitation nucléaire dans un plasma . . . . .	14
1.2.1 Les processus d'excitation directs . . . . .	15
1.2.2 Les processus d'excitation indirects . . . . .	16
1.3 Excitations nucléaires dans un plasma : cas des noyaux $^{235}\text{U}$ et $^{181}\text{Ta}$ . . . . .	18
1.3.1 Le cas de $^{235}\text{U}$ . . . . .	18
1.3.2 Le cas du $^{181}\text{Ta}$ . . . . .	19
1.4 Excitation de l'état $J^\pi = 6^-$ vers l'état $J^\pi = 5^-$ du $^{84}\text{Rb}$ dans un plasma . . . . .	20
1.4.1 Description du noyau . . . . .	20
1.4.2 Processus d'excitation de l'état isomérique $6^-$ dans un plasma . . . . .	21
1.4.3 Mise en évidence de l'excitation de l'état $6^-$ par effet NEET dans un plasma : contraintes expérimentales . . . . .	22
1.4.4 Les enjeux de ce travail de thèse . . . . .	22
<b>2 Physique atomique dans les plasmas</b>	<b>25</b>
2.1 Description des plasmas créés par laser . . . . .	25
2.1.1 Grandeurs caractéristiques d'un plasma . . . . .	25
2.1.2 Caractéristiques d'un plasma créé par laser . . . . .	26
2.2 Processus atomiques dans un plasma . . . . .	27
2.2.1 Les processus radiatifs . . . . .	28
2.2.2 Processus collisionnels . . . . .	29
2.3 Populations des ions, photons et électrons dans un plasma : modèles d'équilibre statistique . . . . .	30
2.3.1 L'équilibre thermodynamique . . . . .	30
2.3.2 L'équilibre thermodynamique local . . . . .	32
2.3.3 L'équilibre coronal . . . . .	32
2.3.4 L'équilibre collisionnel-radiatif . . . . .	32
2.3.5 Modèle HETL avec température d'ionisation . . . . .	33
2.4 Largeur des raies atomiques dans un plasma . . . . .	33
2.4.1 La largeur naturelle . . . . .	33
2.4.2 Élargissement Doppler thermique . . . . .	34
2.4.3 Élargissement Stark . . . . .	34
2.4.4 Profil des raies émises par un plasma : profil de Voigt . . . . .	35
2.5 Les codes de physique atomique utilisés pour décrire les plasmas dans ce travail . . . . .	35
2.5.1 Le code d'atome moyen relativiste . . . . .	36
2.5.2 Le code Multi-Configuration Dirac-Fock (MCDF) . . . . .	37
2.5.3 Le code SCO-RCG . . . . .	41
2.5.4 Le code AVERROËS/TRANSPEC . . . . .	42

2.6	Méthode de génération des spectres X avec le code MCDF . . . . .	43
2.6.1	Hypothèses de la méthode . . . . .	43
2.6.2	Positionnement du problème . . . . .	43
2.6.3	Sélection des configurations électroniques à traiter . . . . .	44
2.6.4	Calcul des populations des niveaux excités . . . . .	47
2.6.5	Création des spectres X . . . . .	48
2.6.6	Vérification des critères de sélection . . . . .	49
<b>3</b>	<b>Mesure et interprétation d'un spectre X émis par un plasma de Rb formé à une intensité laser de <math>\sim 6 \times 10^{14}</math> W/cm<sup>2</sup></b>	<b>53</b>
3.1	Dispositif expérimental . . . . .	54
3.1.1	Le laser PHELIX . . . . .	54
3.1.2	Les cibles utilisées . . . . .	54
3.1.3	Les spectromètres X . . . . .	54
3.1.4	Implantation des spectromètres X dans la chambre . . . . .	56
3.2	Spectres expérimentaux . . . . .	56
3.2.1	Extraction des spectres X . . . . .	56
3.2.2	Étalonnage spectral . . . . .	58
3.2.3	Étalonnage en intensité . . . . .	61
3.3	Caractérisation du plasma produit durant l'expérience . . . . .	63
3.3.1	Température et densité électronique . . . . .	64
3.3.2	Distribution ionique . . . . .	64
3.4	Identifications des raies et comparaisons avec les travaux antérieurs . . . . .	66
3.4.1	Travaux antérieurs . . . . .	66
3.4.2	Comparaison entre spectres expérimentaux et calculés . . . . .	66
3.4.3	Identification des raies . . . . .	74
<b>4</b>	<b>Caractérisation de la transition nucléaire <math>5^- \rightarrow 6^-</math> du <math>^{84}\text{Rb}</math></b>	<b>91</b>
4.1	Positionnement du problème . . . . .	91
4.1.1	Imprécisions sur les données disponibles dans la littérature . . . . .	91
4.1.2	Expériences de mesure de la transition $5^- \rightarrow 6^-$ . . . . .	93
4.2	Mesure hors faisceau de la transition $6^- \rightarrow 3^-$ . . . . .	94
4.2.1	Dispositif expérimental . . . . .	94
4.2.2	Description de la méthode d'analyse . . . . .	95
4.2.3	Résultats pour le $^{84m}\text{Rb}$ . . . . .	98
4.3	Mesure sous faisceau de la transition $5^- \rightarrow 3^-$ . . . . .	99
4.3.1	Dispositif expérimental . . . . .	99
4.3.2	Utilisation des différents types de spectres obtenus lors de l'expérience . . . . .	104
4.3.3	Analyse des données à partir des coïncidences $\gamma - \gamma$ . . . . .	104
4.3.4	Analyse des spectres directs . . . . .	109
4.4	Énergie de la transition $5^- \rightarrow 6^-$ . . . . .	111
4.5	Probabilité de transition réduite de la transition $5^- \rightarrow 6^-$ . . . . .	111
<b>5</b>	<b>Calcul du taux d'excitation par effet NEET de la transition <math>6^- \rightarrow 5^-</math> du <math>^{84}\text{Rb}</math></b>	<b>115</b>
5.1	Expression du taux d'excitation par effet NEET . . . . .	115
5.1.1	Expression de la probabilité d'occurrence de l'effet NEET $P_{NEET}$ . . . . .	116
5.1.2	Expression de l'élément de matrice de couplage atome-noyau . . . . .	117
5.1.3	Expression du taux d'excitation par effet NEET . . . . .	119
5.1.4	Méthode de calcul basée sur le code MCDF . . . . .	120
5.2	Comparaison avec les résultats expérimentaux en cible solide . . . . .	121
5.2.1	Calculs de $P_{NEET}$ dans la base des orbitales . . . . .	121
5.2.2	Calculs de $P_{NEET}$ dans la base des états $ JM\Pi\rangle$ . . . . .	123
5.3	Évaluation du taux d'excitation de la transition $6^- \rightarrow 5^-$ du $^{84}\text{Rb}$ dans un plasma produit par le laser PHELIX à une intensité de $\sim 6 \times 10^{14}$ W/cm <sup>2</sup> . . . . .	123
5.3.1	Taux d'excitations calculés par ISOMEX . . . . .	123

5.3.2	Taux d'excitations par effet NEET calculés à l'aide de MCDF . . . . .	126
5.3.3	Estimation du nombre d'isomères excités . . . . .	131
5.4	Calculs du taux d'excitation nucléaire à une température de $T = 400$ eV . . . . .	133
5.5	Discussion des conditions expérimentales permettant d'optimiser le nombre d'isomères excités . . . . .	134
<b>Conclusion et perspectives</b>		<b>139</b>
<b>Annexes</b>		<b>143</b>
<b>A Quelques éléments de structure atomique</b>		<b>143</b>
A.1	Description des états atomiques . . . . .	143
A.1.1	Cas non-relativiste . . . . .	143
A.1.2	Cas relativiste . . . . .	143
A.2	Description d'une configuration électronique . . . . .	144
A.2.1	Cas non-relativiste . . . . .	144
A.2.2	Cas relativiste . . . . .	144
A.3	Addition des moments cinétiques . . . . .	145
A.3.1	Le couplage $LS$ ou couplage de Russel-Saunders . . . . .	145
A.3.2	Le couplage $jj$ . . . . .	145
A.3.3	Choix du type de couplage . . . . .	145
A.4	Règles de sélection des transitions . . . . .	146
<b>B Procédures d'étalonnage spectral et d'alignement des spectres X</b>		<b>149</b>
B.1	Procédure d'étalonnage spectral . . . . .	149
B.2	Validité des procédures d'étalonnage et d'alignement . . . . .	152
B.2.1	Étalonnage des cristaux . . . . .	152
B.2.2	Alignements des spectres dans les zones de recouvrement entre cristaux . . . . .	152
<b>C Procédure d'étalonnage en intensité des spectres X</b>		<b>155</b>
C.1	Correction du <i>fading</i> . . . . .	155
C.2	Correction du nombre de lectures des écrans photostimulables . . . . .	157
C.3	Correction de la largeur des bandes de projection . . . . .	159
C.4	Réfectivités des cristaux . . . . .	160
C.5	Détermination de la transmission des photons X au travers des feuilles de protection . . . . .	162
C.6	Détermination de la fonction de réponse des écrans photostimulables . . . . .	163
<b>D Sources radioactives utilisées</b>		<b>165</b>
D.1	Source d' $^{152}\text{Eu}$ [99] . . . . .	165
D.2	Source de $^{133}\text{Ba}$ [94] . . . . .	165
D.3	Source de $^{60}\text{Co}$ [126] . . . . .	165
<b>E Probabilité de transition réduite nucléaire dans le modèle de Weisskopf</b>		<b>167</b>
E.1	Probabilité de transition réduite nucléaire . . . . .	167
E.2	Expressions des probabilités de transition réduites nucléaires dans le modèle de Weisskopf . . . . .	167
E.2.1	Transition électrique . . . . .	167
E.2.2	Transition magnétique . . . . .	167
<b>F Méthode de détermination du rapport d'intensité des transitions à 3,4 et 219 keV</b>		<b>169</b>

<b>G</b>	<b>Expression de l'élément de matrice de couplage atome-noyau</b>	<b>173</b>
G.1	Expression de $\langle \Psi_{f2}   H_M^L   \Psi_{i1} \rangle$ . . . . .	173
G.1.1	Expression dans la base des orbitales . . . . .	173
G.1.2	Expression dans la base des états atomiques $ JM\Pi\rangle$ . . . . .	174
G.2	Expression de $ W_{i1,f2} ^2$ . . . . .	176
G.2.1	Expression dans la base des orbitales . . . . .	176
G.2.2	Expression dans la base des états $ JM\Pi\rangle$ . . . . .	178
<b>H</b>	<b>Symboles <math>3j</math> et théorème de Wigner-Eckart</b>	<b>181</b>
H.1	Symbole $3j$ de Wigner . . . . .	181
H.1.1	Relation avec les coefficients de Clebsch-Gordan . . . . .	181
H.1.2	Propriétés . . . . .	181
H.2	Théorème de Wigner-Eckart . . . . .	182

# Introduction

La quête d'une énergie abondante, sûre et écologique a conduit l'Homme à se tourner vers le Soleil et vers le processus qui anime son cœur : la fusion nucléaire. La production d'énergie en quantité suffisante et en respectant l'environnement est, en effet, l'un des enjeux sociétaux majeurs du XXI<sup>ème</sup> siècle. Entre l'utilisation des énergies renouvelables ne permettant pas une production d'énergie suffisante pour subvenir à la demande et l'utilisation de la fission nucléaire dans des centrales dont la sûreté fait débat, la production d'énergie par fusion pourrait être une alternative séduisante. Plusieurs installations sont en cours de développement pour démontrer la possibilité de réaliser des réactions de fusion en laboratoire. Citons notamment les lasers mégajoules NIF<sup>1</sup> aux États-Unis, dont les premiers faisceaux ont été obtenus en 2010, LMJ<sup>2</sup> en France, dont la mise en service est imminente (2014) ainsi que le projet européen HIPER<sup>3</sup>. Dans le cadre de la fusion par confinement inertiel (FCI), une capsule contenant un mélange de Deutérium et Tritium est comprimée et chauffée à l'aide de faisceaux lasers afin d'amorcer les réactions de fusion productrices d'énergie. C'est dans ce contexte de développement de grandes installations laser que prend place notre étude des phénomènes d'excitations du noyau atomique dans les plasmas. Ces études ne pouvant pas être réalisées auprès des accélérateurs de particules conventionnels.

En effet, à l'aide de lasers de haute puissance, il est possible de produire des plasmas denses et chauds dans lesquels les atomes peuvent être fortement ionisés. Dans ces milieux particuliers, il est possible d'étudier comment les propriétés du noyau atomique peuvent être modifiées lorsqu'il est soumis à des conditions extrêmes de température et de densité. Dans un plasma, de nouveaux phénomènes d'excitation nucléaire peuvent devenir dominants et ainsi induire des modifications du peuplement des niveaux nucléaires et de leurs durées de vie apparentes. Ces études sont notamment essentielles pour une meilleure compréhension des processus astrophysiques, telle que la nucléosynthèse.

L'étude des différents phénomènes d'excitation des états nucléaires dans les plasmas créés par laser constitue une part importante des activités de la collaboration formée des groupes ENL<sup>4</sup> du CENBG et EEN<sup>5</sup> du CEA/DAM/DIF. Elle connaît un regain d'intérêt avec la mise en service prochaine d'installations multi-faisceaux laser de haut taux de répétition telles Apollon et ELI en Europe.

Afin de préparer les expériences sur ces futures installations, il est nécessaire de pouvoir prédire les taux d'excitations nucléaires dans les plasmas à l'aide de modèles fiables. Outre la complexité des phénomènes à décrire, le manque de données expérimentales univoques pour contraindre ces modèles représente une difficulté majeure. La contribution de ce travail de thèse consiste à tester la validité d'un modèle statistique développé au CEA/DAM/DIF pour calculer des taux d'excitations nucléaires dans le cas d'un noyau léger, le <sup>84</sup>Rb, afin de dimensionner une expérience de mise en évidence de l'excitation de ce noyau dans un plasma créé par laser.

---

1. NIF : *National Ignition Facility*  
2. LMJ : *Laser MégaJoule*  
3. HIPER : *HIgh Power laser Energy Research facility*  
4. ENL : *Excitations Nucléaires par Laser*  
5. EEN : *Excitations des États Nucléaires*



# Chapitre 1

## Excitations nucléaires dans les plasmas : contexte

### Introduction

L'étude des propriétés des états nucléaires et de leurs populations dans les plasmas denses et chauds est un sujet d'actualité avec la mise en service de lasers de grande énergie tels le NIF<sup>1</sup> aux États-Unis et le LMJ<sup>2</sup> en France. En effet, ces nouveaux lasers permettent de créer des plasmas dans des conditions thermodynamiques de température et de densité susceptibles d'induire des taux d'ionisation très élevés de la matière. Dans ces milieux très ionisés, les taux de réactions ainsi que les propriétés nucléaires telles les durées de vie des états peuvent être modifiées. Cependant très peu de données sont disponibles concernant les mécanismes d'excitation des niveaux nucléaires en jeu et les populations de ces niveaux qui en résultent. Ces dernières années plusieurs travaux théoriques ont été conduits pour évaluer les processus d'excitation nucléaire dans des plasmas à l'équilibre thermodynamique de densité massique autour de 0,01 g/cm<sup>3</sup> avec des températures de quelques dizaines à centaines d'eV [1, 2]. Parmi les processus étudiés, ceux qui mettent en jeu un couplage noyau-cortège électronique sont prédits comme pouvant jouer un rôle prépondérant dans l'excitation des états de basse énergie du noyau. Dans ce cadre, nous sommes intéressés à l'évaluation du taux d'excitation dans un plasma de l'isomère 6<sup>-</sup>, à 463 keV d'énergie d'excitation du <sup>84</sup>Rb vers le niveau 5<sup>-</sup> à 467 keV d'énergie d'excitation. Dans le premier paragraphe, deux types de mécanismes susceptibles de modifier les durées de vie des niveaux nucléaires dans les plasmas sont présentés. Les principaux processus d'excitation nucléaire au sein des plasmas sont rappelés dans le second paragraphe. Les troisième et quatrième paragraphes décrivent des études déjà menées sur l'excitation des noyaux de tantale et d'uranium dans des plasmas et présentent les spécificités du noyau de <sup>84</sup>Rb.

### 1.1 Les plasmas créés par laser : un nouvel environnement pour l'étude des propriétés nucléaires

L'enjeu de la physique nucléaire est l'étude des propriétés (durées de vie, description et population des niveaux d'énergie, voies de décroissance,...) du noyau atomique. Certaines de ces propriétés peuvent être modifiées suivant le milieu dans lequel le noyau est placé. La demi-vie  $T_{1/2}$  d'un niveau nucléaire s'écrit :

$$T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\sum_k \lambda_k} \quad (1.1)$$

$\lambda_k$  désignant le taux de transition associé au processus de désexcitation  $k$  de ce niveau. Celle-ci peut être modifiée par l'ouverture ou la fermeture d'une ou de plusieurs voies de désexcitation.

---

1. NIF : *National Ignition Facility*

2. LMJ : *Laser MégaJoule*

### 1.1.1 Modification de la durée de vie d'un niveau nucléaire par la fermeture ou l'ouverture d'une voie de désexcitation

#### Fermeture d'une voie de désexcitation par modification du cortège électronique

Deux processus sont majoritairement impliqués dans la désexcitation d'un niveau nucléaire excité d'énergie  $E_1$  vers un niveau d'énergie  $E_2$  : la désexcitation radiative et la conversion interne. Lors d'une désexcitation radiative un photon  $\gamma$  est émis avec l'énergie  $E_\gamma = E_1 - E_2$  (en négligeant l'énergie de recul du noyau). Lors d'une conversion interne, l'énergie disponible  $E_1 - E_2$  est transférée à un électron lié qui est alors éjecté du cortège électronique. L'énergie cinétique de cet électron émis est :  $E_e = E_1 - E_2 - E_b$ ,  $E_b$  étant l'énergie de liaison de la couche sur laquelle était situé l'électron. Le rapport des taux de désexcitation par conversion interne  $\lambda_e$  et par désexcitation radiative  $\lambda_\gamma$  définit le *coefficient de conversion interne*  $\alpha_e$ . Celui-ci est lui-même une somme des coefficients de conversion interne sur les différentes couches atomiques :  $\alpha_e = \alpha_e(K) + \alpha_e(L) + \alpha_e(M) + \dots$ . La demi-vie d'un niveau nucléaire où les deux processus décrits ci-dessus prennent place s'écrit donc :

$$T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda_\gamma + \lambda_e} = \frac{\ln 2}{\lambda_\gamma(1 + \alpha_e)} = \frac{\ln 2}{\lambda_\gamma(1 + \alpha_e(K) + \alpha_e(L) + \alpha_e(M) + \dots)} \quad (1.2)$$

La demi-vie de ce niveau dépend donc fortement du cortège électronique. Cette propriété a été mise en évidence sur le premier état excité  $J^\pi = 3/2^+$  à 35,5 keV du  $^{125}\text{Te}$  ( $Z = 52$ ) [3]. En faisant, varier l'état de charge  $Q$  de l'ion Te, Attallah et al. ont pu observer une modification de la durée de vie de l'état  $3/2^+$  [3]. Celle-ci passe de 1,49 ns dans un atome neutre à 11 ns dans un ion auquel 48 électrons ont été arrachés. Cette augmentation de la demi-vie est expliquée par le blocage de la conversion interne en couche K. En effet, l'énergie de liaison de cette couche varie de 31,8 keV pour  $Q = 0$  à 36,6 keV pour  $Q = 48^+$ . Cette variation est due à la modification de l'écrantage du potentiel du noyau et la modification des interactions électron-électron. Pour un état de charge de  $Q = 48^+$ , l'énergie de liaison de la couche K est donc supérieure à l'énergie disponible lors de la désexcitation de l'état  $3/2^+$ . La conversion interne sur cette couche n'est alors plus possible :  $\alpha_e(K) = 0$ . Par conséquent, d'après l'équation (1.2), la durée de vie augmente.

Un autre exemple de modification des propriétés nucléaires induite par une modification du cortège électronique est celui du  $^7\text{Be}$ . Ce noyau décroît, avec une demi-vie de 53,22 jours, vers le  $^7\text{Li}$ . Cette décroissance est réalisée exclusivement par capture électronique. Dans ce processus, un électron du cortège électronique est absorbé par un proton du noyau pour former un neutron. Si l'on ionise totalement un atome de  $^7\text{Be}$  alors cet élément devient stable.

Dans un plasma, les atomes peuvent être fortement ionisés, ce qui peut induire des modifications des durées de vie des niveaux nucléaires au vu des deux exemples précédents. Les plasmas créés par laser sont donc des milieux privilégiés pour étudier l'influence du cortège électronique sur la demi-vie des niveaux nucléaires.

#### Apparition d'une nouvelle voie de désexcitation

Un autre phénomène susceptible de modifier la durée de demi-vie d'un état nucléaire est l'ouverture de nouvelles voies de désexcitation. En effet, si un processus supplémentaire de désexcitation apparaît ou ne peut plus être considéré comme négligeable, la demi-vie de l'état nucléaire devient :

$$T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda_\gamma + \lambda_e + \lambda_{new}} \quad (1.3)$$

où  $\lambda_{new}$  désigne le taux de transition associé à la nouvelle voie de désexcitation. L'ouverture de cette nouvelle voie de désexcitation peut être favorisée par le milieu dans lequel le noyau est placé.

Considérons l'exemple du noyau de  $^{93}\text{Mo}$  placé dans un plasma. Son schéma de niveaux partiel est présenté sur la figure 1.1.

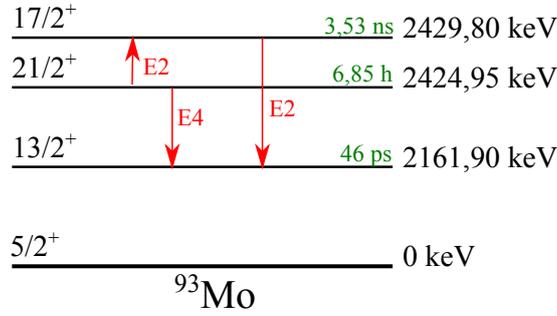


FIGURE 1.1 – Schéma de niveaux partiel du  $^{93}\text{Mo}$ .

Ce noyau possède un état isomérique  $J^\pi = \frac{21}{2}^+$  situé à une énergie d'excitation de 2424,95 keV. Dans un atome isolé, cet état décroît *via* une transition  $E4$ , avec une demi-vie  $T_{1/2} = 6,85$  h, vers l'état  $J^\pi = \frac{13}{2}^+$  situé 2161,90 keV au dessus du fondamental. Dans un plasma, l'état isomérique  $\frac{21}{2}^+$  peut être excité vers l'état  $J^\pi = \frac{17}{2}^+$  ayant une énergie d'excitation de 4,85 keV plus élevée. Cet état  $\frac{17}{2}^+$  décroît également vers l'état  $\frac{13}{2}^+$ . Ainsi, en milieu plasma, la nouvelle voie de désexcitation de l'état isomérique  $\frac{21}{2}^+$  *via* une excitation vers l'état  $\frac{17}{2}^+$  est ouverte. Il s'ensuit une modification de la durée de demi-vie effective de cet isomère. L'évolution de celle-ci en fonction de la température du plasma (énergie moyenne des particules le composant) a été déterminée par Gosselin et al. [4] et est tracée sur la figure 1.2. Elle est calculée en considérant uniquement la désexcitation  $\frac{21}{2}^+ \rightarrow \frac{13}{2}^+$  (trait pointillé) ou en prenant en compte l'excitation vers l'état  $\frac{17}{2}^+$  (transition  $\frac{21}{2}^+ \rightarrow \frac{17}{2}^+ \rightarrow \frac{13}{2}^+$  tracée en trait plein).

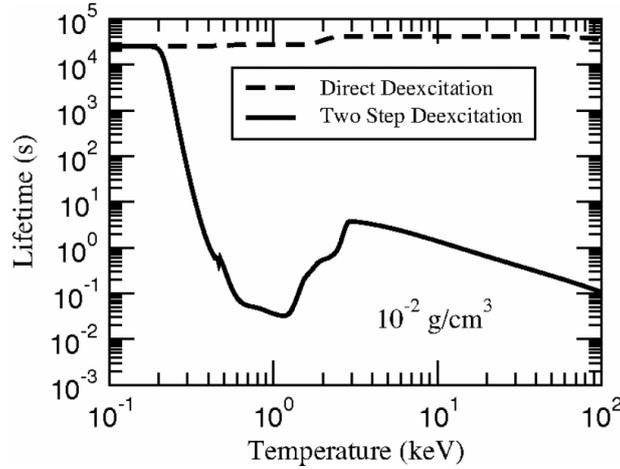


FIGURE 1.2 – Évolution de la demi-vie de l'état isomérique  $\frac{21}{2}^+$  du  $^{93}\text{Mo}$  en fonction de la température du plasma. Calculs effectués pour une densité de  $10^{-2}$  g/cm<sup>2</sup>. Celle-ci est calculée en ne considérant que la désexcitation  $\frac{21}{2}^+ \rightarrow \frac{13}{2}^+$  (trait pointillé) ou en prenant en compte l'excitation vers l'état  $\frac{17}{2}^+$  (trait plein).

Nous constatons que la demi-vie de l'état  $\frac{21}{2}^+$  évolue très peu en fonction de la température (à la modification du coefficient de conversion interne avec le degré d'ionisation près) si l'on considère uniquement la transition  $\frac{21}{2}^+ \rightarrow \frac{13}{2}^+$ . A l'inverse, en prenant en compte l'excitation vers l'état  $\frac{17}{2}^+$ , la demi-vie de l'isomère est fortement modifiée pour une température supérieure à 200 eV. Celle-ci varie alors de plusieurs ordres de grandeur.

Les plasmas créés par laser permettraient d'étudier les propriétés du noyau atomique dans un environnement extrême en température et en densité. Dans l'Univers, les plasmas sont très répandus (étoiles, nébuleuses, queues de comètes,...) et l'étude de la modification des demi-vies des niveaux nucléaires dans ces milieux présente un intérêt astrophysique.

## Les chronomètres cosmologiques dans les plasmas

La modification de la durée de vie effective d'un noyau lorsque celui-ci est placé dans un plasma peut avoir des conséquences sur l'étude de certains processus de nucléosynthèse. A titre d'exemple, citons le cas du  $^{176}\text{Lu}$  dont une partie du schéma de niveaux est représentée sur la figure 1.3.

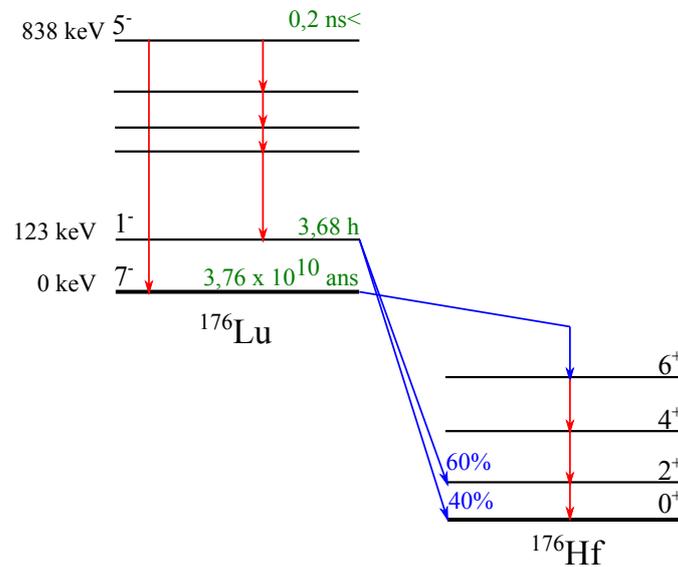


FIGURE 1.3 – Schéma de niveaux partiel du  $^{176}\text{Lu}$  et décroissance  $\beta^-$  vers l' $^{176}\text{Hf}$

L'état fondamental du  $^{176}\text{Lu}$  ( $J^\pi = 7^-$ ,  $T_{1/2} = 3,76 \times 10^{10}$  ans) décroît par radioactivité  $\beta^-$  vers le  $^{176}\text{Hf}$ . Grâce à la longue durée de vie de son état fondamental, le  $^{176}\text{Lu}$  a été considéré comme un chronomètre possible du *processus s* (*s* signifiant *slow*) [5]. Ce dernier est caractérisé par la formation d'éléments plus lourds que le fer par réactions  $(n, \gamma)$  avec des taux de réactions faibles et sur des échelles de temps allant de 100 ans à  $10^5$  ans [6]. Cette capture de neutron est en compétition avec la désintégration  $\beta$  qui intervient sur des échelles de temps plus courtes.

Le  $^{176}\text{Lu}$  possède un état isomérique ( $J^\pi = 1^-$ ,  $T_{1/2} = 3,66$  h) situé à 123 keV au dessus de l'état fondamental qui décroît également vers l' $^{176}\text{Hf}$ . L'existence de cet état excité remet en question l'utilisation du  $^{176}\text{Lu}$  comme chronomètre astronomique. En effet, les résultats des calculs de Klay et al. ont montré que la demi-vie effective de l'état fondamental  $^{176}\text{Lu}$  est fortement modifiée en fonction de la température du plasma stellaire [7]. Celle-ci peut atteindre  $T_{1/2} = 2 \times 10^{-2}$  an pour un plasma de température  $T = 6 \times 10^8$  K (51,8 keV). Cette réduction de la demi-vie apparente est due à l'excitation de l'état fondamental vers l'état isomérique *via* des états de plus hautes énergies (état  $5^-$  à 838 keV notamment). La désintégration  $\beta$  prend alors le pas sur la capture de neutrons, ce qui provoque une modification des abondances des éléments formés dans ce processus. Notons que la même situation se retrouve dans les noyaux d' $^{26}\text{Al}$  et de  $^{34}\text{Cl}$ , également d'intérêt pour l'étude de la nucléosynthèse [8]. L' $^{26}\text{Al}$  est notamment utilisé pour cartographier (détection du  $\gamma$  de décroissance à 1809 keV) et étudier les régions de formation stellaire. Le  $^{34}\text{Cl}$ , ayant une durée de vie plus courte, pourrait être utilisé pour étudier des phénomènes brefs tels que les supernovae et les sursauts  $\gamma$ .

Les lasers de haute énergie permettent la création de plasmas pouvant être utilisés pour étudier en laboratoire des processus d'intérêt astrophysique. Pour comprendre et prédire les modifications des demi-vies des états nucléaires dans les plasmas, il est nécessaire d'identifier les processus d'excitation auxquels les noyaux sont soumis dans ces milieux.

## 1.2 Processus d'excitation nucléaire dans un plasma

En milieu plasma, les principaux processus d'excitation nucléaire pouvant avoir lieu sont classés en deux catégories :

- les processus d'excitation directs dus aux interactions du noyau avec les particules du plasma (photons, électrons et ions)
- les processus d'excitation indirects faisant intervenir un couplage entre le noyau et le cortège électronique

### 1.2.1 Les processus d'excitation directs

Les plasmas contiennent un grand nombre d'électrons libres, de photons et d'ions qui peuvent tous induire des excitations nucléaires. Les principaux processus d'excitation nucléaire associés sont rappelés ci-dessous.

#### La photoexcitation

Dans un processus de photoexcitation, le noyau initialement dans un état d'énergie  $E_1$  est excité vers l'état d'énergie  $E_2$  ( $E_2 > E_1$ ) par l'absorption d'un photon. Il s'agit d'un processus résonant : le photon doit avoir une énergie égale à l'énergie de la transition nucléaire  $\Delta E_{12} = E_2 - E_1$  (à la largeur des niveaux près). La section efficace d'absorption d'un photon d'énergie  $E_\gamma$ , exprimée en  $\text{cm}^2$ , est donnée par la formule de Breit et Wigner [9] :

$$\sigma_\gamma(E_\gamma) = \frac{\pi}{2} \left( \frac{\hbar c}{E_\gamma} \right)^2 \frac{2I_2 + 1}{2I_1 + 1} \frac{\Gamma_2^\gamma \Gamma_2}{(E_\gamma - \Delta E_{12})^2 + \left( \frac{\Gamma_2}{2} \right)^2} \quad (1.4)$$

où :

- $I_1$  et  $I_2$  sont les moments angulaires totaux des états 1 et 2 respectivement
- $\Gamma_2^\gamma$  et  $\Gamma_2$  sont respectivement les largeurs radiative et totale de l'état 2. Ces deux largeurs sont reliées par le coefficient de conversion interne :  $\Gamma_2 = (1 + \alpha_e) \Gamma_2^\gamma$ . La largeur totale  $\Gamma$  d'un état s'exprime à partir de la demi-vie de cet état :  $\Gamma = \frac{\hbar \ln 2}{T_{1/2}}$ .

Les largeurs nucléaires étant, en général, très faibles (par exemple, la largeur de l'état  $5^-$  à 466 keV du  $^{84}\text{Rb}$  est :  $\Gamma_{5^-} = 5,1 \times 10^{-8}$  eV), nous pouvons considérer que la distribution en énergie des photons est constante sur une largeur nucléaire. Ainsi, l'équation (1.4) devient :

$$\sigma_\gamma(E_\gamma) = \pi^2 \left( \frac{\hbar c}{E_\gamma} \right)^2 \frac{2I_2 + 1}{2I_1 + 1} \Gamma_2^\gamma \delta(E_\gamma - \Delta E_{12}) \quad (1.5)$$

Le nombre de noyaux excités de l'état 1 vers l'état 2, par unité de volume et par unité de temps, est alors donné par :

$$\frac{dN_{1 \rightarrow 2}}{dt} = 4\pi n_{ion} \int_{E_\gamma=0}^{\infty} \sigma_\gamma(E_\gamma) g(E_\gamma) dE_\gamma \quad (1.6)$$

où  $n_{ion}$  est la densité ionique et  $g(E_\gamma)$  représente le nombre de photons, par unité d'énergie, de temps, de surface et par stéradian. L'intégrale de l'équation (1.6) devient alors :

$$\frac{dN_{1 \rightarrow 2}}{dt} = 4\pi^3 n_{ion} \left( \frac{\hbar c}{\Delta E_{12}} \right)^2 \frac{2I_2 + 1}{2I_1 + 1} \Gamma_2^\gamma g(\Delta E_{12}) \quad (1.7)$$

A l'équilibre thermodynamique (voir chapitre 2 pour plus de détails),  $g(E_\gamma)$  est donné par la distribution de Planck :

$$g(E_\gamma) = \frac{2E_\gamma^2}{h^3 c^2} \frac{1}{\exp\left(\frac{E_\gamma}{T}\right) - 1} \quad (1.8)$$

où  $T$  est la température du plasma exprimée en unité d'énergie.

Le taux d'excitation  $\lambda_{photo}$ , exprimé en  $\text{s}^{-1}$ , s'écrit :

$$\lambda_{photo} = \frac{1}{n_{ion}} \frac{dN_{1 \rightarrow 2}}{dt} = \frac{2I_2 + 1}{2I_1 + 1} \frac{\Gamma_2^\gamma}{\hbar} \frac{1}{\exp\left(\frac{\Delta E_{12}}{T}\right) - 1} \quad (1.9)$$

Notons que  $\lambda_{photo}$  ne dépend que des propriétés des états nucléaires et de la température du plasma. Plus cette température augmente et plus le taux d'excitation  $\lambda_{photo}$  croît.

## La diffusion inélastique d'électrons

Dans ce processus, une partie de l'énergie d'un électron libre est transférée au noyau par l'échange d'un photon virtuel. L'excitation nucléaire n'est possible que si l'électron possède une énergie supérieure à celle de la transition nucléaire. Différents modèles théoriques existent pour évaluer les sections efficaces d'excitation ( $e, e'$ ) : approche semi-classique, modèles PWBA<sup>3</sup> et DWBA<sup>4</sup> [10, 11]. L'approche semi classique utilise une trajectoire de l'électron décrite de manière classique tandis que les méthodes PWBA et DWBA utilisent une description à partir d'ondes planes et d'ondes distordues respectivement. Selon les modèles théoriques utilisés, les sections efficaces ( $e, e'$ ) varient sur plusieurs ordres de grandeur mais restent cependant faibles ( $\sigma_{(e,e')} < 10^{-32}$  cm<sup>2</sup> dans le cas du premier niveau excité du <sup>181</sup>Ta pour des électrons d'énergies inférieures à 100 keV [10]).

### 1.2.2 Les processus d'excitation indirects

Les électrons et photons du plasma peuvent également interagir avec le cortège électronique et induire ainsi des excitations nucléaires de manière indirecte.

#### L'excitation nucléaire par capture électronique

L'excitation nucléaire par capture électronique (NEEC<sup>5</sup>) est un processus dans lequel un électron libre est capturé sur un état lié de l'atome. L'énergie disponible est alors transférée au noyau par l'intermédiaire d'un photon virtuel. L'effet NEEC, proposé par Goldanskii et Namiot [12], est le processus inverse de la conversion interne. Le schéma de principe d'une excitation nucléaire par effet NEEC est représenté sur la figure 1.4.

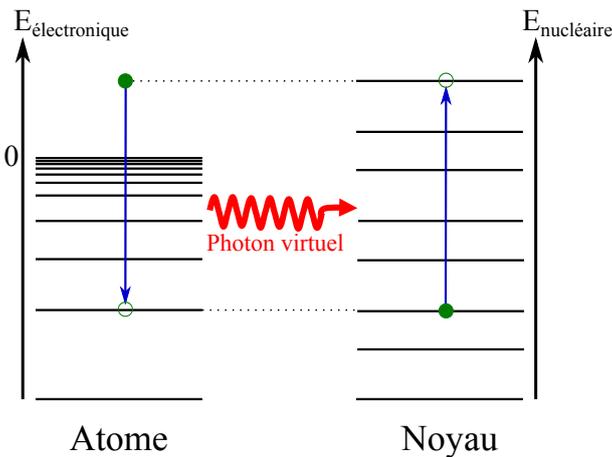


FIGURE 1.4 – Schéma représentant un processus NEEC.

Pour qu'une excitation par effet NEEC puisse avoir lieu, l'énergie cinétique de l'électron libre  $E_e$  doit vérifier :  $E_e = \Delta E_{12} - E_b$  où  $\Delta E_{12}$  est l'énergie de la transition nucléaire et  $E_b$  l'énergie de liaison de l'électron sur la couche électronique finale.

La section efficace d'excitation par effet NEEC, exprimée en cm<sup>2</sup>, est donnée par la règle d'or de Fermi [13] :

$$\sigma_{NEEC}(E_e) = \frac{2\pi}{\hbar v} \left| \langle \Psi_F | H_M^L | \Psi_I \rangle \right|^2 \rho(E_e) \quad (1.10)$$

où :

- $v$  est la vitesse de l'électron
- $\langle \Psi_F | H_M^L | \Psi_I \rangle$  est l'élément de matrice de couplage atome-noyau identique à celui intervenant dans le processus de conversion interne.
- $\rho(E_e)$  est la densité d'états électroniques finals

3. PWBA : *Plane Wave Born Approximation*

4. DWBA : *Distorted Wave Born Approximation*

5. NEEC : *Nuclear Excitation by Electron Capture*

Le taux d'excitation par effet NEEC,  $\lambda_{NEEC}$  est alors calculé comme une somme sur toutes les énergies des électrons libres pouvant être capturés sur les différentes couches électroniques [13] :

$$\lambda_{NEEC} = \int_{E=0}^{\Delta E_{12}} \sigma_{NEEC}(E)v(E)n_e(E)f_{FD}(E)[1 - f_{FD}(E - \Delta E_{12})]dE \quad (1.11)$$

où :

- $v(E)$  est la vitesse de l'électron capturé
- $n_e(E)$  est la densité d'électrons libres à l'énergie  $E$
- $f_{FD}(E)$  est la distribution de Fermi-Dirac

Dans l'équation (1.11), le terme  $n_e(E)f_{FD}(E)$  représente la fonction de distribution des électrons libres et le terme  $1 - f_{FD}(E - \Delta E_{12})$  la proportion d'états liés inoccupés.

Notons, qu'à ce jour, aucune mise en évidence de l'effet NEEC n'a été publiée.

## L'excitation nucléaire par transition électronique

Le processus d'excitation nucléaire par transition électronique (NEET<sup>6</sup>), proposé par Morita en 1973 [14], est un phénomène dans lequel une transition électronique entre deux états atomiques liés induit une excitation nucléaire. Le processus NEET, schématisé sur la figure 1.5, est résonnant : les transitions atomique et nucléaire doivent avoir la même énergie (à la largeur des niveaux près). De plus, la conservation du moment cinétique impose aux deux transitions d'être du même type (électrique ou magnétique) et d'avoir la même multipolarité. Notons que l'effet NEET n'est pas équivalent à une émission X d'un ion suivie d'un processus de photoexcitation. En effet, il a lieu au sein d'un même ion et l'échange d'énergie entre le noyau et son cortège électronique est réalisé par l'intermédiaire d'un photon virtuel.

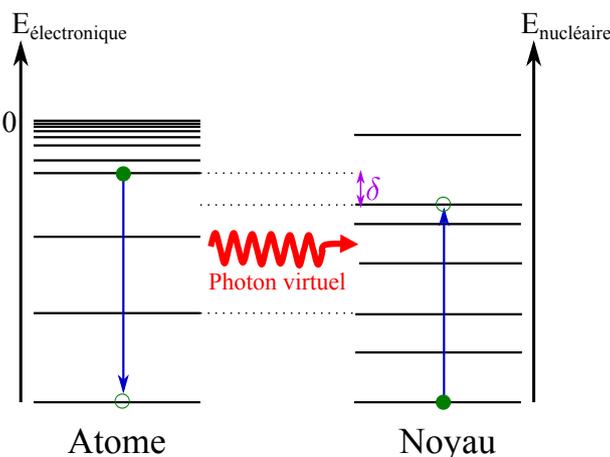


FIGURE 1.5 – Schéma représentant un processus NEET.  $\delta$  est la différence d'énergie entre la transition atomique et la transition nucléaire.

L'effet NEET a été recherché dans les noyaux d'  $^{197}\text{Au}$  [15, 16],  $^{189}\text{Os}$  [17, 18, 19, 20, 21],  $^{193}\text{Ir}$  [22] et de  $^{237}\text{Np}$  [23]. Dans ces expériences, l'état atomique était préparé en créant des lacunes en couche K par l'intermédiaire de faisceaux de photons monoénergétiques produits à l'aide de synchrotrons, de faisceaux d'électrons ou à l'aide d'une source radioactive intense dans le cas du  $^{237}\text{Np}$  [23].

Pour un même noyau d'  $^{197}\text{Au}$  ou d'  $^{189}\text{Os}$ , la probabilité d'occurrence de l'effet NEET mesurée,  $P_{NEET}^{exp}$ , variait de plusieurs ordres de grandeur selon les expériences. En 2001, Harston [24] a effectué une analyse des données publiées sur l'  $^{197}\text{Au}$ ,  $^{189}\text{Os}$  et le  $^{237}\text{Np}$  afin de déterminer les raisons de ces importantes variations. Il suggère que certains de ces résultats aient pu être biaisés par des excitations directes et émet des doutes sur la validité des résultats de la seule expérience réalisée sur le  $^{237}\text{Np}$  [23]. Les résultats jugés non ambigus par Harston, complétés par ceux de l'  $^{193}\text{Ir}$  publiés plus récemment, sont présentés dans le tableau 1.1. Les résultats

6. NEET : *Nuclear Excitation by Electron Transition*

concernant le  $^{237}\text{Np}$  y sont également rapportés. Dans ce tableau, les transitions nucléaires et atomiques résonnantes, les valeurs de  $P_{NEET}^{exp}$  mesurées ainsi que celles du désaccord en énergie  $\delta$  (voir figure 1.5) sont présentées.

Noyau	Transition nucléaire		Transition atomique		$\delta$ (keV)	$P_{NEET}^{exp}$
	$J_1^\pi \rightarrow J_2^\pi$	Nature	Transition	Nature		
$^{197}\text{Au}$	$\frac{3}{2}^+ \rightarrow \frac{1}{2}^+$	$M1 + E2$	$3s \rightarrow 1s$	$M1$	-0,051	$(5,0 \pm 0,6) \times 10^{-8}$ [15]
$^{189}\text{Os}$	$\frac{3}{2}^- \rightarrow \frac{5}{2}^-$	$M1 + E2$	$3s \rightarrow 1s$	$M1$	1,285	$< 9 \times 10^{-10}$ [21]
$^{237}\text{Ir}$	$\frac{3}{2}^+ \rightarrow \frac{1}{2}^+$	$M1 + E2$	$3s \rightarrow 1s$	$M1$	0,107	$(2,8 \pm 0,4) \times 10^{-8}$ [22]
$^{237}\text{Np}$	$\frac{5}{2}^+ \rightarrow \frac{7}{2}^-$	$E1$	$2p_{3/2} \rightarrow 1s$	$E1$	-1,901	$(2,1 \pm 0,6) \times 10^{-4}$ [23]

TABLEAU 1.1 – Caractéristiques des transitions nucléaires et atomiques et probabilités  $P_{NEET}^{exp}$  obtenues lors des expériences de mise en évidence de l’effet NEET dans des cibles solides.  $J_1^\pi$  et  $J_2^\pi$  désignent les moments angulaires des états nucléaires initial et final.

Les valeurs de la probabilité  $P_{NEET}^{exp}$  présentées dans le tableau 1.1 sont très faibles. Le taux d’excitation NEET mesuré pour le  $^{237}\text{Np}$  est élevé en comparaison de celui déterminé dans les autres noyaux et est très différent de celui obtenu théoriquement (nous le vérifierons au chapitre 5). Dans le cas de  $^{189}\text{Os}$ , seule une borne supérieure sur la probabilité NEET a été obtenue. Au vu de ces résultats, l’effet NEET a été mis en évidence sans ambiguïté dans les noyaux  $^{197}\text{Au}$  et  $^{237}\text{Ir}$ . Notons que le processus inverse de l’effet NEET, l’effet BIC<sup>7</sup> a également été observé dans le  $^{125}\text{Te}$  [25].

Disposer, comme dans un plasma, d’un grand nombre de transitions atomiques d’énergies différentes devrait permettre d’augmenter sensiblement la probabilité d’observer l’effet NEET. En effet, les plasmas sont constitués d’un grand nombre d’ions ayant des états de charge différents. Si l’on considère tous les ions d’un même état de charge, le peuplement des sous-couches électroniques de ces ions diffère d’un ion à l’autre. Il en résulte ainsi un grand nombre de transitions électroniques dont certaines peuvent résonner avec la transition nucléaire. Aussi, la probabilité d’obtenir une transition électronique résonante avec la transition nucléaire est plus élevée. Ces considérations sont à l’origine de l’intérêt pour la recherche de la mise en évidence de l’effet NEET en milieu plasma.

D’autres processus d’excitation nucléaire, de probabilités plus faibles, sont également prédits [26] mais ne seront pas décrits dans ce mémoire.

### 1.3 Excitations nucléaires dans un plasma : cas des noyaux $^{235}\text{U}$ et $^{181}\text{Ta}$

Les lasers de grande énergie (plusieurs dizaines de joules à kilo joules) et d’impulsions longues (centaines de picosecondes à plusieurs nanosecondes) disponibles depuis plusieurs années permettent avec des intensités sur cible de l’ordre de quelques  $10^{13}$  à  $10^{15}$  W/cm<sup>2</sup> de produire des plasmas à des températures de quelques dizaines d’eV à quelques keV. Dans ces conditions, des états nucléaires à faible énergie d’excitation ( $E <$  quelques keV) sont susceptibles d’être excités.

Des expériences ont été menées sur les noyaux de  $^{235}\text{U}$  et de  $^{181}\text{Ta}$  dans le but de mettre en évidence leurs excitations éventuelles dans des plasmas. Elles sont décrites ci dessous. Notons qu’aucun résultat positif indiscutable sur ces noyaux n’a été publié à ce jour.

#### 1.3.1 Le cas de $^{235}\text{U}$

L’ $^{235}\text{U}$  semble être un très bon candidat pour les expériences d’excitation nucléaire dans les plasmas disponibles aujourd’hui car il possède un état isomérique ( $J^\pi = \frac{1}{2}^+$ ,  $T_{1/2} = 26,8$  min) situé seulement 76,8 eV au dessus de l’état fondamental ( $J^\pi = \frac{7}{2}^-$ ). La désexcitation de l’état isomérique vers l’état fondamental a lieu par une transition  $E3$ . Le coefficient de conversion

7. BIC : *Bound Internal Conversion*

interne associé à cette transition a été estimé à  $\alpha_e = 2 \times 10^{10}$  [27]. Les largeurs radiatives et totales qui en découlent sont respectivement :  $\Gamma_{1/2+} = 2,84 \times 10^{-19}$  eV et  $\Gamma_{1/2+}^\gamma = 1,42 \times 10^{-29}$  eV. La très faible largeur radiative rend la photoexcitation directe de l'état fondamental vers l'isomère très peu probable ( $\sigma_\gamma(76,8 \text{ eV}) = 2,31 \times 10^{-42} \text{ cm}^2$  à la résonance).

Plusieurs expériences [28, 29, 30] ont été menées pour mettre en évidence l'excitation vers l'isomère du  $^{235}\text{U}$  par effet NEET. Les conclusions de ces études sont contradictoires. Harston et Chemin ont publié une analyse de ces expériences et mis en évidence des sources possibles d'erreur [2]. Ils ont également prédit que les transitions atomiques  $6p_{1/2} \rightarrow 5d_{5/2}$  et  $6p_{5/2} \rightarrow 6p_{1/2}$  sont résonantes avec la transition nucléaire pour des températures de plasma de 20 eV et 100 eV respectivement. Afin de clarifier la situation autour de ces résultats et de valider les taux d'excitation par effet NEET calculés [2, 1] une expérience a été réalisée en 2004 par le groupe ENL en collaboration avec le groupe EEN<sup>8</sup> du CEA/DAM/DIF [31]. Lors de cette expérience, le plasma d' $^{235}\text{U}$  était produit à l'aide d'une impulsion laser (énergie de 1 J et durée d'impulsion de 5 ns) avec une intensité de l'ordre de  $10^{13} \text{ W/cm}^2$ . Le plasma en expansion était collecté sur une feuille d'or. Après quelques tirs, ce collecteur était placé devant un détecteur d'électrons (channeltron) et des détecteurs  $\alpha$  (diodes Si et CsI). La détection retardée des électrons de conversion émis lors de la désexcitation de l'isomère était recherchée comme signature de son excitation. La détection des électrons en anti-coïncidence avec les  $\alpha$  de décroissance de  $^{234}\text{U}$ , présent dans la cible, permettait de réduire significativement le bruit de fond. Lors de cette expérience seule une limite supérieure au taux d'excitation par effet NEET a été déterminée :  $\lambda_{NEET} < 6 \times 10^{-6} \text{ s}^{-1}$ . Cependant, cette expérience a pu mettre en évidence un certain nombre de difficultés expérimentales pouvant expliquer les différences observées sur les taux d'excitation précédemment publiés [28, 29, 30]. Cette limite supérieure est compatible avec les résultats des calculs de Morel et al. [1] donnant un taux NEET variant entre  $3 \times 10^{-6} \text{ s}^{-1}$  et  $10^{-5} \text{ s}^{-1}$  pour un plasma d' $^{235}\text{U}$  dans les mêmes conditions de température et de densité que celles de l'expérience.

### 1.3.2 Le cas du $^{181}\text{Ta}$

Le  $^{181}\text{Ta}$  possède un état isomérique ( $J^\pi = \frac{9}{2}^-$ ,  $T_{1/2} = 6,05 \text{ }\mu\text{s}$ ) situé à 6,237 keV de l'état fondamental ( $J^\pi = \frac{7}{2}^+$ ). La décroissance de cet état isomérique vers l'état fondamental, *via* une transition  $E1$ , a lieu principalement par conversion interne ( $\alpha_e = 70,5$ ). La faible largeur radiative de l'état isomérique ( $\Gamma_{9/2-}^\gamma = 1,05 \times 10^{-12}$  eV) rend la photoexcitation peu probable ( $\sigma_\gamma(6,237 \text{ keV}) = 1,30 \times 10^{-28} \text{ cm}^2$  à la résonance). La diffusion inélastique ( $e, e'$ ) pourrait participer à l'excitation nucléaire bien que sa probabilité soit également faible : Tkalya prédit une section efficace de quelques  $10^{-33} \text{ cm}^2$  pour des électrons d'énergie inférieure à 10 keV [10].

En 2000, Andreev et al. ont rapporté la mise en évidence de l'excitation du  $^{181}\text{Ta}$  dans un plasma laser avec un taux important de  $10^5$  noyaux excités par tir [32]. Le plasma était produit à l'aide d'un laser picoseconde d'une intensité de  $1 - 4 \times 10^{16} \text{ W/cm}^2$ . Les auteurs expliquaient ce fort taux d'excitation par une augmentation drastique de la section efficace de photoexcitation causée par un accroissement de la largeur de l'état isomérique dans le plasma.

Afin de confirmer (ou d'infirmer) ce résultat, le groupe ENL en collaboration avec le groupe EEN du CEA/DAM/DIF et le groupe PETRUX<sup>9</sup> du CELIA<sup>10</sup> a mené une campagne expérimentale auprès du laser Aurore du CELIA. Ce laser kilohertz délivre des impulsions laser d'une durée de 45 fs et pouvant atteindre une intensité sur cible de quelques  $10^{16} \text{ W/cm}^2$ . Dans un premier temps, des mesures ayant pour objectif la caractérisation des distributions en énergie des photons et des électrons émis par le plasma ont été réalisées [33, 34]. Afin de mesurer l'excitation de l'état fondamental du  $^{181}\text{Ta}$  vers son état isomérique, un scintillateur NaI, blindé pour s'affranchir de l'émission X du plasma, était placé dans la chambre expérimentale afin de détecter les  $\gamma$  de désexcitation de l'isomère. Le nombre de ces  $\gamma$  détectés doit décroître au cours du temps avec une période de 6,05  $\mu\text{s}$ . Les résultats négatifs obtenus lors de cette expérience ne confirment donc pas ceux d'Andreev et al. [32] pourtant réalisés dans des conditions similaires.

8. EEN : *Excitations des États Nucléaires*

9. PETRUX : *Particules Et Transport, Rayonnement Ultra-bref, matière sous conditions eXtrêmes*

10. CELIA : *CEntre Lasers Intenses et Applications*

Deux autres noyaux, avec des états excités de basse énergie d'excitation sont des candidats potentiels pour l'étude de l'effet NEET dans les plasmas créés par laser : le  $^{201}\text{Hg}$  et le  $^{84}\text{Rb}$  [35]. Le  $^{201}\text{Hg}$  possède un état isomérique ( $J^\pi = \frac{1}{2}^-$ ,  $T_{1/2} = 81$  ns) situé à une énergie d'excitation de 1,565 keV. Pour un atome de  $^{201}\text{Hg}$ , cet isomère décroît principalement par conversion interne ( $\alpha_e = 4,7 \times 10^4$ ) via une transition  $M1 + E2$ . L'étude de l'excitation de son état fondamental vers l'état isomérique par le processus NEET fait l'objet de la thèse de M. Comet [36]. Les taux d'excitations importants obtenus dans le cadre de cette thèse font du  $^{201}\text{Hg}$  un bon candidat pour la mise en évidence de l'effet NEET. Cependant, la détection retardée d'électrons ayant des énergies inférieures à 1 keV reste difficile et est actuellement à l'étude.

Dans le cas du  $^{84}\text{Rb}$ , et contrairement à tous les cas évoqués ci-dessus, c'est l'excitation d'un niveau isomérique, via une transition de basse énergie qui est recherchée. Une telle désexcitation provoquée d'isomères n'a jamais été mise en évidence. Elle est potentiellement source d'applications. L'étude de l'excitation par effet NEET du  $^{84m}\text{Rb}$  est l'objet de ce mémoire, nous décrivons plus en détail ce noyau et les premières études réalisées sur celui-ci dans le paragraphe suivant.

## 1.4 Excitation de l'état $J^\pi = 6^-$ vers l'état $J^\pi = 5^-$ du $^{84}\text{Rb}$ dans un plasma

### 1.4.1 Description du noyau

Le schéma de niveaux partiel du  $^{84}\text{Rb}$  est représenté sur la figure 1.6. Il est extrait de l'évaluation de Kondev [37], mise en ligne sur la base de données NUDAT<sup>11</sup>. Il s'agit d'un noyau instable ( $T_{1/2} = 32,82$  jours) qui décroît par radioactivité  $\beta^-$  vers le  $^{84}\text{Sr}$  avec une probabilité de 3,9% et par capture électronique vers le  $^{84}\text{Kr}$  avec une probabilité de 96,19%. Quelques minutes après sa production dans des réactions nucléaires, deux états sont encore peuplés : l'état fondamental ( $J^\pi = 2^-$ ) et l'état isomérique  $J^\pi = 6^-$  ayant une demi-vie de 20,26 minutes. Cet état isomérique se situe à une énergie d'excitation de 463,6 keV et décroît vers l'état fondamental en émettant un  $\gamma$  à 463,6 keV ou deux  $\gamma$  à 215,6 et 248,0 keV en coïncidence.

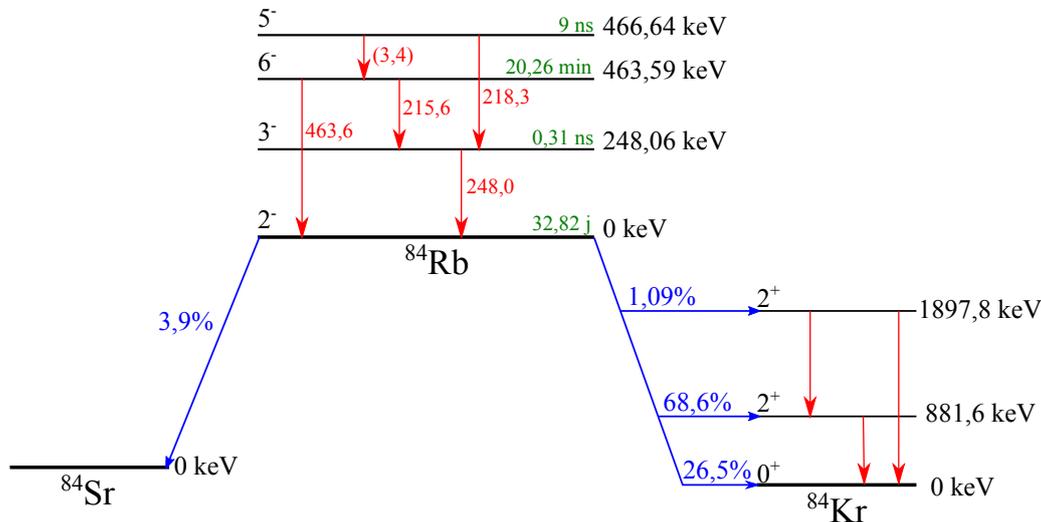


FIGURE 1.6 – Schéma de niveaux partiel du  $^{84}\text{Rb}$ . Données issues de l'évaluation [37].

Dans un plasma, cet état isomérique  $6^-$  pourrait être excité vers l'état  $J^\pi = 5^-$  situé approximativement 3 keV au dessus de ce dernier par une transition de type  $M1$ . Cet état  $5^-$  se désexcite vers l'état  $6^-$  avec une probabilité de 44,1% et vers l'état  $3^-$  avec une probabilité de 55,9%. La désexcitation radiative de l'état  $5^-$  a lieu principalement par l'émission du  $\gamma$  à 218,3 keV qui est 435 fois plus probable que l'émission du  $\gamma$  à 3,4 keV. Le coefficient de conversion interne associé à cette transition est estimé à 361. Notons que l'énergie de ce  $\gamma$  n'a pas été

11. <http://www.nndc.bnl.gov/nudat2/>

mesurée. Cette transition radiative a été conjecturée à partir du bilan des intensités  $\gamma$  de toutes les transitions qui peuplent ou dépeuplent le niveau  $5^-$  [38].

Si la voie de désexcitation indirecte de l'état isomérique  $6^-$  vers l'état fondamental *via* l'excitation vers l'état  $5^-$  (désexcitation du type  $6^- \rightarrow 5^- \rightarrow 2^-$ ) était ouverte, la durée de vie apparente de l'état isomérique  $6^-$  s'en trouverait modifiée. Dans un plasma de  $^{84m}\text{Rb}$ , les différents processus décrits ci-dessus (paragraphe 1.2) peuvent conduire à cette excitation. Les calculs menés pour évaluer leurs contributions respectives sont présentés ci-dessous.

### 1.4.2 Processus d'excitation de l'état isomérique $6^-$ dans un plasma

Les premiers calculs des taux d'excitation de la transition  $6^- \rightarrow 5^-$  ont été effectués à l'aide du code ISOMEX développé par G. Gosselin du CEA/DAM/DIF et publiés dans la référence [35]. Le plasma de  $^{84m}\text{Rb}$ , d'une densité de  $10^{-2} \text{ g/cm}^3$  est supposé à l'équilibre thermodynamique local (ETL) (voir chapitre 2). Les résultats de ces calculs sont présentés sur la figure 1.7. Sur celle-ci, les taux d'excitation par photoexcitation, diffusion ( $e, e'$ ), effet NEET et NEEC sont tracés en fonction de la température du plasma.

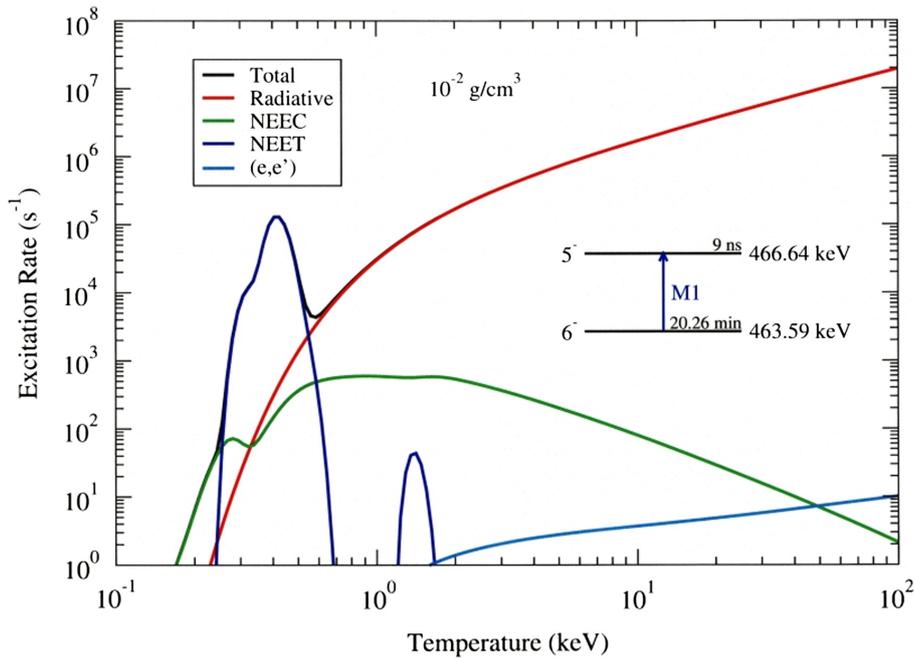


FIGURE 1.7 – Taux d'excitation par photoexcitation, diffusion inélastique d'électrons, NEET et NEEC en fonction de la température du plasma de  $^{84m}\text{Rb}$ . Ce plasma, supposé à l'équilibre thermodynamique local, possède une densité de  $10^{-2} \text{ g/cm}^3$  (calculs effectués pour une transition nucléaire de 3,05 keV).

Le calcul des taux d'excitation par effet NEET et NEEC nécessite une description des états atomiques liés dans un plasma. Dans le code ISOMEX, cette description est réalisée à l'aide d'un modèle d'atome moyen gaussien. Plus de détails sur ce modèle seront donnés aux chapitres 2 et 5. Notons cependant, qu'il s'agit d'une approche statistique et non de calculs de structure atomique détaillée qui passent par la détermination des énergies et moments cinétiques des niveaux atomiques.

D'après la figure 1.7, trois processus sont dominants dans des gammes en température différentes :

- le processus NEEC est dominant pour des températures inférieures à 200 eV avec un taux d'excitation maximum de  $60 \text{ s}^{-1}$
- le processus NEET pour des températures comprises entre 200 et 500 eV avec un taux maximum de  $10^5 \text{ s}^{-1}$
- la photoexcitation domine au dessus de 500 eV avec un taux croissant avec la température. Ce taux dépasse le taux d'excitation par effet NEET pour une température supérieure à

2 keV.

Le taux d'excitation par effet NEET atteint une valeur importante ( $10^5 \text{ s}^{-1}$ ) pour une température de l'ordre de 400 eV. Cette température devrait être accessible expérimentalement avec les lasers nanosecondes de haute énergie à des intensités de l'ordre de  $10^{14} - 10^{15} \text{ W/cm}^2$  [35]. A cette température, les états de charge  $Q \geq 29+$  sont prédits comme contribuant majoritairement à l'effet NEET.

### 1.4.3 Mise en évidence de l'excitation de l'état $6^-$ par effet NEET dans un plasma : contraintes expérimentales

La mise en évidence de l'effet NEET entre les états  $6^-$  et  $5^-$  dans un plasma de  $^{84}\text{Rb}$  impose plusieurs contraintes expérimentales. En premier lieu, il est nécessaire de produire l'état isomérique  $6^-$ . Ceci peut être réalisé à l'aide d'un accélérateur d'ions conventionnel ou par réactions  $(\gamma, n)$  sur l'isotope stable de  $^{85}\text{Rb}$  à l'aide d'un faisceau de photons produits par laser. Afin de créer le plasma de  $^{84}\text{Rb}$ , il est nécessaire de disposer d'un laser nanoseconde de haute énergie pour atteindre des températures de quelques centaines d'eV (voir figure 1.7) et produire un plasma de grand volume. Les plasmas créés avec des impulsions lasers nanosecondes évoluent sur des échelles de temps de quelques picosecondes permettant ainsi à l'effet NEET de s'établir.

Si l'on considère une production de l'état isomérique  $6^-$  à l'aide d'un accélérateur d'ions, il est nécessaire de trouver une installation couplant ce type d'accélérateur et un laser nanoseconde de haute énergie. Une telle installation est disponible au laboratoire GSI<sup>12</sup> où le faisceau d'ions de l'accélérateur UNILAC<sup>13</sup> et le faisceau du laser petawatt PHELIX<sup>14</sup> peuvent être focalisés dans la même chambre expérimentale. D'après les caractéristiques techniques du laser PHELIX, les températures favorables à l'effet NEET semblent atteignables.

La signature de l'excitation de l'isomère vers l'état  $5^-$  est la détection des  $\gamma$  de désexcitation à 218,3 keV ou à 248,0 keV avec une période de 9 ns.

### 1.4.4 Les enjeux de ce travail de thèse

Le principal enjeu de ce travail de thèse est le dimensionnement d'une expérience de mise en évidence de l'excitation nucléaire  $5^- \rightarrow 6^-$  par effet NEET dans un plasma de  $^{84}\text{Rb}$ . La production de l'état isomérique  $6^-$  du  $^{84}\text{Rb}$  serait réalisée à l'aide de l'accélérateur UNILAC du GSI et son excitation interviendrait dans un plasma généré à l'aide du laser de grande énergie PHELIX. Afin de déterminer un taux d'excitation par effet NEET pouvant être utilisé pour le dimensionnement d'une telle expérience, nous avons procédé par étapes :

1. Les premiers calculs de taux d'excitations par effet NEET ont été réalisés à l'aide du code ISOMEX utilisant une description statistique des états atomiques. L'utilisation d'une telle approche étant sujette à caution, nous avons développé une méthode pour décrire les états atomiques dans un plasma à l'équilibre thermodynamique local (ETL) à l'aide d'un code de physique atomique détaillé. Afin de valider cette méthode, une expérience a été réalisée auprès du laser PHELIX. Lors de cette expérience, les spectres X, majoritairement  $E1$ , émis par un plasma de Rb ont été mesurés et comparés avec les spectres théoriques obtenus avec notre méthode de calcul. L'analyse de ces spectres X nous a également permis d'évaluer les propriétés (température et densité) du plasma de Rb produit. La connaissance de ces propriétés est, en effet, nécessaire pour évaluer un taux d'excitation par effet NEET représentatif du plasma produit expérimentalement.

Le deuxième chapitre de cette thèse est consacré au rappel des éléments de physique atomique nécessaires à la description de la méthode développée. Le troisième chapitre présente l'expérience de validation réalisée sur le laser PHELIX et les résultats obtenus.

---

12. GSI : *Gesellschaft für SchwerIonenforschung*

13. UNILAC : *UNIversal Linear ACcelerator*

14. PHELIX : *Petawatt High-Energy Laser for Heavy Ion EXperiments*

2. Au début de ce travail de thèse, l'énergie de transition nucléaire  $6^- \rightarrow 5^-$  n'était connue que peu précisément (incertitudes de l'ordre de 200 eV). L'effet NEET étant un phénomène résonnant, une variation de plusieurs centaines d'eV sur l'énergie de la transition nucléaire causerait une variation drastique du taux d'excitation par effet NEET. Le second objectif de ce travail de thèse est donc de déterminer, avec une meilleure précision, l'énergie de cette transition nucléaire. Les expériences réalisées dans ce but auprès des accélérateurs ELSA à Bruyères le Châtel et TANDEM à Orsay ainsi que les résultats obtenus sont décrits dans le quatrième chapitre. Elles ont permis la mesure précise de l'énergie de la transition nucléaire ainsi que sa caractérisation.
3. A partir de notre méthode de description des états atomiques dans un plasma, les spectres X  $M1$  et  $E2$  impliqués dans l'effet NEET sont calculés. L'évaluation du taux d'excitation par effet NEET est ensuite réalisée. Ces travaux sont présentés et discutés dans le chapitre cinq.

Pour finir, nous discuterons de la faisabilité d'une expérience de mise en évidence de l'effet NEET dans un plasma produit à l'aide du laser PHELIX et de l'apport des nouvelles opportunités expérimentales.



# Chapitre 2

## Physique atomique dans les plasmas

### Introduction

Ce chapitre est dédié à la présentation des concepts de physique atomique dans les plasmas. Dans une première partie, nous décrirons les caractéristiques d'un plasma créé par l'interaction d'un laser nanoseconde avec une cible solide. Puis, nous présenterons les processus de physique atomique ayant lieu au sein de ce plasma et les différents modèles permettant d'évaluer les populations des niveaux atomiques. Une description succincte des différents codes utilisés pour l'analyse des spectres X sera également faite. Nous décrirons plus en détail la méthode développée au cours de cette thèse qui couple un calcul de physique atomique détaillée (MCDF) à une technique originale de sélection des configurations électroniques. Elle sera validée par l'analyse d'un spectre X  $E1$  émis par un plasma de rubidium créé par le laser nanoseconde PHELIX à un éclairage de  $6 \times 10^{14}$  W/cm<sup>2</sup> décrite dans le chapitre 3.

### 2.1 Description des plasmas créés par laser

#### 2.1.1 Grandeurs caractéristiques d'un plasma

Considérons un plasma constitué d'un seul élément :  ${}^A_ZX$  ( $Z$  est le numéro atomique et  $A$  le nombre de masse).

Le plasma est un état de la matière constitué :

- d'ions de différentes charges  $+Qe$  où  $e$  est la charge élémentaire. On utilisera aussi le terme d'*état de charge*  $Q^+$ . La proportion des ions de chaque état de charge  $Q \in [0, Z]$  dans le plasma est appelée *distribution de charge*.
- d'électrons libres de charge  $-e$
- de photons

Ce plasma qui contient des électrons et des ions de charges différentes reste électriquement neutre. Si nous notons  $n_e$  et  $n_{ion}^Q$  les densités volumiques moyennes des électrons et des ions de charge  $Qe$  respectivement, cette condition d'électroneutralité implique :

$$n_e = \sum_{Q=0}^Z Q n_{ion}^Q \quad (2.1)$$

En effet, le produit  $Q n_{ion}^Q$  représente le nombre total d'électrons libres par unité de volume issus des ions de charge  $Qe$  présents dans le plasma. En sommant cette quantité sur tous les états de charge, de  $Q = 0$  (atome neutre) à  $Q = Z$  (ion totalement ionisé), nous obtenons bien le nombre total moyen d'électrons par unité de volume dans le plasma.

La densité ionique totale  $n_{ion}$  peut être définie comme :

$$n_{ion} = \sum_{Q=0}^Z n_{ion}^Q \quad (2.2)$$

L'état de charge moyen  $\bar{Q}$  s'exprime alors comme :

$$\bar{Q} = \frac{\sum_{Q=0}^Z Q n_{ion}^Q}{\sum_{Q=0}^Z n_{ion}^Q} = \frac{n_e}{n_{ion}} \quad (2.3)$$

La densité ionique peut être reliée à la densité massique  $\rho$ , exprimée en  $\text{g/cm}^3$  par :

$$\rho = \frac{M_A}{\mathcal{N}_a} n_{ion} \quad (2.4)$$

où  $M_A$  est la masse molaire de l'élément considéré et  $\mathcal{N}_a$  la constante d'Avogadro.

Si les particules du plasma (ions, photons ou électrons) sont à l'équilibre thermodynamique, chacune de leur distribution en énergie est caractérisée par une même température représentant leur énergie moyenne. En physique des plasmas, il est courant d'exprimer cette température en unité d'énergie (eV). Ainsi, la constante de Boltzmann  $k_B$  est sous-entendue dans les différentes équations de ce chapitre.

Les différents plasmas que l'on peut trouver dans l'Univers ou qu'il est possible de créer en laboratoire peuvent être caractérisés par le couple densité massique et température. Une telle classification est représentée sur la figure 2.1. Les plasmas créés par l'interaction d'un

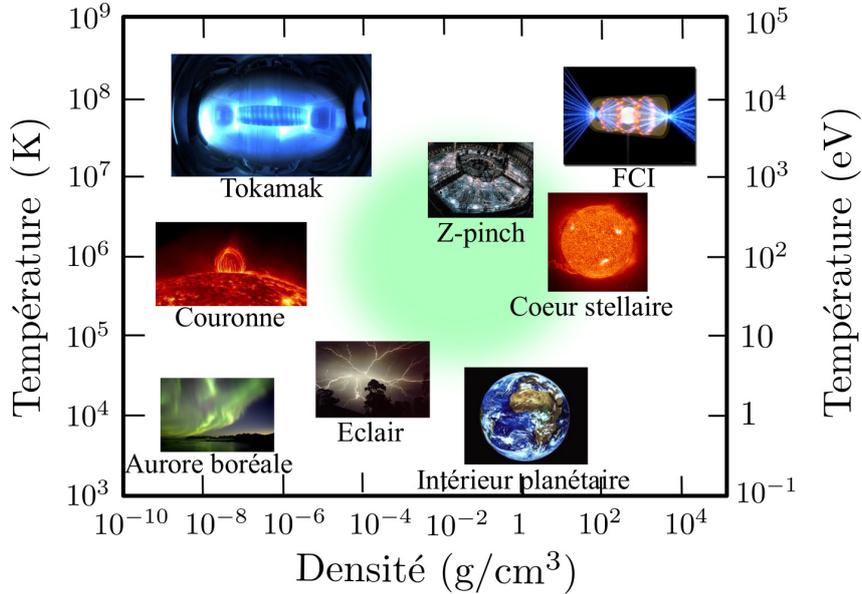


FIGURE 2.1 – Représentation de quelques plasmas de laboratoire ou présents dans l'Univers en fonction du couple température et densité massique. La zone verte correspond au plasma créés par l'interaction d'un faisceau laser sur une cible solide.

faisceau laser sur une cible solide, représentés en vert sur la figure 2.1, sont caractérisés par des températures électroniques comprises entre 100 eV et quelques keV et des densités allant de  $10^{-4}$  à  $10^2 \text{ g/cm}^3$ .

### 2.1.2 Caractéristiques d'un plasma créé par laser

Dans ce paragraphe, la structure générale d'un plasma créé par l'interaction d'un laser de puissance avec une cible solide est décrite. Les principaux paramètres caractérisant le rayonnement laser et son interaction avec une cible sont : la longueur d'onde du rayonnement  $\lambda_L$ , la durée de l'impulsion laser  $\tau$  et l'éclairement laser au niveau de la cible. L'éclairement laser  $I$ , exprimé en  $\text{W/cm}^2$  et couramment appelé intensité, peut être défini comme :

$$I = \frac{E}{\tau S} \quad (2.5)$$

où  $E$  est l'énergie contenue dans une impulsion laser de durée  $\tau$  et  $S$  est la surface de la tache focale du faisceau laser au niveau de la cible.

L'interaction d'un laser de haute énergie sur une cible solide produit très rapidement (sur un temps inférieur à la picoseconde) un plasma à la surface de celle-ci. Les premiers électrons de ce plasma sont créés par des processus d'absorption multi-photonique et des collisions dues au chauffage de la cible. Ces électrons vont ensuite ioniser les atomes de la cible. Le plasma ainsi produit se détend perpendiculairement à la surface de la cible. Le rayonnement laser pénètre ce plasma tant que la pulsation du laser  $\omega_L$  ( $\omega_L = \frac{2\pi c}{\lambda_L}$ ) est supérieure à la pulsation du plasma  $\omega_e$  définie par :

$$\omega_e = \sqrt{\frac{n_e e^2}{\epsilon_0 m_e}} \quad (2.6)$$

où  $n_e$  est la densité électronique locale (exprimée en  $\text{cm}^{-3}$ ),  $e$  et  $m_e$  sont respectivement la charge et la masse de l'électron et  $\epsilon_0$  est la permittivité diélectrique du vide.  $\omega_e$  est la pulsation caractéristique des oscillations des électrons du plasma. Lorsque les électrons s'éloignent des ions, ils subissent une force de rappel (force de Coulomb due aux ions) et se mettent à osciller à la pulsation  $\omega_e$ .

Il est possible de définir une densité électronique critique  $n_c$  au delà de laquelle le rayonnement laser est réfléchi.  $n_c$  est définie par la condition  $\omega_e = \omega_L$  et il vient (dans les unités appropriées) :

$$n_c[\text{cm}^{-3}] = \frac{1,1 \times 10^{21}}{(\lambda_L[\mu\text{m}])^2} \quad (2.7)$$

Par exemple, pour une impulsion laser de longueur d'onde  $\lambda_L = 0,532 \mu\text{m}$ , nous obtenons :  $n_c = 4 \times 10^{21} \text{cm}^{-3}$ .

A un instant donné et pour une durée d'impulsion de l'ordre de la nanoseconde, les profils spatiaux de densité et de température le long de l'axe de propagation du laser sont schématisés sur la figure 2.2. Sur cette figure, l'impulsion laser se propage vers la gauche. Différentes régions sont alors définies :

#### 1. La couronne sous-dense

Cette zone est caractérisée par une densité inférieure à la densité critique  $n_c$  et par une haute température. C'est dans cette zone du plasma que prend place l'absorption du rayonnement laser.

#### 2. La zone de conduction

Dans cette zone, l'énergie laser absorbée dans la couronne diffuse par conduction thermique vers l'intérieur de la cible. Ce transport d'énergie est réalisé par les électrons et les photons. C'est dans cette zone, et plus particulièrement au voisinage de la densité critique que prend place l'émission du rayonnement X.

#### 3. La zone sous choc

L'expansion rapide du plasma conduit à la création d'une onde de choc dans la cible. Les hautes pressions ainsi engendrées permettent à la matière d'atteindre des densités supérieures à celles du solide. Cependant, la température du plasma dans cette zone est trop faible pour qu'il émette un rayonnement X.

#### 4. Le solide non perturbé

Suivant les conditions expérimentales, une région de la cible non perturbée peut subsister à l'issue de la création du plasma.

## 2.2 Processus atomiques dans un plasma

Dans un plasma, les ions interagissent avec les électrons, les photons et les autres ions, ce qui conduit à une modification de la population des états excités de ces ions et/ou de leurs charges. Différents processus sont à l'origine des excitations et désexcitations des ions au sein du plasma.

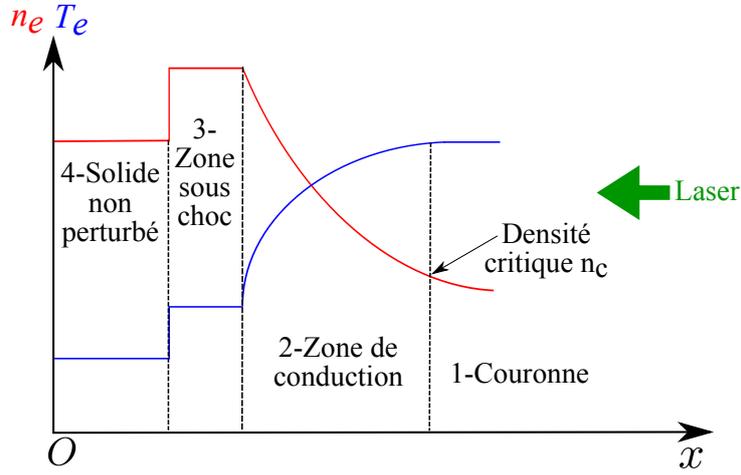


FIGURE 2.2 – Profils spatiaux à un instant donné de la température et de la densité électronique lors de la détente d'un plasma créé par laser. Le laser se propage de droite à gauche le long de l'axe  $Ox$ .

Ces processus peuvent être radiatifs ou collisionnels. Dans la suite de ce paragraphe, nous notons  $N_i^Q$  la population de l'état  $i$  d'un ion de charge  $Qe$ . Chaque processus d'excitation étant associé à son processus inverse de désexcitation, ils seront, à l'exception de l'émission stimulée, décrits par paires.

### 2.2.1 Les processus radiatifs

On désigne par *processus radiatifs* les processus faisant intervenir l'émission ou l'absorption de photons.

#### Émission spontanée, stimulée et photoexcitation

Les processus d'émission spontanée et de photoexcitation peuvent être symbolisés par l'équation :

$$N_i^Q \Leftrightarrow N_j^Q + h\nu$$

Dans le processus d'émission spontanée, un ion excité dans un état  $i$  décroît vers un état de plus basse énergie (état excité ou fondamental  $j$ ) en émettant un photon  $h\nu$  dont l'énergie est égale à la différence de celles des deux états impliqués dans la transition atomique. Ces transitions sont couramment appelées transitions "lié-lié". Le taux de transition  $A_{ij}$ , exprimé en  $s^{-1}$ , associé à ce processus est appelé coefficient d'Einstein pour l'émission spontanée ou taux de transition radiatif. Entre deux niveaux, et pour une transition dipolaire électrique, il s'écrit :

$$A_{ij} = \frac{16\pi^3}{3h\epsilon_0\lambda_{ij}^3 g_i} |\langle \Psi_j | e\vec{r} | \Psi_i \rangle|^2 \quad (2.8)$$

où :

- $\lambda_{ij}$  est la longueur d'onde de la transition entre les niveaux  $i$  et  $j$ .
- $g_i$  est la dégénérescence du niveau initial.
- $\Psi_i$  et  $\Psi_j$  sont respectivement les fonctions d'ondes des niveaux initial et final.

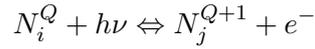
Le processus inverse, la photoexcitation, résulte de l'interaction de l'ion avec le rayonnement du plasma.

Dans le processus d'émission stimulée, la désexcitation d'un ion dans un état  $i$  vers un état  $j$  de plus basse énergie est induite par un photon du plasma ayant une énergie égale à celle de la transition  $i \rightarrow j$ . Ce processus peut être décrit par :

$$N_i^Q + h\nu \Rightarrow N_j^Q + 2h\nu$$

## Photoionisation et recombinaison radiative

Ces processus sont décrits par :



Dans le processus de photoionisation, un photon du plasma est absorbé par un ion. L'énergie ainsi disponible est transférée à un électron lié qui est éjecté dans le continuum.

Dans le processus inverse, un électron du continuum est capturé sur un état lié de l'ion. Cette capture est accompagnée par l'émission d'un photon. Cette émission X est appelée "transition libre-lié".

## *Bremsstrahlung* et *Bremsstrahlung* inverse

Dans ces processus, il n'y a pas d'excitation ou de désexcitation de l'ion. En effet, dans le processus de *Bremsstrahlung*, un photon est émis par un électron décéléré dans le champ coulombien d'un ion. Cette émission de photon est généralement désignée par le terme "transition libre-libre". Le processus inverse décrit l'absorption d'un photon par un électron au voisinage d'un ion. Ce processus est notamment impliqué lors de l'absorption du rayonnement laser. Nous pouvons décrire ces processus par l'équation :

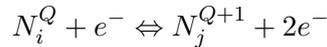


### 2.2.2 Processus collisionnels

Les processus collisionnels désignent les processus faisant intervenir la collision d'un ion avec les électrons et les autres ions du plasma.

#### Ionisation collisionnelle et recombinaison à trois corps

Ces deux processus peuvent être décrits par :

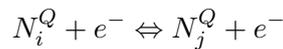


L'ionisation collisionnelle est un processus dans lequel un électron libre du plasma arrache un électron lié d'un ion lors d'une collision.

Dans le processus inverse, deux électrons libres se trouvent au voisinage d'un ion. L'un est capturé par l'ion et l'énergie disponible est transférée à l'autre électron.

#### Excitation et désexcitation collisionnelles

L'équation décrivant ces processus est :



Dans le processus d'excitation collisionnelle, un électron libre induit une excitation de l'ion (de l'état  $i$  vers l'état  $j$  de plus haute énergie) en lui transférant une partie de son énergie lors d'une collision.

Dans le processus de désexcitation collisionnelle, l'énergie disponible lors d'une transition atomique est transférée à un électron libre.

#### Autoionisation (effet Auger) et recombinaison diélectronique

Nous pouvons décrire ces processus par :



Dans le processus d'autoionisation, l'état initial est un état doublement excité. Un des deux électrons de cet état doublement excité est transféré vers un état de plus basse énergie (généralement l'état fondamental). L'énergie disponible est alors transférée à l'autre électron qui est émis vers le continuum. Ce processus ne peut avoir lieu que si la somme des énergies des deux électrons est supérieure à l'énergie d'ionisation de l'ion.

Dans le processus inverse, un électron libre est capturé sur un état excité d'un ion. L'énergie disponible est communiquée à un électron lié (généralement du niveau fondamental) qui est transféré vers un état excité. Il en résulte un état doublement excité.

## 2.3 Populations des ions, photons et électrons dans un plasma : modèles d'équilibre statistique

L'objectif d'un modèle d'équilibre statistique est de déterminer les populations moyennes des niveaux excités des ions  $N_i^Q$  (présents dans différents états de charge) dans le plasma ainsi que la distribution de charge des ions. Cette description est nécessaire afin d'interpréter un spectre X émis par un plasma. Elle est également essentielle pour une évaluation du taux d'excitation par effet NEET dans un plasma. Pour déterminer ces populations, il est nécessaire de décrire la structure atomique des ions mais aussi les distributions en énergie des particules du plasma. En toute rigueur, il faudrait considérer les différents processus évoqués au paragraphe 2.2 et tenir compte de l'évolution temporelle du plasma. Le nombre d'états atomiques à décrire pouvant devenir extrêmement grand, il est nécessaire d'avoir recours à des approximations. Celles-ci seront décrites au paragraphe 2.6.

### 2.3.1 L'équilibre thermodynamique

Un plasma est dit à l'équilibre thermodynamique (ET) si les ions, les électrons et les photons qui le composent sont à l'équilibre. Ceci signifie que le principe de microréversibilité s'applique : par unité de temps, le nombre de transitions de chaque processus (voir 2.2) est égal à celui associé au processus inverse. Un plasma à l'ET est donc optiquement épais à son propre rayonnement, c'est-à-dire que les photons émis au sein du plasma sont réabsorbés localement. Les distributions en énergie des ions, électrons et photons sont caractérisées par les températures, représentant leurs énergies moyennes,  $T_i$ ,  $T_e$  et  $T_r$  respectivement. A l'ET, ces trois températures sont égales :  $T_e = T_i = T_r$ .

#### Distribution en énergie des électrons

Dans un plasma, les fréquences des collisions électron-électron sont très importantes. Si le temps de thermalisation des électrons est inférieur au temps caractéristique d'évolution du plasma, les électrons peuvent être considérés à l'équilibre. Ceci est le cas pour un plasma généré par une impulsion laser nanoseconde. La distribution en énergie des électrons est alors décrite par une distribution de Maxwell-Boltzmann :

$$\frac{dn_e(E)}{dE} = \frac{2n_e}{\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{E}}{T_e^{3/2}} \exp\left(-\frac{E}{T_e}\right) \quad (2.9)$$

où  $n_e$  est la densité électronique volumique moyenne et  $T_e$  la température électronique.

Cette distribution est utilisable pour décrire des plasmas non relativistes et pour des densités peu élevées. Aux très fortes densités, il faut tenir compte du caractère quantique des électrons et notamment du principe d'exclusion de Pauli.

#### Distribution en énergie des ions

Dans un plasma à l'ET, la distribution en énergie des ions est aussi décrite par une distribution de Maxwell-Boltzmann. La prise en compte des effets quantiques n'est pas justifiée car les ions sont beaucoup plus massifs que les électrons. Celle-ci ne serait alors nécessaire qu'à des densités extrêmement élevées et non atteignables expérimentalement.

## Distribution en énergie des photons

A l'équilibre thermodynamique, la distribution en énergie des photons (luminance énergétique monochromatique exprimée en  $\text{W.m}^{-2}.\text{Hz}^{-1}.\text{sr}^{-1}$ ) est donnée par la distribution de Planck :

$$I_\gamma(\nu, T_r) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{\exp\left(\frac{h\nu}{T_r}\right) - 1} \quad (2.10)$$

où  $\nu$  est la fréquence du rayonnement et  $T_r$  la température photonique.  $I_\gamma(\nu, T_r)$  représente la puissance d'un flux selon la normale traversant une surface unité par unité de fréquence et d'angle solide.

## Population des niveaux atomiques

A l'ET, le rapport des populations des niveaux atomiques au sein d'un ion d'état de charge  $Q$  s'exprime à l'aide de la loi de Boltzmann :

$$\frac{N_i^Q}{N_j^Q} = \frac{g_i^Q}{g_j^Q} \exp\left(-\frac{E_i - E_j}{T_e}\right) \quad (2.11)$$

où :

- $N_i^Q$  et  $N_j^Q$  sont les populations, par unité de volume, des niveaux  $i$  et  $j$  respectivement
- $g_i^Q$  et  $g_j^Q$  sont les poids statistiques (dégénérescences) des niveaux  $i$  et  $j$  respectivement
- $E_i$  et  $E_j$  sont les énergies des niveaux  $i$  et  $j$  respectivement
- $T_e$  est la température électronique du plasma

A l'ET, les populations des niveaux excités d'un ion ne dépendent que de  $T_e$  et des données de structure atomique : énergies et poids statistiques des niveaux considérés. Il est également possible d'exprimer la probabilité d'occupation du niveau  $i$  de l'ion de charge  $Qe$  :

$$P_i^Q = \frac{g_i^Q \exp\left(-\frac{E_i}{T_e}\right)}{Z_Q(T_e)} \quad (2.12)$$

où  $Z_Q(T_e)$  est la *fonction de partition* de l'ion de charge  $Qe$ . Celle-ci est définie dans le cadre de la physique statistique [39] et s'exprime, en formalisme canonique<sup>1</sup>, comme une somme sur tous les états atomiques de l'état charge  $Q$  :

$$Z_Q(T_e) = \sum_i g_i^Q \exp\left(-\frac{E_i}{T_e}\right) \quad (2.13)$$

En utilisant le formalisme grand-canonique<sup>2</sup>, il est possible d'exprimer les populations des niveaux fondamentaux des ions de charges différentes. Ainsi, le rapport entre les populations des états fondamentaux des ions de charge  $(Q+1)e$  et  $Qe$  est donné par l'équation de Saha-Boltzmann [40] :

$$\frac{N_1^{Q+1}}{N_1^Q} = \frac{2(2\pi m_e T_e)^{3/2}}{n_e h^3} \frac{g_1^{Q+1}}{g_1^Q} \exp\left(-\frac{\chi^Q}{T_e}\right) \quad (2.14)$$

où :

- $N_1^{Q+1}$  et  $N_1^Q$  sont respectivement les populations, par unité de volume, des niveaux fondamentaux des ions de charge  $(Q+1)e$  et  $Qe$
- $n_e$  est la densité électronique (exprimée en  $\text{cm}^{-3}$ )
- $g_1^{Q+1}$  et  $g_1^Q$  sont les poids statistiques des niveaux fondamentaux des ions de charge  $(Q+1)e$  et  $Qe$  respectivement

1. Un ensemble canonique est un ensemble constitué d'un nombre fixe de particules dans un volume fixé. Ce système peut échanger de l'énergie mais pas de matière avec un autre système beaucoup plus grand appelé réservoir. C'est le cas de l'ensemble des ions d'un état de charge donné.

2. Un ensemble grand-canonique est un système qui peut échanger de l'énergie et des particules avec le réservoir.

—  $\chi^Q$  est l'énergie d'ionisation du niveau fondamental de l'ion de charge  $Qe$

Ainsi à l'aide des équations (2.11) et (2.14), il est possible d'exprimer les populations des niveaux excités de tous les ions dans leurs différents états de charge.

### 2.3.2 L'équilibre thermodynamique local

L'équilibre thermodynamique décrit ci-dessus correspond à un équilibre idéal jamais atteint en laboratoire. En effet, l'équilibre entre les électrons, les ions et les photons est rarement réalisé. Cependant, dans les plasmas denses, l'équilibre thermodynamique peut être atteint localement, ce qui est désigné par le terme équilibre thermodynamique local (ETL). Dans un plasma à l'ETL, le libre parcours moyen des photons est plus grand que la taille du plasma, si bien que les photons peuvent s'échapper du plasma ou être absorbés loin de l'endroit où ils ont été créés. Ainsi, le rayonnement ne suit plus une loi de Planck, il faut, dans ce cas, tenir compte de la propagation du rayonnement dans le plasma. Cependant, dans un plasma à l'ETL, les fréquences des collisions des électrons et des ions sont suffisamment élevées pour que les lois de Boltzmann et de Saha-Boltzmann soient applicables localement pour des densités élevées. Le plasma est représenté par plusieurs cellules, ayant des densités et des températures différentes, où les électrons et les ions sont à l'équilibre mais pas les photons. Un plasma à l'ETL possède donc des gradients de température et de densité entre les différentes cellules. Des représentations schématiques des équilibres ET et ETL sont présentées sur la figure 2.3.

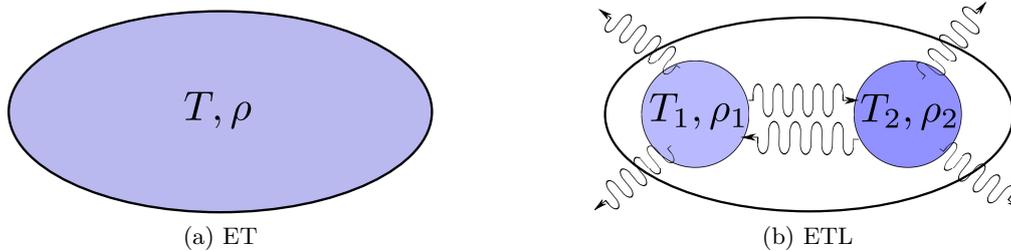


FIGURE 2.3 – Représentations schématiques des équilibres ET (2.3a) et ETL (2.3b).

### 2.3.3 L'équilibre coronal

A l'inverse de l'ETL, l'équilibre coronal permet de décrire un plasma ayant une très faible densité. De tels plasmas existent dans le domaine astrophysique (couronne solaire d'où le nom "coronal" est issu, nébuleuses,...) ou en laboratoire (plasmas de Tokamaks).

Aux basses densités électroniques et ioniques, la désexcitation radiative domine la désexcitation collisionnelle dont le taux est proportionnel à  $n_e^2$ . De plus, les populations des états excités sont très faibles et nous pouvons considérer que chaque ion est dans son état fondamental. Aux basses densités, les processus de photoionisation, photoexcitation et recombinaison à trois corps deviennent aussi négligeables si bien que seuls les processus d'ionisation collisionnelle, de recombinaison radiative et diélectronique sont dominants [41].

Une condition d'application de l'équilibre coronal peut être trouvée dans la référence [42]. Cette condition porte sur la densité électronique :

$$n_e \leq 5,9 \times 10^{10} (Q + 1)^6 T_e^{1/2} \exp\left(\frac{0,1(Q + 1)^2}{T_e}\right) \quad (2.15)$$

### 2.3.4 L'équilibre collisionnel-radiatif

Dans le cas des densités intermédiaires, le plasma est hors de l'équilibre thermodynamique local (HETL). Tous les processus atomiques décrits au 2.2 doivent alors être pris en compte ainsi que l'évolution temporelle du plasma : c'est l'équilibre collisionnel-radiatif (CR). Ainsi l'évolution temporelle de la population d'un état  $i$  d'un ion de charge  $Qe$  est régie par l'équation [43] :

$$\frac{dN_i^Q}{dt} = \sum_{Q'} \sum_j N_j^{Q'} \lambda_{(Q',j) \rightarrow (Q,i)} - N_i^Q \sum_{Q''} \sum_k \lambda_{(Q,i) \rightarrow (Q'',k)} \quad (2.16)$$

où

- $N_i^Q$  et  $N_j^{Q'}$  sont les populations respectives des états  $i$  et  $j$  associées aux ions de charge  $Q$  et  $Q'$  respectivement
- $\lambda_{(Q',j) \rightarrow (Q,i)}$  désigne le taux de peuplement du niveau  $i$  de l'ion de charge  $Q$  à partir du niveau  $j$  de l'ion de charge  $Q'$

L'équation (2.16) est très complexe à résoudre à cause du très grand nombre d'états atomiques à traiter et de la prise en compte de tous les processus de peuplement et de dépeuplement de chaque état particulier. Aussi, il est nécessaire d'avoir recours à des simplifications pour résoudre cette équation.

Par exemple, nous pouvons considérer des populations à l'équilibre stationnaire et écrire :  $\frac{dN_i^Q}{dt} = 0$ . Ceci est vérifié si les temps d'évolution des paramètres macroscopiques du plasma (température et densité) sont supérieurs au temps caractéristique d'évolution des états excités des ions et au temps nécessaire pour obtenir un équilibre d'ionisation et définir ainsi une distribution d'état de charge.

Une autre méthode de simplification de la résolution de l'équation (2.16) consiste à réduire le nombre d'états atomiques à traiter en les regroupant par configurations électroniques. Il est même possible de regrouper plusieurs de ces configurations en supraconfigurations. En général, dans un modèle CR les distributions en énergie des électrons et des ions sont supposées maxwelliennes.

### 2.3.5 Modèle HETL avec température d'ionisation

Un modèle HETL avec température d'ionisation est un modèle hybride qui utilise les équations obtenues pour un plasma à l'ETL. Ces équations sont adaptées et appliquées à la *température d'ionisation*  $T_Z$ . Cette température est définie de manière à obtenir, pour une densité donnée, un état de charge moyen identique en considérant un plasma à l'ETL (à la température  $T_Z$ ) et HETL (à la température  $T_e$ ) [44] :

$$\bar{Q}_{ETL}(\rho, T_Z) = \bar{Q}_{HETL}(\rho, T_e) \quad (2.17)$$

Nous utiliserons le concept de la température d'ionisation lors de l'analyse des spectres X émis par un plasma de Rb (voir chapitre 3). Cette température sera notamment utilisée pour calculer les populations des niveaux atomiques.

## 2.4 Largeur des raies atomiques dans un plasma

Dans un plasma, les interactions d'un ion dans un état excité avec les autres particules libres (électrons, photons et ions) ont un impact sur la largeur des raies atomiques émises par cet ion. L'étude de ces largeurs permet de déterminer certaines propriétés du plasma comme la température et la densité. La largeur d'une raie atomique est aussi une donnée importante intervenant dans le calcul du taux d'excitation par effet NEET (voir chapitre 5). Aussi, nous décrirons brièvement dans ce paragraphe les différents processus conduisant à l'élargissement d'une raie X.

### 2.4.1 La largeur naturelle

La largeur naturelle d'une raie entre deux niveaux atomiques est due à la durée de vie finie de ces niveaux. En ne prenant en compte que cette largeur naturelle, une raie possède un profil lorentzien [41] :

$$\Gamma_n(E) = \frac{\Gamma_{if}}{2\pi} \frac{1}{(E - \Delta E_{if})^2 + \left(\frac{\Gamma_{if}}{2}\right)^2} \quad (2.18)$$

où  $\Delta E_{if}$  est l'énergie de la raie émise entre les niveaux initial  $i$  et final  $f$ .  $\Gamma_{if}$  est la largeur à mi-hauteur de la lorentzienne. Cette largeur s'exprime à l'aide des coefficients d'Einstein pour l'émission spontanée en considérant tous les niveaux finals  $f$  possibles. De plus, il faut aussi tenir compte des largeurs de ces niveaux finals, si ce sont des niveaux excités. Aussi, la largeur à mi-hauteur de la raie  $\Gamma_{if}$  s'exprime par [41] :

$$\Gamma_{if} = \hbar \left( \sum_{k < i} A_{ik} + \sum_{k' < f} A_{fk'} \right) \quad (2.19)$$

où  $A_{ik}$  est le taux radiatif de la transition  $i \rightarrow k$ . Le terme  $k < i$ , indique que le niveau  $k$  est de plus faible énergie que le niveau  $i$ .

La largeur naturelle est la largeur minimale qu'une raie atomique peut avoir. Dans un plasma, celle-ci est généralement négligeable par rapport aux autres contributions. Si l'on considère l'exemple de la configuration initiale  $1s^2 2s^2 3s^1$ , la largeur totale de la transition  $3s \rightarrow 2p$ , en tenant compte des deux transitions  $3s \rightarrow 2p_{1/2}$  et  $3s \rightarrow 2p_{3/2}$  possibles, est :  $\Gamma_{3s \rightarrow 2p} = 3$  meV.

## 2.4.2 Élargissement Doppler thermique

L'élargissement Doppler thermique est dû aux mouvements des ions émetteurs dans le plasma. Si l'on considère que la distribution en vitesse des ions le long d'une ligne de visée est une maxwellienne alors le profil d'une raie, dont la largeur Doppler domine, est gaussien [41] :

$$\Gamma_d(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp \left[ -\frac{(E - \Delta E_{if})^2}{2\sigma^2} \right] \quad (2.20)$$

où  $\Delta E_{if}$  est l'énergie de la raie émise par un ion au repos. La largeur à mi-hauteur du profil gaussien  $\Gamma_{if}$  est reliée à l'écart-type  $\sigma$  par :

$$\Gamma_{if} = 2\sqrt{2 \ln 2} \sigma = 2\Delta E_{if} \sqrt{\frac{2 \ln 2 T_i}{M_i c^2}} \quad (2.21)$$

où  $T_i$  est la température ionique (exprimée en unité d'énergie) et  $M_i$  la masse des ions.

L'excitation nucléaire par effet NEET ayant lieu dans le référentiel de l'atome, l'élargissement Doppler thermique n'est pas à prendre en compte dans le calcul du taux d'excitation par effet NEET.

## 2.4.3 Élargissement Stark

L'élargissement des raies atomiques dû aux interactions entre l'ion émetteur et les autres particules chargées du plasma est appelé élargissement Stark. Suivant le type de particules, l'élargissement Stark est calculé suivant deux approximations différentes :

- l'approximation collisionnelle pour les électrons
- l'approximation quasi-statique pour les ions

## Élargissement collisionnel électronique

Les collisions des électrons libres avec un ion ont lieu sur des temps caractéristiques beaucoup plus courts que les durées de vie des niveaux excités si bien que l'élargissement par impact électronique peut être assimilé à une réduction de ces durées de vie. Dans la théorie collisionnelle, l'émission d'un photon lors d'une désexcitation radiative est perturbée par les collisions électroniques instantanées. Le profil de cet élargissement peut être approximé par une lorentzienne. Bien que différentes théories (semi-classiques ou quantiques) aient été développées, le calcul de l'élargissement collisionnel électronique est complexe et reste un sujet d'étude actuel. Nous utiliserons une expression basée sur les travaux de Baranger [45] et donnée en unité d'énergie :

$$\Gamma = \alpha^2 \hbar c \frac{4\sqrt{2}}{3\sqrt{3}} \pi^{3/2} n_e \sqrt{\frac{m_e c^2}{T_e}} \left( \langle \psi_\alpha | R^2 | \psi_\alpha \rangle + \langle \psi_\beta | R^2 | \psi_\beta \rangle \right) \quad (2.22)$$

où  $\alpha$  est la constante de structure fine,  $\psi_\alpha$  et  $\psi_\beta$  sont respectivement les fonctions d'ondes des orbitales initiale et finale impliquées dans la transition et  $R$  est l'opérateur de position.  $n_e$  et  $T_e$  sont respectivement la densité et la température électroniques. Dans cette expression, la largeur totale  $\Gamma$  est une somme sur les valeurs moyennes de l'opérateur  $R^2$  appliqué aux orbitales initiale et finale de la transition. Aussi, cette largeur peut être écrite comme la somme des largeurs des configurations initiale  $\Gamma_\alpha$  et finale  $\Gamma_\beta$  avec :

$$\Gamma_{\alpha,\beta} = \alpha^2 \hbar c \frac{4\sqrt{2}}{3\sqrt{3}} \pi^{3/2} n_e \sqrt{\frac{m_e c^2}{T_e}} \left( \langle \psi_{\alpha,\beta} | R^2 | \psi_{\alpha,\beta} \rangle \right) \quad (2.23)$$

Dans notre exemple de la configuration initiale  $1s^2 2s^2 3s^1$  pour  $n_e = 4 \times 10^{21}$  g/cm<sup>3</sup> et  $T_e = 400$  eV, nous obtenons  $\Gamma_{3s \rightarrow 2p_{1/2}} = 14$  meV. La largeur collisionnelle est donc bien prépondérante par rapport à la largeur naturelle.

### Élargissement Stark quasi-statique

A l'inverse, les collisions ion-ion sont beaucoup plus lentes que les durées de vie des états excités. Ainsi, l'ion se désexcitant est soumis à une perturbation qui peut être considérée comme constante (approximation quasi-statique). Dans ce cas, l'interaction entre l'ion émetteur et les autres ions est décrite par l'hamiltonien d'interaction suivant [41] :

$$H_{\text{Stark}} = -\vec{E} \cdot \vec{d} \quad (2.24)$$

où  $\vec{d}$  est le moment dipolaire de l'ion émetteur et  $\vec{E}$  est le champ électrostatique généré par les autres ions.

La difficulté du calcul de l'élargissement Stark quasi-statique réside dans la modélisation du champ électrique  $\vec{E}$ . Une liste détaillée des distributions des champs électriques utilisées peut être trouvée dans la référence [46]. Généralement, ces largeurs sont négligeables en comparaison des largeurs collisionnelles électroniques. Aussi, nous ne prendrons pas en compte l'élargissement Stark quasi-statique [47].

#### 2.4.4 Profil des raies émises par un plasma : profil de Voigt

Tous les différents processus évoqués ci-dessus contribuent à la forme d'une raie X, si bien que sa forme totale peut être approximée par un profil de Voigt. Celui-ci est un produit de convolution d'une fonction gaussienne et d'une fonction lorentzienne. Il est donné par [41] :

$$\Gamma(E) = \frac{\Gamma}{2\pi^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-z^2}}{\left(E - \Delta E_{if} + \sqrt{2}\sigma z\right)^2 + \left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2} dz \quad (2.25)$$

où  $\Gamma$  est la largeur à mi-hauteur de la distribution lorentzienne et  $\sigma$  l'écart type de la distribution gaussienne.

Nous aurons recours à ce profil de Voigt, couramment utilisé en spectroscopie X [48], pour ajuster les raies expérimentales dans le chapitre 3.

## 2.5 Les codes de physique atomique utilisés pour décrire les plasmas dans ce travail

Nous avons utilisé différents codes de physique atomique afin de reproduire l'émission X d'un plasma de Rb et pouvoir interpréter le spectre mesuré (voir chapitre 3). Ce spectre X émis par un plasma dépend des différents processus décrits au paragraphe 2.2 et se constitue d'une composante continue sur laquelle des raies discrètes sont identifiables. La composante continue a pour origine principale deux processus :

- le rayonnement de freinage (*Bremsstrahlung*) dont il est possible d'exprimer l'émissivité associée en considérant des ions et des électrons ayant des distributions en énergie maxwelliennes.

— la recombinaison radiative dans laquelle le photon émis possède une énergie minimale correspondant à l'énergie d'ionisation de l'état.

Les raies discrètes observables sur le spectre X émis par un plasma correspondent à l'émission d'un photon lorsqu'un ion se désexcite (transition lié-lié).

Afin de déterminer le spectre X associé aux transitions lié-lié et libre-lié, il est donc nécessaire de déterminer la structure atomique (énergies des niveaux) des ions dans leurs différents états de charge ainsi que les taux de transition associés.

Différents codes ont été développés pour reproduire l'émission X d'un plasma. Ils se distinguent par la nature des processus pris en compte et la précision des résultats obtenus. Ceux que nous avons utilisé sont brièvement décrits ci-dessous. Quelques rappels de structure atomique sont effectués dans l'annexe A.

### 2.5.1 Le code d'atome moyen relativiste

Le modèle d'atome moyen est basé sur le modèle statistique de Thomas-Fermi, initialement développé pour déterminer le potentiel électrostatique  $V(r)$  et le potentiel chimique  $\mu$  d'un ion. Il a été développé dans les années 70 par B. Rozsnyai [49, 50] et permet de prendre en compte la température et la densité du plasma. L'ion moyen est un ion dont les populations électroniques sont les moyennes de celles de tous les ions présents dans le plasma. Ainsi, dans ce modèle tous les ions du plasma sont décrits par un seul ion fictif avec des populations électroniques non entières.

#### Principe du calcul

Dans ce modèle, l'ion est placé au centre d'une sphère, appelée sphère de Wigner-Seitz, dont le rayon  $R_i$  est fixé par la densité ionique  $n_{ion}$  :

$$R_i = \left( \frac{3}{4\pi n_{ion}} \right)^{1/3} \quad (2.26)$$

Cette sphère permet de définir les conditions aux limites pour les fonctions d'onde des orbitales électroniques  $\psi_{nlj}$ . En effet, celles-ci sont nulles en  $r = R_i$ . Dans cette sphère, le nombre total d'électrons (libres et liés) est égal à  $Z$ .

La première étape du calcul débute par le choix d'un jeu de potentiels électrostatique  $V(r)$  et chimique  $\mu$ . Le potentiel  $V(r)$  s'exprime par :

$$V(r) = \frac{Ze}{r} + V_e(r) \quad (2.27)$$

où le premier terme désigne le potentiel créé par le noyau et  $V_e(r)$  le potentiel créé par les électrons. Il est également possible d'ajouter un potentiel d'échange et de corrélation dépendant de la densité [49].

Ce potentiel est ensuite utilisé pour résoudre l'équation de Dirac de manière auto-cohérente afin de déterminer les énergies moyennes des orbitales monoélectroniques  $\bar{\epsilon}_{nlj}$  :

$$H_D \psi_{nlj} = \bar{\epsilon}_{nlj} \psi_{nlj} \quad (2.28)$$

où  $H_D$  est l'hamiltonien de Dirac qui sera explicité au paragraphe 2.5.2.  $H_D$  dépend du potentiel  $V(r)$ .

La statistique de Fermi-Dirac permet alors de déterminer les occupations moyennes des orbitales  $\bar{n}_{nlj}$  :

$$\bar{n}_{nlj} = \frac{g_{nlj}}{1 + \exp\left(\frac{\bar{\epsilon}_{nlj} - \mu}{T_e}\right)} \quad (2.29)$$

où  $g_{nlj}$  est le poids statistique de l'orbitale et  $T_e$  la température électronique définie à l'ETL. Il est alors possible de calculer la densité totale  $n_e(r, \mu)$  qui est une somme sur les contributions

des électrons liés et des électrons libres :

$$n_e(r, \mu) = \underbrace{\sum_{nlj} \bar{n}_{nlj} |\psi_{nlj}|^2}_{e^- \text{ liés}} + \underbrace{\frac{4\pi}{h^3} (2m_e T_e)^{3/2} F_{1/2} \left( \frac{\mu + eV(r)}{T_e}, \left| \frac{eV(r)}{T_e} \right| \right)}_{e^- \text{ libres}} \quad (2.30)$$

où  $F_{1/2}(x, \beta)$  désigne l'intégrale incomplète de Fermi. Celle-ci est définie comme :

$$F_{1/2}(x, \beta) = \int_{\beta}^{+\infty} \frac{z^{1/2}}{1 + \exp(z - x)} dz \quad (2.31)$$

Grâce à la densité  $n_e(r, \mu)$ , il est possible de calculer le potentiel  $V_e(r)$  en intégrant l'équation de Poisson :

$$\nabla^2 V_e(r) = 4\pi n_e(r) \quad (2.32)$$

Nous obtenons, ainsi, une nouvelle valeur pour le potentiel  $V(r)$  à l'aide de l'équation (2.27). Il est également possible de calculer un nouveau potentiel chimique  $\mu$  à l'aide de :

$$4\pi \int_0^{R_i} n_e(r, \mu) r^2 dr = Z \quad (2.33)$$

La procédure itérative est alors reprise à partir de l'équation (2.28) jusqu'à la convergence. A l'issue de cette procédure, nous obtenons les énergies et occupations des orbitales, le potentiel chimique moyen et l'état de charge moyen de l'ion.

### Avantages et limitations

Le modèle d'atome moyen permet d'obtenir rapidement les propriétés moyennes d'un plasma ETL. Pour un couple  $(n_e, T_e)$  donné, une seule configuration électronique moyenne et donc un seul état de charge moyen sont calculés. Il ne permet donc pas de calculer le spectre X détaillé émis par un plasma car il ne tient pas compte de la distribution d'états de charge du plasma et du grand nombre de niveaux atomiques peuplés pour un même état de charge. De plus, les processus d'interaction présents dans le plasma et décrits au paragraphe 2.2 ne sont pas pris en compte dans ce modèle.

### 2.5.2 Le code Multi-Configuration Dirac-Fock (MCDF)

Nous allons à présent décrire le code de physique atomique détaillée Multi-Configuration Dirac-Fock (MCDF) qui permet de déterminer, entre autres, la structure atomique d'un ion isolé. Il a été développé par J. Bruneau [51] et utilise la méthode de Hartree-Fock (méthode de champ moyen) pour résoudre l'équation de Dirac stationnaire. Le type de couplage utilisé dans MCDF est le couplage intermédiaire. Nous n'allons pas décrire la méthode MCDF en détail mais juste rappeler les grandes étapes du calcul et définir les quantités nécessaires pour le calcul du taux d'excitation NEET. La méthode de calcul MCDF a été décrite en détail dans les références [52, 53, 54, 55].

### Hamiltonien de Dirac

L'hamiltonien de Dirac, pour un atome à  $N_e$  électrons s'écrit en unités atomiques ( $m_e = \hbar = e = 1$ ) :

$$H_D = \sum_{i=1}^{N_e} h_i + \sum_{i < j} w_{ij} \quad (2.34)$$

où  $h_i$  est l'hamiltonien de Dirac monoélectronique et  $w_{ij}$  est un opérateur prenant en compte les interactions électron-électron notamment la répulsion coulombienne. L'expression de  $w_{ij}$  ne sera pas détaillée ici mais peut se trouver dans les références [55, 56, 57] par exemple.

L'hamiltonien de Dirac monoélectronique s'écrit :

$$h_i = c\vec{\alpha} \cdot \vec{p}_i + (\beta - 1)c^2 + V_{nuc}(r_i) \quad (2.35)$$

où :

—  $\vec{\alpha}$  est une matrice définie à l'aide des matrices de Pauli  $\vec{\sigma}^p$  :

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma}^p \\ \vec{\sigma}^p & 0 \end{pmatrix}$$

Les matrices de Pauli  $\vec{\sigma}^p$  sont définies par :

$$\sigma_x^p = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y^p = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z^p = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

—  $\vec{p}_i$  est l'opérateur impulsion de l'électron  $i$

—  $\beta$  est une matrice s'exprimant à l'aide de la matrice unité  $I$  (matrice  $2 \times 2$ ) :

$$\beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}$$

—  $V_{nuc}(r_i)$  est le potentiel créé par le noyau

Il est possible de trouver dans la littérature [53, 55] une expression différente de l'hamiltonien  $h_i$  (2.35) dans laquelle le terme  $(\beta - 1)c^2$  est remplacé par le terme  $\beta c^2$ . Ceci provient de la convention choisie pour l'énergie de masse de l'électron ( $c^2$  en unité atomique) : soit elle est incluse dans l'hamiltonien (terme  $\beta c^2$ ), soit elle est retirée (terme  $(\beta - 1)c^2$ ).

### Approximation du champ moyen

L'équation aux valeurs propres utilisant l'hamiltonien de l'équation (2.34) n'est pas résoluble, notamment à cause de l'interaction électron-électron. Aussi, l'approximation du champ moyen est utilisée. Elle consiste à traiter chaque électron indépendamment en considérant qu'il interagit avec un potentiel moyen généré par les  $N_e - 1$  autres électrons et le noyau. Des termes de correction à ce champ moyen peuvent ensuite être traités à l'aide de la théorie des perturbations.

Ainsi, dans l'approximation du champ moyen, l'hamiltonien total  $H_{cm}$  s'écrit :

$$H_{cm} = \sum_{i=1}^{N_e} c\vec{\alpha} \cdot \vec{p}_i + (\beta - 1)c^2 + \bar{V}(r_i) \quad (2.36)$$

où  $\bar{V}(r_i)$  est le potentiel moyen vu par l'électron  $i$ . Il est alors possible de traiter le terme résiduel  $H_D - H_{cm}$  comme une perturbation.

### Fonctions d'onde

Dans l'approximation du champ moyen relativiste, les fonctions d'onde monoélectroniques sont utilisées pour construire la fonction d'onde totale des  $N_e$  électrons. La fonction d'onde  $\psi_{n\kappa m}$  d'une orbitale dépend des nombres quantiques  $n$ ,  $\kappa$  et  $m$ .  $n$  est le nombre quantique principal,  $m$  la projection du moment cinétique total  $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$  sur l'axe de quantification et  $\kappa$  est le nombre quantique relativiste défini par :

$$\kappa = \begin{cases} -j - \frac{1}{2} & \text{si } l = j - \frac{1}{2} \\ j + \frac{1}{2} & \text{si } l = j + \frac{1}{2} \end{cases}$$

Les fonctions d'onde monoélectroniques sont définies, en coordonnées sphériques, par :

$$\langle \vec{r} | n\kappa m \rangle = \psi_{n\kappa m}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} P_{n\kappa}(r) \chi_{\kappa m}(\theta, \phi) \\ i Q_{n\kappa}(r) \chi_{-\kappa m}(\theta, \phi) \end{pmatrix} \quad (2.37)$$

où :  $P_{n\kappa}(r)$  et  $Q_{n\kappa}(r)$  sont les fonctions radiales, appelées grande et petite composantes respectivement.  $\chi_{\kappa m}$  sont les spineurs de Pauli à deux composantes, dont les expressions ne seront pas

explicitées ici. Les fonctions  $\chi_{\kappa m}$  sont états propres des opérateurs  $l^2$ ,  $s^2$ ,  $j^2$  et  $j_z$  avec les valeurs propres  $l(l+1)$ ,  $s(s+1)$ ,  $j(j+1)$  et  $m$  respectivement. Les fonctions d'onde sont orthonormées :

$$\langle n\kappa m | n'\kappa' m' \rangle = \delta_{nn'} \delta_{\kappa\kappa'} \delta_{mm'}$$

Les fonctions d'onde monoélectroniques  $\psi_{n\kappa m}$  sont utilisées pour construire des fonctions d'états de configuration (CSF<sup>3</sup>). Ces CSF sont des combinaisons linéaires des déterminants de Slater formés à partir des fonctions d'onde monoélectroniques des  $N_e$  électrons. L'utilisation de déterminants permet de rendre les fonctions d'onde des CSF antisymétriques et de respecter ainsi le principe d'exclusion de Pauli. La fonction d'onde d'une CSF peut s'écrire comme :

$$\langle \vec{r} | \nu JM\Pi \rangle = \sum_{i=1} d_i \begin{vmatrix} \psi_1^i(\vec{r}_1) & \cdots & \psi_1^i(\vec{r}_{N_e}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{N_e}^i(\vec{r}_1) & \cdots & \psi_{N_e}^i(\vec{r}_{N_e}) \end{vmatrix} \quad (2.38)$$

où  $\nu$  désigne les autres nombres quantiques nécessaires pour définir sans ambiguïté une CSF. Les coefficients  $d_i$  sont déterminés pour que les CSF soient états propres du moment cinétique total  $J^2$ , de sa projection  $J_z$  et de la parité  $\Pi$ . La sommation est faite sur les différentes valeurs possibles des nombres quantiques de chaque orbitale.

Les états propres  $|JM\Pi\rangle$  (généralement appelés ASF<sup>4</sup>) sont alors déterminés en diagonalisant l'hamiltonien dans la base des CSF. Ainsi, les états propres s'écrivent :

$$|JM\Pi\rangle = \sum_j c_j |\nu_j J_j M_j \Pi_j\rangle \quad (2.39)$$

Les états propres définis par les nombres quantiques  $J$ ,  $M$  et  $\Pi$  sont composés uniquement de CSF ayant les mêmes valeurs de  $J$ ,  $M$  et  $\Pi$ .

Les coefficients de mélange  $c_j$  sont déterminés en minimisant la fonctionnelle énergie  $\langle JM\Pi | H_{cm} | JM\Pi \rangle$ . La condition d'orthonormalisation  $\langle J_i M_i \Pi_i | J_j M_j \Pi_j \rangle = \delta_{ij}$  implique pour chaque état propre :

$$\sum_j c_j^2 = 1 \quad (2.40)$$

## Interaction de configuration

L'approche multi-configuration, c'est-à-dire le fait de décomposer les états propres sur la base des CSF, permet d'aller au delà de l'approche monoélectronique et de tenir compte ainsi des corrélations entre les électrons. Les états propres seront mieux décrits en incluant dans le calcul d'autres configurations électroniques que celles d'intérêt car la base sur laquelle se décomposent les états sera plus complète. Cette méthode est appelée méthode de l'interaction de configuration (CI<sup>5</sup>).

Prenons l'exemple du calcul MCDF d'une transition entre les sous-couches  $3d$  et  $2s$  avec un électron dit spectateur (ne participant pas à la transition) dans la couche  $1s$ . Dans notre exemple, deux configurations électroniques relativistes initiales sont possibles :  $1s3d_{3/2}$  et  $1s3d_{5/2}$ . Si l'on s'intéresse uniquement aux transitions  $M1$ , alors seule la transition  $1s3d_{3/2} \rightarrow 1s2s$  est possible. Dans un calcul MCDF avec une prise en compte minimale de l'interaction de configuration, seules les configurations  $1s3d_{3/2}$  et  $1s2s$  seront considérées. Par contre, dans un calcul avec une prise en compte plus complète de l'interaction de configuration, les trois configurations  $1s3d_{3/2}$ ,  $1s3d_{5/2}$  et  $1s2s$  seront utilisées. Bien que la configuration  $1s3d_{5/2}$  ne permette pas de réaliser une transition  $M1$  avec la configuration  $1s2s$ , sa prise en compte permet d'améliorer la précision du calcul.

La prise en compte de l'interaction de configuration dans les calculs MCDF augmente drastiquement le temps de calcul. Les capacités de calcul du CENBG<sup>6</sup> ne nous permettant pas de

3. CSF : *Configuration State Function*

4. ASF : *Atomic State Function*

5. CI : *Configuration Interaction*

6. Cluster de calcul constitué de 10 noeuds composés de bi pro Quad Core Intel(R) Xeon(R) E5345 à 2.33GHz avec 16 Gb de Ram/noeud

réaliser ces calculs en un temps raisonnable, l'interaction de configuration a été prise en compte sous sa forme minimale. Ainsi, dans nos calculs MCDF, seules les configurations électroniques initiale et finale d'une transition seront considérées. Dans la suite de ce mémoire, nous désignons ces calculs MCDF par le terme : "calculs MCDF sans interaction de configuration".

Cependant, à titre de comparaison, des calculs MCDF avec une prise en compte plus complète de l'interaction de configuration ont été menés par nos collaborateurs du CEA/DAM sur le supercalculateur TERA 100. Dans ces calculs les transitions sont choisies à partir des configurations non relativistes. Dans notre exemple, les deux configurations non relativistes initiale et finale sont :  $1s3d$  et  $1s2s$ . Ensuite, les configurations relativistes sont construites à partir des configurations non relativistes : il s'agit des configurations  $1s3d_{3/2}$ ,  $1s3d_{5/2}$  et  $1s2s$ . Les calculs MCDF sont alors effectués avec ce jeu de configurations relativistes. Dans notre exemple, seules trois configurations relativistes sont prises en compte mais ce nombre devient plus important quand le nombre d'électrons présents dans chaque configuration augmente. Nous discuterons des résultats obtenus avec les deux méthodes dans le chapitre 3.

### Sorties du code MCDF

A l'issue de la résolution des équations MCDF, nous obtenons un grand nombre d'informations. Celles utilisées pour la création des spectres X sont :

- énergies, moments cinétiques totaux  $J$  et parités des niveaux.
- énergies et taux radiatifs pour les transitions choisies ( $E1$ ,  $M1$ ,...)

Concernant le calcul du taux d'excitation NEET, nous avons en plus besoin :

- des parties radiales des fonctions d'onde monoélectroniques : les petites et grandes composantes sont données numériquement en fonction du rayon de l'orbitale considérée.
- des coefficients de mélange des CSF pour chaque état propre.

### Exemple

Dans ce paragraphe, nous illustrons les concepts décrits ci-dessus par l'exemple du calcul MCDF de la transition  $1s3d_{3/2} \rightarrow 1s2s$ . Dans le cas d'un calcul MCDF sans CI, seules les deux configurations  $1s3d_{3/2}$  et  $1s2s$  sont prises en compte. L'addition des moments cinétiques des sous-couches de chaque configuration relativiste conduit aux CSF suivantes :

- $|1s3d_{3/2} 1^+M\rangle$  (avec  $M \in \llbracket -1,1 \rrbracket$ ) et  $|1s3d_{3/2} 2^+M\rangle$  (avec  $M \in \llbracket -2,2 \rrbracket$ ) construites à partir de la configuration initiale
- $|1s2s 0^+0\rangle$  et  $|1s2s 1^+M\rangle$  (avec  $M \in \llbracket -1,1 \rrbracket$ ) construites à partir de la configuration finale.

La résolution des équations MCDF conduit aux états propres présentés dans le tableau 2.1. Dans ce tableau, nous avons attribué un numéro à chaque niveau caractérisé par une valeur de  $J$ . La décomposition des états sur la base des CSF est reportée dans ce tableau.

n°	État	Décomposition sur la base des CSF
1	$ 1^+M\rangle$ ( $M \in \llbracket -1,1 \rrbracket$ )	$ 1^+M\rangle =  1s3d_{3/2} 1^+M\rangle$
2	$ 2^+M\rangle$ ( $M \in \llbracket -2,2 \rrbracket$ )	$ 2^+M\rangle =  1s3d_{3/2} 2^+M\rangle$
3	$ 0^+0\rangle$	$ 0^+0\rangle =  1s2s 0^+0\rangle$
4	$ 1^+M\rangle$ ( $M \in \llbracket -1,1 \rrbracket$ )	$ 1^+M\rangle =  1s2s 1^+M\rangle$

TABLEAU 2.1 – Décomposition des états propres issus des configurations  $1s3d_{3/2}$  et  $1s2s$ .

D'après le tableau 2.1, sans CI, les coefficients de mélange sont tous égaux à 1. Dans ce cas, chaque CSF est un état propre.

Nous pouvons considérer à présent le cas d'un calcul avec CI. Pour cela, la configuration  $1s3d_{5/2}$  est ajoutée en entrée de MCDF. Par addition des moments cinétiques, des nouvelles CSF sont construites à partir de la configuration  $1s3d_{5/2}$  :  $|1s3d_{5/2} 2^+M\rangle$  ( $M \in \llbracket -2,2 \rrbracket$ ) et

$|1s3d_{5/2} 3^+ M\rangle$  ( $M \in \llbracket -3, 3 \rrbracket$ ). Nous obtenons la nouvelle liste d'états propres présentée dans le tableau 2.2.

n°	État	Décomposition sur la base des CSF		
1	$ 1^+ M\rangle$ ( $M \in \llbracket -1, 1 \rrbracket$ )	$ 1^+ M\rangle =  1s3d_{3/2} 1^+ M\rangle$		
2	$ 2^+ M\rangle$ ( $M \in \llbracket -2, 2 \rrbracket$ )	$ 2^+ M\rangle = 0,9998$	$ 1s3d_{3/2} 2^+ M\rangle - 0,0187$	$ 1s3d_{5/2} 2^+ M\rangle$
3	$ 0^+ 0\rangle$	$ 0^+ 0\rangle =  1s2s 0^+ 0\rangle$		
4	$ 1^+ M\rangle$ ( $M \in \llbracket -1, 1 \rrbracket$ )	$ 1^+ M\rangle =  1s2s 1^+ M\rangle$		
5	$ 2^+ M\rangle$ ( $M \in \llbracket -2, 2 \rrbracket$ )	$ 2^+ M\rangle = 0,9998$	$ 1s3d_{5/2} 2^+ M\rangle + 0,0187$	$ 1s3d_{3/2} 2^+ M\rangle$
6	$ 3^+ M\rangle$ ( $M \in \llbracket -3, 3 \rrbracket$ )	$ 3^+ M\rangle =  1s3d_{5/2} 3^+ M\rangle$		

TABLEAU 2.2 – Décomposition des états propres issus des configurations  $1s3d_{3/2}$ ,  $1s3d_{5/2}$  et  $1s2s$ .

Une prise en compte plus complète de l'interaction de configuration est visible sur la décomposition des états propres n°2 et n°5. En effet, dans ce cas, ces états s'écrivent comme des combinaisons linéaires de deux CSF dont l'une est construite à partir de la configuration  $1s3d_{5/2}$ .

### Avantages et limitations

MCDF est un code de physique atomique détaillé qui permet d'obtenir les énergies des raies X avec une grande précision (quelques eV). En revanche, ce code traite un ion isolé et ne prend pas en compte tous les processus atomiques pouvant avoir lieu dans un plasma ni les effets de densité. Dans ce travail, seules les transitions radiatives sont calculées par MCDF et les données de structure atomique obtenues sont utilisées dans un modèle décrivant le plasma. Nous avons développé un modèle de plasma ETL simple qui sera décrit au paragraphe 2.6.

Le temps de calcul reste le principal inconvénient de MCDF. En effet, pour des configurations où beaucoup de moments cinétiques doivent être additionnés, les temps de calcul peuvent être de plusieurs heures. De plus, la convergence des fonctions d'onde est assez délicate à obtenir si bien qu'il est parfois nécessaire de réaliser plusieurs fois un même calcul en faisant varier certains paramètres. La contrepartie à des résultats de précision est donc un temps de calcul important.

### 2.5.3 Le code SCO-RCG

Entre les deux extrêmes que constituent les approches statistique (code d'atome moyen relativiste) et détaillée (code MCDF), se situe l'approche hybride, employée au sein du code ETL SCO-RCG [58]. Celle-ci consiste à combiner les deux approches statistique et détaillée pour obtenir, en un temps de calcul raisonnable, des spectres X suffisamment précis pour une comparaison avec des spectres expérimentaux.

L'objectif de l'approche statistique est de modéliser un *faisceau de transitions* sans avoir à calculer la structure des niveaux atomiques. Un *faisceau de transitions* désigne l'ensemble des raies entre les niveaux atomiques qui sont issus de configurations électroniques différentes. Ces raies sont généralement proches en énergie et, sous l'effet des différents processus d'élargissement possibles dans un plasma, coalescent pour former de larges structures non résolues. Pour modéliser ces faisceaux de transitions non résolus les formalismes UTA<sup>7</sup> [59] et SOSA<sup>8</sup> [60] ont été développés. Dans le formalisme UTA, un faisceau de transitions est modélisé par une enveloppe (généralement gaussienne) caractérisée par son énergie moyenne et sa variance. Cependant, pour les atomes de  $Z$  élevé, les effets relativistes (interaction spin-orbite notamment) conduisent à une séparation du faisceau de transitions en plusieurs sous-faisceaux. Pour tenir compte de ce phénomène, le formalisme SOSA a été développé.

Cependant, pour des configurations comportant un nombre important d'électrons, le nombre de configurations électroniques à prendre en compte peut devenir très élevé et les temps de calcul

7. UTA : *Unresolved Transition Arrays*

8. SOSA : *Spin Orbit Split Arrays*

deviennent rédhibitoires. Pour réduire ces temps de calcul, il est possible de regrouper plusieurs configurations électroniques proches en énergie pour former des *supraconfigurations* (SC). Dans une supraconfiguration, les sous-couches voisines en énergie sont regroupées pour former des supracouches. Par exemple, la supraconfiguration :

$$(1s)^2(2s2p)^8(3s3p3d)^{18}(4s4p4d4f)^{16}$$

représente 223 configurations, 8535 configurations relativistes et 49309974 niveaux [47]. La figure 2.4 schématise les différents regroupements possibles entre niveaux, configurations et supraconfigurations. L'ensemble des transitions entre deux SC est appelé STA<sup>9</sup>.

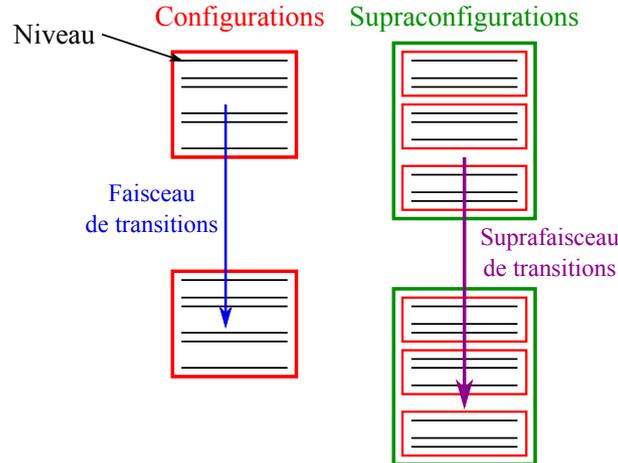


FIGURE 2.4 – Représentation des différents regroupements possibles : niveaux regroupés en configurations, elles-même associées en supraconfigurations.

SCO-RCG est basé sur deux codes : le code SCO [61] pour l'approche statistique et le code RCG [62] pour l'approche détaillée. SCO est un code permettant une description des plasmas en fonction de la température et de la densité. Le code RCG est un code de physique atomique détaillé permettant un calcul des niveaux d'énergie et des raies. Le choix entre calcul détaillé ou statistique est automatique sur des critères basés sur les distributions de raies (nombre, largeurs individuelles,...)

SCO-RCG présente un bon compromis entre le calcul détaillé et l'approche purement statistique. Il peut donc être utilisé pour l'interprétation de spectres expérimentaux. De plus, l'approche statistique permet de réduire drastiquement les temps de calcul par rapport à une méthode DLA<sup>10</sup> (méthode MCDF sans sélection des configurations) par exemple.

#### 2.5.4 Le code AVERROÈS/TRANSPEC

Les différents codes présentés précédemment considèrent un équilibre ETL. Or, une description précise des plasmas créés par laser nécessite de se placer dans un cadre HETL [63]. Dans ce cas, les différents processus atomiques décrits au paragraphe 2.2 doivent être considérés pour déterminer les populations des niveaux excités des ions. Les calculs HETL présentés dans cette thèse ont été effectués par Jean-Christophe Pain et Franck Gilleron du CEA/DAM/DIF avec le code AVERROÈS/TRANSPEC développé par Olivier Peyrusse. Le formalisme utilisé dans le code AVERROÈS [64, 65] est celui des supraconfigurations (voir paragraphe 2.5.3) dans une approche HETL. Les configurations regroupées au sein d'une même supraconfiguration sont supposées être à l'ETL entre elles, ce qui est désigné par le terme "ETL partiel". AVERROÈS calcule les énergies des supraconfigurations, les taux de transition radiatifs et collisionnels ainsi que les énergies et variances des STA. Ces données sont ensuite utilisées par le code TRANSPEC [66, 67] pour calculer les populations HETL des niveaux atomiques et générer des spectres X.

9. STA : *Super-Transition Array*

10. DLA : *Detailed Level Accounting*

## 2.6 Méthode de génération des spectres X avec le code MCDF

### 2.6.1 Hypothèses de la méthode

La méthode de calcul des spectres X, que nous avons développée, est décrite ci-dessous. Elle est basée sur le code MCDF et les populations des niveaux excités dans un plasma sont déterminées sous l'hypothèse d'un équilibre ETL. De plus, nous considérons que le rayonnement X est uniquement produit par émission spontanée lors de transitions à un électron. Enfin, nous ne prenons pas en compte les effets de densité puisque nous considérons un ion isolé même si celle-ci peut avoir des effets sur les fonctions d'onde des états propres. Toutes ces hypothèses sont très restrictives mais nous permettent d'élaborer une méthode simple de calcul des spectres X et du taux d'excitation NEET. Bien que cette méthode de calcul ne puisse pas rivaliser, au niveau de l'interprétation des spectres X émis par un plasma, avec des codes HETL basés sur des équilibres collisionnel-radiatifs, elle nous permet d'aller au delà du modèle de l'atome moyen qui était la seule méthode de calcul utilisée jusqu'à présent pour déterminer les taux d'excitation NEET. Afin de valider cette méthode, nous comparerons des spectres X calculés aux spectres expérimentaux (voir chapitre 3).

### 2.6.2 Positionnement du problème

Pour réaliser un calcul MCDF, nous devons fournir au code une liste de configurations électroniques qui servira à établir la base dans laquelle l'hamiltonien sera diagonalisé. Dans le cadre des calculs MCDF sans interaction de configuration, seules deux configurations sont prises en compte : la configuration initiale et la configuration finale. Comme nous ne considérons que les transitions à un électron, nous pouvons définir sans ambiguïté la configuration finale associée à une configuration initiale et à une transition donnée. En effet, si l'on suppose une transition  $\alpha \rightarrow \beta$  entre les orbitales  $\alpha$  et  $\beta$ , la configuration initiale doit vérifier les critères suivants :

- posséder au moins un électron dans l'orbitale  $\alpha$
- posséder au moins un trou dans l'orbitale  $\beta$

La configuration finale est alors construite à partir de la configuration initiale en réalisant la transition  $\alpha \rightarrow \beta$  :

- un électron en moins dans l'orbitale  $\alpha$
- un électron en plus dans l'orbitale  $\beta$
- occupations de toutes les autres orbitales identiques à celles de la configuration initiale.

Pour un état de charge  $Q$  donné, plusieurs configurations initiales sont associées à la même transition. En effet, en faisant varier les occupations des orbitales ne participant pas à la transition tout en gardant un état de charge constant, nous définissons un ensemble de configurations initiales (et donc leurs configurations finales associées). Plus l'état de charge sera faible et plus il y aura d'électrons spectateurs à prendre en compte et plus le nombre de configurations électroniques initiales à considérer sera élevé. Ce nombre dépend aussi du nombre d'orbitales prises en compte pour définir les configurations électroniques. Dans le cas du  $^{84}\text{Rb}$ , nous avons considéré des configurations composées des orbitales  $1s$  à  $6g_{9/2}$ . Nous avons également considéré que l'orbitale  $1s$  est toujours pleine. Nous verrons au chapitre 3 que ces hypothèses sont vérifiées. En effet, les configurations électroniques identifiées ne sont peuplées que jusqu'à l'orbitale  $6d_{5/2}$  et l'ionisation de la couche  $1s$  est très peu probable au vu des températures électroniques atteintes expérimentalement. Afin d'illustrer le nombre de configurations initiales possibles (et donc le nombre de calculs MCDF à effectuer) pour différents états de charge, nous considérons l'exemple de la transition  $E1\ 3s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}$ . Les nombres de configurations initiales possibles, en prenant en compte les différentes positions des électrons spectateurs pour les états de charge allant de  $26^+$  à  $34^+$  sont présentés dans le tableau 2.3.

Ce tableau illustre la limitation de la méthode qui consiste à prendre en compte toutes les configurations possibles (méthode DLA). En effet, en considérant nos capacités de calcul limitées, les calculs ne seraient réalisables que pour des états de charge supérieurs ou égaux à  $32^+$ . De plus, ce tableau ne présente le nombre de configurations à traiter que pour la transition  $3s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}$ . Or pour générer un spectre X complet, il faut traiter d'autres transitions. Si, par exemple, nous voulons calculer le spectre X correspondant aux transitions E1 entre les couches

Q	Nombre de configurations
26 <sup>+</sup>	68016688
27 <sup>+</sup>	14049302
28 <sup>+</sup>	2591331
29 <sup>+</sup>	418359
30 <sup>+</sup>	57520
31 <sup>+</sup>	6471
32 <sup>+</sup>	559
33 <sup>+</sup>	33
34 <sup>+</sup>	1

TABLEAU 2.3 – Nombre de configurations initiales possibles pour la transition  $3s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}$  pour des états de charge allant de 26<sup>+</sup> à 34<sup>+</sup>.

$n = 3$  et  $n = 2$ , il faut prendre en compte les transitions suivantes :  $3s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}$ ,  $3s_{1/2} \rightarrow 2p_{3/2}$ ,  $3p_{1/2} \rightarrow 2s_{1/2}$ ,  $3p_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2}$ ,  $3d_{3/2} \rightarrow 2p_{1/2}$ ,  $3d_{3/2} \rightarrow 2p_{3/2}$  et  $3d_{5/2} \rightarrow 2p_{3/2}$ . Ainsi, le nombre de configurations à traiter (tableau 2.3) est approximativement multiplié par sept pour chaque état de charge. Par conséquent, nous devons mettre en place une sélection des configurations à traiter dans les calculs MCDF afin de rendre possible la génération d'un spectre X pour les états de charge faibles ( $Q \leq 32^+$ ).

Nous avons évoqué ci-dessus le cas des calculs MCDF sans interaction de configuration. Quand on prend en compte cette dernière, le nombre de calculs à effectuer est plus faible car chaque calcul regroupe un nombre plus important de configurations qui auraient été traitées séparément sinon. En contrepartie, les calculs sont alors beaucoup plus longs. Par conséquent, quel que soit le type de calcul MCDF, un critère de sélection des configurations à traiter est nécessaire pour réduire les temps de calcul.

### 2.6.3 Sélection des configurations électroniques à traiter

Afin de rendre les calculs des spectres X réalisables en des temps raisonnables, nous devons mettre en place une méthode de sélection des configurations. L'objectif est donc de sélectionner les configurations électroniques initiales conduisant aux raies X les plus intenses. Comme l'intensité d'une raie est proportionnelle à l'occupation de l'état initial conduisant à cette raie, nous pouvons appliquer un critère sur les populations des états initiaux. Cependant, pour déterminer les occupations ou les probabilités d'occupation des états initiaux, il faut connaître leurs énergies et leurs moments angulaires (2.12) et donc réaliser un calcul MCDF. Afin d'appliquer une sélection avant d'effectuer les calculs MCDF, nous appliquons un critère sur les configurations initiales puisque les états propres initiaux sont calculés à partir de celles-ci. Ainsi, nous devons chercher les configurations électroniques les plus probables pour un couple densité/température donné, puisque le peuplement des niveaux excités dépend des conditions thermodynamiques du plasma. La procédure de gestion des calculs MCDF à traiter se déroule en deux étapes : l'une de sélection avant les calculs MCDF et l'autre de vérification, après.

#### Première étape : sélection des configurations

La première étape consiste à traiter les configurations les plus probables. Pour cela, nous utilisons le code d'atome moyen relativiste qui permet d'obtenir une configuration électronique moyenne pour un couple densité/température donné. Les occupations  $\bar{n}_j$  des orbitales composant cette configuration moyenne, données par l'équation (2.29), ne sont pas entières mais peuvent être utilisées pour définir  $\bar{p}_j$  la probabilité d'occupation moyenne de l'orbitale  $j$  comme :

$$\bar{p}_j = \frac{\bar{n}_j}{g_j} \quad (2.41)$$

où :

- $\bar{n}_j$  est l'occupation moyenne de l'orbitale  $j$  calculée par le code d'atome moyen à une densité et une température donnée
- $g_j$  est la dégénérescence de l'orbitale  $j$

Ainsi, en supposant qu'il n'y a pas de corrélation entre les électrons des différentes sous-couches, il est possible de calculer  $\mathcal{P}_k$ , la probabilité d'occupation de la configuration  $k$ , dite réelle (ayant des occupations entières), à l'aide d'une loi binomiale :

$$\mathcal{P}_k = \mathcal{C} \prod_{j=1}^{n_{orb}} \binom{g_j}{n_j^k} \bar{p}_j^{n_j^k} (1 - \bar{p}_j)^{g_j - n_j^k} \quad (2.42)$$

où :

- $\mathcal{C}$  est un coefficient de normalisation permettant d'obtenir  $\sum_k \mathcal{P}_k = 1$
- $n_{orb}$  est le nombre d'orbitales utilisées pour définir les configurations ( $n_{orb} = 34$  pour le Rb)
- $n_j^k$  est l'occupation de l'orbitale  $j$  de la configuration ( $n_j^k$  est un entier)

Lors de la sélection des configurations, chaque état de charge est considéré comme indépendant. Les spectres obtenus pour chaque état de charge sont pondérés *a posteriori* par une distribution d'état de charge calculée indépendamment. Ainsi, la normalisation est effectuée sur toutes les configurations possibles à un état de charge donné.

En pratique, le code de sélection des configurations génère toutes les configurations électroniques possibles à un état de charge donné et calcule les probabilités  $\mathcal{P}_k$  (équation (2.42)) associées à chaque configuration. La normalisation est appliquée sur l'ensemble des configurations possibles à un état de charge  $Q$  donné, dont le nombre est noté  $n_{conf}^Q$ . Le coefficient  $\mathcal{C}$  est calculé par l'équation :

$$\mathcal{C} = \frac{1}{\sum_{k=1}^{n_{conf}^Q} \prod_{j=1}^{n_{orb}} \binom{g_j}{n_j^k} \bar{p}_j^{n_j^k} (1 - \bar{p}_j)^{g_j - n_j^k}} \quad (2.43)$$

Ensuite, les configurations sont classées par probabilité décroissante. Nous obtenons ainsi une nouvelle liste de configurations avec leurs probabilités associées  $\mathcal{P}_k$  tels que  $\mathcal{P}_1 \geq \mathcal{P}_2 \geq \dots \geq \mathcal{P}_{n_{conf}^Q}$ .

A ce stade, nous devons encore effectuer une sélection des configurations pouvant réaliser une transition  $\alpha \rightarrow \beta$  donnée. Pour un état de charge et une transition  $\alpha \rightarrow \beta$  donnés, nous sélectionnons dans la liste totale des configurations possibles toutes les configurations initiales de la transition  $\alpha \rightarrow \beta$ . Notons  $n_{conf}^{\alpha \rightarrow \beta}$  leurs nombres. Les probabilités associées à ce sous-ensemble des  $\{\mathcal{P}_k\}$  sont notées  $\{\mathcal{P}_k^{\alpha \rightarrow \beta}\}$ . A partir de ce sous-ensemble, nous définissons une probabilité cumulée pour la  $l^{\text{ème}}$  configuration (avec  $l \leq n_{conf}^{\alpha \rightarrow \beta}$ ) par :

$$\mathcal{P}_l^{\alpha \rightarrow \beta} = \sum_{k=1}^l \mathcal{P}_k^{\alpha \rightarrow \beta} \quad (2.44)$$

Le cas particulier  $l = n_{conf}^{\alpha \rightarrow \beta}$  nous donne la probabilité totale d'effectuer la transition  $\alpha \rightarrow \beta$  à l'état de charge considéré. Notons  $\mathcal{P}_{tot}^{\alpha \rightarrow \beta}$  cette probabilité :

$$\mathcal{P}_{tot}^{\alpha \rightarrow \beta} = \mathcal{P}_{n_{conf}^{\alpha \rightarrow \beta}}^{\alpha \rightarrow \beta} = \sum_{k=1}^{n_{conf}^{\alpha \rightarrow \beta}} \mathcal{P}_k^{\alpha \rightarrow \beta} \quad (2.45)$$

Finalement, pour réaliser le spectre associé à la transition  $\alpha \rightarrow \beta$  à un état de charge donné, nous effectuons les calculs MCDF pour les couples de configurations initiale et finale allant de la première configuration initiale (ayant la plus grande probabilité  $\mathcal{P}_1^{\alpha \rightarrow \beta}$ ) jusqu'à la première configuration  $l_{99}$  qui vérifie :

$$\mathcal{P}_{l_{99}}^{\alpha \rightarrow \beta} \geq 0,99 \mathcal{P}_{tot}^{\alpha \rightarrow \beta} \quad (2.46)$$

Ainsi, les  $l_{99}$  configurations initiales prises en compte représentent au moins 99% de la probabilité totale d'effectuer la transition  $\alpha \rightarrow \beta$ . Le critère à 99% est pour l'instant arbitraire et sa validité sera discutée plus loin.

Le tableau 2.4 présente le nombre de configurations à traiter pour la transition  $3s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}$  avec le critère de sélection à 99% appliqué à deux températures différentes (270 et 400 eV). Le choix de ces deux températures sera justifié dans les chapitres 3 et 5. Nous remarquons que le

Q	Nombre de configurations		
	Sans sélection	Avec sélection	
		$T_e = 270$ eV	$T_e = 400$ eV
26 <sup>+</sup>	68016688	187	1975
27 <sup>+</sup>	14049302	37	571
28 <sup>+</sup>	2591331	30	218
29 <sup>+</sup>	418359	19	129
30 <sup>+</sup>	57520	12	109
31 <sup>+</sup>	6471	6	63
32 <sup>+</sup>	559	5	23
33 <sup>+</sup>	33	3	4
34 <sup>+</sup>	1	1	1

TABLEAU 2.4 – Nombre de configurations initiales avec et sans critère de sélection pour la transition  $3s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}$  et pour des états de charge allant de 26<sup>+</sup> à 34<sup>+</sup>.

critère de sélection permet de réduire drastiquement le nombre de configurations à traiter et rend possible les calculs des spectres X des états de charge faibles. En effet, bien que nous considérons l'ensemble des configurations dont la somme des probabilités d'occupation représente 99% de la probabilité d'occupation totale, le nombre de configurations à traiter est réduit de plusieurs ordres de grandeur, notamment pour les états de charge faibles. Cette propriété, très intéressante pour réduire le nombre de calculs à effectuer, est illustrée sur la figure 2.5 qui représente la probabilité d'occupation cumulée  $\mathcal{P}_l^{3s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}}$  en fonction du numéro  $l$  de la configuration pour l'état de charge  $Q = 26^+$  à une température de 400 eV.

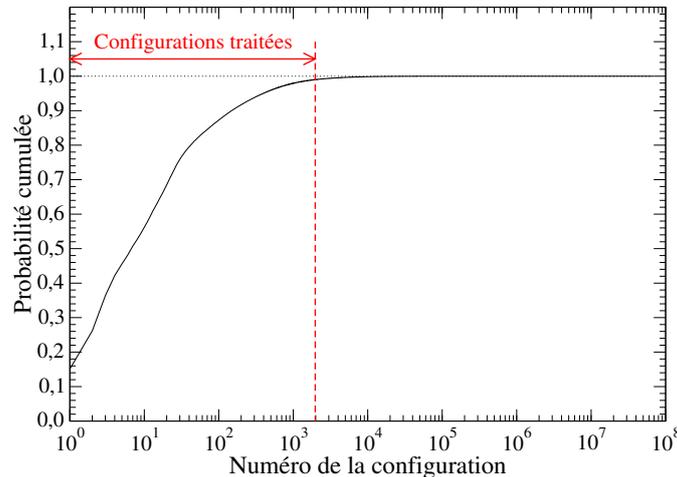


FIGURE 2.5 – Probabilité d'occupation cumulée  $\mathcal{P}_l^{3s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}}$  en fonction du numéro  $l$  de la configuration pour l'état de charge  $Q = 26^+$  et pour une température de 400 eV.

Sur la figure 2.5, nous remarquons que très peu de configurations ont des probabilités d'occupations significatives et participent donc à la probabilité cumulée  $\mathcal{P}_{l_{99}}^{3s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}}$ .

Dans le tableau 2.4, nous observons que plus la température est élevée et plus le nombre de configurations d'intérêt est important. Ceci s'explique par le fait que plus la température est élevée et plus le peuplement des états excités est important. Notre critère de sélection dépendant de la température, il est important d'évaluer celle-ci dans le cadre d'une expérience ou à partir

de simulations hydrodynamiques.

## Seconde étape : vérification

Une fois les calculs MCDF effectués pour les  $l_{99}$  configurations sélectionnées, nous appliquons un critère de vérification pour nous assurer qu'il n'y a pas de configuration initiale non prise en compte pouvant conduire à des raies X d'une intensité significative dans le spectre final. Pour cela, nous avons vérifié que la hauteur des raies issues des configurations  $l_{99} + 1, l_{99} + 2, \dots$  non prises en compte ne peut pas excéder celles des raies déjà calculées.

### 2.6.4 Calcul des populations des niveaux excités

Une fois les calculs MCDF effectués après la sélection décrite au paragraphe précédent, il faut déterminer la population d'un niveau  $i$  au sein du plasma, que l'on notera  $N_i^Q$  pour l'état de charge  $Q$ . Cette population par unité de volume est donnée par :

$$N_i^Q = n_{ion} P_Q P_i^Q \quad (2.47)$$

où :

- $n_{ion}$  est la densité ionique
- $P_Q$  est la fraction ionique de l'ion de charge  $Qe$
- $P_i^Q$  est la probabilité d'occupation du niveau  $i$  de l'état de charge  $Q$

Dans le cadre de l'ETL,  $P_i^Q$  est donné par l'équation 2.12 :

$$P_i^Q = \frac{g_i^Q \exp\left(-\frac{E_i}{T_e}\right)}{Z_Q(T_e)}$$

où :

- $g_i^Q$  est le poids statistique du niveau  $i$ ,  $g_i^Q = 2J_i + 1$  avec  $J_i$  le moment cinétique total du niveau  $i$
  - $E_i$  l'énergie du niveau  $i$
  - $T_e$  la température électronique du plasma
  - $Z_Q(T_e)$  est la fonction de partition de l'état de charge  $Q$
- $Z_Q(T_e)$  est donnée par :

$$Z_Q(T_e) = \sum_{i=1}^{n_{etp}^Q} (2J_i + 1) \exp\left(-\frac{E_i}{T_e}\right) \quad (2.48)$$

où  $n_{etp}^Q$  désigne le nombre total d'états propres issus de l'état de charge  $Q$ . Ainsi, il faut prendre en compte toutes les configurations possibles à cet état de charge, même celles qui ne sont pas associées à des transitions (état fondamental par exemple). Il nous faut aussi, pour le calcul de la fonction de partition, appliquer un critère de sélection similaire à celui décrit plus haut. Ce critère porte sur l'ensemble des configurations possibles à un état de charge  $Q$  donné, associé aux probabilités  $\{\mathcal{P}_k\}$  calculées à l'aide de l'équation (2.42). Nous définissons une probabilité cumulée associée à la configuration  $l$  :

$$\mathcal{P}_l = \sum_{k=1}^l \mathcal{P}_k \quad (2.49)$$

Ainsi, pour le calcul de la fonction de partition, nous traitons la première configuration (avec la probabilité d'occupation la plus élevée) puis toutes les configurations jusqu'à celle  $l_{99}$  vérifiant :

$$\mathcal{P}_{l_{99}} \geq 0,99 \quad (2.50)$$

Pour le calcul de la fonction de partition, seules les énergies et moments cinétiques des états propres nous sont utiles. Aussi, les calculs MCDF sont réalisés avec une seule configuration.

Nous ne réutilisons pas les calculs effectués pour la détermination des raies X. Ceci nous permet d'éviter un risque de comptage multiple si une même configuration est présente dans plusieurs calculs MCDF.

## 2.6.5 Création des spectres X

Dans ce paragraphe, différentes quantités utilisées pour représenter les spectres X sont définies. Elles seront utiles dans la suite de ce manuscrit.

### Taux radiatif pondéré

Pour chaque raie entre deux niveaux  $i$  et  $f$ , MCDF calcule le taux radiatif  $A_{if}$  correspondant. Pour tenir compte de la probabilité d'occupation du niveau initial  $P_i^Q$ , nous définissons le taux radiatif pondéré  $\mathcal{A}_{if}^Q(\lambda)$  par :

$$\mathcal{A}_{if}^Q(\lambda) = P_i^Q A_{if} \Gamma_{if}(\lambda) \quad (2.51)$$

où  $\Gamma_{if}(\lambda)$  est un profil centré sur la longueur d'onde  $\lambda_{if}$  qui peut être introduit pour tenir compte de la largeur des raies (expérimentale, naturelle, collisionnelle,...).  $\Gamma_{if}(\lambda)$  s'exprime en  $\text{\AA}^{-1}$  et est normalisé :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Gamma_{if}(\lambda) d\lambda = 1$$

Si l'on ne tient pas compte de la largeur de la raie,  $\Gamma_{if}(\lambda) = \delta(\lambda - \lambda_{if})$ .

A un état de charge  $Q$  donné, le taux radiatif total  $\mathcal{A}^Q(\lambda)$  est la somme des taux radiatifs de toutes les raies émises à cet état de charge :

$$\mathcal{A}^Q(\lambda) = \sum_{i \rightarrow f} \mathcal{A}_{if}^Q = \sum_{i \rightarrow f} P_i^Q A_{if} \Gamma_{if}(\lambda) \quad (2.52)$$

### Emissivité

L'émissivité est une quantité couramment utilisée en spectroscopie des plasmas. Elle représente l'énergie émise à une longueur d'onde donnée, par unité de volume, de temps et d'angle solide. Elle s'exprime généralement en  $\text{erg.cm}^{-3}.\text{s}^{-1}.\text{sr}^{-1}.\text{\AA}^{-1}$  (1 erg =  $10^{-7}$  J). Pour une raie entre les niveaux  $i$  et  $f$ , à un état de charge  $Q$  donné, l'émissivité lié-lié  $\epsilon_{if}^Q(\lambda)$  à la longueur d'onde  $\lambda$  s'écrit :

$$\epsilon_{if}^Q(\lambda) = \frac{1}{4\pi} \frac{hc}{\lambda_{if}} N_i^Q A_{if} \Gamma_{if}(\lambda) \quad (2.53)$$

où :

- $\lambda_{if}$  est la longueur d'onde de la raie entre le niveau excité  $i$  et le niveau final  $f$ . Son énergie est alors donnée par  $\frac{hc}{\lambda_{if}}$ .
- $N_i^Q$  est la population du niveau excité  $i$  de l'ion de charge  $Q$  par unité de volume.  $N_i^Q$  s'exprime en  $\text{cm}^{-3}$ .
- $A_{if}$  est le taux radiatif entre les niveaux  $i$  et  $f$ .

$\epsilon_{if}^Q(\lambda)$  peut donc être réécrite en introduisant le taux radiatif pondéré :

$$\epsilon_{if}^Q(\lambda) = \frac{n_{ion}}{4\pi} P_Q \frac{hc}{\lambda_{if}} P_i^Q A_{if} \Gamma_{if}(\lambda) = \frac{n_{ion}}{4\pi} P_Q \frac{hc}{\lambda_{if}} \mathcal{A}_{if}^Q(\lambda) \quad (2.54)$$

Pour un état de charge  $Q$ , l'émissivité  $\epsilon^Q(\lambda)$  correspond à la somme des émissivités de toutes les raies émises à cet état de charge :

$$\epsilon^Q(\lambda) = \sum_{i \rightarrow f} \epsilon_{if}^Q(\lambda) = \sum_{i \rightarrow f} \frac{n_{ion}}{4\pi} P_Q \frac{hc}{\lambda_{if}} \mathcal{A}_{if}^Q(\lambda) \quad (2.55)$$

## 2.6.6 Vérification des critères de sélection

Nous discutons ci-dessous deux hypothèses utilisées dans notre méthode de sélection.

### Utilisation des probabilités calculées avec une loi binomiale

Les configurations électroniques sont sélectionnées à partir d'une probabilité calculée à l'aide d'une loi binomiale (équation (2.42)). Considérons une configuration électronique  $k$  à un état de charge donné ayant une probabilité d'occupation calculée à partir de la loi binomiale et des résultats du code d'atome moyen,  $\mathcal{P}_k$ . A partir de cette configuration,  $n_{etp}^k$  niveaux sont calculés par MCDF, associés aux probabilités  $P_i^Q$  calculées à partir de la fonction de partition. Si le calcul des probabilités d'occupation utilisant la loi binomiale est valide, le rapport  $R_k^Q$  suivant doit être égal à 1 :

$$R_k^Q = \frac{\mathcal{P}_k}{\sum_{i=1}^{n_{etp}^k} P_i^Q} = 1 \quad (2.56)$$

En réalité, il n'y aura jamais strictement égalité car les deux probabilités sont calculées sous des hypothèses différentes. La figure 2.6 présente la moyenne du rapport  $R_k^Q$ , notée  $\langle R^Q \rangle$ , pour chaque état de charge et à la température de 400 eV. Cette moyenne est calculée sur toutes les configurations traitées à chaque état de charge et donc vérifiant le critère (2.46). Les barres d'erreur correspondent aux écart-types.

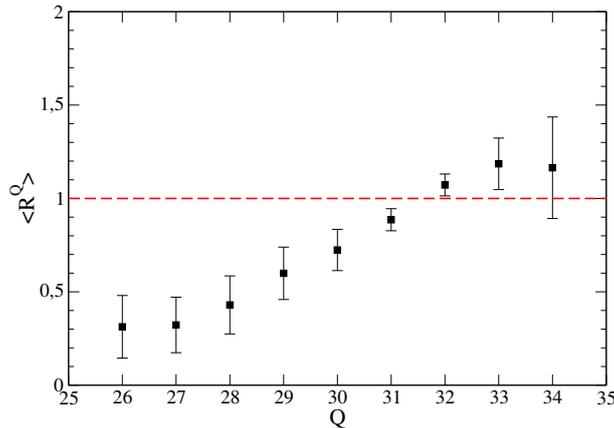


FIGURE 2.6 – Évolution de la moyenne  $\langle R^Q \rangle$  en fonction de l'état de charge  $Q$  pour une température de 400 eV.

Sur cette figure, nous remarquons que  $\langle R^Q \rangle = 1$  est approximativement vérifiée pour les états de charge  $31^+$  et  $32^+$ . Lorsque l'on s'écarte de ces états de charge, le rapport moyen  $\langle R^Q \rangle$  s'éloigne de 1. Or, l'état de charge moyen (calculé avec le code d'atome moyen relativiste) à 400 eV est de  $\bar{Q} = 31,8$ . Ainsi, plus on s'éloigne de cet état de charge moyen et moins les résultats obtenus avec le code d'atome moyen sont fiables.

Cependant, nous constatons que l'écart à l'unité du rapport moyen  $\langle R^Q \rangle$  n'est jamais de plus d'un facteur 4. Aussi, comme le code d'atome moyen est uniquement utilisé pour le critère de sélection, cet écart est acceptable. Il serait par contre plus problématique d'utiliser les probabilités calculées avec le code d'atome moyen pour pondérer les taux radiatifs et tracer un spectre X.

### Utilisation du critère à 99%

Pour vérifier le seuil de notre critère de sélection, fixé à 99%, nous comparons des spectres X calculés en faisant varier ce seuil. Si les spectres ainsi obtenus ne présentent pas de variations notables (apparition de raies intenses par exemple), nous garderons le seuil fixé à 99%. La figure 2.7 présente deux spectres X de Rb pour les états de charge  $27^+$  et  $30^+$  en faisant varier le seuil

de 95% à 99,9%. Ils représentent, pour chaque raie, le taux radiatif pondéré par la probabilité d'occupation de l'état initial. Ces spectres ont été calculés pour toutes les transitions  $E1$  entre les couches  $n = 3,4,5,6$  et  $n = 2$  à  $T_e = 270$  eV. Ils ont été convolués par un profil lorentzien de largeur  $7$  mÅ.

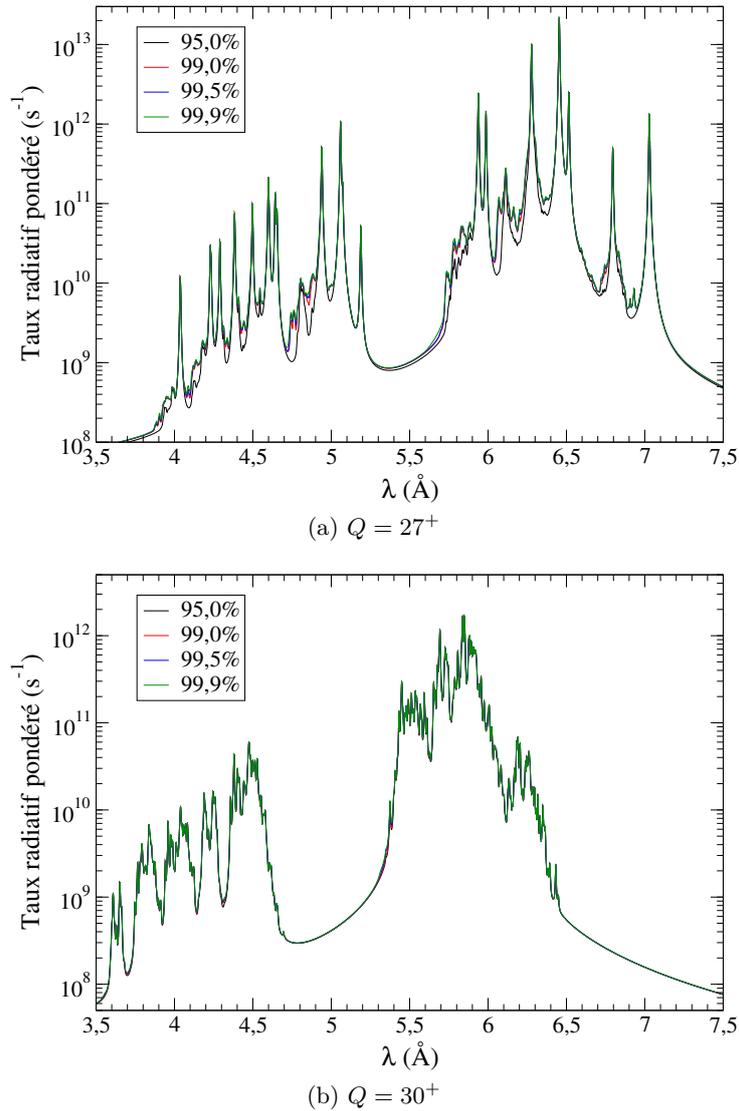


FIGURE 2.7 – Spectres X pour les transitions  $E1$  des couches  $n = 3,4,5,6$  vers  $n = 2$  pour différentes valeurs du seuil de sélection.

Nous pouvons remarquer que pour un seuil supérieur à 99%, il n'y a pas de différence notable entre les spectres calculés. Le seuil de 99% est donc bien adapté.

## Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les caractéristiques d'un plasma créé par laser et les différents processus atomiques pouvant y avoir lieu. La modélisation du milieu complexe qu'est un plasma nécessite l'élaboration de modèles d'équilibres statistiques pour décrire les distributions en énergie des particules libres du plasma et les populations des états liés des ions. Suivant les différents processus pris en compte, ces modèles peuvent être plus ou moins complexes. L'ETL est un cas particulier car les populations des niveaux excités ne dépendent que des données de structure atomique (énergies et moments cinétiques des niveaux). De plus, à l'ETL le nombre de transitions de chaque processus est égal à celui du processus inverse. Ainsi, l'ETL permet une description plus simple des plasmas créés par laser. La méthode de calcul que nous avons développée repose sur l'hypothèse d'un plasma à l'ETL. Nous avons également

utilisé le concept de la température d'ionisation. Nous montrerons au chapitre 3, que ce modèle ETL, bien que moins complexe que des modèles HETL, permet de reproduire les spectres X émis par un plasma de Rb créé avec le laser PHELIX.

Nous avons également décrit les différents codes de physique atomique que nous avons utilisés pour l'analyse des spectres expérimentaux (voir chapitre 3). Nous avons détaillé plus précisément les codes d'atome moyen et MCDF car ils sont au coeur de la méthode de calcul ETL que nous avons développée. En effet, celle-ci repose sur des calculs détaillés réalisés avec MCDF pour un ensemble de configurations électroniques préalablement sélectionnées avec les résultats du code d'atome moyen. La validation de cette méthode, qui sera utilisée pour le calcul des transitions  $M1$  impliquées dans le NEET, sera réalisée par comparaison des spectres  $E1$  calculés avec les spectres expérimentaux.



## Chapitre 3

# Mesure et interprétation d'un spectre X émis par un plasma de Rb formé à une intensité laser de $\sim 6 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$

### Introduction

Afin de valider la méthode de calcul décrite au chapitre 2, nous avons réalisé une expérience dans laquelle des spectres X émis par un plasma de Rb créé par le laser PHELIX ont été mesurés sur une gamme de longueur d'onde comprise entre 3,8 – 7,3 Å. Une nouvelle expérience était nécessaire car les données disponibles dans la littérature, présentées dans le tableau 3.1, étaient insuffisantes. En effet, soit ces données ne couvraient pas un domaine de longueur d'onde suffisant pour notre étude soit les spectres mesurés n'étaient pas publiés, rendant ainsi la comparaison entre spectres théoriques et expérimentaux impossible. Les spectres obtenus par Elliott et al. [68] n'ont pas été émis à partir d'un plasma. Ils peuvent seulement être utilisés pour valider une identification des raies X.

Référence	Hutcheon et al. [69]	Gordon et al. [70]	Zigler et al. [71]	Elliott et al. [68]
Gamme spectrale (Å)	5,17 – 6,52	5,93 – 7,14	6,04 – 6,75	4,93 – 5,06
Spectre émis par un plasma	oui	oui	oui	non
Éclairement laser ( $\text{W/cm}^2$ )	$\sim 5 \times 10^{15}$	$\sim 2 \times 10^{14}$	$\sim 4 \times 10^{13}$	$\emptyset$
Spectre publié	oui	non	non	oui

TABLEAU 3.1 – Présentation des précédentes expériences portant sur les identifications de raies dans des spectres de Rb.

En outre, pour déterminer un taux d'excitation par effet NEET attendu dans une expérience avec le laser PHELIX, le plasma produit doit être caractérisé (température, densité,...). Cette caractérisation peut être obtenue par l'analyse des spectres X émis par le plasma. Aussi, l'enjeu de l'expérience réalisée est double : valider notre méthode de calcul des spectres X et en extraire les propriétés du plasma produit avec PHELIX afin de calculer un taux d'excitation par effet NEET dans ce plasma.

La première partie de ce chapitre est dédiée à la description du dispositif expérimental utilisé. Dans la deuxième partie, l'extraction et l'étalonnage (en longueur d'onde et en intensité) des spectres X seront présentés. Puis, une comparaison des résultats obtenus avec les différents codes et méthodes de calcul présentés au paragraphe 2.5.1 sera effectuée. Dans la dernière partie de chapitre, la majorité des raies présentes dans le spectre sera identifiée.

## 3.1 Dispositif expérimental

### 3.1.1 Le laser PHELIX

Le laser utilisé lors de l'expérience est le laser Nd :glass PHELIX. Lors de notre expérience, sa fréquence était doublée ( $\lambda = 532$  nm) à l'aide d'un cristal de DKDP<sup>1</sup>. En réduisant la longueur d'onde du laser, la densité critique augmente et le faisceau laser pénètre plus loin dans le plasma. Il y a ainsi un meilleur couplage entre le rayonnement laser et le plasma. L'impulsion laser avait une énergie de 150 J à  $2\omega$ . La largeur à mi-hauteur de son profil temporel était de 1,4 ns. Le faisceau laser était focalisé sur la cible à l'aide d'une lentille de 4 m de distance focale. L'angle entre celui-ci et la normale à la cible était de  $10^\circ$  afin d'éviter qu'une partie du faisceau soit réfléchi et retourne vers la cavité laser. La tache focale évaluée à l'aide d'une caméra CCD avait un diamètre de l'ordre de 150  $\mu\text{m}$ . Ainsi, l'éclairement laser sur cible était de  $\sim 6 \times 10^{14}$  W/cm<sup>2</sup>. La cadence des tirs était d'un tir toutes les 90 minutes.

### 3.1.2 Les cibles utilisées

Nous avons utilisé des cibles de fluorure de rubidium (RbF) afin de mesurer le spectre X émis par le plasma de Rb. Le fluor ne possède pas de raie d'émission dans la gamme spectrale que nous avons étudiée. Ces cibles ont été réalisées au GSI et étaient pures à 99,975%. Nous avons également utilisé les cibles suivantes pour l'étalonnage des cristaux : RbCl, Al et Si. Les différentes cibles utilisées mesuraient  $\sim 1$  cm de largeur et de longueur et avaient une épaisseur de l'ordre de 5 mm.

À l'état naturel, le Rb est principalement composé de l'isotope  $^{85}\text{Rb}$  (72,2%). L'expérience de mise en évidence de l'effet NEET aura lieu sur l'isotope  $^{84}\text{Rb}$ , mais la différence d'une unité du nombre de neutrons n'a pas d'influence visible sur les spectres d'émission atomiques. Ceci a notamment été vérifié à l'aide de MCDF.

### 3.1.3 Les spectromètres X

Afin de mesurer le spectre X émis par le plasma de Rb, trois spectromètres ont été utilisés. Ils étaient constitués chacun d'un cristal de Bragg et d'un écran photostimulable, également appelé *Image Plate (IP)* pour enregistrer le spectre dispersé dans l'espace selon la longueur d'onde. Les spectres mesurés sont intégrés en temps. Ces deux éléments sont décrits ci-dessous.

#### Les cristaux de Bragg

Afin d'effectuer la dispersion spectrale, nous avons utilisé des cristaux de Bragg. Un rayonnement X est réfléchi par un tel cristal s'il vérifie la loi de Bragg :

$$2d \sin \theta_B = n\lambda \quad (3.1)$$

où :

- $d$  est la distance inter-réticulaire du cristal, c'est-à-dire la distance entre deux plans cristallins,
- $\theta_B$  est l'angle de Bragg, mesuré entre le plan du cristal et le rayonnement incident,
- $n$  est l'ordre de diffraction,
- $\lambda$  est la longueur d'onde du rayonnement incident.

Un cristal de Bragg peut se présenter sous différentes géométries suivant l'orientation de ses plans cristallins. Plus la géométrie du cristal est complexe et plus son alignement est délicat. Afin de couvrir le large domaine spectral 3,38 – 7,39 Å lors de chaque tir laser, nous avons utilisé trois cristaux de Bragg différents à l'ordre  $n = 1$  de diffraction : un HOPG<sup>2</sup> plan, un PET<sup>3</sup> plan et un PET cylindrique. Ces cristaux ont été disposés à des angles de Bragg moyens différents pour couvrir la gamme spectrale d'intérêt avec des zones de recouvrement entre deux cristaux

---

1. DKDP : *Deuterated Potassium Dihydrogen Phosphate* ( $KD_2PO_4$ )

2. HOPG : *Highly Oriented Pyrolytic Graphite*

3. PET : *Pentaerythritol*

adjacents. L'angle de Bragg moyen désigne l'angle entre le plan du cristal et les rayons incidents sur celui-ci en son milieu. Les caractéristiques de ces cristaux sont présentées dans le tableau 3.2. Dans ce tableau,  $L_d$  désigne la longueur du cristal suivant son axe dispersif et  $L_{nd}$  celle suivant son axe non-dispersif (axe perpendiculaire à l'axe dispersif). Ces quantités sont représentées sur la figure 3.1.

Cristal	HOPG plan	PET plan	PET cylindrique
Dimensions $L_d \times L_{nd}$ (mm)	$50 \times 25$	$55 \times 15$	$30 \times 50$
Rayon de courbure $R_C$ (mm)	$\infty$	$\infty$	100
$2d$ (Å)	6,708	8,742	8,742
Angle de Bragg moyen ( $^\circ$ )	36	38	53

TABLEAU 3.2 – Caractéristiques des cristaux de Bragg utilisés durant l'expérience.

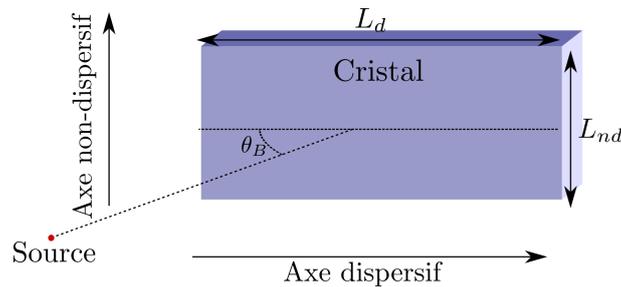


FIGURE 3.1 – Représentation schématique d'un cristal de Bragg plan.

Comme indiqué ci-dessus, nous avons utilisé deux cristaux plans. Le cristal plan est le plus simple des cristaux de Bragg. Les plans cristallins sont tous parallèles à la surface du cristal. Un cristal de Bragg plan se comporte ainsi comme un miroir plan pour des rayons X vérifiant la relation de Bragg (3.1).

Nous avons également utilisé un cristal PET cylindrique. La surface d'un cristal cylindrique forme une portion de cylindre dont l'axe de révolution est confondu avec son axe de dispersion spectrale. Grâce à cette géométrie particulière, les rayons X d'une longueur d'onde donnée réfléchis par le cristal sont focalisés en un point. Le spectre ainsi obtenu sur le détecteur s'étend le long d'une ligne, appelée ligne focale. Cette ligne est confondue avec l'axe de révolution du cylindre. La focalisation du spectre est réalisée suivant son axe non dispersif. Ainsi, suivant son axe dispersif, un cristal cylindrique réfléchit les rayons X de la même manière qu'un cristal plan. La focalisation du spectre sur le détecteur est optimale lorsque sa distance au cristal est égale au rayon de courbure  $R_C$  de ce cristal. De même la distance entre la source X et le cristal doit être égale au rayon de courbure  $R_C$ . Cette disposition particulière entre le cristal, la source et le détecteur est appelée configuration de Von Hamos. Un schéma de cette configuration est présenté sur la figure 3.2.

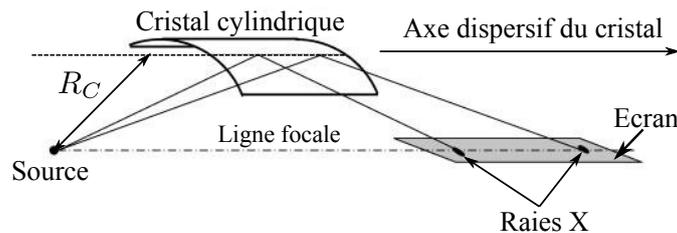


FIGURE 3.2 – Représentation de la configuration de Von Hamos pour un cristal cylindrique. Figure adaptée de [72].

## Les écrans photostimulables

Les écrans photostimulables sont des films plastiques souples d'environ 0,5 mm d'épaisseur et sensibles aux rayonnements ionisants. Nous avons utilisé des écrans de type TR de la marque Fuji. Ces écrans sont constitués de trois couches : une couche sensible déposée sur une couche de support et une couche magnétique, permettant de maintenir l'écran sur un support magnétisé. Les caractéristiques de ces différentes couches sont présentées dans le tableau 3.3.

Couche	Composition	Masse volumique (g/cm <sup>3</sup> )	Épaisseur (μm)
Sensible	BaFBr <sub>0,85</sub> I <sub>0,15</sub> (dopants Eu <sup>2+</sup> )	3,31	115
Support	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> O	1,66	190
Magnétique	ZnMn <sub>2</sub> Fe <sub>5</sub> NO <sub>40</sub> H <sub>15</sub> C <sub>10</sub> :Eu <sup>2+</sup>	2,77	160

TABLEAU 3.3 – Caractéristiques des différentes couches composant un écran photostimulable de type TR.

Quand une particule ionisante dépose une partie de son énergie dans la couche sensible, l'Eu<sup>2+</sup>, introduit comme dopant dans cette couche, est ionisé. L'électron ainsi émis est capturé par un site FBr ou FI pour former un état métastable FBr<sup>-</sup> ou FI<sup>-</sup> respectivement. L'information sur le dépôt d'énergie de la particule incidente est ainsi stockée dans ces états métastables. La désexcitation de ces états métastables peut être spontanée au cours du temps. Ce phénomène est appelée *fading* et doit être évalué afin de déterminer la quantité de signal perdu. La procédure de correction du *fading* est décrite dans les références [73, 74]. Nous reviendrons sur cette correction au paragraphe C.1. Cependant, la désexcitation des états métastables peut aussi être déclenchée par des photons comme lors de la phase de lecture des écrans dans un scanner spécifique. Dans ce cas, elle conduit à l'émission d'un photon de luminescence photostimulé, suite à la recombinaison de l'électron éjecté d'un état métastable avec un ion Eu<sup>3+</sup>. Ce photon de luminescence est appelé PSL (*PhotoStimulated Luminescence*).

Le scanner (un Fuji FLA-7000 dans notre cas) utilisé pour révéler le signal stocké dans l'écran emploie un laser, dont la longueur d'onde est optimisée pour désexciter les états métastables. Les PSL émis lors du balayage de l'écran par le laser sont comptés par un photomultiplicateur. Enfin, le logiciel du scanner reconstitue une image de l'écran dont l'intensité est donnée en PSL pour des pixels carrés mesurant 50 μm de côté.

### 3.1.4 Implantation des spectromètres X dans la chambre

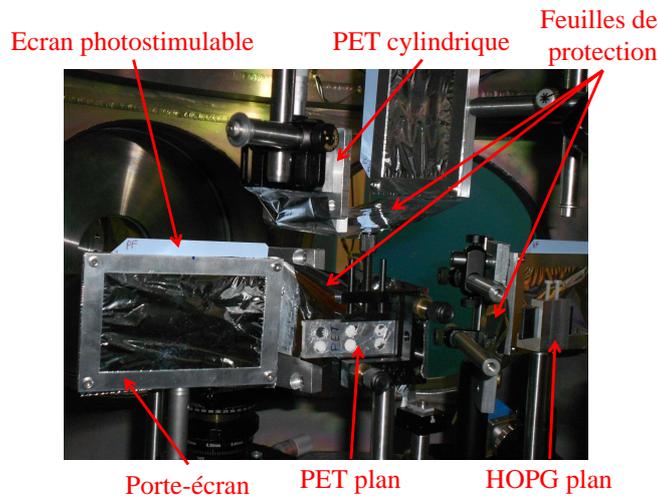
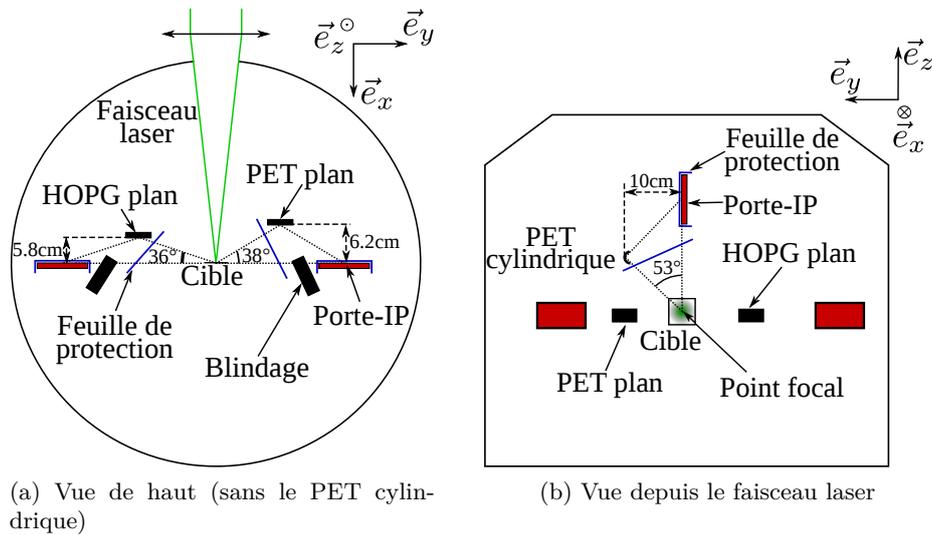
Une photo ainsi qu'un schéma du dispositif expérimental présentant les positions des cristaux et des porte-écrans photostimulables dans la chambre expérimentale sont présentés sur la figure 3.3. Les cristaux étaient protégés des débris émis par la cible lors du tir laser par des feuilles de mylar aluminisé. Des feuilles de même composition étaient placées devant les porte-écrans. Des blindages étaient positionnés afin de protéger au maximum les écrans photostimulables de l'émission directe du plasma (particules arrivant directement sur l'écran).

## 3.2 Spectres expérimentaux

### 3.2.1 Extraction des spectres X

Les images obtenues pour chaque cristal après un tir laser sur une cible de RbF sont présentées sur la figure 3.4. Sur cette figure, nous pouvons noter que les écrans photostimulables étaient de dimensions suffisantes pour enregistrer l'image du cristal en entier.

Les images obtenues avec les cristaux plans (figures 3.4a et 3.4b) et cylindrique (figure 3.4c) sont très différentes. L'effet de focalisation du cristal cylindrique est nettement visible sur la figure 3.4c puisque le spectre ne s'étend que sur une largeur de ~ 2 mm suivant l'axe non dispersif du cristal. En comparaison, les largeurs des spectres suivant ce même axe sont respectivement de ~ 30 mm et ~ 38 mm pour les cristaux plans HOPG et PET respectivement.



(c) Photo des spectromètres X dans la chambre

FIGURE 3.3 – Schéma et photo du dispositif expérimental.

Nous constatons, de plus, une courbure des raies sur les cristaux plans. Celle-ci provient naturellement de la géométrie cristal-source. En effet, tous les rayons X issus de la source (supposée ponctuelle) frappant le cristal avec un même angle de Bragg sont émis sur un cône dont le sommet est la source X. De plus, à cette courbure reflétant la projection du cône sur l'écran peuvent s'ajouter des déformations dues à des imperfections dans le positionnement des cristaux. En effet, les positions des cristaux et porte-écrans ayant été ajustées "à la main" (voir figure 3.3c), il est fort probable que la géométrie réelle des spectromètres s'écarte légèrement de celle planifiée (figures 3.3a et 3.3b).

En ce qui concerne le cristal cylindrique, la forme des raies observée s'explique par un léger écart de positionnement de l'écran par rapport à sa ligne focale.

L'intensité de certaines raies n'est pas constante sur toute leur longueur. Ce phénomène est surtout visible sur le spectre obtenu avec le cristal de HOPG plan. Ceci provient sans doute de défauts d'uniformité de la surface des cristaux. Nous notons aussi la présence de défauts sur les écrans eux-mêmes, visibles sur l'image du cristal PET plan (figure 3.4b). Ces défauts proviennent de rayures sur ces écrans, dues à leurs manipulations répétées. En effet, les écrans, dont nous disposons, étaient de type TR et ne possèdent pas de couche de protection au dessus de la couche sensible.

Le spectre X est obtenu en projetant l'image sur l'axe dispersif du cristal. Pour cela, nous avons défini une bande de projection pour chacun des cristaux. Ces bandes sont représentées sur la figure 3.4. L'origine du spectre (bord gauche de l'écran) et le sens de l'axe de projection

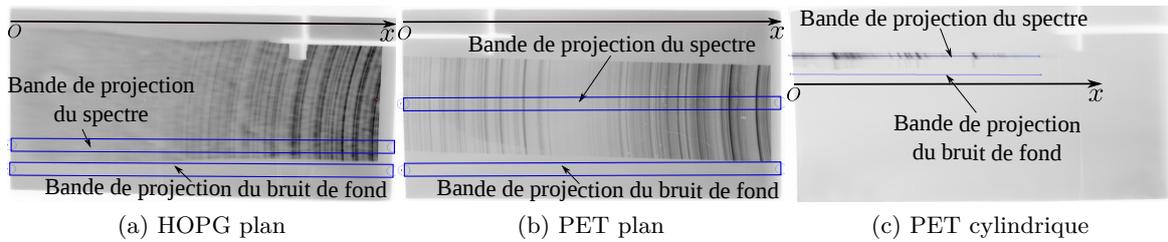


FIGURE 3.4 – Images obtenues après lecture des écrans photostimulables pour un tir laser sur une cible de RbF. Les bandes de projection des spectres X et du bruit de fond sont également précisées.

( $Ox$ ) sont également indiqués sur cette figure. Les dimensions et positions de ces bandes de projections ont été choisies de manière à éviter les zones abimées des cristaux et des écrans et à minimiser l'élargissement des raies après projection. En effet, à cause de leurs courbures, une projection de l'image totale du cristal engendrerait une perte de résolution en longueur d'onde. Par ailleurs, la quantité de signal sur les écrans étant suffisante, la projection de toute l'image n'est pas nécessaire. Les bandes de projection ont une largeur de 4 mm pour les cristaux plans et de 0,2 mm pour le PET cylindrique.

Un bruit de fond est présent sur les parties des écrans où l'image du cristal est absente. Ce bruit de fond est sans doute dû aux particules qui diffusent dans la chambre avant d'atteindre les écrans ou qui traversent les écrans en provenance directe de la source. Afin de soustraire ce bruit de fond pour chaque cristal, une bande de projection de mêmes dimensions que celles utilisées pour la projection du spectre X est définie dans une région de l'image sans spectre. Ces bandes de projection du bruit de fond sont également reportées sur la figure 3.4.

Les spectres ainsi projetés sont représentés sur la figure 3.5 pour les trois cristaux. Ils représentent l'intensité du signal (en PSL) en fonction de la position (en mm) définie à partir du bord de l'écran.

Nous remarquons une importante différence au niveau du nombre de PSL entre les spectres issus des cristaux plans (figures 3.5a et 3.5b) et celui obtenu avec le cristal PET cylindrique. Cette différence s'explique par un nombre de lectures de l'écran dans le scanner différent. En effet, lors de la première lecture des écrans dans le scanner, toutes les images obtenues présentaient des zones saturées. Cette saturation provient uniquement du photomultiplicateur présent dans le scanner et non d'une saturation du nombre d'états métastables dans la couche sensible des écrans. Afin d'obtenir une image non saturée, les écrans ont été lus plusieurs fois de suite. Le cristal cylindrique étant focalisant, il a fallu lire l'écran associé un plus grand nombre de fois : six fois au lieu de trois pour les cristaux plans (HOPG et PET). Nous détaillerons dans l'annexe C la méthode utilisée pour corriger les spectres en intensité en fonction du nombre de lectures des écrans.

Ces spectres corrigés du bruit de fond doivent être étalonnés pour établir la relation entre la position d'une raie sur l'écran et sa longueur d'onde.

### 3.2.2 Étalonnage spectral

#### Lois de dispersion théoriques

Les cristaux plans et cylindriques se comportent de la même manière suivant leurs axes dispersifs. Nous pouvons exprimer leurs relations de dispersion spectrale donnant la longueur d'onde d'une raie X en fonction de sa position sur l'écran photostimulable, à partir des mêmes considérations géométriques. Les différentes quantités nécessaires à l'expression de la relation de dispersion sont présentées sur la figure 3.6 qui représente la configuration dans laquelle les différents cristaux ont été utilisés. Dans le cas particulier du PET cylindrique, nous avons la distance écran cristal  $h$  qui est égale au rayon de courbure  $R_C$ . D'après la figure 3.6, l'angle de Bragg associé au bord gauche de l'écran est supérieur à celui associé à son bord droit. D'après la relation (3.1), les longueurs d'onde sont donc croissantes lorsque l'écran est parcouru de droite

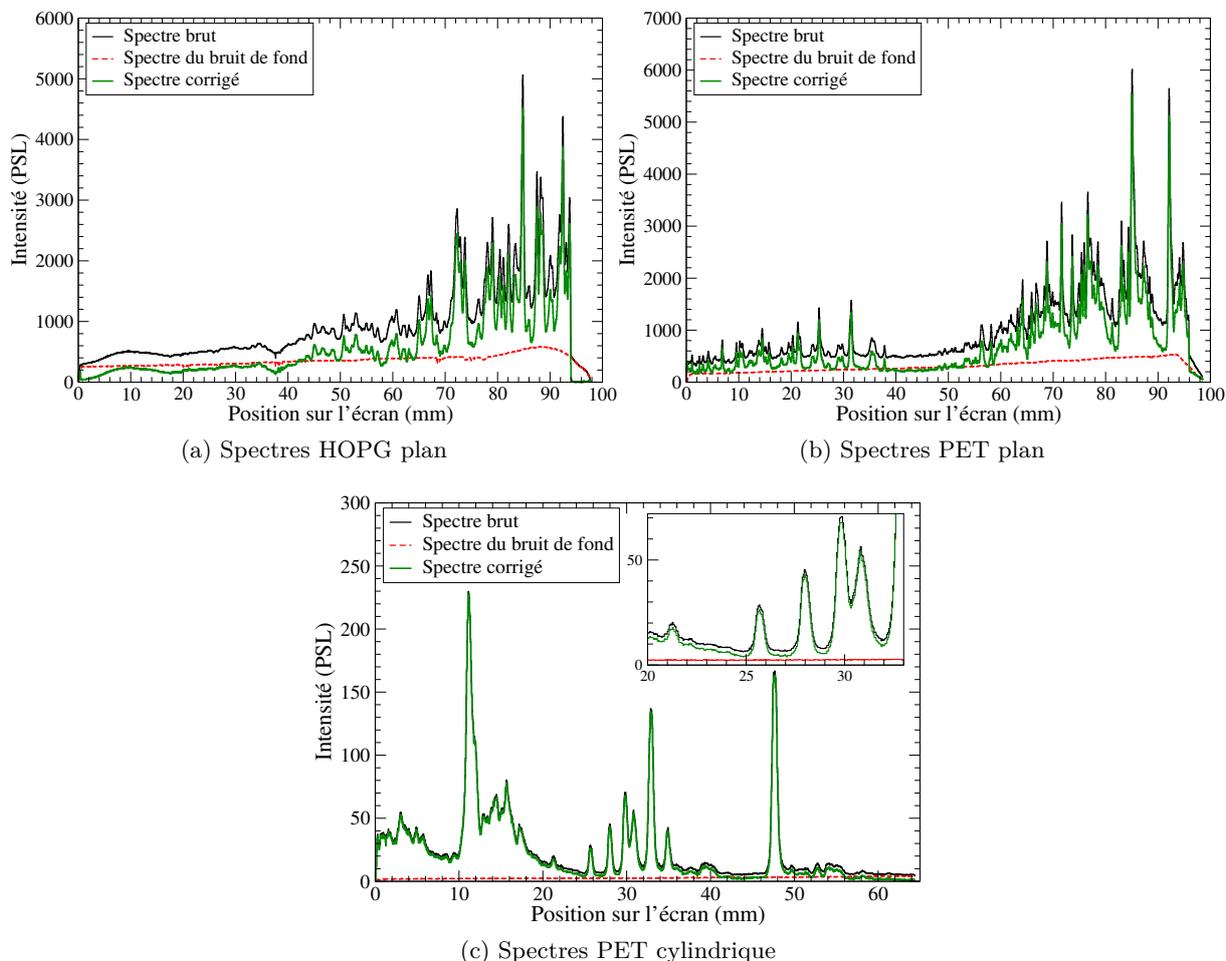


FIGURE 3.5 – Spectres bruts et de bruit de fond obtenus après projection des bandes définies sur la figure 3.4. Le "spectre corrigé" désigne le spectre brut auquel le spectre de bruit de fond a été soustrait.

à gauche. Ainsi, pour obtenir un spectre orienté dans le sens des longueurs d'onde croissantes, l'origine  $O$  des positions sur l'écran est donc choisie à son bord droit (voir figure 3.4).

La position  $x$  sur l'écran photostimulable est reliée à l'angle de Bragg  $\theta_B$  par la relation :

$$x = L - \frac{2h}{\tan \theta_B} \quad (3.2)$$

En utilisant l'équation (3.1) avec  $n = 1$ , dans l'équation (3.2), il vient :

$$\lambda = \frac{2d}{\sqrt{1 + \left(\frac{L-x}{2h}\right)^2}} \quad (3.3)$$

Les relations de dispersion calculées à partir de l'équation (3.3) pour les trois cristaux utilisés sont tracées sur la figure 3.7. Il est possible d'ajuster, dans la gamme de positions d'intérêt, ces relations de dispersion par des polynômes de degré deux. Ceci justifie l'emploi de tels polynômes pour l'étalonnage des différents cristaux. D'après la figure 3.7, la gamme spectrale couverte par les trois cristaux est comprise entre 3 et 7,5 Å. De plus, nous disposons de gammes spectrales communes entre deux cristaux adjacents. Ces zones de recouvrement nous seront, par la suite, utiles pour l'étalonnage en longueur d'onde et la calibration en intensité des trois cristaux.

### Procédure d'étalonnage des spectres X

La procédure d'étalonnage comprend plusieurs étapes. Pour chacun des cristaux, la relation position - longueur d'onde est établie sur des spectres mesurés sur des cibles étalons. Ces relations

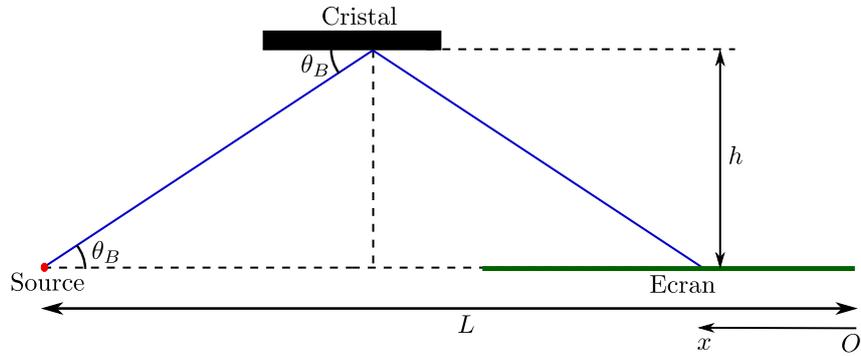


FIGURE 3.6 – Configuration dans laquelle les cristaux ont été utilisés

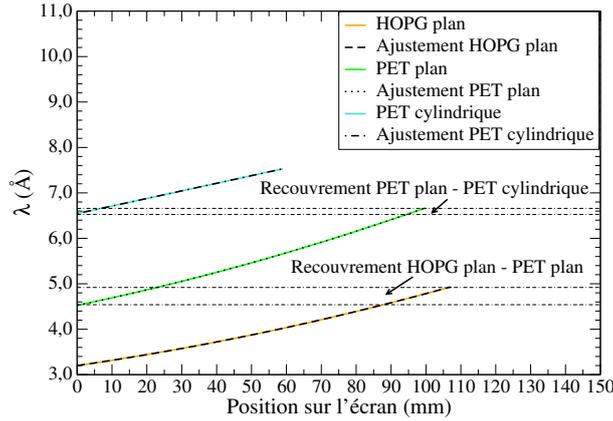


FIGURE 3.7 – Courbes de dispersion spectrale calculées avec l'équation (3.3) et ajustements polynomiaux (en trait pointillés) pour les trois cristaux utilisés.

d'étalonnage sont ensuite utilisées sur les spectres de Rb après correction des décalages éventuels des écrans entre les tirs laser. Les spectres des trois cristaux sont rassemblés en un seul spectre en les ajustant dans leurs zones de recouvrement. Chacune de ces étapes est caractérisée par des coefficients d'étalonnage et de recalage. Dans la pratique, ces opérations sont répétées un million de fois pour obtenir les valeurs moyennes des paramètres d'ajustement et les incertitudes associées.

Les lois de dispersion calculées à l'aide de l'équation (3.3) sont basées sur des positionnements parfaits des cristaux (figure 3.7). Aussi pour tenir compte de leurs positionnements réels, leurs étalonnages sont réalisés à l'aide des cibles étalons présentées dans le tableau 3.4. Le nombre de raies utilisées y est aussi mentionné. Les longueurs d'onde des raies étalons sont extraites de la base de données de R. L. Kelly<sup>4</sup>. Elles sont issues de calculs dont les incertitudes ne sont pas connues. Nous n'avons donc pas pu les prendre en compte.

Cristal	HOPG plan	PET plan	PET cylindrique
Cible étalon	RbCl (raies du Cl)	Si	Al
Nombre de raies utilisées ( $n_{etal}$ )	6	8	8
Raies utilisées	He-like, Li-like	H-like, He-like	He-like, Li-like

TABLEAU 3.4 – Caractéristiques des raies utilisées pour l'étalonnage des cristaux.

Afin d'étalonner les spectres, les centroïdes des raies X des sources étalons ainsi que les incertitudes associées ont été déterminés. Pour cela, les raies X sont ajustées par des profils de Voigt pour tenir compte des élargissements des raies dans le plasma. Ce même profil est utilisé pour déterminer les centroïdes des raies de Rb d'intérêt.

Cependant, il est impossible d'appliquer directement les lois de dispersion déterminées avec les sources étalons sur les spectres issus des tirs sur cible de Rb car un décalage en position

4. Voir <http://www.cfa.harvard.edu/ampcgi/kelly.pl>

est observable entre les spectres obtenus lors de tirs différents. Celui-ci est sans doute dû aux positionnements des écrans photostimulables dans leurs porte-écrans qui n'étaient pas reproductibles. Il s'ajoute à cette erreur de positionnement une incertitude sur la détermination de l'origine  $O$  de l'axe  $Ox$  de projection. En effet, le bord de l'écran n'est défini qu'avec une précision de quelques pixels. Le décalage total résultant est illustré sur la figure 3.8 où des agrandissements des spectres RbF obtenus sur le cristal PET plan et issus de trois tirs laser différents sont présentés.

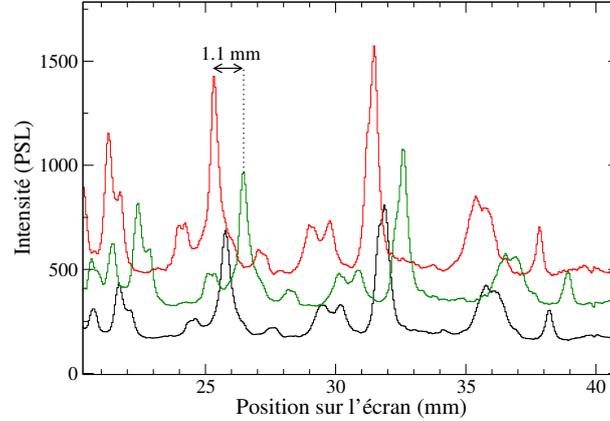


FIGURE 3.8 – Illustration du décalage en position sur le cristal PET plan pour trois tirs laser différents.

Sur cette figure, nous constatons que le décalage maximum entre les spectres issus des trois tirs différents est millimétrique.

Comme indiqué ci-dessus, une procédure itérative a été mise en place afin de tenir compte des incertitudes sur les centroïdes des raies et d'évaluer la propagation de celles-ci au travers de toute la procédure d'étalonnage et d'alignement des spectres. Les différentes étapes de cette procédure sont décrites dans l'annexe B.

### 3.2.3 Étalonnage en intensité

L'objectif de cette partie est de déterminer le nombre de photons émis par la source à la longueur d'onde  $\lambda$ , noté  $N_X(\lambda)$  et exprimé en photons. $\text{\AA}^{-1}.\text{sr}^{-1}$ . Celui-ci est relié au nombre de PSL mesurés à la longueur d'onde  $\lambda$ ,  $N_{IP}(\lambda)$  (exprimé en PSL. $\text{\AA}^{-1}$ ), dans le spectre étalonné obtenu après soustraction d'un spectre de bruit de fond par la relation :

$$N_X(\lambda) = \frac{C_{fading} C_{lecture} C_{proj}}{\Omega_{eff}(\lambda) T(\lambda) R_{IP}(\lambda)} N_{IP}(\lambda) \quad (3.4)$$

où :

- $C_{fading}$  est le coefficient de correction du *fading*, c'est-à-dire de la décroissance spontanée du signal stocké dans la couche sensible de l'écran au cours du temps.
- $C_{lecture}$  permet de corriger du nombre de lectures des écrans nécessaires pour compenser la saturation présente sur certaines zones de ces écrans lors de la première lecture.
- $C_{proj}$  permet de compenser le fait que les bandes de projections utilisées (voir figure 3.4) ne prennent pas en compte l'ensemble du signal présent sur l'écran photostimulable.
- $\Omega_{eff}(\lambda)$  est l'angle solide effectif du cristal. Il correspond à l'angle solide géométrique du cristal pondéré par sa réflectivité. Il s'exprime par :  $\Omega_{eff}(\lambda) = \phi_{coll}(\lambda) R_{int}(\lambda)$  où  $\phi_{coll}(\lambda)$  est l'angle de collection du cristal à la longueur d'onde  $\lambda$  et  $R_{int}(\lambda)$  sa réflectivité intégrée. Ces quantités sont définies dans l'annexe C.
- $T(\lambda)$  est la transmission totale des rayons X au travers des différentes feuilles présentes devant le cristal et devant le porte-écran.
- $R_{IP}(\lambda)$  est la réponse des écrans TR à la longueur d'onde  $\lambda$ . Elle est exprimée en PSL/photon et exprime le nombre de PSL induits par le passage d'un photon de longueur d'onde  $\lambda$  au travers de l'écran photostimulable.

Les méthodes utilisées pour évaluer ces différents paramètres sont décrites dans l'annexe C. Les spectres X étalonnés en absolu par la relation (3.4) sont tracés sur la figure 3.9 pour les trois cristaux. Ils représentent l'intensité, exprimée en photons. $\text{\AA}^{-1}.\text{sr}^{-1}$ , en fonction de la longueur d'onde du rayonnement.

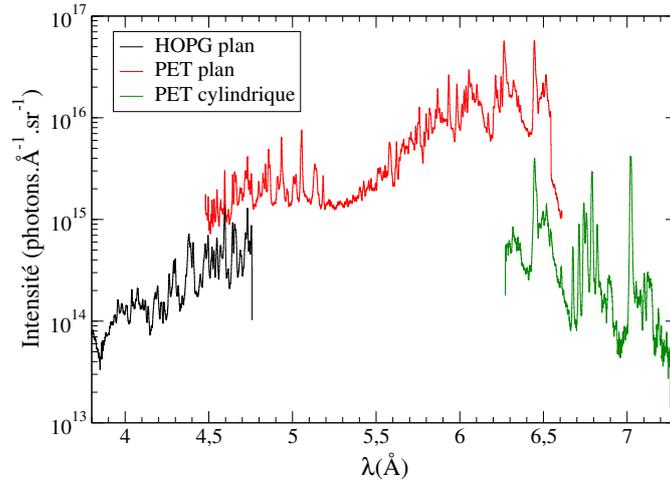


FIGURE 3.9 – Spectres X étalonnés en longueur d'onde et en intensité issus des trois cristaux.

Un écart en intensité entre les trois cristaux est visible. En effet, en utilisant les zones de recouvrement entre cristaux, nous pouvons remarquer que le spectre obtenu avec le HOPG plan est  $\sim 4$  fois moins intense que le spectre issu du cristal PET plan. Ce dernier est lui-même  $\sim 15$  fois plus intense que le spectre mesuré avec le cristal PET cylindrique. Ces différences importantes ne peuvent être expliquées par l'imprécision sur la fonction de réponse des écrans puisqu'elle a la même valeur en chaque point situé dans les zones de recouvrement des cristaux. Bien que l'angle  $\phi_{coll}$  ait été déterminé de manière géométrique, il nous semble improbable que les différences observées sur la figure 3.9 puissent être expliquées par la différence entre le positionnement réel des cristaux et celui utilisé pour le calcul de  $\phi_{coll}$ . En effet, une erreur d'un facteur  $\sim 4$  sur  $\phi_{coll} \approx L_{nd}/D(\lambda)$  impliquerait une erreur du même ordre de grandeur sur les mesures des positionnements, ce qui est peu probable. Les autres facteurs de correction ont pu être vérifiés et n'impliqueraient pas de tels différences entre cristaux. Ainsi, l'interprétation de ces différences réside sans doute dans les réflectivités intégrées des cristaux que nous n'avons pas mesurées dans ce travail. De plus, celles-ci peuvent varier au cours du temps et de l'utilisation des cristaux. Par exemple, la réflectivité d'un cristal non protégé et soumis au débris éjectés par la cible se détériore plus rapidement que celle d'un cristal parfaitement protégé.

Afin de faciliter la comparaison entre les spectres théoriques et expérimentaux, les spectres obtenus avec les trois cristaux sont recalés en intensité afin de ne former qu'un seul spectre. Pour cela, nous utilisons les zones de recouvrement entre cristaux pour déterminer le coefficient multiplicatif à appliquer aux différents spectres. Chaque coefficient est calculé de manière à minimiser l'écart en intensité entre les spectres dans la gamme spectrale de recouvrement. La jonction entre deux spectres contigus est réalisée à la position où l'écart entre les intensités des deux spectres est minimal. Le spectre obtenu avec le cristal HOPG plan est choisi arbitrairement comme référence en intensité. Ainsi, le spectre obtenu avec le cristal PET plan est aligné en intensité sur celui mesuré avec le cristal HOPG. Puis, le spectre mesuré avec le cristal PET cylindrique est aligné sur le spectre issu de l'alignement des cristaux HOPG et PET plan. Cependant, comme l'intensité absolue de ces spectres après ajustement n'a plus de signification, nous utiliserons par la suite des unités arbitraires.

Les spectres obtenus avec les différents cristaux sont tracés sur la figure 3.10. Ils représentent l'intensité mesurée, en unités arbitraires (u. a.), en fonction de la longueur d'onde. Les points de jonction des spectres sont aussi indiqués. Ils sont similaires mais ne se superposent pas exactement en intensité dans les zones de recouvrement. Ceci provient, sans doute, d'inhomogénéités dans la structure des cristaux. Ainsi, suivant la zone de l'écran utilisée pour réaliser la bande de projection, nous n'obtenons pas exactement la même intensité pour une même raie. A

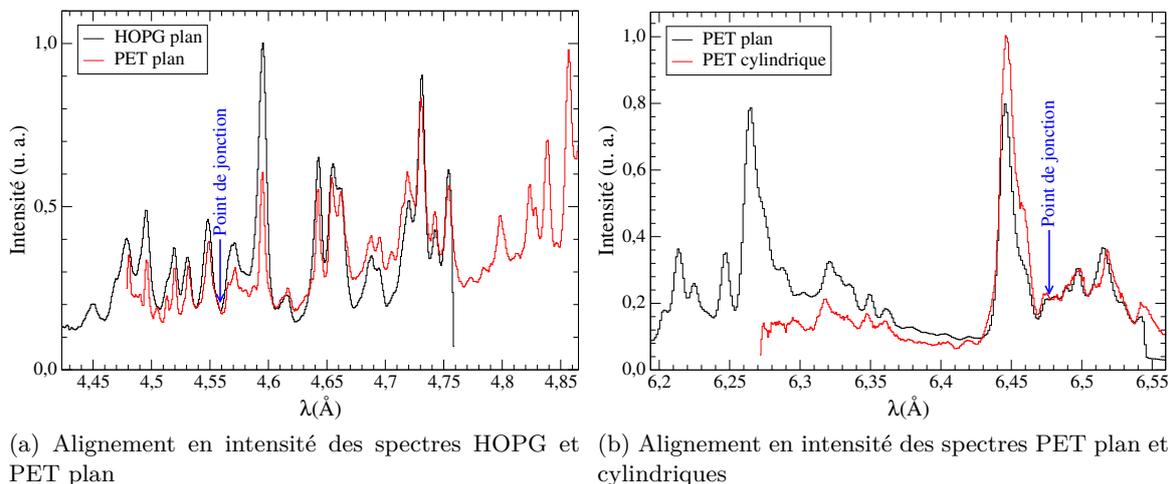


FIGURE 3.10 – Ajustement en intensité des spectres obtenus avec les trois cristaux. Les points des jonctions entre les différents spectres sont indiqués.

ceci s'ajoute l'incertitude sur la réflectivité intégrée que nous avons utilisée. Cependant, comme nous ne comparerons pas quantitativement les intensités relatives des raies, ces problèmes de raccordement de spectres ne sont pas rédhibitoires pour notre analyse.

A l'issue des différentes étapes de correction et d'alignement des spectres mesurés avec les trois cristaux, nous obtenons un spectre unique, représentant l'intensité (en unités arbitraires) en fonction de la longueur d'onde du rayonnement. Ce spectre est tracé sur la figure 3.11 dans la gamme spectrale 3,8 – 7,3 Å. Sur cette figure, les gammes spectrales de chaque cristal utilisé pour réaliser ce spectre sont indiquées. Elles ne seront plus précisées par la suite.

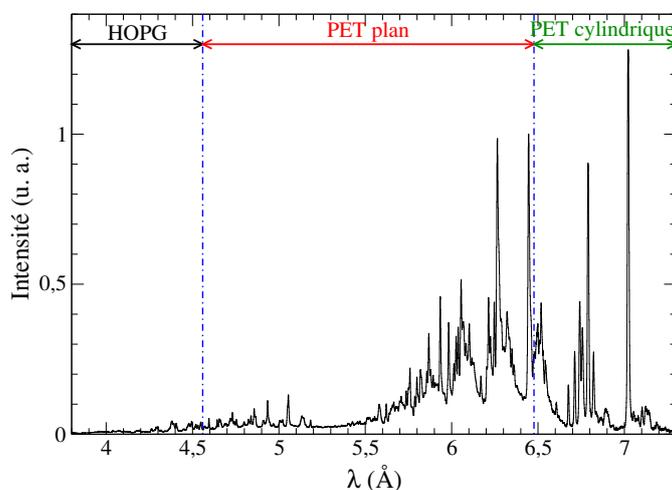


FIGURE 3.11 – Spectre X créé à partir de l'alignement en intensité de ceux mesurés avec les trois cristaux.

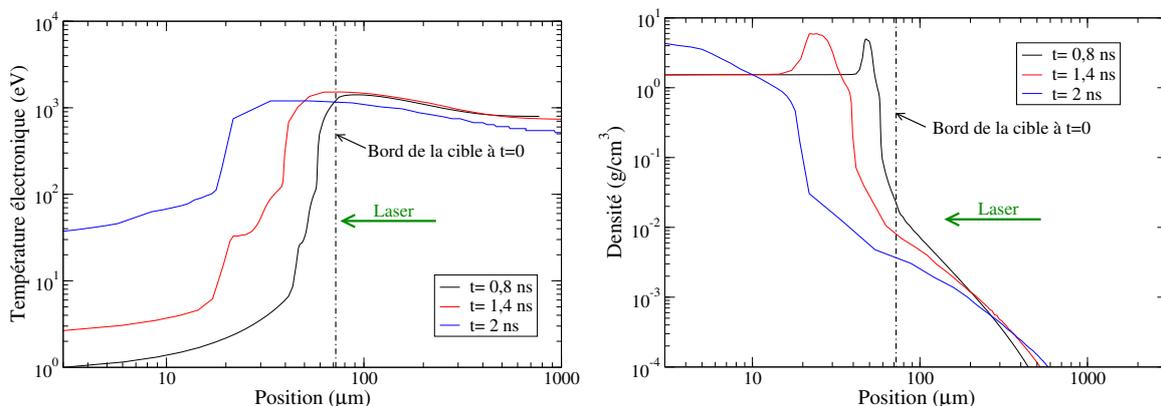
### 3.3 Caractérisation du plasma produit durant l'expérience

Afin de construire les spectres X théoriques, il est nécessaire de déterminer la densité et la température du plasma produit avec PHELIX. Elles sont, en effet, nécessaires dans l'étape de sélection des configurations les plus probables avec le code d'atome moyen relativiste et pour déterminer les populations des niveaux excités. Sous l'hypothèse d'un plasma à l'ETL, ces dernières se calculent avec une distribution de Boltzmann (voir chapitre précédent).

### 3.3.1 Température et densité électronique

Afin de déterminer les températures et densités permettant d'évaluer la distribution d'états de charge nécessaire pour pondérer les spectres MCDF calculés, des simulations hydrodynamiques ont été réalisées avec le code CHIVAS [75]. Ce code utilise les paramètres de l'impulsion laser (forme temporelle, longueur d'onde) et l'éclairement laser sur cible. Il permet de calculer les profils de température électronique et de densité à un instant  $t$  donné après le début de l'impulsion laser. Ce code est de type  $1D_{1/2}$ , ce qui signifie qu'il calcule les profils de température et de densité suivant une dimension (suivant l'axe  $Ox$ ) mais qu'il tient compte des transferts de chaleur suivant une dimension perpendiculaire à la première (axe  $Oy$ ).

Les profils de température et de densité obtenus aux instants 0,8, 1,4 et 2 ns après le début de l'impulsion laser sont présentés sur la figure 3.12. Ces simulations ont été réalisées pour une cible de Rb pur et pour un éclairement laser de  $6 \times 10^{14}$  W/cm<sup>2</sup>. Les paramètres de l'impulsion laser (150 J, durée de 1,4 ns et longueur d'onde de 532 nm) ont également été utilisés dans ces simulations.



(a) Profils de température électronique à différents instants  $t$  après le début de l'impulsion laser (b) Profils de densité à différents instants  $t$  après le début de l'impulsion laser

FIGURE 3.12 – Résultats des simulations hydrodynamiques réalisées avec le code CHIVAS. Le bord de la cible est initialement situé à une distance de 72 μm et le faisceau laser se propage vers la gauche.

La zone la plus émissive du plasma est située à une densité proche de la densité critique ( $\rho_c = 2 \times 10^{-2}$  g/cm<sup>3</sup>). D'après ces simulations, la température électronique au voisinage de cette densité critique est approximativement constante au cours du temps et vaut, en moyenne :  $T_e \sim 1,4$  keV.

### 3.3.2 Distribution ionique

Le spectre X émis par un plasma contient les contributions de toutes les raies émises par tous les ions dans leurs différents états de charge. Pour construire les spectres théoriques, il est donc nécessaire de déterminer la distribution de charge des ions dans le plasma. Celle-ci dépend des caractéristiques du plasma et notamment des températures et densités électroniques, déterminées ci-dessus. La connaissance précise de la distribution de charge n'est pas essentielle pour notre étude. En effet, la pondération des spectres théoriques par une distribution d'états de charge ne sert que de guide visuel pour l'identification du spectre du plasma de Rb.

La distribution des états de charge HETL calculée avec le code AVERROÈS est présentée sur la figure 3.13. Ces calculs ont été réalisés par Franck Gilleron et Jean-Christophe Pain du CEA/DAM/DIF. Ils sont effectués à une température électronique HETL de 1,4 keV, une température radiative de 100 eV et une densité de  $10^{-2}$  g/cm<sup>3</sup>, soit une densité proche de la densité critique. La densité n'intervenant que dans la procédure de sélection des configurations à traiter dans les calculs MCDF, sa détermination précise n'est pas requise pour notre méthode. Notons également que la distribution de charge est peu sensible au choix de la température radiative

(entre 0 et 250 eV). Ceci a été confirmé en réalisant d'autres calculs avec des températures radiatives différentes [76].

Cette distribution de charge est centrée autour de l'état de charge  $Q = 27^+$ . Notre méthode de calcul des spectres X repose sur l'hypothèse d'un plasma à l'ETL. Or la température électronique déduite des simulations hydrodynamiques ( $T_e = 1,4$  keV) est une température HETL. Celle-ci ne peut pas être utilisée dans notre méthode de calcul ETL car elle conduirait à des états de charge trop élevés. Nous devons donc déterminer une température ETL d'ionisation à utiliser dans notre méthode de calcul et qui reproduise la distribution de charge HETL. Afin de déterminer cette température effective, d'autres calculs ont été réalisés avec le code AVERROËS mais dans une approche ETL. Les distributions de charge ainsi calculées sont également présentées sur la figure 3.13. Une température ETL de  $T = 270$  eV permet d'assez bien reproduire la distribution des états de charge obtenue avec une température HETL de 1,4 keV. Notons que les états de charge moyens obtenus avec les calculs AVERROËS HETL à 1,4 keV et ETL à 270 eV sont identiques et valent :  $\bar{Q} = 27,4$ .

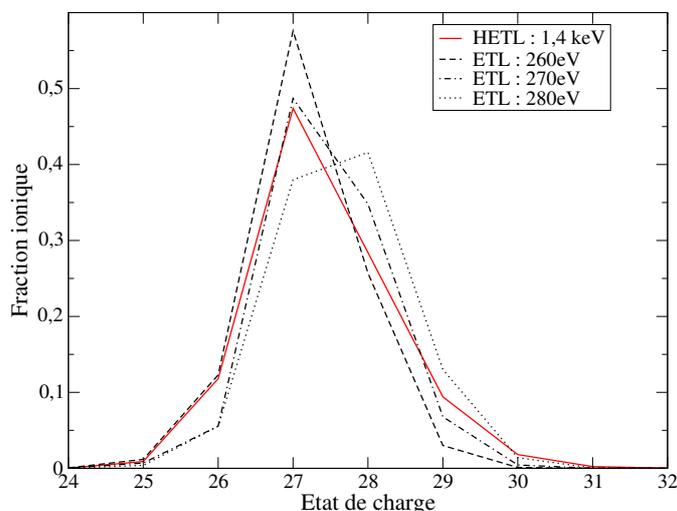


FIGURE 3.13 – Comparaison des distributions de charge obtenues avec le code AVERROËS utilisé dans des approches HETL et ETL pour un plasma de Rb à différentes températures. [77]

Cependant, la question de la validité de ces calculs hydrodynamiques et de la température choisie pour nos calculs de spectres X se pose. A titre de comparaison, d'autres calculs ont été effectués à des températures électroniques HETL de 1 et 2 keV et sont présentés sur la figure 3.14.

D'après cette figure, les distributions de charge n'évoluent pas de manière drastique entre 1 et 2 keV au sens où l'état de charge dominant est toujours compris entre  $27^+$  et  $28^+$ . En effet, bien que la distribution obtenue à  $T_e = 2$  keV soit plus large que celles calculées à 1 et 1,4 keV, elle reste centrée sur l'état de charge  $28^+$ .

Dans la suite de ce chapitre, les paramètres utilisés dans les différents codes ou méthodes de calcul sont résumés dans le tableau 3.5.

Méthode / Code	MCDF (avec ou sans CI)	AVERROËS
Densité ( $\text{g}/\text{cm}^3$ )	$10^{-2}$	$10^{-2}$
Température électronique (eV)	270	1400

TABLEAU 3.5 – Valeurs des températures électroniques et densités utilisées dans les différents codes ou méthodes de calcul.

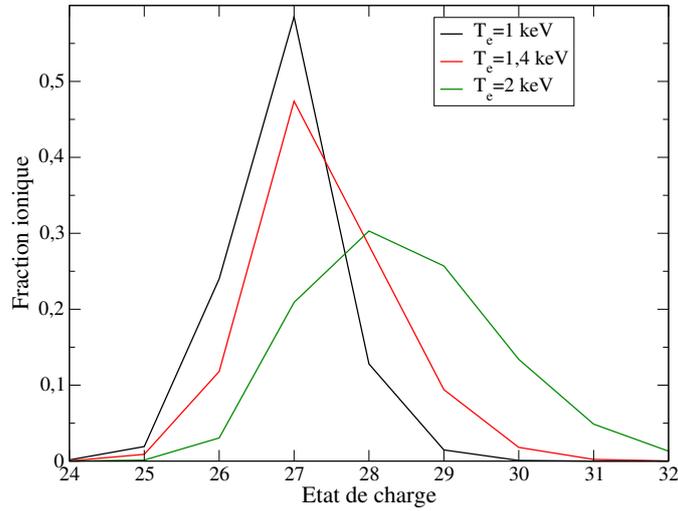


FIGURE 3.14 – Comparaison des distributions de charge HETL obtenues avec le code AVER-ROÈS pour des températures électroniques de 1, 1,4 et 2 keV. La densité du plasma est de  $10^{-2}$  g/cm<sup>3</sup> et la température radiative de  $T_r = 100$  eV.

### 3.4 Identifications des raies et comparaisons avec les travaux antérieurs

#### 3.4.1 Travaux antérieurs

En 2006, une compilation des longueurs d’onde, probabilités de transition et énergies des niveaux pour des spectres de Rb allant de l’atome neutre au Rb<sup>36+</sup> a été publiée par Sansonetti [78]. Les identifications qu’il a compilées sont principalement issues d’analyses de spectres X obtenus lors d’expériences d’interaction d’un faisceau laser sur une cible de Rb solide. Le tableau 3.6 résume les conditions et principaux résultats de ces études.

Référence	Ce travail [77]	Hutcheon et al. [69]	Gordon et al. [70]	Zigler et al. [71]	Elliott et al. [68]
Expérience		Plasma créé par laser			EBIT
Gamme spectrale (Å)	3,38 – 7,39	5,17 – 6,52	5,93 – 7,14	6,04 – 6,75	4,93 – 5,06
Éclairement laser (W/cm <sup>2</sup> )	$\sim 6 \times 10^{14}$	$\sim 5 \times 10^{15}$	$\sim 2 \times 10^{14}$	$\sim 4 \times 10^{13}$	∅
Identifications	Rb <sup>26+</sup> $\tilde{a}$ Rb <sup>29+</sup>	Rb <sup>27+</sup> , Rb <sup>28+</sup>	Rb <sup>26+</sup> , Rb <sup>27+</sup>	Rb <sup>28+</sup>	Rb <sup>27+</sup>

TABLEAU 3.6 – Résumé des travaux antérieurs d’identification des raies dans la gamme spectrale d’intérêt en comparaison de nos travaux. Les états de charge reportés dans le tableau sont ceux pour lesquels des identifications sont publiées et non ceux atteints expérimentalement.

Notons la particularité des travaux d’Elliott et al. qui ont utilisé un piège à ions créé par un faisceau d’électrons (EBIT<sup>5</sup>). Dans ce dispositif, un faisceau d’électrons monoénergétique excite et ionise les ions par collisions. Ces ions sont piégés radialement par les charges d’espace du faisceau d’électrons et axialement par le champ électrique créé par des électrodes.

Seuls Hutcheon et al. et Elliott et al. ont publié les spectres de Rb qu’ils ont mesurés. Ainsi la comparaison de notre spectre expérimental avec ceux des autres auteurs présentés dans le tableau 3.6 sera délicate car uniquement basée sur les tableaux d’identification publiés.

#### 3.4.2 Comparaison entre spectres expérimentaux et calculés

Dans un premier temps, nous allons comparer le spectre expérimental aux spectres théoriques obtenus avec notre méthode de calcul utilisant le code MCDF sans interaction de confi-

5. EBIT : *Electron Beam Ion Trap*

guration. En effet, cette méthode étant simple et relativement peu couteuse en temps de calcul, nous voulons tester sa capacité à reproduire les grandes structures du spectre expérimental. Si cette méthode s'avère efficace, nous l'utiliserons pour le calcul de taux d'excitation NEET dans un plasma de  $^{84}\text{Rb}$ . Cependant, une comparaison des intensités de ces spectres ne serait pas pertinente. Seuls des modèles collisionnel-radiatifs sont capables de reproduire précisément les spectres expérimentaux issus de plasmas HETL [63].

Dans un second temps, nous évaluerons l'apport de la prise en compte de l'interaction de configuration dans les calculs MCDF en comparant les spectres calculés par cette méthode avec le spectre expérimental.

Enfin, nous comparerons les spectres MCDF calculés sans interaction de configuration avec ceux obtenus avec des codes ayant une description du plasma plus précise : le code ETL SCORCG et le code HETL AVERROËS. Ces calculs ont été effectués par J-C. Pain et F. Gilleron du CEA/DAM/DIF [47].

### Spectres calculés avec MCDF sans interaction de configuration

Afin de faciliter la comparaison entre spectres théoriques et expérimentaux, les spectres théoriques sont convolués par un profil lorentzien de largeur  $\Delta\lambda = 7 \text{ m}\text{\AA}$ . Cette valeur, obtenue en ajustant les raies des spectres expérimentaux, a été utilisée dans les profils des raies pour tenir compte de la résolution expérimentale. Un profil lorentzien a été utilisé car il est simple et rapide à calculer (en comparaison d'un profil de Voigt). De plus, pour la simple comparaison globale que nous faisons, le profil lorentzien est suffisant.

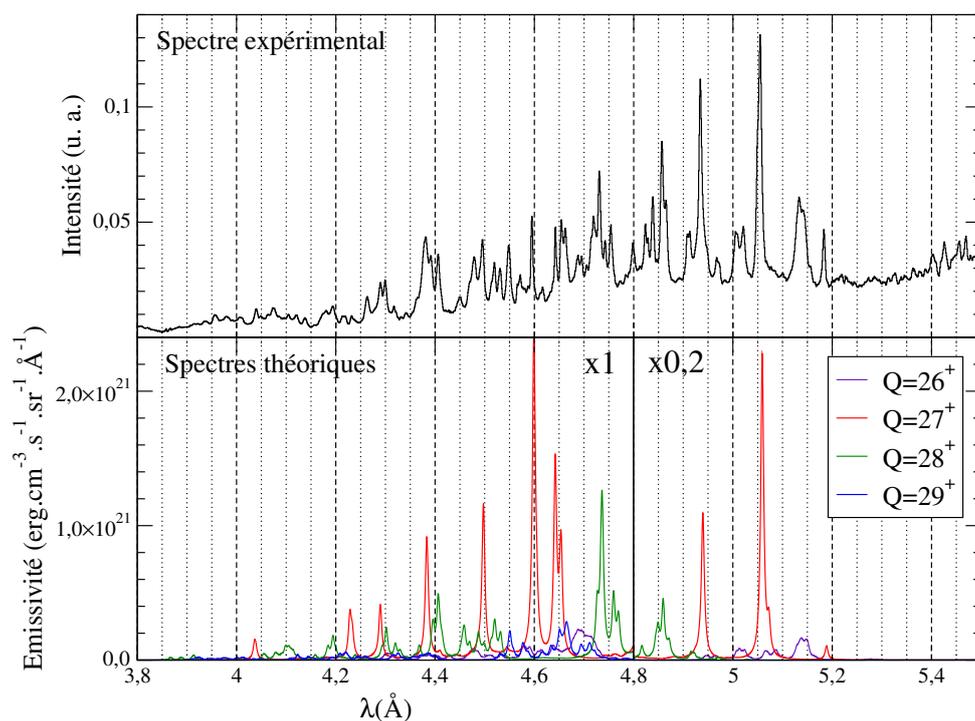
Ces spectres théoriques sont pondérés par la distribution d'état de charge HETL présentée sur la figure 3.13. Ces spectres ne sont pas additionnés afin de mieux visualiser la contribution des raies issues de chaque état de charge au spectre expérimental.

Les spectres théoriques pour des états de charge compris entre  $26^+$  et  $29^+$  ainsi que le spectre expérimental sont présentés sur la figure 3.15. Pour une meilleure lisibilité, cette comparaison est séparée en deux gammes spectrales (l'une entre 3,8 et 5,5 Å sur la figure 3.15a et l'autre entre 5,5 et 7,3 Å sur la figure 3.15b) et avec différentes échelles en intensité. Les mêmes spectres, en échelle semi-logarithmique, sont présentés sur la figure 3.16.

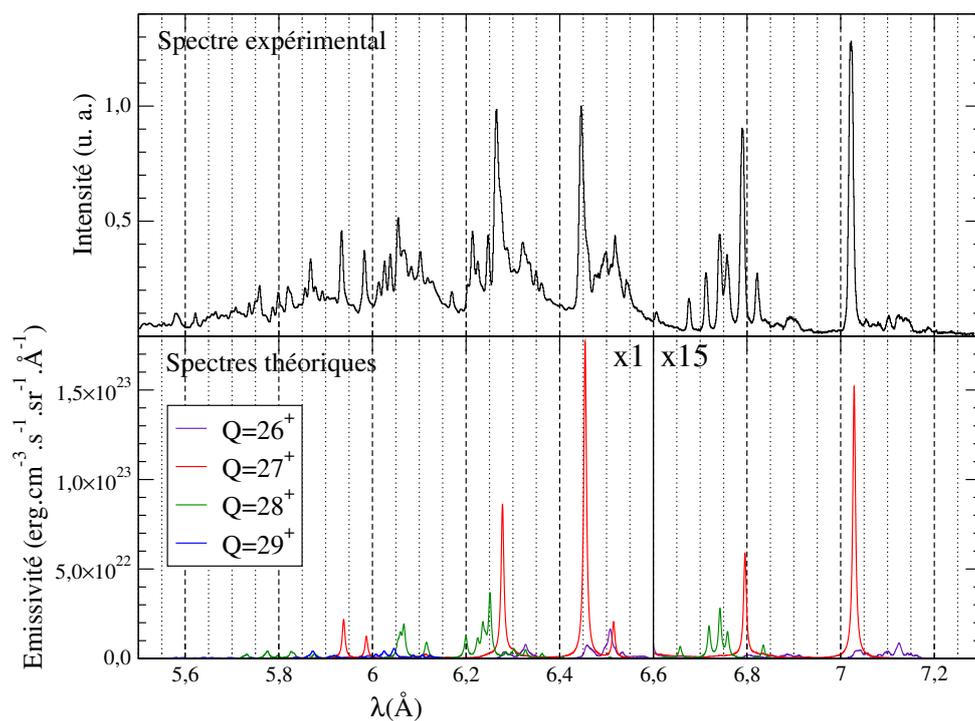
D'après cette figure, les principales structures du spectre expérimental sont globalement bien reproduites avec les spectres issus des états de charge compris entre  $26^+$  et  $29^+$ . Les états de charge dominants sont les  $Q = 27^+$  et  $Q = 28^+$ . En revanche, les intensités relatives des raies ne sont pas particulièrement bien reproduites. Ceci est normal au vu de la simplicité de la méthode de calcul : le spectre est calculé sous l'hypothèse d'un plasma ETL pour un ion isolé. De plus, nous avons considéré une description simplifiée de l'émission X du plasma puisque seul le processus d'émission spontanée est pris en compte. Tous les processus radiatifs induits par l'interaction des ions avec les particules libres (électrons, photons et ions) du plasma sont négligés. L'absorption du flux de photons sur la longueur du plasma est, elle aussi, négligée.

Dans le spectre expérimental, les raies situées au dessus de 6,6 Å ont des intensités du même ordre de grandeur que celles localisées entre 6,2 et 6,5 Å. Ce n'est pas le cas dans les spectres théoriques où la différence d'intensité entre ces deux groupes de raies est d'environ deux ordres de grandeur. Cet écart important pourrait être expliqué par la réabsorption des raies néonoïdes situées avant 6,6 Å dans le plasma qui ferait apparaître les raies situées au delà de 6,6 Å plus intenses par contraste. Cette hypothèse a été avancée pour expliquer un même désaccord entre les spectres théoriques et expérimentaux du Kr [79], bien que le code utilisé pour leur interprétation était le code HETL AVERROËS.

L'identification des raies en utilisant la méthode basée sur des calculs MCDF sans interaction de configuration est présentée dans le tableau 3.7, donné à la fin de ce chapitre. Ces identifications sont basées sur la comparaison entre les spectres théoriques et le spectre expérimental présentée sur la figure 3.15. Cette identification est univoque et aisée pour les raies intenses et isolées comme celles situées au delà de 6,6 Å. Par contre, pour les raies de faibles intensités et localisées dans des régions de forte densité de raies, cette identification est plus délicate.

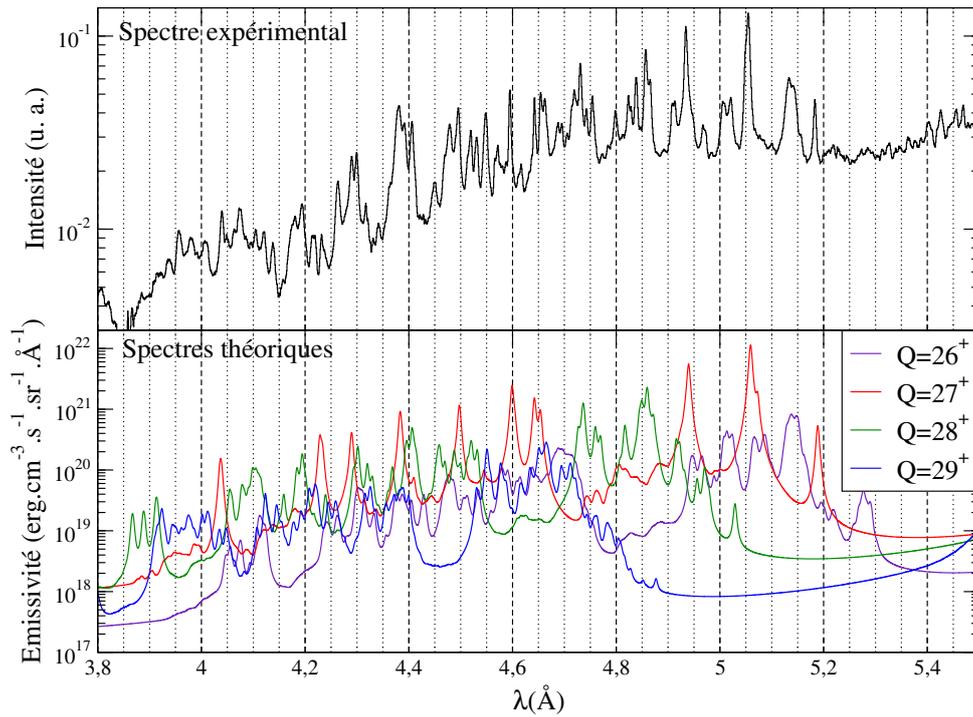


(a) Gamme spectrale : 3,8 – 5,5 Å

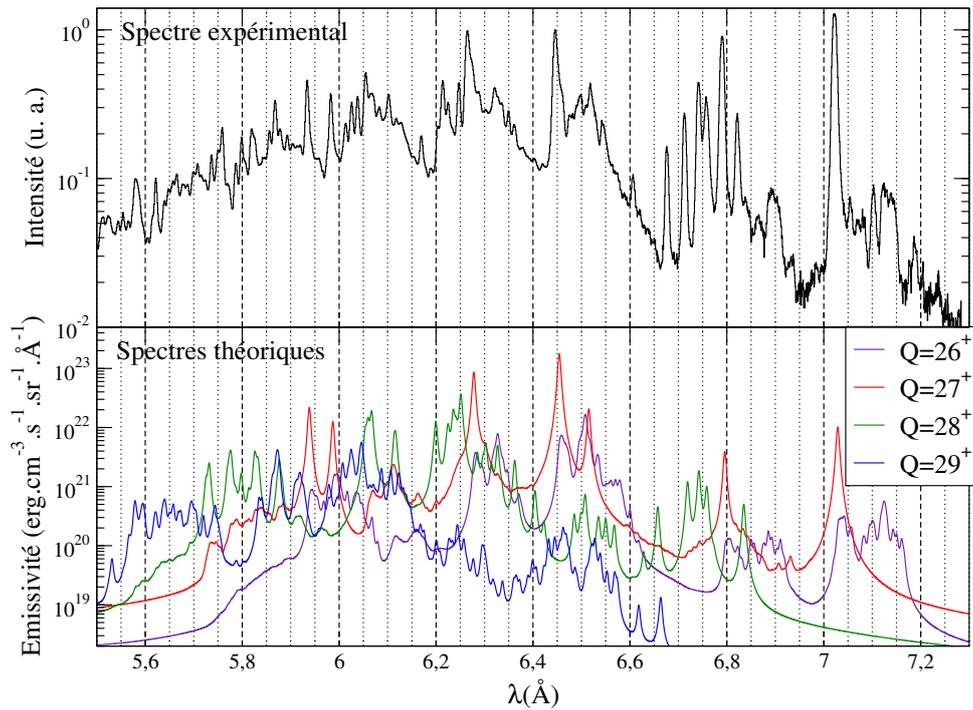


(b) Gamme spectrale : 5,5 – 7,3 Å

FIGURE 3.15 – Comparaison en échelle linéaire entre les spectres de Rb théoriques pour des états de charge allant de  $26^+$  à  $29^+$  et le spectre expérimental. Les spectres théoriques sont obtenus avec la méthode utilisant le code MCDF sans interaction de configuration.



(a) Gamme spectrale : 3,8 – 5,5 Å



(b) Gamme spectrale : 5,5 – 7,3 Å

FIGURE 3.16 – Comparaison en échelle semi-logarithmique entre les spectres de Rb théoriques pour des états de charge allant de  $26^+$  à  $29^+$  et le spectre expérimental. Les spectres théoriques sont obtenus avec la méthode utilisant le code MCDF sans interaction de configuration.

## Spectres calculés avec MCDF avec interaction de configuration

Nous avons étudié l'effet de la prise en compte de l'interaction de configuration dans les calculs MCDF. Cette comparaison a été restreinte aux états de charge dominants ( $27^+$  et  $28^+$ ). La figure 3.17 présente les spectres calculés avec MCDF (taux radiatif pondéré) avec et sans prise en compte de l'interaction de configuration pour ces états de charge.

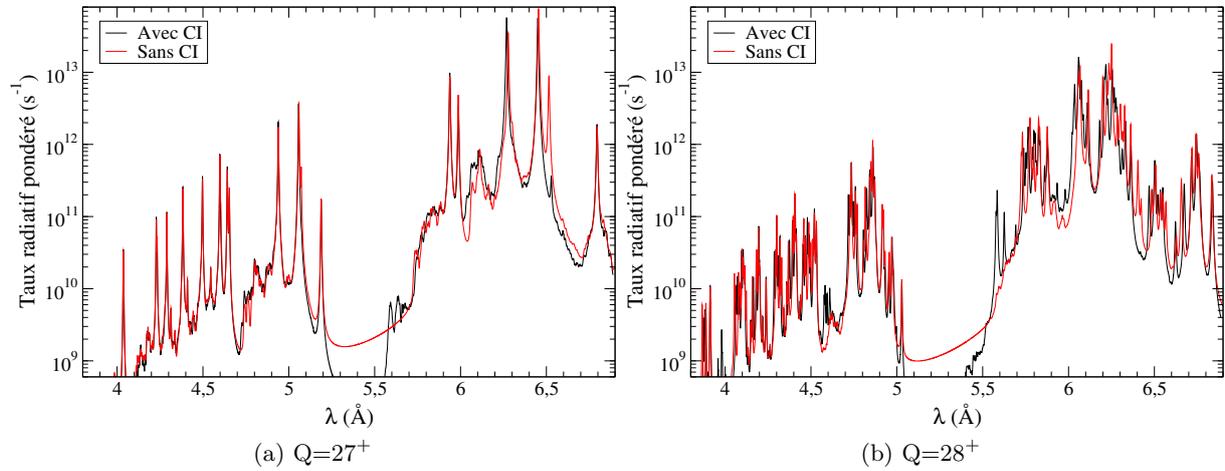


FIGURE 3.17 – Comparaison des spectres MCDF calculés avec et sans interaction de configuration pour les états de charge  $27^+$  et  $28^+$ .

Les spectres MCDF calculés avec et sans interaction de configuration sont très similaires. Cependant, nous notons quelques différences en intensité et l'apparition de raies supplémentaires dans les spectres avec CI (raie à  $5,58 \text{ \AA}$  sur le spectre de l'état de charge  $28^+$ , par exemple). Ces raies ne sont pas les plus intenses du spectre. La méthode de calcul sans CI permet donc d'obtenir rapidement des spectres (en comparaison avec les calculs avec CI) utilisables pour l'identification. Nous verrons au paragraphe suivant que les calculs MCDF avec CI ont été nécessaires pour l'identification d'une dizaine de raies dans le spectre expérimental. Si un besoin de précision est requis, il est possible de mettre en place la méthode d'identification suivante :

1. Une première identification est effectuée avec les résultats des calculs MCDF sans CI.
2. Quelques calculs MCDF avec CI sont réalisés pour les configurations dominantes dans les gammes spectrales non reproduites à l'étape précédente.

## Comparaison des spectres calculés avec MCDF sans interaction de configuration et ceux calculés avec SCO-RCG

Nous pouvons également comparer les spectres obtenus avec notre méthode de calculs MCDF et ceux obtenus avec SCO-RCG qui permet une description des effets du plasma (absorption du rayonnement sur la longueur du plasma notamment) sur la structure atomique. La comparaison des spectres totaux (somme sur les spectres des différents états de charge) est présentée sur la figure 3.18.

Nous constatons que l'aspect général des spectres obtenus avec MCDF et SCO-RCG est très similaire. Notons cependant, la présence de quelques raies supplémentaires (par exemple entre  $6,0$  et  $6,3 \text{ \AA}$ ). Ces raies sont présentes dans le spectre obtenu avec SCO-RCG car ce code prend en compte l'interaction de configuration. Ceci est rendu possible grâce à la description de type statistique de certaines parties du spectres permettant de limiter le nombre de calculs détaillés à prendre en compte. Remarquons également que l'intensité relative de certaines raies du spectre expérimental est mieux reproduite par le calcul SCO-RCG que celui effectué avec MCDF (intensité relative des raies à  $6,23$  et  $6,42 \text{ \AA}$  par exemple). Cependant, comme MCDF, le code SCO-RCG n'arrive pas à reproduire les intensités relatives des raies situées au-delà de  $6,6 \text{ \AA}$ .

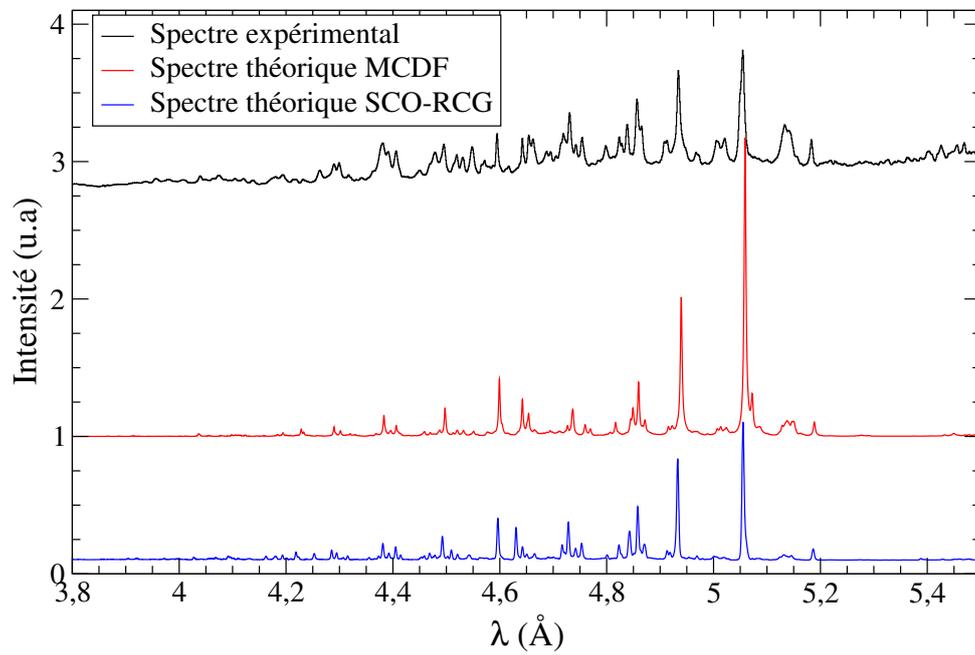
Cette comparaison des résultats obtenus avec notre méthode de calcul et ceux calculés avec SCO-RCG conforte la fiabilité de nos résultats. Ils sont, en effet, très similaires à ceux obtenus avec un code plus perfectionné au niveau de la description de la physique atomique dans un plasma. De plus, la méthode de sélection des configurations ne semble pas avoir omis des configurations conduisant à des raies intenses. Ainsi, l'identification des raies du spectre expérimental est réalisable avec nos calculs.

### **Comparaison des spectres calculés avec MCDF sans interaction de configuration et ceux calculés avec AVERROÈS**

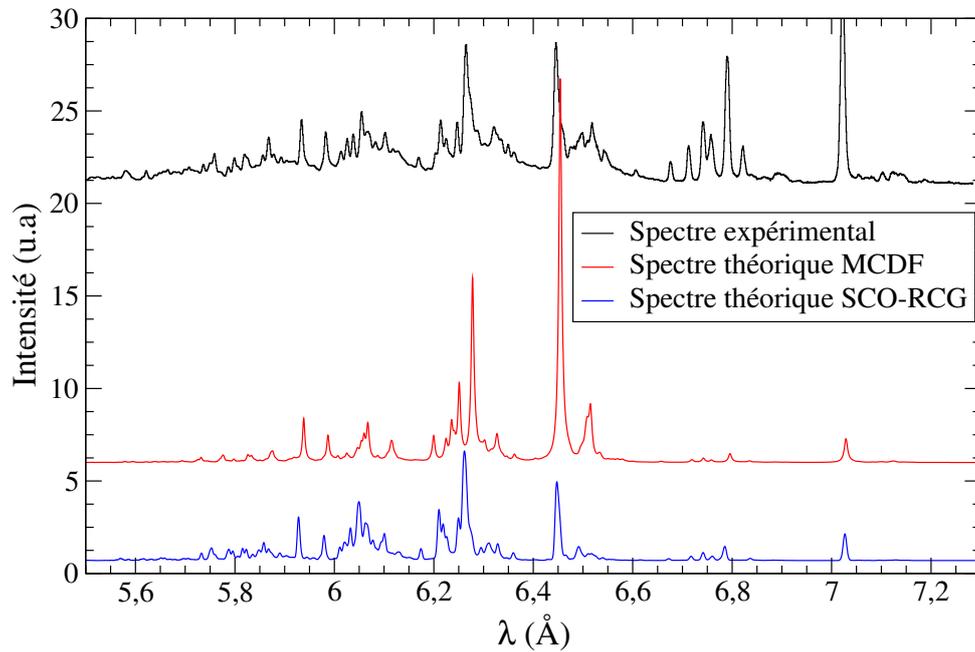
Nous pouvons également confronter nos spectres calculés en supposant un équilibre ETL avec ceux calculés avec AVERROÈS en considérant un équilibre HETL. Cette comparaison est présentée sur la figure 3.19.

Nous constatons que le spectre obtenu avec AVERROÈS comporte moins de raies que celui obtenu avec MCDF. Ceci vient de la conception même du code AVERROÈS, qui utilise la méthode des supraconfigurations. Toutes les raies ou structures déterminées par AVERROÈS sont présentes dans le spectre MCDF. Aucune structure importante n'est donc absente de nos résultats. Notons également le meilleur accord entre spectres expérimental et théorique au niveau des intensités relatives des raies. La prise en compte des différents processus atomiques ayant lieu au sein des plasmas permet, en effet, une meilleure description des populations des niveaux atomiques et donc de l'intensité des raies. Les spectres obtenus avec AVERROÈS même s'ils ne sont pas en mesure de bien rendre compte des intensités des raies situées après 6,6 Å, sont plus proches de l'expérience que ceux calculés avec MCDF.

Au vu de la comparaison entre les spectres obtenus avec AVERROÈS et MCDF, nous constatons que la prise en compte des effets HETL modifie les intensités des raies mais n'en fait pas apparaître de nouvelles. Ceci justifie l'identification faite avec nos résultats MCDF dans une approche ETL.

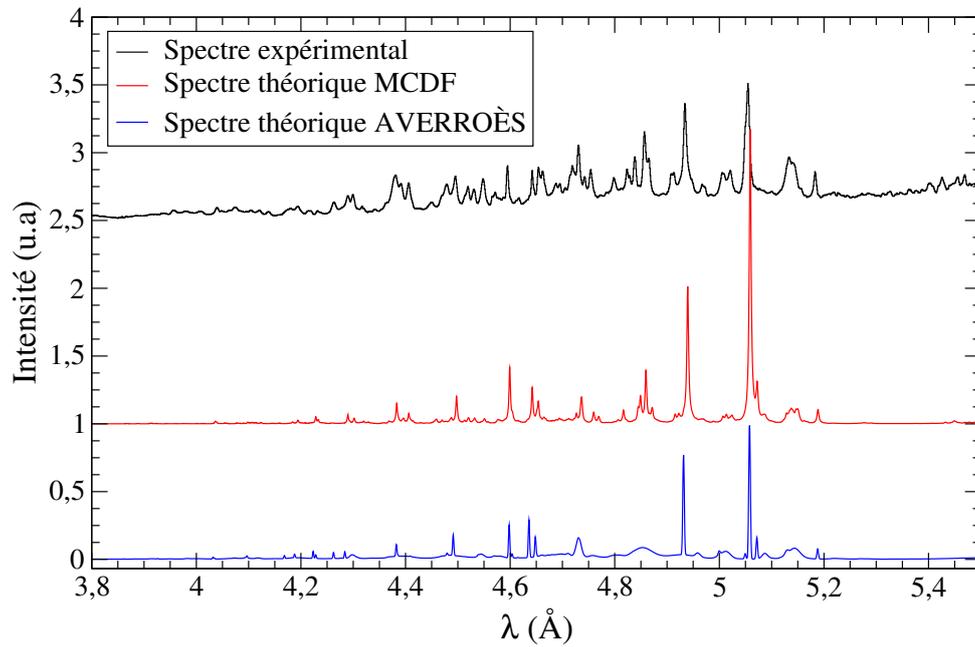


(a) Gamme spectrale : 3,8 – 5,5  $\text{\AA}$

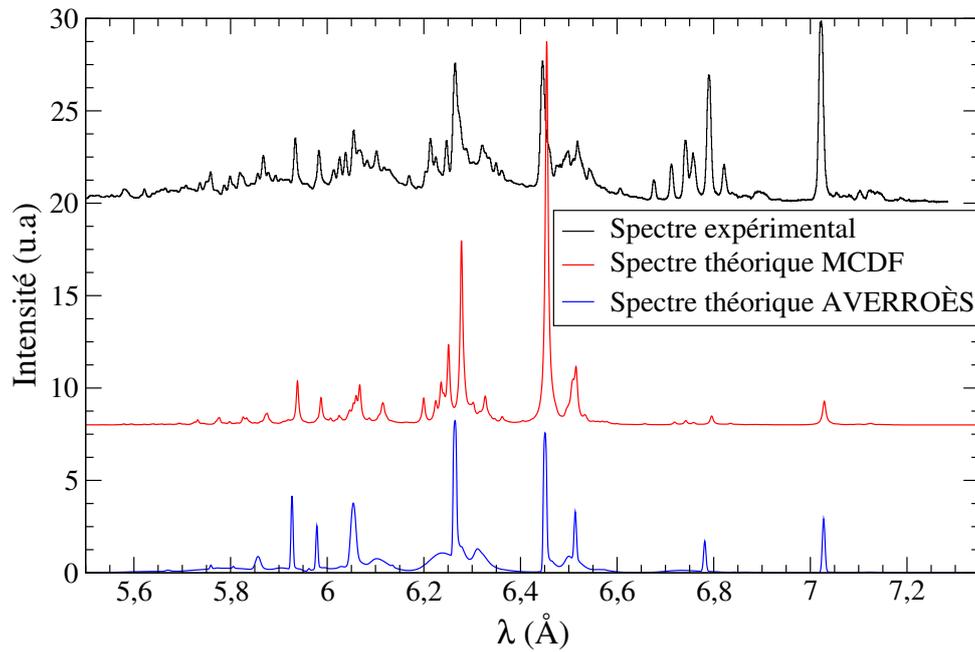


(b) Gamme spectrale : 5,5 – 7,3  $\text{\AA}$

FIGURE 3.18 – Comparaison entre les spectres de Rb théoriques obtenus avec les codes MCDF et SCO-RCG pour une température de 270 eV et le spectre expérimental.



(a) Gamme spectrale : 3,8 – 5,5  $\text{\AA}$



(b) Gamme spectrale : 5,5 – 7,3  $\text{\AA}$

FIGURE 3.19 – Comparaison entre les spectres de Rb théoriques obtenus avec les codes MCDF et AVERROËS et le spectre expérimental. Les calculs MCDF et AVERROËS ont été effectués à des températures de 270 eV (ETL) et 1,4 keV (HETL) respectivement.

### 3.4.3 Identification des raies

La figure 3.22, donnée en fin de chapitre, présente le spectre expérimental du Rb, tracé sur la gamme 3,8 – 5,5 Å (figure 3.22a) et 5,5 – 7,3 Å (figure 3.22b). Les raies pour lesquelles une identification est proposée dans le tableau 3.7, sont repérées par des labels. Pour chaque entrée du tableau, les données suivantes sont reportées :

- le label de la raie utilisé sur la figure 3.22. Pour les raie néonoïdes, la nomenclature standard utilisée dans les références [80, 69] est reportée entre parenthèses. Les raies portant un label numérique sont identifiées à l'aide des calculs MCDF effectués sans interaction de configuration. Pour les raies labélisées par une lettre, nous avons eu recours aux calculs MCDF avec prise en compte de l'interaction de configuration.
- la longueur d'onde de la raie mesurée expérimentalement  $\lambda_{\text{exp}}$  en Å
- celle déterminée avec les calculs MCDF, notée  $\lambda_{\text{MCDF}}$  en Å
- la longueur d'onde mesurée par les autres auteurs si la raie a été identifiée
- l'état de charge  $Q$  de l'ion et sa séquence isoélectronique (élément  ${}^A_Z X$  tel que  $Z = 37 - Q$ )
- les configurations électroniques initiale et finale
- le moment cinétique total et la parité des niveaux initial ( $J_i^\pi$ ) et final ( $J_f^\pi$ )
- le taux radiatif  $A_{if}$  (exprimé en  $\text{s}^{-1}$ ) et calculé avec MCDF
- l'émissivité lié-lié totale de la raie  $\varepsilon_{if}$ , exprimée en  $\text{erg.cm}^{-3}.\text{s}^{-1}.\text{sr}^{-1}$ .

Pour les raies situées dans la gamme spectrale commune aux travaux antérieurs et aux nôtres, le symbole  $\emptyset$  est utilisé pour les raies n'ayant pas été identifiées ou avec des identifications différentes entre celles des références [69, 70, 71, 68] et les nôtres.

Il est important de noter qu'une largeur expérimentale a été introduite pour les raies des spectres théoriques. Aussi une raie théorique après élargissement peut en réalité être composée d'un grand nombre de raies non élargies. Ceci est illustré sur la figure 3.20. Cette figure présente la gamme 5,5 – 5,8 Å du spectre théorique de l'état de charge  $29^+$  pour deux largeurs de raies différentes (0,1 mÅ et 7 mÅ).

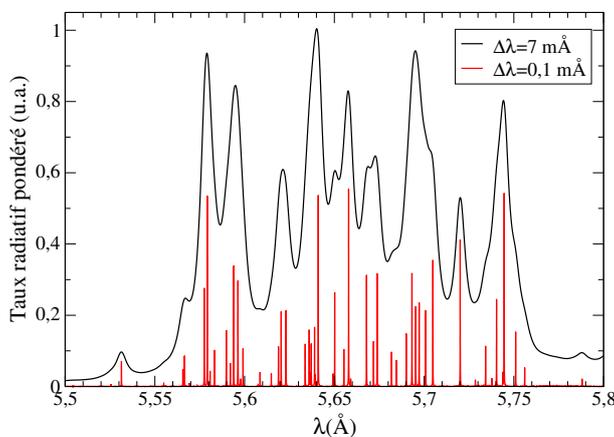


FIGURE 3.20 – Effet de la largeur du profil de convolution ( $\Delta\lambda$ ) sur le spectre X.

Afin d'éviter de présenter un tableau d'identification trop long, nous avons effectué une sélection des raies présentées dans celui-ci. Le critère de sélection est le suivant :

1. l'intervalle de longueur d'onde qui contribue à chaque raie du spectre théorique est défini "visuellement"
2. l'aire  $\mathcal{A}_{\text{tot}}$  (exprimée en  $\text{erg.cm}^{-3}.\text{s}^{-1}.\text{sr}^{-1}$ ) de cette raie théorique est calculée
3. toutes les raies non-élargies présentes dans l'intervalle défini en 1. sont classées par ordre décroissant d'aire :  $\mathcal{A}_1 \geq \mathcal{A}_2 \geq \dots$
4. le plus petit nombre  $n$  de raies prises en compte dans l'identification reportée dans le tableau vérifie :

$$\sum_{i=1}^n \mathcal{A}_i \geq 0,9 \mathcal{A}_{\text{tot}}$$

Si plusieurs raies théoriques issues d'états de charge différents contribuent à une raie expérimentale alors le même critère est appliqué mais l'aire  $\mathcal{A}_{\text{tot}}$  est calculée sur l'ensemble des raies théoriques de tous les états de charge d'intérêt. Le classement est alors réalisé sur ce même ensemble de raies.

### Identifications des raies sodiumoïdes ( $\text{Rb}^{26+}$ )

L'identification des raies sodiumoïdes est difficile car le spectre du  $\text{Rb}^{26+}$  est principalement composé de larges structures contenant un très grand nombre de raies. Ce spectre ne comporte pas de raies très intenses comme celui du  $\text{Rb}^{27+}$  par exemple.

Les deux structures isolées et labélisées 38-39 et 41-42 correspondent à des transitions  $2s^2 2p^5 3l 4d \rightarrow 2s^2 2p^6 3l$ . La structure numérotée 62 se compose de transitions  $2s^2 2p^5 3l 3d \rightarrow 2s^2 2p^6 3l$ . La même identification générale a été faite par Gordon et al. [70]. Cette raie est aussi probablement composée de transitions fluoroides  $2s^1 2p^5 3d^1 \rightarrow 2s^1 2p^6$ .

Deux autres larges structures numérotées 71 et 73 peuvent être attribuées sans ambiguïté à une émission des raies sodiumoïdes car elles sont bien isolées dans le spectre. Elles sont composées de transitions  $2s^2 2p^5 3s 3l \rightarrow 2s^2 2p^6 3l$ . Les positions de ces structures sont en accord avec celles prédites par Gordon et al. en faisant une extrapolation isoélectronique sur les éléments voisins. En effet, ils ont extrapolé ces raies sodiumoïdes à 6,894 Å et 7,135 Å mais sans donner leurs identifications précises.

De plus, d'autres raies sodiumoïdes peuvent être mélangées avec les raies néonoïdes numérotées 61 et 63. Ces raies sodiumoïdes sont identifiées comme étant des transitions  $2s^2 2p^5 3l 3l' \rightarrow 2s^2 2p^6 3l$ . Cependant, l'identification complète de ces raies n'est pas reportée dans le tableau à cause du très grand nombre de raies présentes dans ces structures.

### Identifications des raies néonoïdes ( $\text{Rb}^{27+}$ )

Le spectre X du Rb que nous avons mesuré est typique d'un spectre de couche L. Les raies les plus intenses sont des raies néonoïdes correspondant à des transitions à partir des configurations excitées  $2s^2 2p^5 ns$ ,  $2s^2 2p^5 nd$  ou  $2s 2p^6 np$  vers l'état fondamental  $2s^2 2p^6$ .

Dans la gamme spectrale 4,93 – 7,14 Å, où des données ont déjà été publiées, nos identifications (pour les raies 37, 40, 43, 50, 51, 61, 63, 64 et 72) sont en accord avec celles des autres auteurs [69, 70, 68]. Nous avons cependant un désaccord au sujet de la raie  $2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4 4s^1 \rightarrow 2s^2 2p^6$ , labélisée 4F dans la référence [69]. En effet, cette raie est présente dans nos calculs MCDF mais avec un taux radiatif bien plus faible que celui de la raie  $2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4 4s^1 \rightarrow 2s^2 2p^6$ , noté 4D dans la référence [69]. Plus précisément, le taux radiatif de la raie 4F est  $6,9 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$  selon nos calculs et de  $1,3 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$  d'après ceux de la littérature [81]. D'après nos calculs, les raies 4D et 4F sont séparées de moins de 2 mÅ et d'après le critère de sélection des raies dans le tableau d'identification décrit plus haut, seule la raie 4D est reportée dans notre tableau comme l'identification de la raie expérimentale numérotée 40.

Dans la gamme spectrale où il n'y a pas (à notre connaissance) d'identification publiée, nous avons identifié quatre raies (n°10, 12, 18 et 24) dont les longueurs d'onde ont été prédites par Boiko et al. [80]. Les longueurs d'onde mesurées sont en accord avec celles prédites par Boiko et al. [80] mais notre identification est différente pour certaines raies. Elles sont discutées ci-dessous :

- La raie 10 (6C), que nous avons mesurée à 4,290(1) Å a été prédite à 4,298 Å. par Boiko et al. Selon eux, la configuration initiale est  $2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4 6d_{5/2}^1$  tandis que selon nos calculs MCDF, il s'agit de  $2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4 6d_{3/2}^1$ . D'après notre identification, cette raie pourrait être mélangée à des raies fluoroides issues de la transition  $2s^2 2p_{3/2}^4 5d_{3/2}^1 \rightarrow 2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4$ .
- la raie 12 (6D) mesurée à 4,380(1) Å, a été prédite à 4,389 Å par Boiko et al. Nous avons la même identification que Boiko et al. pour la composante la plus intense. Selon nos calculs MCDF, celle-ci pourrait être mélangée à la raie  $2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3 6d_{3/2}^1 \rightarrow 2s^2 2p^6$ , qui a une émissivité 9,4 fois plus faible.
- La raie 18 (5C) mesurée à 4,495(1) Å, a été prédite à 4,498 Å par Boiko et al. Nous avons identifié la configuration initiale comme étant  $2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4 5d_{3/2}^1$ . Boiko et al. ont

proposé la configuration initiale  $2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4 5d_{5/2}^1$ . Nous pouvons remarquer de nouveau une inversion des orbitales  $nd_{3/2}$  et  $nd_{5/2}$  entre notre identification et celle de Boiko et al.

- La raie 24 (5D) mesurée à 4,595(1) Å a été prédite à 4,595 Å. En plus de la raie  $2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 5d_{5/2}^1 \rightarrow 2s^2 2p^6$ , aussi identifiée par Boiko et al., nous avons une contribution supplémentaire à la raie expérimentale. Cette raie supplémentaire, identifiée comme  $2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 5d_{3/2}^1 \rightarrow 2s^2 2p^6$  a une émissivité 9,2 fois plus faible que la composante principale aussi identifiée par Boiko et al.

Les contributions supplémentaires aux raies 12 (6D) et 24 (5D) sont peu intenses en comparaison des composantes principales de ces raies. Cependant, nous les avons prises en compte car elles vérifient notre critère de sélection.

Nous remarquons que les inversions des orbitales  $nd_{3/2}$  et  $nd_{5/2}$  dans les identifications de Boiko et al sont aussi présentes dans celles des raies 37(4C) et 61(3C). En effet, concernant la raie 37 (4C), nous proposons qu'un électron soit situé dans l'orbitale  $4d_{3/2}$ , comme dans les références [69, 68] et contrairement à Boiko et al. qui suggèrent qu'il soit présent dans l'orbitale  $4d_{5/2}$ . Pour la raie 61 (3C), nous proposons un électron sur l'orbitale  $3d_{3/2}$ , comme les références [69, 70], au lieu de l'orbitale  $3d_{5/2}$ , proposée par Boiko et al. Nous pouvons supposer que cette inversion des deux orbitales  $nd_{3/2}$  et  $nd_{5/2}$  est simplement une erreur de saisie. En effet, si l'on considère les configurations initiales proposées par Boiko et al., nous obtenons des raies quadrupolaires électriques ( $E2$ ). Ces raies étant moins intenses que les raies dipolaires électriques ( $E1$ ), ceci conforte notre hypothèse d'une simple erreur de saisie. Néanmoins, même si les identifications de Boiko et al. présentent des erreurs, les longueurs d'ondes qu'ils ont calculées sont en accord avec celles que nous avons mesurées, à l'exception de la raie 4F qui est reportée par Hutcheon et al. [69] comme une erreur d'identification.

Nous avons aussi identifié quatre raies (numérotées 1, 8, 25 and 26) qui n'ont été, ni mesurées précédemment, ni prédites par Boiko et al. La raie n°1 correspond à une transition  $2s^1 2p^6 6p^1 \rightarrow 2s^2 2p^6$ , la raie n°8 à une transition  $2s^1 2p^6 5p^1 \rightarrow 2s^2 2p^6$  et la raie 25 à une transition  $2s^1 2p^6 4p_{3/2}^1 \rightarrow 2s^2 2p^6$ . Concernant la raie n°26, nous avons identifié les transitions néonoïdes  $2s^1 2p^6 4p_{1/2}^1 \rightarrow 2s^2 2p^6$  et  $2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 5s^1 \rightarrow 2s^2 2p^6$ , probablement mélangées avec la transition oxygéoïde  $2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 4d_{5/2}^1 \rightarrow 2s^2 2p^6$ .

### Identifications des raies fluoroïdes ( $\text{Rb}^{28+}$ )

Les raies fluoroïdes facilement identifiables sont situées au delà de 6,6 Å (raies numérotées 65 à 68 et 70) car elles sont intenses et isolées. Elles correspondent à des transitions  $2s^2 2p^4 3s^1 \rightarrow 2s^2 2p^5$  et  $2s^1 2p^5 3s^1 \rightarrow 2s^1 2p^6$ . Dans ce groupe de raies, seule la raie numérotée 67 a été identifiée dans les études précédentes [71]. L'identification de cette raie publiée dans la référence [71] est identique à la nôtre.

Il est cependant étonnant que le groupe de raies intenses constitué des raies 65, 66, 68 et 70 n'ait pas été reporté et identifié dans les références [69, 70, 71]. Ce groupe de raies n'est pas présent dans le spectre publié par Gordon et al. [70]. Concernant les autres références, le spectre n'étant pas publié, nous ne pouvons pas conclure à une absence de ces raies ou une absence de leurs identifications.

Néanmoins, ce groupe de raies fluoroïdes a été observé dans des spectres X émis par des ions de numéros atomiques voisins : du germanium ( $Z = 32$ ) au krypton ( $Z = 36$ ), strontium ( $Z = 38$ ), niobium ( $Z = 41$ ) et molybdène ( $Z = 42$ ) [82, 83, 84, 85]. Il est ainsi possible de tracer des diagrammes de Moseley pour les quatre raies évoquées ci-dessus. Ces diagrammes représentent la racine carré de l'énergie d'une raie en fonction du numéro atomique de l'ion dans lequel cette raie a été mesurée. Sur ces diagrammes, les points expérimentaux se répartissent selon une droite. Initialement découvert sur les raies  $K\alpha$ , cette propriété a été utilisée pour prédire empiriquement l'énergie de raies dans des éléments non étudiés. Les diagrammes de Moseley pour les raies n°65, n°66, n°68 et n°70 sont tracés sur la figure 3.21. Les ajustements linéaires sont réalisés à partir des données publiées [82, 83, 84, 85]. Les points issus de notre travail (Rb) sont présents sur la figure pour comparaison mais n'ont pas été pris en compte dans

l'ajustement.

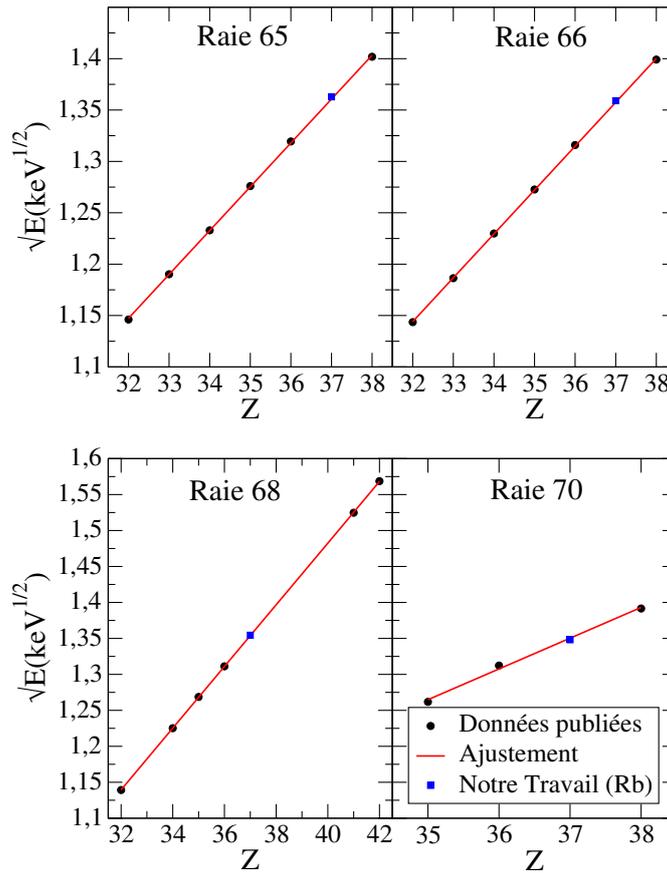


FIGURE 3.21 – Diagrammes de Moseley pour les raies 65, 66, 68 et 70. L’ajustement linéaire (en rouge) est déterminé à partir des données (ronds noirs) des références [82, 83, 84, 85]. Les points Rb (carrés bleus) sont ajoutés pour comparaison.

Nous remarquons un bon accord entre nos valeurs expérimentales et l’extrapolation isoélectronique. Ceci conforte l’identification que nous avons faite de ces raies.

Nous n’avons pas observé la raie reportée à 6.502 Å par Zigler et al. comme étant la raie fluoroïde la plus intense de son spectre. Dans cette région du spectre, l’émission X est principalement dominée par des raies néonoïdes et sodiumoïdes (raies n°63 et 64). D’après nos calculs MCDF, quelques raies fluoroïdes sont présentes dans cette région mais leurs émissivités sont bien plus faibles que celles des raies néonoïdes et fluoroïdes. De plus, Zigler et al. ont travaillé avec un éclairage laser plus faible que le nôtre et ils auraient dû observer une émission des raies sodiumoïdes plus importante que la nôtre. En effet, une baisse d’intensité laser se traduit par une augmentation relative des raies sodiumoïdes par rapport aux raies néonoïdes dans ces régions [70]. Il est aussi intéressant de noter que Sansonetti [78] émet des doutes sur les identifications de Zigler et al.

Les raies 53, 54 et 59 ont été identifiées comme des raies fluoroïdes par Zigler et al. et comme des raies oxygénoïdes dans notre identification. La raie n°54 a aussi été identifiée comme une raie fluoroïde par Hutcheon et al. Cependant, selon nos calculs MCDF, la séquence de raies 52, 53 et 54 est bien reproduite par une émission de raies oxygénoïdes. Selon Zigler et al., la raie  $f$  est une raie fluoroïde. Nous avons la même identification que Zigler et al. en ce qui concerne l’état de charge mais pas le niveau initial. En effet, selon nos calculs MCDF, le niveau initial a un moment cinétique total  $J = 3/2$  alors que Zigler et al. attribue  $J = 5/2$  ou  $J = 1/2$  à ce niveau. Ils proposent deux identifications pour cette raie car celle-ci leur apparaît mélangée.

La raie  $d$ , identifiée comme la transition fluoroïde  $2s^1 2p^5 3d^1 \rightarrow 2s^1 2p^6$ , n’a pas été identifiée dans les études précédentes même s’il s’agit d’une raie isolée et assez intense.

Nous avons attribué aux cinq raies labélisées 55, 56, 58,  $e$  et 60 les mêmes identifications que celles publiées dans les références [69, 71]. Cependant, dans notre identification la raie n°58 est

probablement mélangée avec les raies oxygénoïdes issues de la transition  $2s^12p^43d^1 \rightarrow 2s^12p^5$ .

Dans la gamme spectrale 6,0 – 6,3 Å, la principale transition fluoroïde est  $2s^22p^43d^1 \rightarrow 2s^22p^5$ . Concernant les raies dont la configuration initiale possède un électron dans la couche  $n = 3$ , nous avons aussi identifié sept raies (raies 44 à 49 et *c*) dans la gamme spectrale 5,5 – 6,0 Å. Elles correspondent à la transition  $2s^12p^53p^1 \rightarrow 2s^22p^5$ . La raie n°49 est aussi probablement mélangée avec des raies oxygénoïdes.

Dans la gamme spectrale 4,47 – 4,92 Å, nous avons identifié des raies fluoroïdes labélisées 16, 17, 19 à 21, 28 à 36, *a* et *b*. Elles correspondent à des transitions dont la configuration initiale possède un électron dans la couche  $n = 4$  :  $2s^22p^44d^1 \rightarrow 2s^22p^5$ ,  $2s^12p^54d^1 \rightarrow 2s^12p^6$ ,  $2s^22p^44s^1 \rightarrow 2s^22p^5$  et  $2s^12p^54p^1 \rightarrow 2s^22p^5$ . Nous avons aussi identifié une raie (n°17) dont l'orbitale  $2s$  est vide :  $2p^64p^1 \rightarrow 2s^12p^6$ . La raie 15 ne peut pas être classée avec les raies précédentes car elle est issue d'un mélange de plusieurs transitions :  $2s^12p^54p^1 \rightarrow 2s^22p^5$ ,  $2s^12p^55d^1 \rightarrow 2s^12p^6$  et  $2s^22p^45s^1 \rightarrow 2s^22p^5$ .

Entre 4,30 et 4,41 Å, l'électron effectuant la transition est dans l'orbitale  $n = 5$  (raies 11, 13 et 14). Nous avons ainsi identifié les transitions :  $2s^22p^45d^1 \rightarrow 2s^22p^5$  et  $2s^12p^55d^1 \rightarrow 2s^12p^6$ .

Dans la gamme spectrale 4,12 – 4,20 Å, nous observons des raies dont la configuration initiale possède un électron dans la couche  $n = 6$  (raies 4, 6 et 7). En effet, nous avons identifié les transitions :  $2s^22p^46d^1 \rightarrow 2s^22p^5$  et  $2s^12p^56d^1 \rightarrow 2s^12p^6$ . Par contre, ces raies fluoroïdes sont probablement mélangées avec des raies oxygénoïdes correspondant aux transitions :  $2s^22p^35d^1 \rightarrow 2s^22p^4$  et  $2s^12p^45d^1 \rightarrow 2s^12p^5$ .

En dessous de 4,12 Å, nous avons identifié deux raies (n°2 et 3) issues de la transition  $2s^12p^55p^1 \rightarrow 2s^22p^5$ . Ces raies sont probablement mélangées avec des raies oxygénoïdes (transitions  $2s^22p^35d^1 \rightarrow 2s^22p^4$ ). La raie n°2 est aussi composée de transitions dont la configuration initiale a son orbitale  $2s$  vide :  $2p^65p^1 \rightarrow 2s^12p^6$ .

## Identifications des raies oxygénoïdes (Rb<sup>29+</sup>)

Une identification des raies oxygénoïdes n'a pas été réalisée dans les précédentes études et dans cette gamme spectrale. Les raies oxygénoïdes sont généralement peu intenses et la plupart sont mélangées avec des raies fluoroïdes. Ces cas de raies mélangées ont été discutés précédemment. Cependant, nous avons aussi identifié quelques raies oxygénoïdes non mélangées avec d'autres raies.

Les raies n°5 et 9 correspondent à des transitions  $2s^22p^35d^1 \rightarrow 2s^22p^4$  et  $2s^12p^45d^1 \rightarrow 2s^12p^5$ . La transition  $2s^12p^45s^1 \rightarrow 2s^22p^4$  contribue aussi faiblement à la raie n°9.

Les raies oxygénoïdes dont la configuration initiale possède un électron excité dans la couche  $n = 4$  sont situées entre 4,5 et 4,7 Å (raies 22, 23 et 26). Les transitions correspondantes sont :  $2s^22p^34d^1 \rightarrow 2s^22p^4$  et  $2s^12p^44d^1 \rightarrow 2s^12p^5$ . Les raies 22 et 23 ne sont pas mélangées tandis que la raie 24 est majoritairement composée de raies néonoïdes.

Dans la gamme spectrale 5,8 – 6,0 Å, nous avons identifié sept raies oxygénoïdes (raies 44, 52 à 54 et 57 à 59) correspondant à des transitions  $2s^22p^33d^1 \rightarrow 2s^22p^4$  et  $2s^12p^43d^1 \rightarrow 2s^12p^5$ . Dans ce groupe de raies, seule la raie n°49 est mélangée avec des raies fluoroïdes qui sont décrites au paragraphe précédent.

## Conclusion

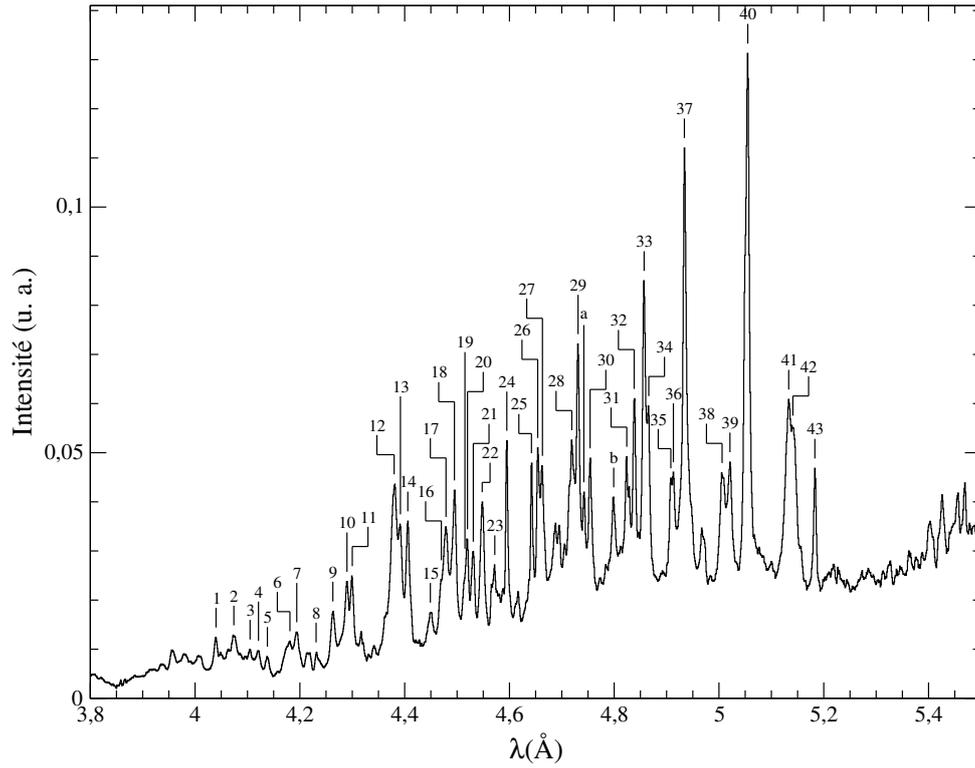
Dans ce chapitre, nous avons présenté la mesure du spectre X émis par un plasma de Rb produit avec le laser PHELIX à un éclairage de  $\sim 6 \times 10^{14}$  W/cm<sup>2</sup>. Ce spectre a été obtenu à l'aide de trois cristaux de Bragg disposés de manière à obtenir une large gamme spectrale (3,8 – 7,3 Å).

Les caractéristiques du plasma produit avec PHELIX ont été déterminées à l'aide de simulations hydrodynamiques. Elles ont été utilisées pour déterminer la distribution d'états de charge du plasma à l'aide de calculs HETL avec le code AVERROËS. Nous avons pu aussi déterminer une température ETL d'ionisation nécessaire pour générer des spectres X théoriques avec notre méthode de calcul ETL.

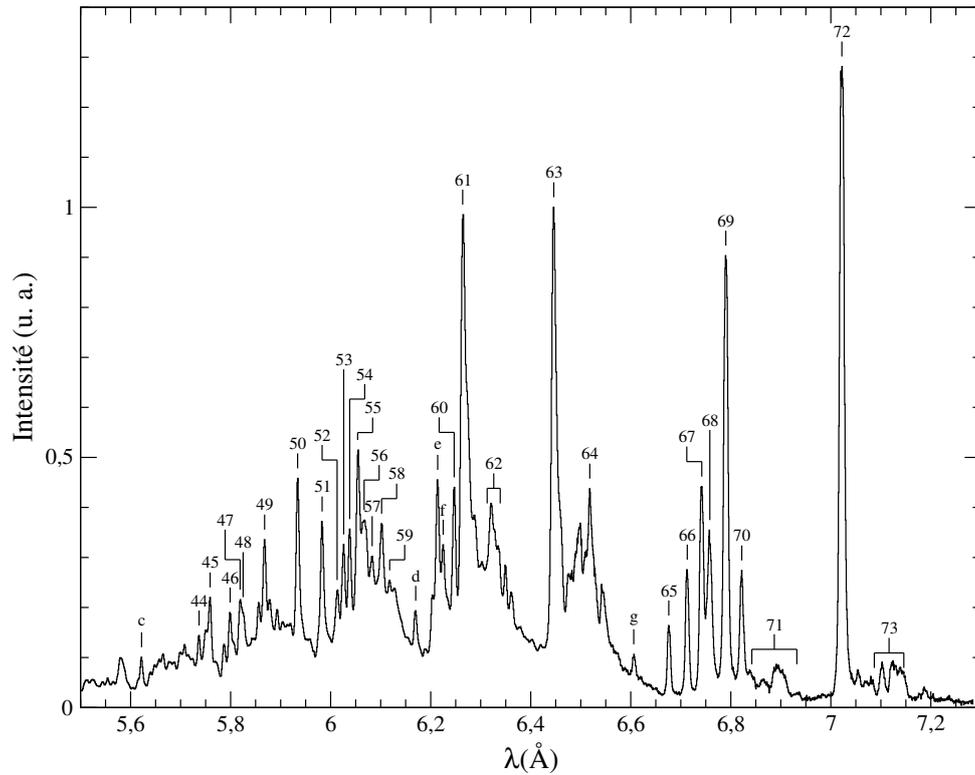
Les spectres X théoriques obtenus ont permis l'identification d'un grand nombre de raies expérimentales (environ 70 dont 49 n'avaient pas été identifiées jusqu'à présent). Dans les gammes spectrales communes, les identifications publiées dans des études précédentes sont majoritairement en accord avec les nôtres. Ceci permet de valider notre méthode de calcul et en particulier notre méthode de sélection basée sur les résultats du code d'atome moyen. Comme nos résultats sont en accord avec ceux des autres auteurs, nous avons confiance dans les identifications que nous proposons dans la gamme spectrale non étudiée précédemment et pour le  $\text{Rb}^{29+}$ .

Les spectres théoriques obtenus avec notre méthode de calculs sont comparables à ceux déterminés à partir des codes plus perfectionnés SCO-RCG et AVERROÈS, qui ont une description plus précise de la physique atomique dans les plasmas. Ceci conforte l'utilisation de notre méthode pour l'identification de spectres expérimentaux et pour le calcul des transitions atomiques  $M1$  impliquées dans l'effet NEET.

L'identification des raies du spectre expérimental indique que la distribution de charge calculée avec AVERROÈS semble représentative de celle du plasma. Cette distribution de charge sera utilisée pour déterminer le taux d'excitation NEET et estimer le nombre d'isomères produits que l'on peut attendre dans un plasma de Rb créé avec le laser PHELIX. Nous pourrions ainsi conclure sur la faisabilité de l'expérience de mise en évidence de l'effet NEET auprès des installations PHELIX et UNILAC.



(a) Gamme spectrale 3,8 – 5,5 Å



(b) Gamme spectrale 5,5 – 7,3 Å

FIGURE 3.22 – Spectre X expérimental d'un plasma de Rb avec les labels des raies utilisés dans le tableau 3.7.

TABLEAU 3.7 – Identification des raies sodiomoides, neonoides, fluoroides et oxygenoides du spectre X de Rb

Label	$\lambda_{\text{exp}}(\text{\AA})$	$\lambda_{\text{MCDF}}(\text{\AA})$	$\lambda_{\text{ref}}(\text{\AA})$	Ion(seq)	Config initiale	$J_i^\pi$	Config finale	$J_f^\pi$	$A_{if}(\text{s}^{-1})$	$\varepsilon_{if}(\text{erg.cm}^{-3}.\text{s}^{-1}.\text{sr}^{-1})$
1	4.040(1)	4.0363		Rb <sup>27+</sup> (Ne)	$2s^1 2p^6 6p_{3/2}^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6$	0 <sup>+</sup>	$3.1 \times 10^{12}$	$1.2 \times 10^{18}$
		4.0388		Rb <sup>27+</sup> (Ne)	$2s^1 2p^6 6p_{1/2}^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6$	0 <sup>+</sup>	$1.6 \times 10^{12}$	$6.4 \times 10^{17}$
2	4.074(1)	4.0782		Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4 5p_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4$	1/2 <sup>-</sup>	$3.8 \times 10^{12}$	$1.8 \times 10^{17}$
		4.0830		Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4 5p_{1/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4$	1/2 <sup>-</sup>	$3.2 \times 10^{12}$	$1.6 \times 10^{17}$
		4.0781		Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4 5p_{3/2}^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4$	1/2 <sup>-</sup>	$6.0 \times 10^{12}$	$1.4 \times 10^{17}$
		4.0765		Rb <sup>28+</sup> (F)	$2p^6 5p_{3/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$2s^1 2p^6$	1/2 <sup>+</sup>	$4.5 \times 10^{12}$	$1.1 \times 10^{17}$
		4.0810		Rb <sup>28+</sup> (F)	$2p^6 5p_{1/2}^1$	1/2 <sup>-</sup>	$2s^1 2p^6$	1/2 <sup>+</sup>	$4.7 \times 10^{12}$	$5.6 \times 10^{16}$
		4.1058		Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 5p_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$4.3 \times 10^{12}$	$2.8 \times 10^{17}$
3	4.105(1)	4.1052		Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 5p_{3/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$2.6 \times 10^{12}$	$2.5 \times 10^{17}$
		4.1024		Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 5p_{3/2}^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$5.6 \times 10^{12}$	$1.8 \times 10^{17}$
		4.1034		Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 5p_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4$	1/2 <sup>-</sup>	$2.1 \times 10^{12}$	$1.1 \times 10^{17}$
		4.1074		Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 5p_{1/2}^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4$	1/2 <sup>-</sup>	$2.2 \times 10^{12}$	$5.7 \times 10^{16}$
		4.1071		Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{3/2}^3 5d_{3/2}^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	1 <sup>+</sup>	$7.9 \times 10^{12}$	$3.9 \times 10^{16}$
		4.1240		Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 6d_{3/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$2s^1 2p^6$	1/2 <sup>+</sup>	$4.2 \times 10^{12}$	$1.1 \times 10^{17}$
4	4.121(1)	4.1234		Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{3/2}^3 5d_{3/2}^1$	3 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	2 <sup>+</sup>	$9.4 \times 10^{12}$	$1.1 \times 10^{17}$
		4.1233		Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2 5d_{3/2}^1$	2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2$	2 <sup>+</sup>	$9.5 \times 10^{12}$	$9.9 \times 10^{16}$
		4.1236		Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2 5d_{3/2}^1$	3 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2$	2 <sup>+</sup>	$5.8 \times 10^{12}$	$8.5 \times 10^{16}$
		4.1236		Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 6d_{3/2}^1$	1/2 <sup>-</sup>	$2s^1 2p^6$	1/2 <sup>+</sup>	$6.3 \times 10^{12}$	$8.5 \times 10^{16}$
		4.1225		Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2 5d_{3/2}^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2$	2 <sup>+</sup>	$1.1 \times 10^{13}$	$7.2 \times 10^{16}$
		4.1228		Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{3/2}^3 5d_{3/2}^1$	2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	2 <sup>+</sup>	$4.7 \times 10^{12}$	$3.8 \times 10^{16}$
		4.1438		Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2 5d_{3/2}^1$	3 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2$	2 <sup>+</sup>	$6.6 \times 10^{12}$	$1.0 \times 10^{17}$
		4.1455		Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 5d_{3/2}^1$	2 <sup>+</sup>	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	2 <sup>-</sup>	$9.1 \times 10^{12}$	$4.5 \times 10^{16}$
5	4.138(1)	4.1458		Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 5d_{3/2}^1$	3 <sup>+</sup>	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	2 <sup>-</sup>	$5.4 \times 10^{12}$	$3.7 \times 10^{16}$
		4.1461		Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 5d_{3/2}^1$	1 <sup>+</sup>	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	2 <sup>-</sup>	$1.1 \times 10^{13}$	$3.3 \times 10^{16}$
		4.1447		Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2 5d_{3/2}^1$	2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2$	2 <sup>+</sup>	$2.9 \times 10^{12}$	$3.2 \times 10^{16}$
		4.1842		Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 6d_{5/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	1/2 <sup>-</sup>	$5.5 \times 10^{12}$	$3.4 \times 10^{17}$
		4.1832		Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 6d_{5/2}^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	1/2 <sup>-</sup>	$1.1 \times 10^{13}$	$3.4 \times 10^{17}$
6	4.181(1)	4.1851		Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 6d_{5/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$2s^1 2p^6$	1/2 <sup>+</sup>	$6.4 \times 10^{12}$	$2.0 \times 10^{17}$
		4.1846		Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 6d_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	1/2 <sup>-</sup>	$8.6 \times 10^{11}$	$5.4 \times 10^{16}$
		4.1754		Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2 5d_{5/2}^1$	2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2$	1 <sup>+</sup>	$5.2 \times 10^{12}$	$5.0 \times 10^{16}$
		4.1784		Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 5d_{3/2}^1$	3 <sup>+</sup>	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	2 <sup>-</sup>	$6.6 \times 10^{12}$	$4.9 \times 10^{16}$

TABLEAU 3.7 – Suite

7	4.194(1)	4.1942	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2 6d_{5/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$7.6 \times 10^{12}$	$9.2 \times 10^{17}$
		4.1942	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2 6d_{5/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$7.7 \times 10^{12}$	$6.2 \times 10^{17}$
		4.2006	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3 6d_{5/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4$	1/2 <sup>-</sup>	$5.4 \times 10^{12}$	$3.5 \times 10^{17}$
		4.1956	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2 6d_{5/2}^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$2.7 \times 10^{12}$	$1.1 \times 10^{17}$
		4.1965	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2 6d_{3/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$8.3 \times 10^{11}$	$1.0 \times 10^{17}$
		4.1918	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^2 5d_{5/2}^1$	3 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3$	2 <sup>+</sup>	$5.8 \times 10^{12}$	$7.7 \times 10^{16}$
		4.1965	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2 6d_{3/2}^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$1.8 \times 10^{12}$	$7.2 \times 10^{16}$
8	4.231(1)	4.2284	Rb <sup>27+</sup> (Ne)	$2s^1 2p_{5/2}^6 p_{3/2}^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6$	0 <sup>+</sup>	$5.4 \times 10^{12}$	$3.4 \times 10^{18}$
		4.2333	Rb <sup>27+</sup> (Ne)	$2s^1 2p^6 5p_{1/2}^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6$	0 <sup>+</sup>	$2.8 \times 10^{12}$	$1.8 \times 10^{18}$
9	4.263(1)	4.2587	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2 5d_{5/2}^1$	3 <sup>+</sup>	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	2 <sup>-</sup>	$1.1 \times 10^{13}$	$9.8 \times 10^{16}$
		4.2576	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2 5d_{5/2}^1$	2 <sup>+</sup>	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	2 <sup>-</sup>	$1.3 \times 10^{13}$	$8.4 \times 10^{16}$
		4.2676	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^1 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3 5d_{5/2}^1$	1 <sup>+</sup>	$2s^1 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4$	0 <sup>-</sup>	$1.5 \times 10^{13}$	$4.6 \times 10^{16}$
		4.2612	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^1 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3 5d_{5/2}^1$	1 <sup>+</sup>	$2s^1 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4$	1 <sup>-</sup>	$1.4 \times 10^{13}$	$4.1 \times 10^{16}$
		4.2628	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^1 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3 5d_{5/2}^1$	2 <sup>+</sup>	$2s^1 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4$	1 <sup>-</sup>	$5.5 \times 10^{12}$	$2.6 \times 10^{16}$
		4.2587	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2 5d_{5/2}^1$	1 <sup>+</sup>	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	2 <sup>-</sup>	$6.6 \times 10^{12}$	$2.5 \times 10^{16}$
		4.2599	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2 5d_{5/2}^1$	0 <sup>+</sup>	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4$	1 <sup>-</sup>	$2.1 \times 10^{13}$	$2.0 \times 10^{16}$
		4.2494	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2 5d_{5/2}^1$	2 <sup>+</sup>	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	1 <sup>-</sup>	$3.6 \times 10^{12}$	$1.9 \times 10^{16}$
		4.2626	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2 5d_{3/2}^1$	3 <sup>+</sup>	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	2 <sup>-</sup>	$1.4 \times 10^{12}$	$1.3 \times 10^{16}$
		4.2570	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^2 5s^1$	2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3$	2 <sup>+</sup>	$1.0 \times 10^{12}$	$1.1 \times 10^{16}$
		4.2631	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2 5d_{3/2}^1$	1 <sup>+</sup>	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	2 <sup>-</sup>	$2.5 \times 10^{12}$	$9.6 \times 10^{15}$
4.2492	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2 5d_{3/2}^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	0 <sup>+</sup>	$1.1 \times 10^{12}$	$8.6 \times 10^{15}$		
10 (6C)	4.290(1)	4.2897	Rb <sup>27+</sup> (Ne)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4 6d_{3/2}^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6$	0 <sup>+</sup>	$5.9 \times 10^{12}$	$4.3 \times 10^{18}$
		4.2933	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{3/2}^4 5d_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4$	1/2 <sup>-</sup>	$8.8 \times 10^{12}$	$7.0 \times 10^{17}$
11	4.300(1)	4.3015	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3 5d_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$9.4 \times 10^{12}$	$9.7 \times 10^{17}$
		4.3020	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3 5d_{3/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$5.8 \times 10^{12}$	$9.0 \times 10^{17}$
		4.3021	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3 5d_{3/2}^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$1.1 \times 10^{13}$	$5.8 \times 10^{17}$
12 (6D)	4.380(1)	4.3832	Rb <sup>27+</sup> (Ne)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 6d_{5/2}^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6$	0 <sup>+</sup>	$1.0 \times 10^{13}$	$9.1 \times 10^{18}$
		4.3859	Rb <sup>27+</sup> (Ne)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 6d_{3/2}^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6$	0 <sup>+</sup>	$1.1 \times 10^{12}$	$9.8 \times 10^{17}$
13	4.392(1)	4.3960	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3 5d_{5/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4$	1/2 <sup>-</sup>	$1.1 \times 10^{13}$	$1.1 \times 10^{18}$
		4.3941	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3 5d_{5/2}^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4$	1/2 <sup>-</sup>	$2.0 \times 10^{13}$	$1.0 \times 10^{18}$
		4.3967	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 5d_{5/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$2s^1 2p^6$	1/2 <sup>+</sup>	$1.2 \times 10^{13}$	$5.9 \times 10^{17}$
14	4.406(1)	4.4062	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2 5d_{5/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$1.4 \times 10^{13}$	$2.7 \times 10^{18}$
		4.4063	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2 5d_{5/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$1.4 \times 10^{13}$	$1.8 \times 10^{18}$
		4.4090	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2 5d_{5/2}^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$4.9 \times 10^{12}$	$3.2 \times 10^{17}$
		4.4108	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2 5d_{3/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$1.5 \times 10^{12}$	$3.0 \times 10^{17}$

TABLEAU 3.7 – Suite

15	4.449(1)	4.4594	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 4p_{3/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$6.6 \times 10^{12}$	$1.4 \times 10^{18}$
		4.4544	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 5d_{5/2}^1$	1/2 <sup>-</sup>	$2s^1 2p^6$	1/2 <sup>+</sup>	$1.9 \times 10^{13}$	$5.5 \times 10^{17}$
		4.4580	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 4p_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$3.3 \times 10^{12}$	$4.8 \times 10^{17}$
		4.4569	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 5d_{5/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$2s^1 2p^6$	1/2 <sup>+</sup>	$8.0 \times 10^{12}$	$4.5 \times 10^{17}$
		4.4507	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 5s^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$1.2 \times 10^{12}$	$1.7 \times 10^{17}$
16	4.470(1)	4.4695	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 4p_{1/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$3.9 \times 10^{12}$	$5.8 \times 10^{17}$
		4.4699	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 4p_{1/2}^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$6.2 \times 10^{12}$	$4.6 \times 10^{17}$
17	4.479(1)	4.4879	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 4p_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4$	1/2 <sup>-</sup>	$7.6 \times 10^{12}$	$9.3 \times 10^{17}$
		4.4876	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 4p_{3/2}^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4$	1/2 <sup>-</sup>	$1.2 \times 10^{13}$	$7.1 \times 10^{17}$
		4.4851	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2p^6 4p_{3/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$2s^1 2p^6$	1/2 <sup>+</sup>	$8.7 \times 10^{12}$	$5.3 \times 10^{17}$
18 (5C)	4.495(1)	4.4974	Rb <sup>27+</sup> (Ne)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 5d_{3/2}^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6$	0 <sup>+</sup>	$1.1 \times 10^{13}$	$1.2 \times 10^{19}$
19	4.515(2)	4.5127	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 4p_{3/2}^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$1.1 \times 10^{13}$	$9.1 \times 10^{17}$
20	4.520(1)	4.5212	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 4p_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$8.2 \times 10^{12}$	$1.4 \times 10^{18}$
		4.5198	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 4p_{3/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$5.0 \times 10^{12}$	$1.2 \times 10^{18}$
		4.5186	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 4p_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4$	1/2 <sup>-</sup>	$3.8 \times 10^{12}$	$5.0 \times 10^{17}$
21	4.531(1)	4.5319	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 4p_{1/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$6.0 \times 10^{12}$	$1.5 \times 10^{18}$
		4.5331	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 4p_{1/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$2.2 \times 10^{12}$	$3.8 \times 10^{17}$
		4.5283	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 4p_{1/2}^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4$	1/2 <sup>-</sup>	$3.9 \times 10^{12}$	$2.6 \times 10^{17}$
22	4.548(1)	4.5508	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2 4d_{3/2}^1$	2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2$	2 <sup>+</sup>	$2.2 \times 10^{13}$	$5.8 \times 10^{17}$
		4.5511	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{3/2}^3 4d_{3/2}^1$	3 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	2 <sup>+</sup>	$2.0 \times 10^{13}$	$5.8 \times 10^{17}$
		4.5515	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2 4d_{3/2}^1$	3 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2$	2 <sup>+</sup>	$1.4 \times 10^{13}$	$5.4 \times 10^{17}$
		4.5487	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2 4d_{3/2}^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2$	2 <sup>+</sup>	$2.5 \times 10^{13}$	$4.0 \times 10^{17}$
		4.5580	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2 4d_{3/2}^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2$	0 <sup>+</sup>	$2.6 \times 10^{13}$	$3.9 \times 10^{17}$
		4.5496	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{3/2}^3 4d_{3/2}^1$	2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	2 <sup>+</sup>	$1.0 \times 10^{13}$	$2.1 \times 10^{17}$
23	4.572(1)	4.5761	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2 4d_{3/2}^1$	3 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2$	2 <sup>+</sup>	$1.2 \times 10^{13}$	$4.8 \times 10^{17}$
		4.5767	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 4d_{3/2}^1$	2 <sup>+</sup>	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	2 <sup>-</sup>	$2.0 \times 10^{13}$	$2.6 \times 10^{17}$
		4.5776	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 4d_{3/2}^1$	3 <sup>+</sup>	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	2 <sup>-</sup>	$1.3 \times 10^{13}$	$2.3 \times 10^{17}$
		4.5783	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 4d_{3/2}^1$	1 <sup>+</sup>	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	2 <sup>-</sup>	$2.5 \times 10^{13}$	$1.9 \times 10^{17}$
		4.5822	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^1 2p_{3/2}^4 4d_{3/2}^1$	2 <sup>+</sup>	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4$	1 <sup>-</sup>	$2.0 \times 10^{13}$	$1.8 \times 10^{17}$
		4.5785	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2 4d_{3/2}^1$	2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2$	2 <sup>+</sup>	$4.7 \times 10^{12}$	$1.3 \times 10^{17}$
24 (5D)	4.595(1)	4.5992	Rb <sup>27+</sup> (Ne)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 5d_{5/2}^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6$	0 <sup>+</sup>	$1.9 \times 10^{13}$	$2.6 \times 10^{19}$
		4.6045	Rb <sup>27+</sup> (Ne)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 5d_{3/2}^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6$	0 <sup>+</sup>	$2.0 \times 10^{12}$	$2.8 \times 10^{18}$
25	4.642(1)	4.6422	Rb <sup>27+</sup> (Ne)	$2s^1 2p^6 4p_{3/2}^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6$	0 <sup>+</sup>	$1.0 \times 10^{13}$	$1.6 \times 10^{19}$
26	4.654(1)	4.6540	Rb <sup>27+</sup> (Ne)	$2s^1 2p^6 4p_{1/2}^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6$	0 <sup>+</sup>	$5.5 \times 10^{12}$	$8.4 \times 10^{18}$
		4.6509	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^1 4d_{5/2}^1$	3 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2$	2 <sup>+</sup>	$3.7 \times 10^{13}$	$1.7 \times 10^{18}$
		4.6513	Rb <sup>27+</sup> (Ne)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 5s^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6$	0 <sup>+</sup>	$7.3 \times 10^{11}$	$1.1 \times 10^{18}$

TABLEAU 3.7 – Suite

27	4.663(1)	4.6654	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^2 4d_{5/2}^1$	3 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3$	2 <sup>+</sup>	$2.7 \times 10^{13}$	$9.8 \times 10^{17}$	
		4.6686	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^2 4d_{5/2}^1$	2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3$	1 <sup>+</sup>	$2.9 \times 10^{13}$	$7.8 \times 10^{17}$	
		4.6641	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^2 4d_{5/2}^1$	2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3$	2 <sup>+</sup>	$2.9 \times 10^{13}$	$7.5 \times 10^{17}$	
		4.6593	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{3/2}^3 4d_{5/2}^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{3/2}^4$	0 <sup>+</sup>	$4.6 \times 10^{13}$	$5.5 \times 10^{17}$	
		4.6726	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^2 4d_{5/2}^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3$	1 <sup>+</sup>	$1.7 \times 10^{13}$	$2.9 \times 10^{17}$	
		4.6631	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^1 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3 4d_{5/2}^1$	2 <sup>+</sup>	$2s^1 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4$	1 <sup>-</sup>	$2.2 \times 10^{13}$	$2.4 \times 10^{17}$	
		4.6671	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{5/2}^2 4d_{5/2}^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3$	2 <sup>+</sup>	$1.4 \times 10^{13}$	$2.1 \times 10^{17}$	
		4.6722	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^2 4d_{3/2}^1$	3 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3$	2 <sup>+</sup>	$2.8 \times 10^{12}$	$1.0 \times 10^{17}$	
		4.6620	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^2 4d_{3/2}^1$	2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3$	2 <sup>+</sup>	$3.0 \times 10^{12}$	$9.9 \times 10^{16}$	
		4.6723	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^1 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3 4d_{5/2}^1$	2 <sup>+</sup>	$2s^1 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4$	1 <sup>-</sup>	$8.8 \times 10^{12}$	$9.8 \times 10^{16}$	
28	4.719(1)	4.7266	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{3/2}^4 4d_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4$	1/2 <sup>-</sup>	$1.9 \times 10^{13}$	$3.6 \times 10^{18}$	
29	4.731(1)	4.7354	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3 4d_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$2.1 \times 10^{13}$	$5.3 \times 10^{18}$	
		4.7369	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3 4d_{3/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$1.4 \times 10^{13}$	$5.3 \times 10^{18}$	
		4.7371	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3 4d_{3/2}^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$2.4 \times 10^{13}$	$3.0 \times 10^{18}$	
a	4.742(1)	4.7462	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p^5 4d^1$	1/2 <sup>-</sup>	$2s^1 2p^6$	1/2 <sup>+</sup>	$3.1 \times 10^{13}$	$1.5 \times 10^{18}$	
		4.7477	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p^5 4d^1$	3/2 <sup>-</sup>	$2s^1 2p^6$	1/2 <sup>+</sup>	$1.5 \times 10^{13}$	$1.5 \times 10^{18}$	
30	4.754(1)	4.7595	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3 4d_{3/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$1.0 \times 10^{13}$	$4.0 \times 10^{18}$	
		4.7609	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3 4d_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$3.2 \times 10^{12}$	$8.4 \times 10^{17}$	
b	4.799(2)	4.8058	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p^5 4d^1$	3/2 <sup>-</sup>	$2s^1 2p^6$	1/2 <sup>+</sup>	$1.1 \times 10^{13}$	$1.2 \times 10^{18}$	
31	4.824(2)	4.8167	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^2 4d_{5/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$1.2 \times 10^{13}$	$5.2 \times 10^{18}$	
32	4.838(2)	4.8490	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3 4d_{5/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4$	1/2 <sup>-</sup>	$2.9 \times 10^{13}$	$7.0 \times 10^{18}$	
		4.8447	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3 4d_{5/2}^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4$	1/2 <sup>-</sup>	$4.2 \times 10^{13}$	$5.1 \times 10^{18}$	
		4.8494	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 4d_{5/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$2s^1 2p^6$	1/2 <sup>+</sup>	$2.6 \times 10^{13}$	$3.2 \times 10^{18}$	
33	4.857(2)	4.8595	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{5/2}^2 4d_{5/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$2.8 \times 10^{13}$	$1.3 \times 10^{19}$	
		4.8597	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^2 4d_{5/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$2.9 \times 10^{13}$	$9.2 \times 10^{18}$	
34	4.866(2)	4.8721	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3 4d_{5/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4$	1/2 <sup>-</sup>	$1.3 \times 10^{13}$	$3.3 \times 10^{18}$	
		4.8668	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^2 4d_{5/2}^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$1.0 \times 10^{13}$	$1.7 \times 10^{18}$	
		4.8711	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^2 4d_{3/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$3.2 \times 10^{12}$	$1.5 \times 10^{18}$	
		4.8709	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^2 4d_{3/2}^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$6.9 \times 10^{12}$	$1.1 \times 10^{18}$	
35	4.908(2)	4.9155	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 4d_{5/2}^1$	1/2 <sup>-</sup>	$2s^1 2p^6$	1/2 <sup>+</sup>	$4.1 \times 10^{13}$	$2.8 \times 10^{18}$	
36	4.913(2)	4.9223	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 4d_{5/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$2s^1 2p^6$	1/2 <sup>+</sup>	$1.6 \times 10^{13}$	$2.1 \times 10^{18}$	
37 (4C)	4.934(2)	4.9395	4.9351(10)[68] / 4.931(3)[69]	Rb <sup>27+</sup> (Ne)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4 4d_{3/2}^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6$	0 <sup>+</sup>	$2.2 \times 10^{13}$	$5.8 \times 10^{19}$

TABLEAU 3.7 – Suite

38	5.006(2)	5.0128		Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4 3p_{3/2}^1 4d_{3/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p^6 3p_{3/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$2.1 \times 10^{13}$	$1.4 \times 10^{18}$
		5.0070		Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4 3s^1 4d_{3/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3s^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2.1 \times 10^{13}$	$1.2 \times 10^{18}$
		5.0139		Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4 3p_{3/2}^1 4d_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p^6 3p_{3/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$1.9 \times 10^{13}$	$8.2 \times 10^{17}$
		5.0071	∅	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4 3s^1 4d_{3/2}^1$	1/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3s^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2.1 \times 10^{13}$	$6.1 \times 10^{17}$
		5.0139		Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4 3d_{3/2}^1 4d_{3/2}^1$	5/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$1.2 \times 10^{13}$	$6.0 \times 10^{17}$
		5.0150		Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4 3p_{1/2}^1 4d_{3/2}^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p^6 3p_{1/2}^1$	1/2 <sup>-</sup>	$2.2 \times 10^{13}$	$5.0 \times 10^{17}$
		5.0099		Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4 3p_{3/2}^1 4d_{3/2}^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p^6 3p_{3/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$2.1 \times 10^{13}$	$4.4 \times 10^{17}$
		5.0061		Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4 3d_{3/2}^1 4d_{3/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$1.2 \times 10^{13}$	$3.9 \times 10^{17}$
39	5.021(2)	5.0233		Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4 3d_{5/2}^1 4d_{3/2}^1$	7/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{5/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2.1 \times 10^{13}$	$1.4 \times 10^{18}$
		5.0247		Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4 3d_{5/2}^1 4d_{3/2}^1$	5/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{5/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$1.9 \times 10^{13}$	$9.4 \times 10^{17}$
		5.0203	∅	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4 3d_{5/2}^1 4d_{3/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{5/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2.0 \times 10^{13}$	$6.6 \times 10^{17}$
		5.0192		Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4 3p_{1/2}^1 4d_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p^6 3p_{1/2}^1$	1/2 <sup>-</sup>	$1.2 \times 10^{13}$	$5.6 \times 10^{17}$
		5.0272		Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4 3d_{3/2}^1 4d_{3/2}^1$	5/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$9.8 \times 10^{12}$	$4.9 \times 10^{17}$
		5.0250		Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4 3d_{3/2}^1 4d_{3/2}^1$	1/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2.0 \times 10^{13}$	$3.3 \times 10^{17}$
(4F)	∅	5.0577	5.0573(10)[68] / 5.044(3)[69]	Rb <sup>27+</sup> (Ne)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4 4s^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6$	0 <sup>+</sup>	$6.9 \times 10^{11}$	$2.2 \times 10^{18}$
40 (4D)	5.055(2)	5.0591	5.0523(10)[68] / 5.050(3)[69]	Rb <sup>27+</sup> (Ne)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4 4d_{5/2}^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6$	0 <sup>+</sup>	$3.9 \times 10^{13}$	$1.2 \times 10^{20}$
41	5.133(3)	5.1283		Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3s^1 4d_{5/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3s^1$	1/2 <sup>+</sup>	$3.5 \times 10^{13}$	$2.4 \times 10^{18}$
		5.1376		Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3p_{1/2}^1 4d_{5/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p^6 3p_{1/2}^1$	1/2 <sup>-</sup>	$3.7 \times 10^{13}$	$2.1 \times 10^{18}$
		5.1409		Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{5/2}^1 4d_{5/2}^1$	7/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{5/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$1.7 \times 10^{13}$	$1.3 \times 10^{18}$
		5.1315		Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3s^1 4d_{5/2}^1$	1/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3s^1$	1/2 <sup>+</sup>	$3.7 \times 10^{13}$	$1.3 \times 10^{18}$
		5.1340		Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3p_{3/2}^1 4d_{5/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p^6 3p_{3/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$1.6 \times 10^{13}$	$1.2 \times 10^{18}$
		5.1425	∅	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3p_{3/2}^1 4d_{5/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p^6 3p_{3/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$1.5 \times 10^{13}$	$1.2 \times 10^{18}$
		5.1393		Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3p_{3/2}^1 4d_{5/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p^6 3p_{3/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$2.1 \times 10^{13}$	$1.1 \times 10^{18}$
		5.1371		Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3p_{1/2}^1 4d_{5/2}^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p^6 3p_{1/2}^1$	1/2 <sup>-</sup>	$3.7 \times 10^{13}$	$1.0 \times 10^{18}$
		5.1355		Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3p_{3/2}^1 4d_{5/2}^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p^6 3p_{3/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$3.6 \times 10^{13}$	$9.6 \times 10^{17}$
		5.1341		Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3p_{3/2}^1 4d_{5/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p^6 3p_{3/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$1.6 \times 10^{13}$	$8.5 \times 10^{17}$
		5.1234		Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{5/2}^1 4d_{5/2}^1$	5/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{5/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$1.0 \times 10^{13}$	$6.0 \times 10^{17}$
		42	5.141(3)	5.1463		Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{3/2}^1 4d_{5/2}^1$	5/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>
5.1501				Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{5/2}^1 4d_{5/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{5/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$3.4 \times 10^{13}$	$1.3 \times 10^{18}$
5.1479				Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{3/2}^1 4d_{5/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$3.2 \times 10^{13}$	$1.3 \times 10^{18}$
5.1502	∅			Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{5/2}^1 4d_{5/2}^1$	5/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{5/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2.0 \times 10^{13}$	$1.2 \times 10^{18}$
5.1514				Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{5/2}^1 4d_{5/2}^1$	7/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{5/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$1.4 \times 10^{13}$	$1.1 \times 10^{18}$
5.1460				Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{3/2}^1 4d_{5/2}^1$	1/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$3.7 \times 10^{13}$	$7.5 \times 10^{17}$
5.1460				Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3s^1 4d_{3/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3s^1$	1/2 <sup>+</sup>	$3.0 \times 10^{12}$	$2.1 \times 10^{17}$
43 (4G)	5.183(3)	5.1886	5.179(3)[69]	Rb <sup>27+</sup> (Ne)	$2s^2 2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^4 4s^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6$	0 <sup>+</sup>	$1.5 \times 10^{12}$	$5.7 \times 10^{18}$
c	5.622(3)	5.6256	∅	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p^5 3p^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p^5$	3/2 <sup>-</sup>	$1.8 \times 10^{12}$	$1.8 \times 10^{18}$

TABLEAU 3.7 – Suite

44	5.737(3)	5.7319	$\emptyset$	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3p_{3/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$1.5 \times 10^{13}$	$2.5 \times 10^{19}$
		5.7251		Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3p_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$8.7 \times 10^{12}$	$9.6 \times 10^{18}$
45	5.759(3)	5.7772	$\emptyset$	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3p_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4$	1/2 <sup>-</sup>	$1.9 \times 10^{13}$	$1.8 \times 10^{19}$
		5.7761		Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3p_{3/2}^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4$	1/2 <sup>-</sup>	$2.6 \times 10^{13}$	$1.2 \times 10^{19}$
		5.7730		Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3p_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$9.2 \times 10^{12}$	$1.1 \times 10^{19}$
		5.7749		Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3p_{3/2}^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$1.4 \times 10^{13}$	$8.5 \times 10^{18}$
46	5.799(3)	5.7980	$\emptyset$	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3p_{3/2}^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$2.5 \times 10^{13}$	$1.5 \times 10^{19}$
47	5.819(3)	5.8261	$\emptyset$	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3p_{3/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$1.1 \times 10^{13}$	$2.1 \times 10^{19}$
		5.8253		Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3p_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4$	1/2 <sup>-</sup>	$1.4 \times 10^{13}$	$1.4 \times 10^{19}$
		5.8298		Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3p_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4$	1/2 <sup>-</sup>	$7.0 \times 10^{12}$	$6.9 \times 10^{18}$
48	5.825(4)	5.8329	$\emptyset$	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3p_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$1.7 \times 10^{13}$	$2.1 \times 10^{19}$
49	5.868(3)	5.8765	$\emptyset$	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3p_{3/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$1.4 \times 10^{13}$	$2.7 \times 10^{19}$
		5.8722		Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{3/2}^1$	3 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	2 <sup>+</sup>	$5.8 \times 10^{13}$	$1.6 \times 10^{19}$
		5.8707		Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{3/2}^1$	2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	2 <sup>+</sup>	$6.8 \times 10^{13}$	$1.4 \times 10^{19}$
		5.8746		Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{3/2}^3 3d_{3/2}^1$	3 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	2 <sup>+</sup>	$5.7 \times 10^{13}$	$1.3 \times 10^{19}$
		5.8753		Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{3/2}^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	0 <sup>+</sup>	$7.5 \times 10^{13}$	$8.3 \times 10^{18}$
50 (3A)	5.934(4)	5.9385	5.938(5)[70] / 5.945(3)[69]	Rb <sup>27+</sup> (Ne)	$2s^1 2p^6 3p_{3/2}^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6$	0 <sup>+</sup>	$2.3 \times 10^{13}$	$2.4 \times 10^{20}$
51 (3B)	5.983(4)	5.9871	5.988(5)[70] / 5.994(3)[69]	Rb <sup>27+</sup> (Ne)	$2s^1 2p^6 3p_{1/2}^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6$	0 <sup>+</sup>	$1.3 \times 10^{13}$	$1.4 \times 10^{20}$
52	6.013(4)	6.0076	$\emptyset$	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{5/2}^1$	3 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	2 <sup>+</sup>	$5.7 \times 10^{13}$	$1.5 \times 10^{19}$
		6.0064		Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{5/2}^1$	3 <sup>+</sup>	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	2 <sup>-</sup>	$5.5 \times 10^{13}$	$8.1 \times 10^{18}$
		6.0132		Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{5/2}^1$	2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	2 <sup>+</sup>	$8.5 \times 10^{12}$	$1.6 \times 10^{18}$
53	6.026(4)	6.0246	$\emptyset$	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{5/2}^1$	3 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	2 <sup>+</sup>	$1.1 \times 10^{14}$	$3.6 \times 10^{19}$
		6.0291		Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{3/2}^3 3d_{5/2}^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{3/2}^4$	0 <sup>+</sup>	$1.4 \times 10^{14}$	$1.2 \times 10^{19}$
		6.0187		Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{5/2}^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	1 <sup>+</sup>	$5.0 \times 10^{13}$	$5.8 \times 10^{18}$
53	6.026(4)	$\emptyset$	6.031(3)[69]	Rb <sup>28+</sup> (F)						
54	6.038(4)	6.0461	$\emptyset$	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{5/2}^1$	3 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	2 <sup>+</sup>	$6.7 \times 10^{13}$	$1.8 \times 10^{19}$
		6.0480		Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{5/2}^1$	2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	1 <sup>+</sup>	$7.7 \times 10^{13}$	$1.5 \times 10^{19}$
		6.0426		Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{5/2}^1$	2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	2 <sup>+</sup>	$8.1 \times 10^{13}$	$1.5 \times 10^{19}$
		6.0459		Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{5/2}^1$	2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	2 <sup>+</sup>	$4.7 \times 10^{13}$	$1.2 \times 10^{19}$
		6.0460		Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{5/2}^1$	2 <sup>+</sup>	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4$	1 <sup>-</sup>	$9.6 \times 10^{13}$	$7.7 \times 10^{18}$
		6.0537		Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{5/2}^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	2 <sup>+</sup>	$3.3 \times 10^{13}$	$3.8 \times 10^{18}$
54	6.038(4)	$\emptyset$	6.040(3)[71] / 6.044(3)[69]	Rb <sup>28+</sup> (F)						
55	6.054(4)	6.0596	6.053(3)[71] / 6.059(3)[69]	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$6.7 \times 10^{13}$	$1.1 \times 10^{20}$
		6.0541	$\emptyset$	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{3/2}^4 3d_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4$	1/2 <sup>-</sup>	$5.3 \times 10^{13}$	$6.8 \times 10^{19}$
	$\emptyset$	$\emptyset$	6.053(3)[71] / 6.055(3)[69]	Rb <sup>28+</sup> (F)						
56	6.067(4)	6.0670	$\emptyset$	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{3/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$5.3 \times 10^{13}$	$1.3 \times 10^{20}$
		6.0679	6.062(3)[71]	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{3/2}^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$7.0 \times 10^{13}$	$5.7 \times 10^{19}$

TABLEAU 3.7 – Suite

57	6.083(4)	6.0866	$\emptyset$	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2 3d_{5/2}^1$	2 <sup>+</sup>	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	1 <sup>-</sup>	$1.1 \times 10^{14}$	$1.0 \times 10^{19}$
		6.0881		Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^1 3d_{5/2}^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2$	0 <sup>+</sup>	$6.5 \times 10^{13}$	$9.2 \times 10^{18}$
58	6.102(4)	6.1138	6.107(3)[71]	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{3/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$1.6 \times 10^{13}$	$4.2 \times 10^{19}$
		6.1168	$\emptyset$	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3d_{3/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$2s^1 2p^6$	1/2 <sup>+</sup>	$6.0 \times 10^{13}$	$4.1 \times 10^{19}$
		6.1153	$\emptyset$	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3d_{3/2}^1$	1/2 <sup>-</sup>	$2s^1 2p^6$	1/2 <sup>+</sup>	$6.8 \times 10^{13}$	$2.3 \times 10^{19}$
		6.1069	$\emptyset$	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{5/2}^1$	2 <sup>+</sup>	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	2 <sup>-</sup>	$8.3 \times 10^{13}$	$9.7 \times 10^{18}$
59	6.118(4)	6.1230	$\emptyset$	Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{5/2}^1$	3 <sup>+</sup>	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	2 <sup>-</sup>	$5.6 \times 10^{13}$	$9.3 \times 10^{18}$
		6.1213		Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{5/2}^1$	1 <sup>+</sup>	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4$	1 <sup>-</sup>	$7.9 \times 10^{13}$	$4.1 \times 10^{18}$
		6.1237		Rb <sup>29+</sup> (O)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{5/2}^1$	1 <sup>+</sup>	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	2 <sup>-</sup>	$4.2 \times 10^{13}$	$3.0 \times 10^{18}$
59	6.118(4)	$\emptyset$	6.122(3)[71]	Rb <sup>28+</sup> (F)						
d	6.170(4)	6.1816	$\emptyset$	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p^5 3d^1$	3/2 <sup>-</sup>	$2s^1 2p^6$	1/2 <sup>+</sup>	$4.1 \times 10^{13}$	$3.0 \times 10^{19}$
e	6.214(4)	6.2188	6.218(3)[71]	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p^4 3d^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p^5$	1/2 <sup>-</sup>	$9.2 \times 10^{13}$	$1.4 \times 10^{20}$
		6.2157	$\emptyset$	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p^4 3d^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p^5$	3/2 <sup>-</sup>	$3.2 \times 10^{13}$	$9.2 \times 10^{19}$
f	6.225(4)	6.2293	$\emptyset$	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p^4 3d^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p^5$	3/2 <sup>-</sup>	$2.4 \times 10^{13}$	$4.5 \times 10^{19}$
f	6.225(4)	$\emptyset$	6.231(3)[71]	Rb <sup>28+</sup> (F)						
60	6.247(4)	6.2511	6.251(3)[71]	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2 3d_{5/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$7.0 \times 10^{13}$	$2.1 \times 10^{20}$
		6.2509		Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2 3d_{5/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$8.5 \times 10^{13}$	$1.7 \times 10^{20}$
61 (3C)	6.264(4)	6.2777	6.286(5)[70] / 6.277(3)[69]	Rb <sup>27+</sup> (Ne)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3d_{3/2}^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6$	0 <sup>+</sup>	$6.3 \times 10^{13}$	$9.2 \times 10^{20}$
62	6.311-6.342	6.3269	$\emptyset$	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{5/2}^1$	1/2 <sup>-</sup>	$2s^1 2p^6$	1/2 <sup>+</sup>	$1.2 \times 10^{14}$	$5.0 \times 10^{19}$
		6.3262		Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3p_{3/2}^1 3d_{3/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p^6 3p_{3/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$6.1 \times 10^{13}$	$2.1 \times 10^{19}$
		6.3277		Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3d_{3/2}^1 3d_{5/2}^1$	7/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{5/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$6.0 \times 10^{13}$	$2.0 \times 10^{19}$
		6.3203		Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3s^1 3d_{3/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3s^1$	1/2 <sup>+</sup>	$6.1 \times 10^{13}$	$1.8 \times 10^{19}$
		6.3283		Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3d_{3/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$9.0 \times 10^{13}$	$1.6 \times 10^{19}$
		6.3385		Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3d_{3/2}^1 3d_{5/2}^1$	5/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{5/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$5.5 \times 10^{13}$	$1.4 \times 10^{19}$
		6.3331	6.324(5)[70]	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3p_{3/2}^1 3d_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p^6 3p_{3/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$5.7 \times 10^{13}$	$1.3 \times 10^{19}$
		6.3253		Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3d_{3/2}^1 3d_{5/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{5/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$6.0 \times 10^{13}$	$1.0 \times 10^{19}$
		6.3296		Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3s^1 3d_{3/2}^1$	1/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3s^1$	1/2 <sup>+</sup>	$6.1 \times 10^{13}$	$9.2 \times 10^{18}$
		6.3159		Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3p_{1/2}^1 3d_{3/2}^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p^6 3p_{1/2}^1$	1/2 <sup>-</sup>	$6.1 \times 10^{13}$	$7.3 \times 10^{18}$
6.3245		Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3p_{3/2}^1 3d_{3/2}^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p^6 3p_{3/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$6.1 \times 10^{13}$	$7.1 \times 10^{18}$		
63 (3D)	6.446(4)	6.4542	6.448(5)[70] / 6.454(3)[69]	Rb <sup>27+</sup> (Ne)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{5/2}^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6$	0 <sup>+</sup>	$1.1 \times 10^{14}$	$1.9 \times 10^{21}$
		$\emptyset$	$\emptyset$	6.502(3)[71]	Rb <sup>28+</sup> (F)					

TABLEAU 3.7 – Suite

64 (3E)	6.518(4)	6.5152	6.519(5)[70] / 6.519(3)[69]	Rb <sup>27+</sup> (Ne)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{3/2}^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6$	0 <sup>+</sup>	$1.2 \times 10^{13}$	$2.2 \times 10^{20}$
		6.5084	∅	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{5/2}^2$	5/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{5/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$1.3 \times 10^{14}$	$3.9 \times 10^{19}$
		6.5059	∅	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3s^1 3d_{5/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3s^1$	1/2 <sup>+</sup>	$1.1 \times 10^{14}$	$3.9 \times 10^{19}$
		6.5090	∅	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{3/2}^1 3d_{5/2}^1$	5/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$1.1 \times 10^{14}$	$3.3 \times 10^{19}$
		6.5065	∅	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3p_{1/2}^1 3d_{5/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p^6 3p_{1/2}^1$	1/2 <sup>-</sup>	$1.1 \times 10^{14}$	$3.1 \times 10^{19}$
		6.4995	∅	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3p_{3/2}^1 3d_{5/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p^6 3p_{3/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$1.0 \times 10^{14}$	$2.8 \times 10^{19}$
		6.5101	∅	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3p_{3/2}^1 3d_{5/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p^6 3p_{3/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$5.6 \times 10^{13}$	$2.3 \times 10^{19}$
		6.5172	∅	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{3/2}^1 3d_{5/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$1.0 \times 10^{14}$	$2.2 \times 10^{19}$
		6.4956	∅	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3s^1 3d_{5/2}^1$	1/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3s^1$	1/2 <sup>+</sup>	$1.1 \times 10^{14}$	$1.9 \times 10^{19}$
		6.5039	∅	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3d_{5/2}^2$	3/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{5/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$8.7 \times 10^{13}$	$1.8 \times 10^{19}$
		g	6.606(4)	6.6232	∅	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p^5 3s^1$	1/2 <sup>-</sup>	$2s^1 2p^6$	1/2 <sup>+</sup>
65	6.676(4)	6.6574	∅	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2 3s^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$3.3 \times 10^{12}$	$4.8 \times 10^{18}$
66	6.713(4)	6.7190	∅	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3s^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4$	1/2 <sup>-</sup>	$4.1 \times 10^{12}$	$1.0 \times 10^{19}$
		6.7187	∅	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3s^1$	1/2 <sup>-</sup>	$2s^1 2p^6$	1/2 <sup>+</sup>	$4.3 \times 10^{12}$	$2.6 \times 10^{18}$
67	6.742(4)	6.7422	6.741(3)[71]	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2 3s^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$6.3 \times 10^{12}$	$2.0 \times 10^{19}$
68	6.758(4)	6.7581	∅	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3s^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4$	1/2 <sup>-</sup>	$4.1 \times 10^{12}$	$5.2 \times 10^{18}$
		6.7591	∅	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^2 3s^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3$	3/2 <sup>-</sup>	$1.0 \times 10^{12}$	$5.0 \times 10^{18}$
69 (3F)	6.790(4)	6.7957	6.789(5)[70]	Rb <sup>27+</sup> (Ne)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3s^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6$	0 <sup>+</sup>	$1.8 \times 10^{12}$	$4.2 \times 10^{19}$
70	6.822(4)	6.8349	∅	Rb <sup>28+</sup> (F)	$2s^1 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3s^1$	3/2 <sup>-</sup>	$2s^1 2p^6$	1/2 <sup>+</sup>	$4.0 \times 10^{12}$	$5.4 \times 10^{18}$
71	6.843-6.908	6.9104	∅	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3s^1 3p_{3/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p^6 3p_{3/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$1.7 \times 10^{12}$	$1.0 \times 10^{18}$
		6.8932	∅	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3s^1 3d_{5/2}^1$	7/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{5/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$1.7 \times 10^{12}$	$9.7 \times 10^{17}$
		6.8860	∅	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3s^1 3d_{3/2}^1$	5/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$1.8 \times 10^{12}$	$7.5 \times 10^{17}$
		6.8854	∅	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3s^1 3p_{1/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p^6 3p_{1/2}^1$	1/2 <sup>-</sup>	$1.7 \times 10^{12}$	$6.8 \times 10^{17}$
		6.8562	∅	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3s^2$	1/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3s^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2.5 \times 10^{12}$	$6.2 \times 10^{17}$
		6.8774	∅	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3s^1 3d_{5/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{5/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$1.7 \times 10^{12}$	$4.8 \times 10^{17}$
		6.8740	∅	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3s^1 3d_{5/2}^1$	5/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{5/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$1.1 \times 10^{12}$	$4.7 \times 10^{17}$
		6.8488	∅	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3s^1 3p_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p^6 3p_{3/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$1.2 \times 10^{12}$	$4.3 \times 10^{17}$
		6.8507	∅	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3s^1 3p_{3/2}^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p^6 3p_{3/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$1.8 \times 10^{12}$	$3.3 \times 10^{17}$
		6.8496	∅	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3s^1 3d_{3/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$1.1 \times 10^{12}$	$3.1 \times 10^{17}$
		6.9029	∅	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3s^1 3d_{5/2}^1$	5/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{5/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$5.9 \times 10^{11}$	$2.5 \times 10^{17}$
		6.8606	∅	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3s^1 3d_{3/2}^1$	1/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$1.8 \times 10^{12}$	$2.5 \times 10^{17}$
		6.9188	∅	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3s^1 3p_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p^6 3p_{3/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$6.0 \times 10^{11}$	$2.3 \times 10^{17}$
		6.9034	∅	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3s^1 3d_{3/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$6.7 \times 10^{11}$	$1.9 \times 10^{17}$
72 (3G)	7.022(4)	7.0287	7.024(5)[70]	Rb <sup>27+</sup> (Ne)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3s^1$	1 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6$	0 <sup>+</sup>	$3.9 \times 10^{12}$	$1.1 \times 10^{20}$

TABLEAU 3.7 – Suite

73	7.087-7.167	∅	7.1259	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3s^1 3d_{5/2}^1$	7/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{5/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2.9 \times 10^{12}$	$2.0 \times 10^{18}$
			7.0998	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3s^2$	3/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3s^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2.8 \times 10^{12}$	$1.6 \times 10^{18}$
			7.1240	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3s^1 3p_{1/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p^6 3p_{1/2}^1$	1/2 <sup>-</sup>	$3.2 \times 10^{12}$	$1.6 \times 10^{18}$
			7.0943	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3s^1 3p_{3/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p^6 3p_{3/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$2.2 \times 10^{12}$	$1.5 \times 10^{18}$
			7.1173	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3s^1 3d_{3/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$3.7 \times 10^{12}$	$1.3 \times 10^{18}$
			7.1040	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3s^1 3d_{5/2}^1$	5/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{5/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2.5 \times 10^{12}$	$1.3 \times 10^{18}$
			7.1202	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3s^1 3d_{3/2}^1$	5/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2.3 \times 10^{12}$	$1.2 \times 10^{18}$
			7.1505	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3s^1 3p_{3/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p^6 3p_{3/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$1.6 \times 10^{12}$	$1.1 \times 10^{18}$
			7.1608	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3s^1 3p_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p^6 3p_{3/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$2.1 \times 10^{12}$	$1.0 \times 10^{18}$
			7.1226	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3s^1 3p_{1/2}^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p^6 3p_{1/2}^1$	1/2 <sup>-</sup>	$3.8 \times 10^{12}$	$9.3 \times 10^{17}$
			7.1425	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3s^1 3d_{3/2}^1$	5/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$1.4 \times 10^{12}$	$7.5 \times 10^{17}$
			7.0839	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3s^1 3p_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p^6 3p_{3/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$1.7 \times 10^{12}$	$7.5 \times 10^{17}$
			7.1280	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3s^1 3p_{3/2}^1$	1/2 <sup>+</sup>	$2s^2 2p^6 3p_{3/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$3.2 \times 10^{12}$	$7.5 \times 10^{17}$
			7.0804	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3s^1 3d_{5/2}^1$	3/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{5/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$2.1 \times 10^{12}$	$7.0 \times 10^{17}$
			7.1435	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3s^1 3d_{5/2}^1$	5/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{5/2}^1$	5/2 <sup>+</sup>	$1.3 \times 10^{12}$	$6.8 \times 10^{17}$
			7.1285	Rb <sup>26+</sup> (Na)	$2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3s^1 3d_{3/2}^1$	1/2 <sup>-</sup>	$2s^2 2p^6 3d_{3/2}^1$	3/2 <sup>+</sup>	$3.5 \times 10^{12}$	$6.2 \times 10^{17}$



# Chapitre 4

## Caractérisation de la transition nucléaire $5^- \rightarrow 6^-$ du $^{84}\text{Rb}$

### Introduction

L'effet NEET étant un phénomène résonnant, la connaissance précise des énergies, des natures et multipolarités des transitions atomiques et nucléaire impliquées dans le processus d'excitation est cruciale pour calculer un taux d'excitation fiable. Les précisions sur les énergies des transitions atomiques et nucléaires sont généralement différentes : les codes de physique atomique les plus précis sont capables de déterminer les énergies des transitions atomiques avec une précision inférieure à la dizaine d'eV tandis que la spectroscopie  $\gamma$  est généralement précise à la centaine d'eV près (hors sources particulières ou d'étalonnage). Aussi, pour l'évaluation du taux d'excitation par effet NEET dans le  $^{84}\text{Rb}$ , nous avons entrepris de caractériser la transition nucléaire  $5^- \rightarrow 6^-$  du  $^{84}\text{Rb}$ . Ce chapitre est dédié à la description de cette mesure. Dans une première partie, nous montrerons pourquoi les données disponibles dans la littérature ne sont pas assez précises pour notre étude. Puis, les expériences de mesure de la transition nucléaire auprès de deux accélérateurs différents seront décrites. Enfin, nous discuterons de la nature et de la multipolarité de la transition  $5^- \rightarrow 6^-$ .

### 4.1 Positionnement du problème

#### 4.1.1 Imprécisions sur les données disponibles dans la littérature

Une évaluation des données obtenues lors des différentes expériences de structure nucléaire sur le  $^{84}\text{Rb}$  a été réalisée par Kondev [37] en 2009. La partie de basse énergie d'excitation (inférieure à 700 keV) du schéma de niveaux du  $^{84}\text{Rb}$  publié dans la référence [37] est représentée sur la figure 4.1. Ce schéma de niveaux a été construit à partir de plusieurs résultats expérimentaux. Certaines données (type de transition, moments angulaires des niveaux) peuvent donc être ambiguës. C'est le cas, par exemple, du moment angulaire du niveau à 613,6 keV donné comme étant à égal à  $4^-$  ou  $5^-$ . Notons également, qu'il existe des incohérences entre certains schémas de niveaux publiés, notamment sur le placement de certaines transitions  $\gamma$ . Par exemple, le placement des  $\gamma$  à 1278 et 136 keV est différent dans le schéma de niveaux publié par Schwengner et al. [86] et dans celui proposé par Döring et al. [38]. Pour Döring et al., le  $\gamma$  à 136 keV peuple l'état  $5^-$  situé à une énergie d'excitation de 466,6 keV. Pour Schwengner et al., le  $\gamma$  à 1278 keV est situé à la place du  $\gamma$  à 136 keV et peuple donc l'état  $5^-$ .

Pour plus de lisibilité, les caractéristiques (moments angulaires initial  $I_1^\pi$  et final  $I_2^\pi$ , énergies des niveaux initial  $E_1$  et final  $E_2$ , type de transition, intensité  $\gamma I_\gamma^1$ , coefficient de conversion interne), des transitions du schéma de niveaux de la figure 4.1 sont reportées dans le tableau 4.1. L'existence de la transition  $5^- \rightarrow 6^-$  de 3,4 keV est suggérée par un bilan des intensités  $\gamma$ .

---

1. L'intensité  $\gamma$  d'une transition donnée est le rapport du taux de transition radiatif sur le taux de transition total.

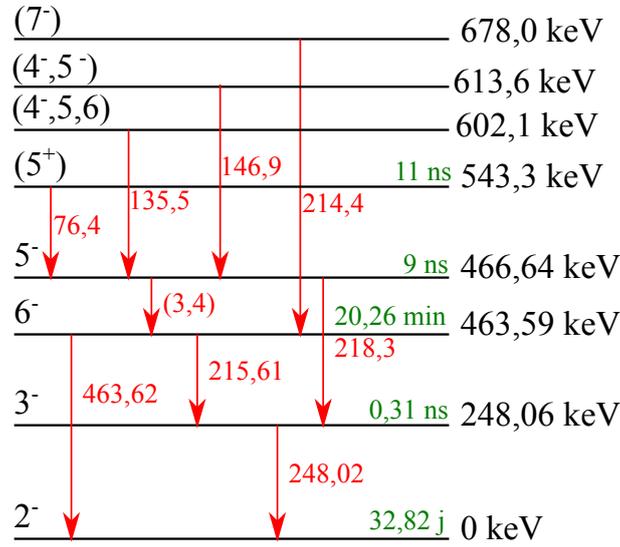


FIGURE 4.1 – Schéma de niveaux partiel du  $^{84}\text{Rb}$ . Données issues de l'évaluation de Kondev [37]. Les données entre parenthèses sont incertaines.

$I_1^\pi$	$E_1$ (keV)	$I_2^\pi$	$E_2$ (keV)	$E_\gamma$ (keV)	Type	$I_\gamma$ (%)	$\alpha_e$
$(7^-)$	677,99 (13)	$6^-$	463,59 (8)	214,4 (1)	(M1)	100	0,0189
$(4^-, 5^-)$	613,6 (4)	$5^-$	466,64 (16)	146,9 (5)			
$(4^-, 5, 6)$	602,1 (6)	$5^-$	466,64 (16)	135,5 (5)		100	
$(5^+)$	543,28 (12)	$5^-$	466,64 (16)	76,4 (2)	(E1)	41 (9)	0,212
$3^-$	248,06 (8)	$2^-$	0	248,02 (10)	$E2 (+M1)$	100	0,0343
$6^-$	463,59 (8)	$3^-$	248,06 (8)	215,61 (10)	(M3 + E4)	95 (3)	1,08
		$2^-$	0	463,62 (10)	E4	100 (3)	0,0391
$5^-$	466,64 (16)	$6^-$	463,59 (8)	(3,4)	(M1)	0,23 (8)	361
		$3^-$	248,06 (8)	218,3 (2)	E2	100	0,0556

TABLEAU 4.1 – Caractéristiques des transitions du schéma de niveaux du  $^{84}\text{Rb}$  présenté sur la figure 4.1. Pour les transitions  $\gamma$  issues d'un même niveau initial d'énergie  $E_1$ , l'intensité  $\gamma$  de la transition la plus intense est normalisée à 100%. Données issues de l'évaluation de Kondev [37].

A partir de l'évaluation présentée dans le tableau 4.1, plusieurs valeurs de l'énergie de la transition  $5^- \rightarrow 6^-$  peuvent être déduites. Elles sont reportées dans le tableau 4.2.

Énergie de la transition $5^- \rightarrow 6^-$ (keV)	Méthode de calcul à partir de l'évaluation [37]
2,69 (0,38)	différence des énergies des $\gamma$
3,05 (0,18)	différence des énergies des niveaux
3,4	valeur suggérée

TABLEAU 4.2 – Énergies de la transition  $5^- \rightarrow 6^-$  du  $^{84}\text{Rb}$  à partir de l'évaluation de Kondev [37].

Nous constatons une incohérence entre les différentes valeurs obtenues puisque l'énergie de la transition  $\gamma$  n'est pas égale à la différence des énergies des deux niveaux qu'elle relie (l'énergie de recul du noyau est négligeable). Le tableau 4.3 reporte l'énergie de la transition  $5^- \rightarrow 6^-$  déduite des différents travaux utilisés pour l'évaluation. Notons que dans certaines références les incertitudes sur les énergies des niveaux ou des  $\gamma$  ne sont pas précisées.

L'énergie de la transition  $5^- \rightarrow 6^-$  n'est donc pas connue précisément. L'effet NEET étant un processus résonnant, le taux d'excitation associé est très sensible à l'énergie de la transition nucléaire. Suivant sa valeur, ce taux fluctuera selon l'existence ou non d'une transition atomique à cette énergie. La figure 4.2 représente un spectre de taux radiatif pondéré (défini au chapitre 2) en fonction des énergies des transitions atomiques calculées avec MCDF. Une température ETL

Énergie de la transition $5^- \rightarrow 6^-$ (keV)	Référence
4	Han et al. [87]
3,31 (31)	Schwengner et al. [86]
3,4	Döring et al. [38]

TABLEAU 4.3 – Énergies de la transition  $5^- \rightarrow 6^-$  du  $^{84}\text{Rb}$  obtenues à partir des références citées par Kondev.

de 270 eV et une densité de  $10^{-2}$  g/cm<sup>3</sup> ont été utilisées pour calculer le spectre représentant le taux radiatif pondéré de l'état de charge  $Q = 33^+$  du  $^{84}\text{Rb}$ . Toutes les transitions  $M1$  des couches  $n = 4,5,6$  vers  $n = 2$  sont représentées. La largeur des raies a été arbitrairement fixée à 2 eV.

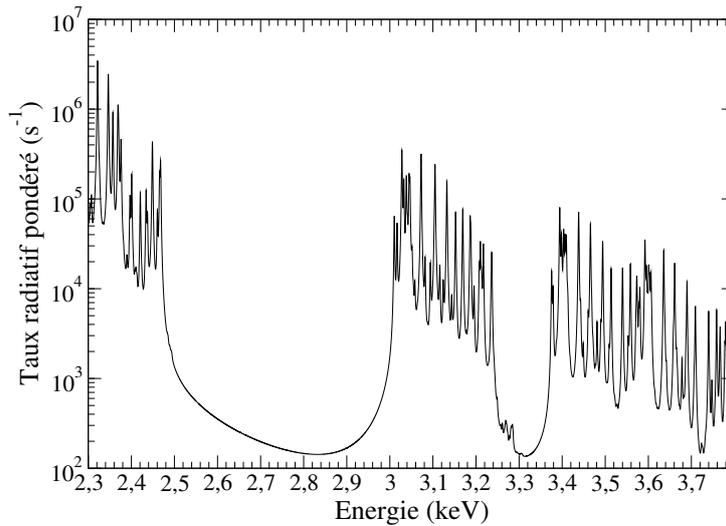


FIGURE 4.2 – Taux radiatif pondéré en fonction des énergies des transitions atomiques. Spectre calculé pour des raies  $M1$  des couches  $n = 4,5,6$  vers  $n = 2$  de l'état de charge  $Q = 33^+$  du  $^{84}\text{Rb}$ .

Ce spectre présente des raies discrètes regroupées dans des structures isolées. On passe ainsi, en quelques centaines d'eV, de zones à fortes densités de raies où le taux NEET peut être important à des zones sans raie où il sera négligeable (entre 2,5 et 3 keV par exemple). Il est donc impératif de connaître le plus précisément possible l'énergie de la transition nucléaire.

#### 4.1.2 Expériences de mesure de la transition $5^- \rightarrow 6^-$

Pour évaluer l'énergie de la transition nucléaire  $5^- \rightarrow 6^-$ , nous avons mesuré l'énergie des  $\gamma$  émis lors des transitions  $5^- \rightarrow 3^-$  et  $6^- \rightarrow 3^-$ . L'énergie de la transition  $5^- \rightarrow 6^-$  est alors calculée en faisant la différence des énergies de ces transitions.

L'état isomérique  $6^-$ , ayant une demi-vie de 20,26 min, il est possible de mesurer sa décroissance hors faisceau, après sa production. Ceci permet de s'affranchir de la désexcitation des états de plus hautes énergies ayant des durées de vie plus courtes et de limiter ainsi le bruit de fond sur le spectre mesuré. Une telle mesure a été effectuée sur l'accélérateur d'électrons ELSA du CEA/DAM/DIF. Celle-ci nous a également permis de tester et de valider notre procédure d'acquisition de données et notre méthode d'analyse.

A l'inverse, la durée de vie de l'état  $5^-$  étant de 9 ns, il est nécessaire de produire cet état et de mesurer sa décroissance simultanément. Une telle mesure requiert un dispositif de spectroscopie  $\gamma$  "prompte" associé à un accélérateur. Nous avons donc utilisé le multidétecteur ORGAM installé sur une aire expérimentale de l'accélérateur TANDEM de l'IPN d'Orsay.

## 4.2 Mesure hors faisceau de la transition $6^- \rightarrow 3^-$

### 4.2.1 Dispositif expérimental

#### Production du $^{84m}\text{Rb}$ : l'accélérateur ELSA du CEA/DAM/DIF

ELSA est un accélérateur linéaire qui peut accélérer des faisceaux d'électrons jusqu'à une énergie de 18 MeV à l'aide de quatre cavités radiofréquences (une à 144 MHz et trois à 433 MHz). Les électrons sont produits grâce à un laser ( $\lambda = 532$  nm) par effet photoélectrique sur une cathode de  $\text{Cs}_3\text{Sb}$  [88]. Dans notre cas, le faisceau d'électrons était converti en un faisceau photons par Bremsstrahlung dans un convertisseur en tantale afin de produire le  $^{84m}\text{Rb}$  par réaction  $^{85}\text{Rb}(\gamma, n)^{84m}\text{Rb}$ . La section efficace de cette réaction, mesurée sur ELSA par le groupe ENL [89], est présentée sur la figure 4.3.

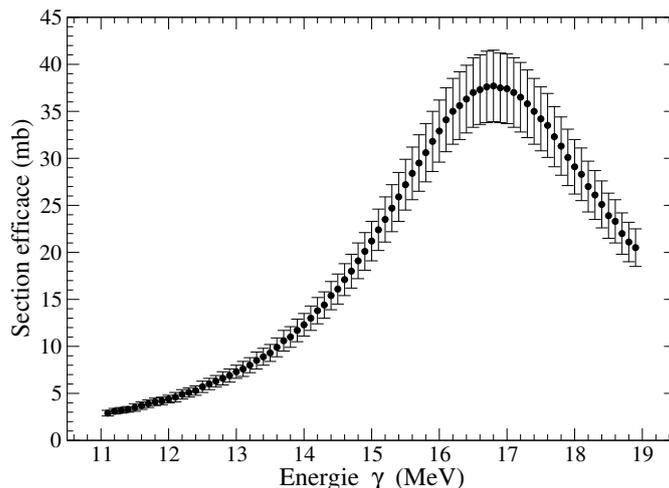


FIGURE 4.3 – Section efficace de production du  $^{84m}\text{Rb}$  par réaction  $^{85}\text{Rb}(\gamma, n)^{84m}\text{Rb}$ . Données issues de [89].

L'énergie du faisceau d'électrons utilisée pour la production du  $^{84m}\text{Rb}$  était de 18 MeV. Cette énergie permettait d'obtenir un nombre d'isomères suffisant à l'issue de 20 minutes d'irradiation. Les cibles utilisées étaient des disques de chlorure de rubidium ( $\text{RbCl}$ ) de 2,4 cm de diamètre et de 3 mm d'épaisseur.

#### Mesure du spectre de décroissance du $^{84m}\text{Rb}$ : détecteur germanium et acquisition Ortec DSPEC Plus

Après chaque irradiation, la cible de  $\text{RbCl}$  était placée à environ 20 cm d'un détecteur germanium pour mesurer le spectre de décroissance du  $^{84m}\text{Rb}$ . Il s'agissait d'un germanium ultrapur (HPGE) coaxial ayant une efficacité commerciale<sup>2</sup> de 40%. La résolution du détecteur Ge utilisé, mesurée à l'aide d'une source d' $^{152}\text{Eu}$ , était de 0,5% à 244,7 keV. L'ensemble germanium-cible de  $\text{RbCl}$  était placé dans un château de plomb pour le protéger de la radioactivité ambiante.

La chaîne d'acquisition équipant le détecteur Ge était le système DSPEC Plus de la marque Ortec qui intègre la haute tension, l'amplificateur et le convertisseur analogique-numérique (ADC<sup>3</sup>). Il permet une régulation des hautes tensions ainsi que de l'amplificateur afin de limiter les variations du gain d'amplification au cours du temps. Il a été montré que les résolutions des pics à 122 keV et 1332 keV des sources de  $^{57}\text{Co}$  et  $^{60}\text{Co}$  respectivement sont identiques si elles sont déterminées par des moyennes effectuées sur 40 spectres de 30 min d'acquisition chacun ou par une mesure réalisée sur le spectre total (durée d'acquisition totale de 20h) [90]. Ce système présente également une très faible non-linéarité intégrale (moins de 0,006%) qui est la déviation maximale d'un point expérimental à la droite d'étalonnage.

2. L'efficacité commerciale désigne l'efficacité pour le pic de pleine énergie à 1332,5 MeV d'une source de  $^{60}\text{Co}$  placée à 25 cm du détecteur. Cette efficacité est normalisée par rapport à celle d'un détecteur  $\text{NaI}$  cylindrique de  $7,62 \times 7,62$  cm.

3. ADC : *Analog to Digital Converter*

L'ADC du système DSPEC Plus code les signaux sur une gamme de 16384 canaux. Le gain de l'amplificateur était choisi de manière à obtenir une gamme d'énergie allant de 0 à 530 keV sur les 16384 canaux du spectre. Cette gamme d'énergie permet de mesurer l'énergie du  $\gamma$  à 463,6 keV. En faisant la différence de cette énergie et de celle du  $\gamma$  à 248,0 keV, nous pouvons ainsi vérifier l'énergie du  $\gamma$  à 215,5 keV. De plus, le codage de cette gamme d'énergie sur 16384 canaux permet d'obtenir un échantillonnage suffisant afin de réaliser des ajustements précis des pics de pleine énergie.

## Sources d'étalonnage

Afin de déterminer la courbe d'étalonnage de chaque spectre  $\gamma$ , nous avons employé des sources radioactives dont les énergies des  $\gamma$  émis sont dans la gamme d'énergie d'intérêt ( $< 500$  keV) et connues avec une très bonne précision ( $< 1$  eV pour la plupart). Dans notre cas, nous avons utilisé les sources de  $^{152}\text{Eu}$  et de  $^{133}\text{Ba}$ . Les énergies et intensités des transitions  $\gamma$  utilisées sont reportées dans l'annexe D.

Afin de contrôler et corriger une éventuelle variation de l'étalonnage au cours du temps, la ou les sources étalons ont été mises à compter devant le détecteur Ge en même temps que la cible de RbCl activée.

### 4.2.2 Description de la méthode d'analyse

#### Programme utilisé : gf3 de la suite RadWare

Pour déterminer les énergies des  $\gamma$  émis lors de la désexcitation du  $^{84m}\text{Rb}$ , des ajustements des pics de pleine énergie correspondant à ces  $\gamma$  ont été réalisés avec le programme gf3 de la suite RadWare réalisée par D. C. Radford<sup>4</sup>. Cette suite de programmes est couramment utilisée en spectroscopie  $\gamma$  pour l'analyse de spectres.

gf3 réalise l'ajustement d'une partie du spectre  $\gamma$  avec un ou plusieurs pics sur un fond modélisé par un polynôme d'ordre 2. Chaque pic est modélisé par trois composantes :

- une gaussienne principale
- une gaussienne "inclinée" permettant de modéliser une collection incomplète des charges à cause de défauts dans le cristal de Ge. Ces défauts peuvent être dus à des impuretés ou causés par des dommages si le détecteur a été exposé à un flux de neutrons.
- une fonction échelon permettant d'augmenter le fond Compton dans la partie de basse énergie du pic.

Les composantes utilisées pour l'ajustement d'un pic sont représentées sur la figure 4.4.

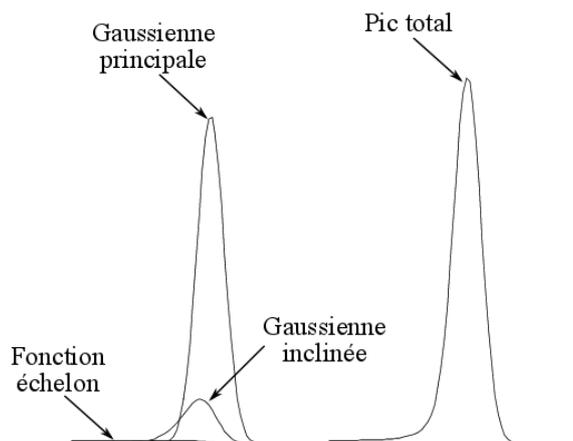


FIGURE 4.4 – Représentation des trois composantes utilisées dans gf3 pour l'ajustement d'un pic. Figure adaptée de [91].

4. RadWare est téléchargeable à l'adresse suivante : <http://radware.phy.ornl.gov/>

A chaque ajustement, gf3 détermine les centroïdes et aires des pics  $\gamma$  ainsi que les incertitudes associées. Celles-ci tiennent compte des incertitudes sur les paramètres d'ajustement et de leurs covariances.

### Étalonnage des spectres

Afin de contrôler l'évolution de l'expérience au cours du temps, celle-ci est découpée en différentes séquences d'acquisition, appelés "runs". A chaque run, un spectre en énergie est obtenu et analysé séparément.

Pour chaque spectre obtenu lors d'un run, nous déterminons la courbe d'étalonnage associée par un ajustement linéaire à partir des pics  $\gamma$  des sources étalons :

$$E_i^{etal} = a C_i^{etal} + b \quad (4.1)$$

où :

- $E_i^{etal}$  est l'énergie (en keV) d'un pic  $i$  d'étalonnage
- $C_i^{etal}$  le centroïde (en canal) d'un pic  $i$  déterminé avec gf3
- $a$  et  $b$  sont les paramètres déterminés par l'ajustement. Celui-ci a été effectué à l'aide du logiciel Root [92] et prend en compte les incertitudes sur les centroïdes et les énergies des  $\gamma$  des sources étalons.

Le choix d'un ajustement linéaire sera discuté lors de l'analyse des spectres obtenus avec les sources radioactives.

### Détermination des énergies des pics d'intérêt

Après avoir déterminé les paramètres  $a$  et  $b$ , la relation (4.1) est utilisée pour calculer les énergies  $E_i$  des pics  $\gamma$  d'intérêt. L'incertitude statistique (à  $1\sigma$ )  $\sigma(E_i)$  associée est calculée par :

$$\sigma(E_i) = \sqrt{C_i^2 \sigma(a)^2 + \sigma(b)^2 + a^2 \sigma(C_i)^2 + 2 \text{cov}(a,b) C_i} \quad (4.2)$$

où :

- $\sigma(a)$  et  $\sigma(b)$  sont les incertitudes sur les paramètres  $a$  et  $b$  respectivement. Elles sont déterminées lors de l'ajustement de la droite d'étalonnage sous Root.
- $\sigma(C_i)$  est l'incertitude sur le centroïde du pic (exprimée en canal). Elle est déterminée par gf3.
- $\text{cov}(a,b)$  est la covariance entre les paramètres  $a$  et  $b$ . Elle est calculée par Root.

Pour un pic d'intérêt, le calcul de l'énergie  $E_i$  et de son incertitude  $\sigma(E_i)$  est réalisé pour un nombre  $n_s$  de spectres mesurés puis une moyenne pondérée  $\bar{E}$  est calculée. Celle-ci est définie par :

$$\bar{E} = \frac{\sum_{i=1}^{n_s} \frac{E_i}{\sigma(E_i)^2}}{\sum_{i=1}^{n_s} \frac{1}{\sigma(E_i)^2}} \quad (4.3)$$

L'incertitude sur la moyenne  $\bar{E}$  est donnée par :

$$\sigma(\bar{E}) = \max(\sigma_{int}(\bar{E}), \sigma_{ext}(\bar{E})) \quad (4.4)$$

où  $\sigma_{int}(\bar{E})$  et  $\sigma_{ext}(\bar{E})$  sont respectivement les incertitudes interne et externe [93]. Elles sont définies par :

$$\sigma_{int}(\bar{E}) = \sqrt{\frac{1}{\sum_{i=1}^{n_s} \frac{1}{\sigma(E_i)^2}}} \quad (4.5)$$

$$\sigma_{ext}(\bar{E}) = \frac{\sum_{i=1}^{n_s} \frac{(E_i - \bar{E})^2}{\sigma(E_i)^2}}{\sum_{i=1}^{n_s} \frac{1}{\sigma(E_i)^2}} \quad (4.6)$$

L'incertitude interne ne tient compte que des incertitudes individuelles des différentes mesures tandis que l'incertitude externe prend en compte la dispersion des mesures autour de la valeur moyenne.

## Validation de la méthode

Afin de valider notre méthode d'analyse, nous l'avons testée à l'aide des sources radioactives de  $^{152}\text{Eu}$  et de  $^{133}\text{Ba}$ . Pour cela, les deux sources ont été mises à compter simultanément devant le détecteur Ge. L'étalonnage est réalisé avec les pics  $\gamma$  de  $^{152}\text{Eu}$  afin de déterminer les énergies des pics du  $^{133}\text{Ba}$ .

Un exemple de spectre en énergie obtenu après une acquisition avec les sources de  $^{152}\text{Eu}$  et de  $^{133}\text{Ba}$  est donné sur la figure 4.5.

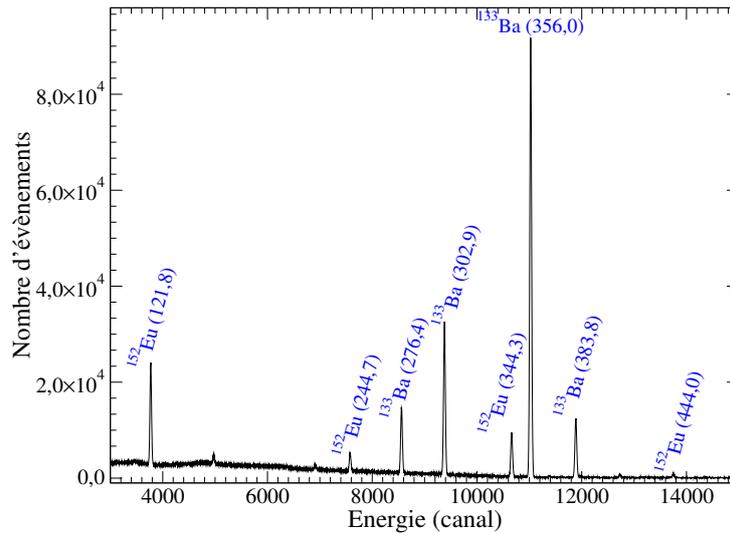


FIGURE 4.5 – Exemple d'un spectre  $\gamma$  obtenu après une acquisition avec les sources de  $^{152}\text{Eu}$  et de  $^{133}\text{Ba}$ . Les énergies des pics d'intérêt pour notre étude sont indiquées.

Pour les ajustements de ces spectres, il n'a pas été nécessaire d'introduire une gaussienne "inclinée".

A partir des centroïdes de  $^{152}\text{Eu}$ , la droite d'étalonnage est obtenue par ajustement, ce qui nous permet de déterminer les énergies des pics  $\gamma$  du  $^{133}\text{Ba}$ . Dans l'exemple du spectre de la figure 4.5, l'ajustement linéaire est présenté sur la figure 4.6.

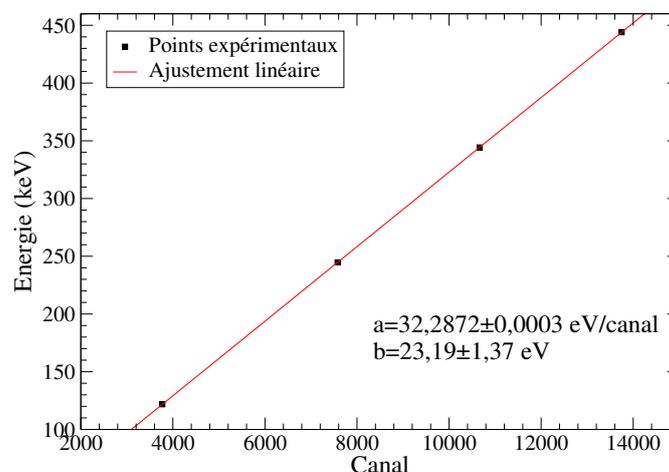


FIGURE 4.6 – Étalonnage linéaire du spectre de la figure 4.5. Les barres d'erreur sont plus petites que la dimension des symboles.

Nous remarquons un bon accord entre les points expérimentaux et l'ajustement linéaire.

Cette procédure d'étalonnage est reproduite pour les treize spectres de  $^{133}\text{Ba}$  et  $^{152}\text{Eu}$  afin d'obtenir les valeurs moyennes et les incertitudes statistiques (à  $1\sigma$ ) associées à partir des équations (4.3) et (4.4) respectivement. Celles-ci sont reportées dans le tableau 4.4 en comparaison avec les valeurs publiées dans la référence [94]. La différence entre nos résultats et ceux de la référence [94] est également indiquée.

Ce travail (keV)	Khazov et al. [94] (keV)	Différence (ce travail - ref [94]) (eV)
276,3934 (4)	276,3989 (12)	-5,5 (13)
302,8522 (4)	302,8508 (5)	1,4 (7)
356,0142 (5)	356,0129 (7)	1,3 (9)
383,8495 (6)	383,8485 (12)	1,0 (14)

TABLEAU 4.4 – Valeurs moyennes et incertitudes des énergies des pics  $\gamma$  du  $^{133}\text{Ba}$  obtenues à partir des treize spectres individuels.

Afin de quantifier l'écart entre les valeurs de référence et celles déterminées par l'étalonnage, nous calculons, l'écart quadratique moyen  $\bar{\sigma}$  défini par :

$$\bar{\sigma} = \sqrt{\frac{1}{n_{pic}} \sum_{i=1}^{n_{etal}} (E_{ref}^i - E_{etal}^i)^2} \quad (4.7)$$

où :

- $n_{pic}$  est le nombre de pics utilisés ( $n_{pic} = 4$ )
- $E_{ref}^i$  est l'énergie de référence (issue des tables, Khazov et al. [94] dans le cas du  $^{133}\text{Ba}$ ) du  $i^{\text{ème}}$  pic
- $E_{etal}^i$  est l'énergie du  $i^{\text{ème}}$  pic calculée avec la courbe d'étalonnage

L'écart quadratique moyen entre les énergies  $\gamma$  obtenues et celles de la référence [94] est de :  $\bar{\sigma}_{lin} = 2,98$  eV. Notre méthode permet donc d'obtenir des énergies avec une précision moyenne inférieure à 5 eV. Compte tenu des incertitudes sur les énergies des  $\gamma$ , les arrondis se feront à l'eV près dans la suite de ce chapitre.

Nous avons également testé l'utilisation d'un étalonnage quadratique pour déterminer les énergies des  $\gamma$  du  $^{133}\text{Ba}$ . Dans ce cas, l'écart quadratique moyen est  $\bar{\sigma}_{quad} = 3,13$  eV. Les écarts quadratiques moyens obtenus avec les deux types d'étalonnage sont similaires et il n'est donc pas nécessaire d'avoir recours à un étalonnage quadratique.

### 4.2.3 Résultats pour le $^{84m}\text{Rb}$

Pour déterminer les énergies des  $\gamma$  émis lors de la décroissance du  $^{84m}\text{Rb}$ , l'échantillon de  $^{84}\text{Rb}$  activé a été mis à compter avec une source d' $^{152}\text{Eu}$  seule ou avec les sources d' $^{152}\text{Eu}$  et de  $^{133}\text{Ba}$ .

Un exemple de spectre mesuré avec l'échantillon de  $^{84}\text{Rb}$  activé et la source d' $^{152}\text{Eu}$ , après étalonnage, est représenté sur la figure 4.7. Ce spectre présente des pics  $\gamma$  facilement identifiables et ajustables avec gf3. Notons la présence du pic à 146,4 keV issu de la décroissance du  $^{34m}\text{Cl}$  produit par réaction  $^{35}\text{Cl}(\gamma, n)^{34m}\text{Cl}$  à partir du  $^{35}\text{Cl}$  composant la cible de RbCl.

Nous appliquons la méthode d'analyse décrite au paragraphe 4.2.2 afin de déterminer les énergies des  $\gamma$  de la décroissance du  $^{84m}\text{Rb}$ . La figure 4.8 présente des exemples d'ajustements des pics  $\gamma$  du  $^{84m}\text{Rb}$ . Nous constatons que les pics expérimentaux et les ajustements sont en très bon accord.

### Compilation des résultats

A l'issue de l'étalonnage de cinq spectres  $^{84m}\text{Rb} + ^{152}\text{Eu}$  et de trois spectres  $^{84m}\text{Rb} + ^{152}\text{Eu} + ^{133}\text{Ba}$ , nous obtenons les valeurs moyennes et incertitudes (à  $1\sigma$ ) des différentes transitions données dans le tableau 4.5. En comparaison les résultats de la référence [37] sont indiqués.

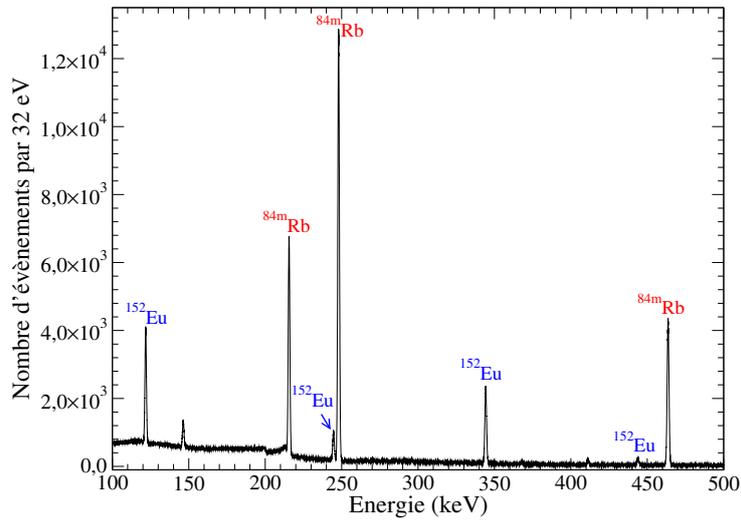


FIGURE 4.7 – Exemple d’un spectre  $\gamma$  obtenu après une acquisition avec l’échantillon de RbCl activé et la source de  $^{152}\text{Eu}$ . Les pics étalons de  $^{152}\text{Eu}$  sont représentés en bleu et ceux de  $^{84m}\text{Rb}$  en rouge.

Transition	Ce travail (keV)	Kondev et al. (keV)
$6^- \rightarrow 3^-$	215,601 (1)	215,61 (10)
$3^- \rightarrow 2^-$	248,013 (2)	248,02 (10)
$6^- \rightarrow 2^-$	463,618 (3)	463,62 (10)

TABLEAU 4.5 – Valeurs moyennes et incertitudes des énergies des  $\gamma$  de désexcitation du  $^{84m}\text{Rb}$ .

Nous constatons que nos résultats sont compatibles avec ceux de F. G. Kondev [37], mais avec des incertitudes plus faibles. La dispersion des résultats run à run par rapport à la moyenne est illustrée sur la figure 4.9 pour le cas du  $\gamma$  de 215,6 keV du  $^{84m}\text{Rb}$ .

Nous constatons que les mesures individuelles sont peu dispersées autour de la valeur moyenne. Le calcul de l’énergie du 215,6 keV en effectuant la différence des énergies des  $\gamma$  à 463,6 et 248,0 keV est compatible, dans les barres d’erreur, avec le résultat de la mesure directe puisque il donne : 215,605 (3) keV. Ceci conforte ainsi le résultat de la mesure directe. La mesure par différence permettant de soustraire une éventuelle erreur systématique, nous pouvons conclure que notre mesure directe ne présente pas une telle erreur. L’ensemble de ces résultats valide notre méthode d’acquisition et d’analyse des spectres  $\gamma$ . Cette même méthode sera utilisée pour la mesure de la transition  $5^- \rightarrow 3^-$ .

### 4.3 Mesure sous faisceau de la transition $5^- \rightarrow 3^-$

La demi-vie de l’état  $5^-$  à 466,6 keV étant de 9 ns, sa désexcitation ne pouvait pas être mesurée lors de l’expérience auprès de l’accélérateur ELSA. En effet, cette mesure nécessite de produire cet état et de mesurer sa désexcitation simultanément. Cette expérience de spectroscopie  $\gamma$  prompte a été réalisée auprès de l’accélérateur TANDEM de l’IPN d’Orsay.

#### 4.3.1 Dispositif expérimental

##### Production du $^{84}\text{Rb}$ : l’accélérateur TANDEM de l’IPN d’Orsay

Le TANDEM d’Orsay est un accélérateur de type Van de Graaff dans lequel une haute tension est créée au centre d’une enceinte sous vide, appelée tank, par un apport de charge. Ces charges sont transportées au centre du tank à l’aide d’une chaîne composée d’une succession de barreaux conducteurs et isolants. La tension maximale atteignable est de 15 MV. Des ions négatifs sont injectés à une extrémité du tank et sont accélérés jusqu’à sa partie centrale grâce à la force électrostatique. Les ions perdent ensuite une grande partie de leurs électrons au passage de

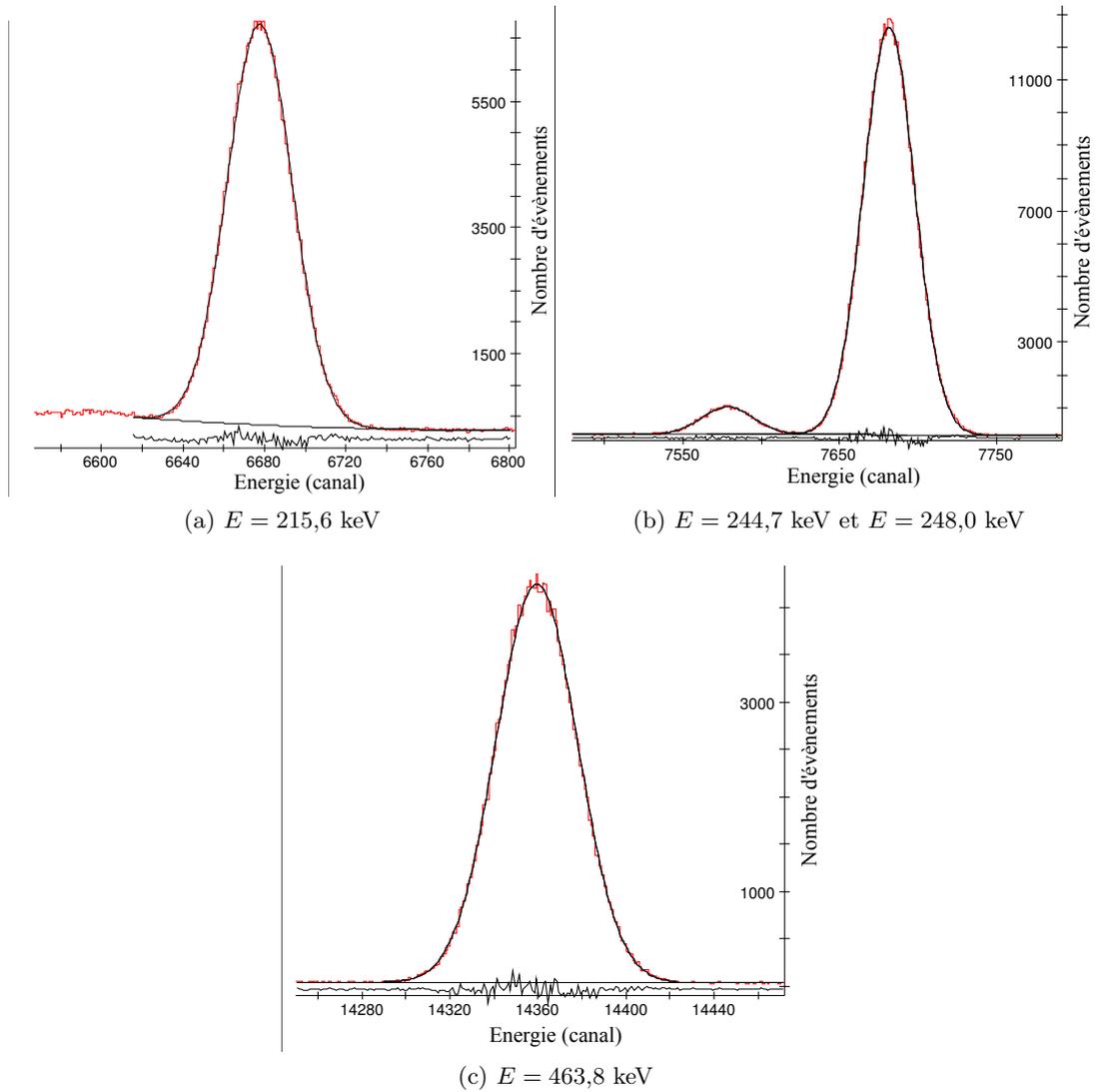


FIGURE 4.8 – Exemples d’ajustements des pics du  $^{84m}\text{Rb}$ . Les données expérimentales et les ajustements sont respectivement présentés en rouge et noir. La différence entre ces deux quantités est tracée en dessous de chaque pic.

l’éplucheur (ou *stripper*) qui est constitué d’une mince feuille de carbone ou d’une couche de gaz. Les ions devenus positifs sont alors éjectés du tank. Un schéma de fonctionnement d’un accélérateur tandem est donné sur la figure 4.10. Cet accélérateur peut produire une grande diversité de faisceaux stables : du faisceau de protons à celui d’or ainsi que des faisceaux d’agrégats.

Pour former le  $^{84}\text{Rb}$ , nous avons choisi d’utiliser une cible de  $^{76}\text{Ge}$ . Pour produire le  $^{84}\text{Rb}$ , à partir de cette cible et avec les faisceaux disponibles au Tandem d’Orsay, deux réactions de fusion-évaporation peuvent être utilisées :  $^{76}\text{Ge} (^{11}\text{B}, 3n)^{84}\text{Rb}$  et  $^{76}\text{Ge} (^{12}\text{C}, p + 3n)^{84}\text{Rb}$ . Les sections efficaces de ces réactions, calculées avec le code PACE4 [96], sont présentées sur la figure 4.11. Les sections efficaces des autres éléments formés lors de la désexcitation du noyau composé sont également indiquées.

D’après la figure 4.11, la section efficace de production du  $^{84}\text{Rb}$  par réaction  $^{76}\text{Ge} (^{11}\text{B}, 3n)^{84}\text{Rb}$  est maximale pour une énergie de faisceau comprise entre 32 et 35 MeV et vaut  $\sim 450 \text{ mb}$  ( $1 \text{ b} = 10^{-24} \text{ cm}^2$ ). Elle est également dominante dans cette gamme d’énergie par rapport aux autres sections efficaces.

Dans le cas d’un faisceau incident de  $^{12}\text{C}$ , la section efficace de production du  $^{84}\text{Rb}$  est maximale entre 58 et 62 MeV et vaut  $\sim 350 \text{ mb}$  ce qui est plus faible qu’avec la réaction  $^{76}\text{Ge} (^{11}\text{B}, 3n)^{84}\text{Rb}$ . De plus, le  $^{84}\text{Rb}$  n’est pas l’élément présentant la section efficace majoritaire. Aussi, le bruit de fond dû à la désexcitation des autres éléments produits sera plus important.

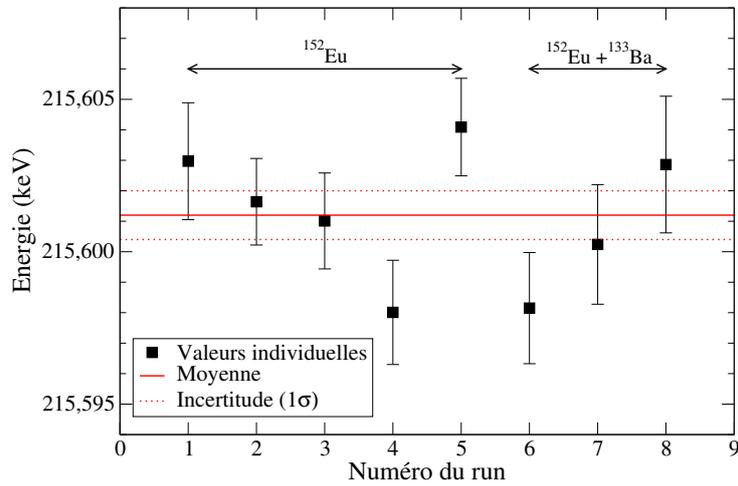


FIGURE 4.9 – Évolution de l'énergie mesurée du  $\gamma$  à 215,6 keV en fonction du numéro des spectres. La valeur moyenne et les barres d'incertitudes à  $1\sigma$  sont indiquées. Les sources utilisées pour l'étalonnage des spectres sont indiquées.

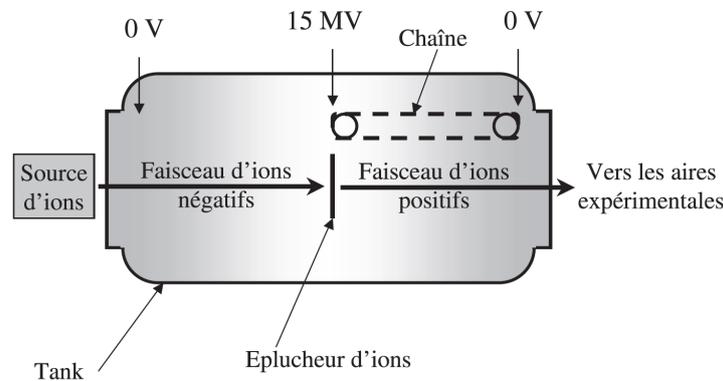


FIGURE 4.10 – Schéma d'un accélérateur Tandem. Figure issue de [95].

Par conséquent, nous avons choisi de produire le  $^{84}\text{Rb}$  par réaction  $^{76}\text{Ge} (^{11}\text{B}, 3n) ^{84}\text{Rb}$ . L'énergie du faisceau de  $\text{B}^{4+}$  était de 30 MeV et l'intensité de l'ordre de 40 nA.

Dans le cadre de notre expérience, il est important que la désexcitation des noyaux de  $^{84}\text{Rb}$  ait lieu au repos afin de s'affranchir de l'élargissement Doppler des raies  $\gamma$  émises par ces noyaux. Pour cela, la couche de  $1 \text{ mg/cm}^2$  de  $^{76}\text{Ge}$  est déposée sur une couche d'or de  $1,97 \mu\text{m}$  d'épaisseur (ou  $3,8 \text{ mg/cm}^2$ ) qui permet d'arrêter les noyaux de  $^{84}\text{Rb}$  produits.

### Le multidétecteur germanium ORGAM

Le multidétecteur ORGAM (ORsay GAMma array) est constitué d'une association de plusieurs détecteurs Ge afin de maximiser l'angle solide de détection et par conséquent l'efficacité totale de détection. La structure mécanique d'ORGAM est sphérique avec un centre qui coïncide avec la position de la cible, et comporte 45 alvéoles pouvant accueillir autant de détecteurs Ge. Chaque détecteur Ge, refroidi à l'azote liquide, est équipé d'une enceinte anti-Compton constituée de 10 cristaux scintillants de BGO ( $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$ ) disposés autour du cristal de Ge et couplés chacun à un photomultiplicateur. Une photo du multidétecteur ORGAM dans la configuration utilisée lors de notre expérience est présentée sur la figure 4.12.

Les enceintes anti-Compton permettent de limiter les dépôts partiels d'énergie dans les détecteurs Ge par effet Compton. En effet, lors d'une diffusion Compton dans un cristal de Ge, le photon diffusé peut sortir de ce cristal. Le photon incident ne dépose pas alors toute son énergie dans le cristal. Si le photon sortant du cristal de Ge est détecté par l'un des BGO associés, il est alors possible de rejeter l'évènement et de diminuer ainsi le fond Compton dans les spectres obtenus avec les détecteurs Ge. Afin de quantifier l'efficacité d'une enceinte anti-Compton, on

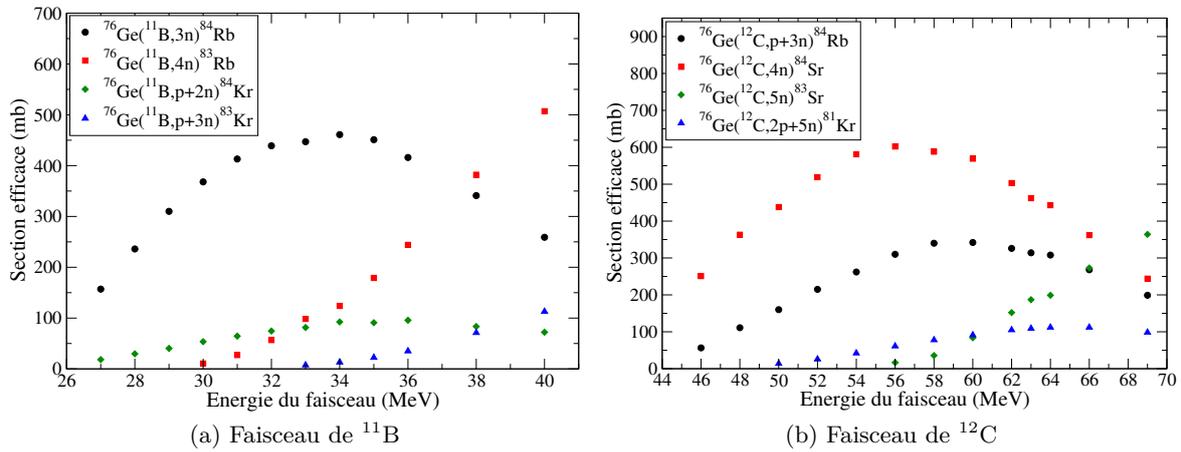


FIGURE 4.11 – Sections efficaces de production du  $^{84}\text{Rb}$  formé par réaction de fusion-évaporation en fonction de l'énergie du faisceau incident. Les sections efficaces des autres éléments majoritairement peuplés dans les réactions sont également indiquées. Calculs réalisés avec le code PACE4 [96].

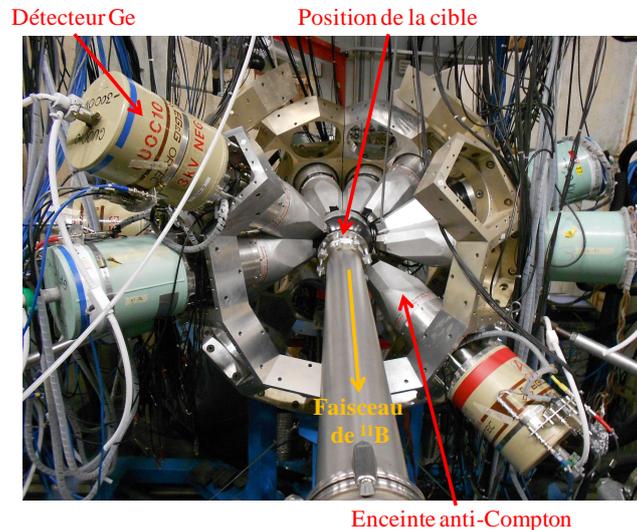


FIGURE 4.12 – Photo du multidétecteur ORGAM dans la configuration utilisée lors de notre expérience.

définit le taux de réjection  $T_{rej}$  par :

$$T_{rej} = \frac{(P/C)_{\text{avec réjection}}}{(P/C)_{\text{sans réjection}}} \quad (4.8)$$

où  $(P/C)_{\text{avec réjection}}$  et  $(P/C)_{\text{sans réjection}}$  désignent respectivement les rapports pic/Compton avec et sans système de réjection Compton.

Le rapport pic/Compton ( $P/C$ ) est défini, pour une source de  $^{60}\text{Co}$ , comme le rapport entre la hauteur du pic de pleine énergie à 1332,5 keV et la hauteur moyenne du fond Compton entre 1040 et 1096 keV [93]. Pour illustrer l'effet de la réjection Compton, un exemple de spectre du  $^{60}\text{Co}$  est tracé sur la figure 4.13 avec et sans réjection. Le spectre des événements rejetés est également représenté. Le taux de réjection calculé à partir de l'équation (4.8), pour le spectre de la figure 4.13 est :  $T_{rej} = 2,3$ . D'après la figure 4.13a, la diminution du nombre d'évènements dans le plateau Compton grâce à l'enceinte anti-Compton est clairement visible. De plus, le nombre d'évènements de pleine énergie rejetés par l'enceinte anti-Compton est faible.

Les signaux analogiques issus des détecteurs Ge et BGO sont amplifiés et mis en forme avant d'être envoyés vers les cartes d'acquisition COMET (COdage et Marquage En Temps). L'acquisition COMET est un système d'acquisition sans déclenchement global ("Triggerless") dans

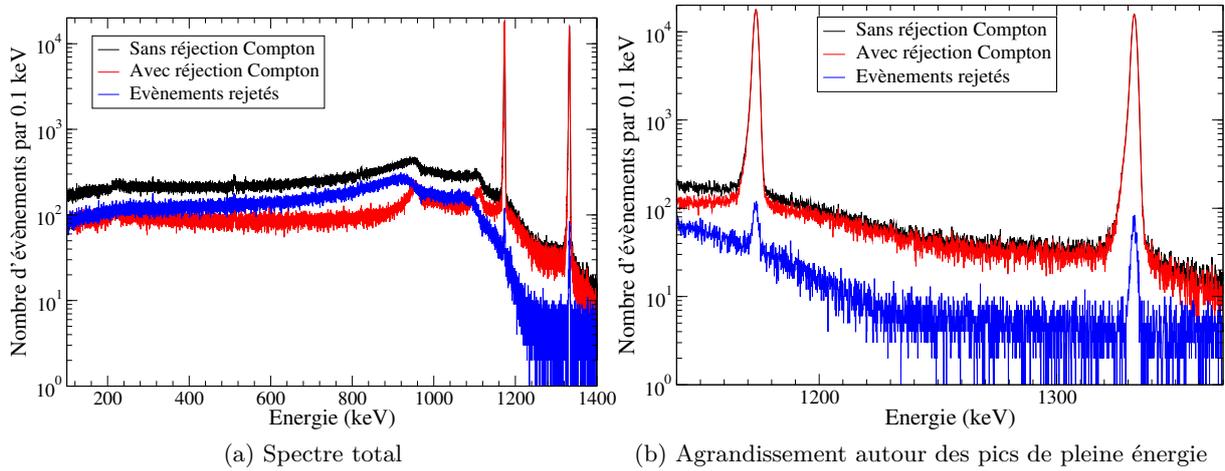


FIGURE 4.13 – Exemple d’un spectre en énergie du  $^{60}\text{Co}$  mesuré avec un Ge doté d’une enceinte anti-Compton. Les spectres avec et sans réjection Compton sont présentés. Le spectre des évènements rejetés est également représenté.

lequel les amplitudes de tous les signaux issus des détecteurs Ge d’ORGAM sont codées. Chaque des voies Ge de la carte COMET est considérée comme indépendante et le déclenchement de l’acquisition est réalisé dès qu’une de ces voies est touchée. A chaque évènement, les données suivantes sont codées :

- énergie : il s’agit du signal représentatif de l’énergie déposée dans le cristal de Ge. Il est codé sur 15 bits.
- temps : il s’agit de l’instant de déclenchement de l’acquisition mesuré à partir de la mise en marche de l’acquisition COMET. Le signal temps est codé sur 47 bits avec une précision de 400 ps.
- marquage : il s’agit d’un signal logique qui indique si un évènement a été détecté dans l’enceinte anti-Compton associé au Ge ayant déclenché l’acquisition.

Avec une acquisition "Triggerless", il est nécessaire de reconstruire les évènements Ge en coïncidence *a posteriori*. Pour cela, il est important que les évènements soient classés dans l’ordre chronologique de leurs arrivées. Ce classement est assuré par un programme de relecture des données brutes (non classées par ordre chronologique) développé par M. Lebois [97] et M. Ferraton [98]. Les résultats de ce programme sont enregistrés sous format Root (matrice à trois dimensions).

Dans le cadre de notre expérience, 12 détecteurs Ge étaient à notre disposition. Les gains des amplificateurs étaient ajustés pour obtenir une gamme de 0 à  $\sim 2$  MeV. Ces détecteurs sont désignés par le terme "Ge bas gain" dans la suite de ce travail. Afin d’obtenir une résolution suffisante et un bon échantillonnage pour les ajustements des pics de pleine énergie pour des énergies inférieures à 500 keV, les sorties des cinq Ge ayant la meilleure résolution ont été dédoublées puis envoyées sur les voies d’un amplificateur réglées avec un gain plus élevé. Du point de vue de l’acquisition, ces voies Ge dédoublées sont considérées comme des détecteurs indépendants avec un label propre. Les sorties de ces cinq Ge sont désignées par le terme "Ge haut gain". Le tableau 4.6 récapitule les différents détecteurs utilisés ainsi que les voies de l’acquisition COMET associées.

## Le système d’acquisition Ortec DSPEC Plus

Lors de cette expérience, nous avons également utilisé le système d’acquisition Ortec DSPEC Plus, éprouvé lors de l’expérience auprès d’ELSA, afin d’obtenir des spectres haute résolution et avec un gain d’amplification stable dans le temps. Ce système d’acquisition a été connecté, pour quelques séquences d’acquisition, au détecteur Ge GFOC24 d’ORGAM.

Nom du détecteur Ge	Type de gain	Nom de la voie COMET
GUOC10	bas gain	<i>g1</i>
GFIC40	bas gain	<i>g2</i>
GUOC15	bas gain	<i>g3</i>
	haut gain	<i>g17</i>
GFIC35	bas gain	<i>g4</i>
GFIC48	bas gain	<i>g5</i>
GFOC24	bas gain	<i>g7</i>
	haut gain	<i>g21</i>
GFIC41	bas gain	<i>g8</i>
GUOC04	bas gain	<i>g9</i>
GFOC23	bas gain	<i>g10</i>
	haut gain	<i>g29</i>
GUOC29	bas gain	<i>g13</i>
	haut gain	<i>g18</i>
GFIC47	bas gain	<i>g14</i>
GFIC37	bas gain	<i>g15</i>
	haut gain	<i>g25</i>

TABLEAU 4.6 – Liste des détecteurs Ge utilisés et des voies COMET associées.

### 4.3.2 Utilisation des différents types de spectres obtenus lors de l'expérience

Dans cette expérience, nous avons construit différents types de spectres  $\gamma$  à partir des données de l'acquisition ORGAM et Ortec DSPEC Plus. L'utilisation du multidétecteur ORGAM permet d'effectuer une analyse des coïncidences  $\gamma - \gamma$  entre les différents détecteurs Ge. Cette technique d'analyse permet d'isoler certaines cascades  $\gamma$  et de reconstruire le schéma de niveaux du noyau d'intérêt. Dans un premier temps, nous avons donc construit une matrice de coïncidences  $\gamma - \gamma$  afin de nous assurer que les pics  $\gamma$  d'intérêt n'étaient pas contaminés. Puis, nous avons utilisé les spectres directs haute résolution obtenus avec l'acquisition Ortec pour réaliser les ajustements de ces pics et déterminer précisément leurs énergies.

### 4.3.3 Analyse des données à partir des coïncidences $\gamma - \gamma$

#### Alignement et étalonnage des spectres $\gamma$

La première étape de l'analyse des données obtenues avec le multi-détecteur ORGAM et l'acquisition COMET consiste à aligner, pour un détecteur Ge donné, les spectres  $\gamma$  obtenus lors des différentes séquences d'acquisition. En effet, le gain d'amplification pouvant évoluer entre les différents runs, il est nécessaire d'aligner les spectres avant de les additionner en vue de leurs étalonnages. Cette évolution est visible sur la figure 4.14a, qui présente l'évolution d'une région des spectres  $\gamma$  pour un Ge d'ORGAM en fonction du numéro du run (seuls les runs d'intérêt sont représentés). Un run correspond généralement à une durée d'acquisition de  $\sim 1$ h. Afin de corriger cette dérive de gain pour chaque détecteur Ge, des pics sont identifiés sur les spectres  $\gamma$  des différents runs et une transformation linéaire est déterminée pour aligner ces pics sur ceux du run de référence. Ce run de référence (n°86) correspond à celui le plus proche du run d'étalonnage avec une source d' $^{152}\text{Eu}$  (run n°88).

L'évolution des spectres  $\gamma$  en fonction des runs après application de la transformation linéaire est représentée sur la figure 4.14b. Les variations de gain ont bien été corrigées et, par conséquent, les runs peuvent être additionnés. Cette procédure d'alignement est réalisée pour 56 runs d'intérêt et pour les 17 voies Ge.

L'étalonnage des spectres a été réalisé à l'aide d'une source d' $^{152}\text{Eu}$ . Nous avons utilisé des ajustements quadratiques car ils permettaient d'obtenir l'erreur quadratique moyenne la plus faible entre les valeurs des énergies  $\gamma$  de la source d' $^{152}\text{Eu}$  calculées avec l'ajustement et celles des tables [99].

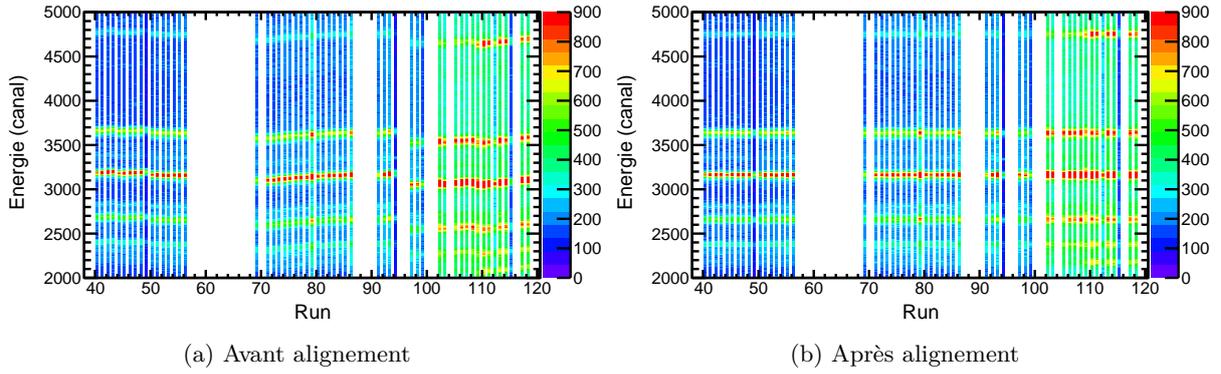


FIGURE 4.14 – Évolution d'une région des spectres  $\gamma$  non étalonnés obtenus avec un Ge d'ORGAM en fonction du numéro du run (seuls les runs d'intérêt sont représentés).

Pour cette étude, la correction en intensité des spectres pour tenir compte de la variation de l'efficacité des détecteurs Ge en fonction de l'énergie des  $\gamma$  n'est pas nécessaire et n'a donc pas été réalisée.

### Alignement en temps des détecteurs Ge

Comme l'acquisition COMET est "triggerless", il est nécessaire de reconstruire les coïncidences  $\gamma - \gamma$  en parcourant toutes les données enregistrées. Si la distance temporelle entre deux évènements est inférieure à une fenêtre de coïncidence de durée  $\tau$  choisie alors ces deux évènements sont considérés en coïncidence (voir figure 4.15).

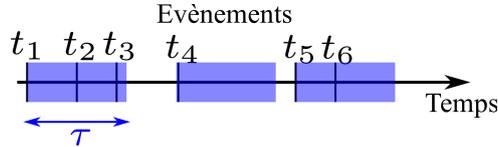


FIGURE 4.15 – Exemple de reconstruction des coïncidences. Les évènements numérotés 2 et 3 sont en coïncidence avec l'évènement 1, il s'agit d'une coïncidence de multiplicité 3. Les évènements 5 et 6 forment une coïncidence de multiplicité 2.

Avant de déterminer la largeur temporelle de la fenêtre de coïncidence, il est nécessaire d'aligner en temps les différentes voies de l'acquisition COMET. En effet, les longueurs de câbles entre les détecteurs Ge et les cartes d'acquisition peuvent être différentes si bien qu'un évènement détecté simultanément par deux détecteurs pourra être enregistré avec des temps d'arrivée différents. Afin d'aligner en temps toutes les voies Ge, une voie est choisie comme référence des temps  $T_{ref}$  et, pour toutes les autres voies Ge, les histogrammes des différences de temps entre la voie Ge de référence et la voie Ge étudiée  $T_g$  sont construits. Un exemple de ces histogrammes est représenté sur la figure 4.16. Le détecteur Ge de référence est le  $g15$  et le détecteur à aligner le  $g7$ .

Sur cet histogramme, un pic de 94 ns de largeur à mi-hauteur et situé à 45 ns est identifiable. Il correspond à des évènements corrélés ayant une origine physique commune (cascade de désexcitation  $\gamma$  par exemple). Ce pic est appelé "pic prompt". Des évènements situés en dehors de ce pic sont également visibles et correspondent à des coïncidences dites fortuites. Il s'agit de la détection dans une même fenêtre temporelle de deux évènements indépendants (désintégration de deux noyaux différents par exemple). Si les deux voies Ge étaient correctement alignées en temps, le pic prompt se situerait à  $T_{ref} - T_{g7} = 0$ . L'alignement des différentes voies Ge consiste donc à mesurer la position du pic prompt et à introduire le décalage temporel nécessaire pour chacune des 17 voies Ge.

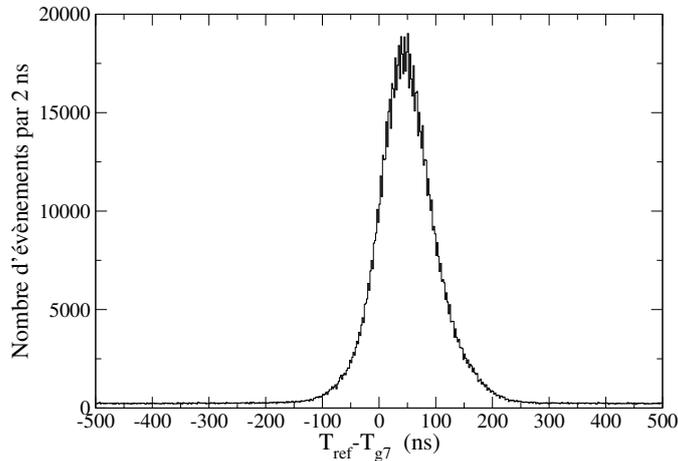


FIGURE 4.16 – Histogramme représentant la différence de temps entre un Ge de référence ( $g15$ ) et le Ge  $g7$ , avant alignement temporel des voies de ces deux détecteurs.

### Choix de la fenêtre de coïncidence

La fenêtre de coïncidence doit être suffisamment large pour ne pas manquer d'évènements corrélés. À l'inverse, plus la fenêtre de coïncidence est large et plus le nombre de coïncidences fortuites comptabilisé est important.

Afin de déterminer la valeur de  $\tau$  appropriée, nous choisissons dans un premier temps une valeur de  $\tau$  élevée ( $\tau = 1000$  ns) afin de prendre en compte tous les évènements corrélés. L'histogramme représentant la différence de temps entre deux évènements d'une même coïncidence  $\Delta T$  est alors tracé. Cet histogramme est symétrisé : pour deux évènements en coïncidence avec les temps  $T_1$  et  $T_2$ , les canaux correspondant aux différences  $T_1 - T_2$  et  $T_2 - T_1$  de l'histogramme sont incrémentés. Les coïncidences de multiplicité supérieure à deux sont décomposées en coïncidences doubles. Par exemple, pour une coïncidence de multiplicité trois ( $T_1, T_2, T_3$ ), les coïncidences doubles suivantes sont construites :  $T_1 - T_2, T_1 - T_3, T_2 - T_3$  ainsi que les valeurs opposées associées. L'histogramme représentant la différence des temps entre deux évènements en coïncidence pour tous les runs d'intérêt et pour les 12 voies Ge bas gain préalablement alignés en temps est représenté sur la figure 4.17. Les voies Ge haut gain ont été retirées car elles conduiraient à une surévaluation du nombre de coïncidences.

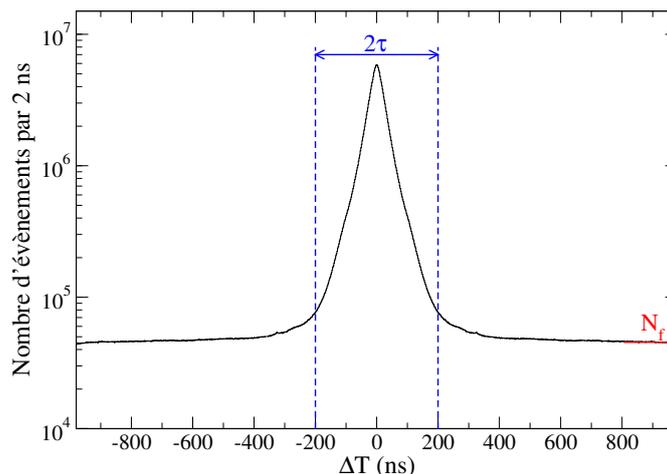


FIGURE 4.17 – Histogramme des différences de temps entre les deux évènements d'une coïncidence de multiplicité deux. La fenêtre de coïncidence  $\tau = 200$  ns choisie est représentée.

Sur cet histogramme, le pic prompt est clairement identifiable ainsi que le plateau dû aux coïncidences fortuites. Le nombre de "vraies" coïncidences détectées dans la fenêtre  $\tau$  est :  $A_c(\tau) = A_{tot}(\tau) - A_f(\tau)$  où  $A_f(\tau)$  est le nombre de coïncidences fortuites et  $A_{tot}(\tau)$  le nombre de total de coïncidences détectées dans la fenêtre  $\tau$ . Afin d'évaluer  $A_f(\tau)$ , nous supposons que le

plateau autour du pic prompt n'est constitué que de coïncidences fortuites. Ainsi,  $A_f(\tau) = N_f \times \tau$  où  $N_f$  est le taux de comptage de coïncidences fortuites (voir figure 4.17). Si l'on suppose que la fenêtre de 1000 ns permet de détecter toutes les vraies coïncidences, il est alors possible d'exprimer le nombre de vraie coïncidences rejetées dans la fenêtre  $\tau$  :  $A_r(\tau) = A_c(\tau = 1000) - A_c(\tau)$ . Sur la figure 4.18, les rapports  $A_c(\tau)/A_c(\tau = 1000)$  et  $A_f(\tau)/A_{tot}(\tau)$  sont tracés en fonction de  $\tau$ .

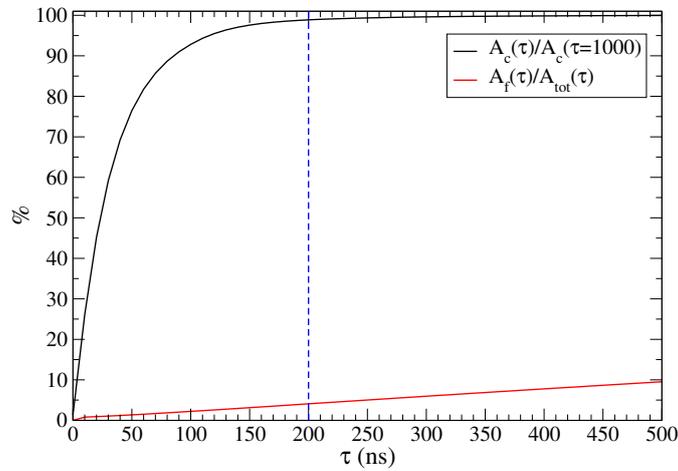


FIGURE 4.18 – Évolutions des rapports  $A_c(\tau)/A_c(\tau = 1000)$  et  $A_f(\tau)/A_{tot}(\tau)$  en fonction de la largeur de la fenêtre de coïncidence  $\tau$ .

Nous avons choisi une fenêtre de coïncidence  $\tau = 200$  ns, qui permet de prendre en compte 98,9% des vraies coïncidences (voir figure 4.18). Dans ce cas, seuls 4,1% des événements détectés sont dus à des coïncidences fortuites.

### Construction des matrices de coïncidences $\gamma - \gamma$

Une matrice de coïncidences  $\gamma - \gamma$  est un histogramme à deux dimensions qui représente, pour deux événements Ge en coïncidence, l'énergie déposée dans un détecteur en fonction de celle déposée dans le second. Généralement, une matrice  $\gamma - \gamma$  est symétrique : pour deux dépôts d'énergie  $E_1$  et  $E_2$  en coïncidence, les canaux correspondant à  $(E_1, E_2)$  et  $(E_2, E_1)$  sont incrémentés. Une matrice  $\gamma - \gamma$  ne permet que la représentation de coïncidences de multiplicité deux. Les coïncidences de multiplicité plus élevée sont utilisées pour reconstruire des coïncidences de multiplicité deux. La figure 4.19 présente l'exemple de la matrice de coïncidence entre deux Ge haut gain.

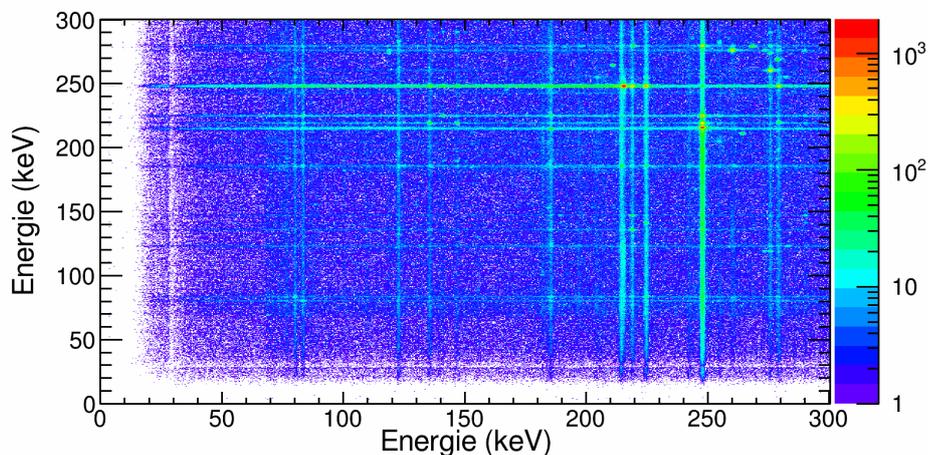


FIGURE 4.19 – Partie de la matrice de coïncidences  $\gamma - \gamma$  entre deux Ge haut gain.

Sur cette figure, les coïncidences entre deux évènements de pleine énergie sont identifiables par des points. Les coïncidences entre évènements de pleine énergie et évènements Compton sont matérialisées par des traits.

Sur la figure 4.19, les coïncidences entre le  $\gamma$  à 248 keV et ceux à 215 et 218 keV sont clairement visibles.

Le spectre de la projection totale de la matrice de la figure 4.19 est présenté sur la figure 4.20. Sur ce spectre, le pic de pleine énergie associé à la transition  $5^- \rightarrow 3^-$  est clairement visible à une énergie plus proche de 219 keV que de 218 keV comme suggéré dans les tables.

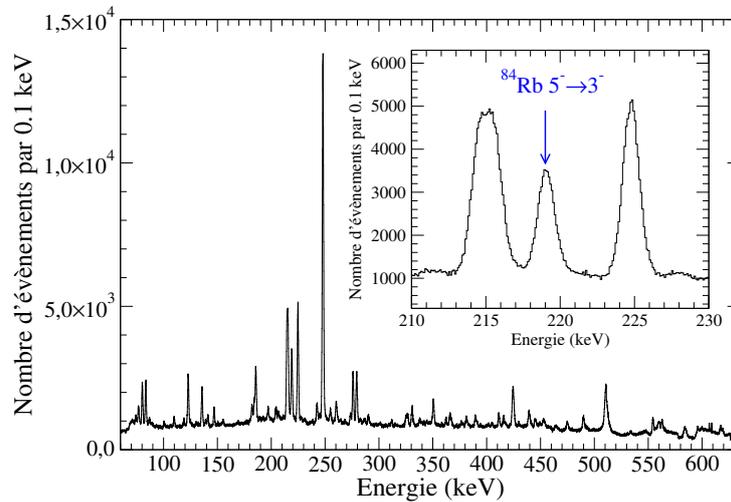


FIGURE 4.20 – Spectre en énergie obtenu par projection de la matrice de coïncidence entre deux Ge haut gain.

### Projection et soustraction d'un fond

Pour analyser les coïncidences  $\gamma - \gamma$ , des fenêtres en énergie, appelées "gate", sont définies sur un axe de la matrice  $\gamma - \gamma$  autour d'un pic de pleine énergie. Le contenu de chaque gate est ensuite projeté suivant l'autre axe de la matrice. Il est également nécessaire de soustraire un fond lors de la projection de la matrice. En effet, le spectre obtenu après projection d'une gate autour d'une énergie  $E_\gamma$  d'un pic de pleine énergie comporte plusieurs contributions :

- les pics de pleine énergie des  $\gamma$  issus de la même cascade que celui d'énergie  $E_\gamma$  et qui sont les évènements d'intérêt
- les évènements Compton des  $\gamma$  de la même cascade que celui utilisé comme gate
- les évènements issus des autres cascades  $\gamma$  dont le dépôt d'énergie d'un photon par effet Compton se situe dans la gate.

On néglige ici les coïncidences fortuites (voir 4.3.3) ainsi que les évènements dus à des  $\gamma$  provenant d'une diffusion Compton ayant eu lieu dans un autre détecteur Ge. Ces évènements sont, en majorité, rejetés grâce aux enceintes anti-Compton.

Pour soustraire ce fond, nous avons utilisé la méthode de D. C. Radford décrite dans la référence [100] et employée dans le programme escl8r [101]. Elle consiste à générer une matrice de fond qui sera soustraite à la matrice  $\gamma - \gamma$ . Cette matrice de fond est créée à partir des spectres des projections totales de la matrice  $\gamma - \gamma$  et des spectres de fond Compton estimés à partir de ces spectres de projection totale. Cette méthode présente l'avantage d'être simple à mettre en œuvre et permet de soustraire les évènements Compton en coïncidence avec les évènements de la gate [100].

### Analyse des projections à partir de la gate sur le 219 keV

Afin de nous assurer que le pic de pleine énergie à 219 keV n'est pas contaminé par des  $\gamma$  issus de décroissances autres que celles du  $^{84}\text{Rb}$ , nous choisissons une gate autour de ce pic. Le spectre obtenu par projection de cette gate est présenté sur la figure 4.21.

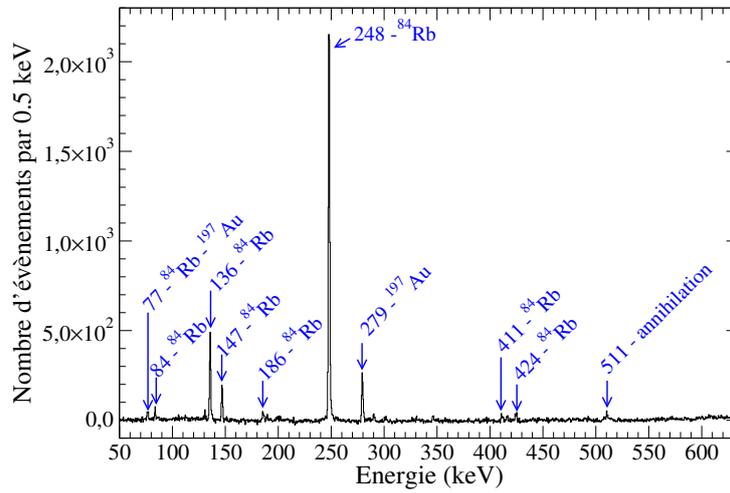


FIGURE 4.21 – Projection de la gate à 219 keV de la matrice de coïncidence symétrique entre deux Ge haut gain.

Les pics dominants de ce spectre correspondent à des  $\gamma$  présents dans la même cascade de désexcitation que la transition  $5^- \rightarrow 3^-$  d'après le schéma de niveaux de [37]. Des pics dus à la désexcitation  $\gamma$  de  $^{197}\text{Au}$ , support de la cible excitée par excitation coulombienne sont également visibles : il s'agit de coïncidences fortuites. Cependant, comme la désexcitation de  $^{197}\text{Au}$  n'émet pas de  $\gamma$  autour de 219 keV, elle ne constitue pas un problème pour notre étude.

La même gate est appliquée sur la matrice de coïncidences entre un Ge bas gain et un Ge haut gain afin d'examiner la projection à plus haute énergie. Cette projection est présentée sur la figure 4.22. Sur ce spectre, les pics les plus visibles correspondent toujours à des  $\gamma$  des cascades

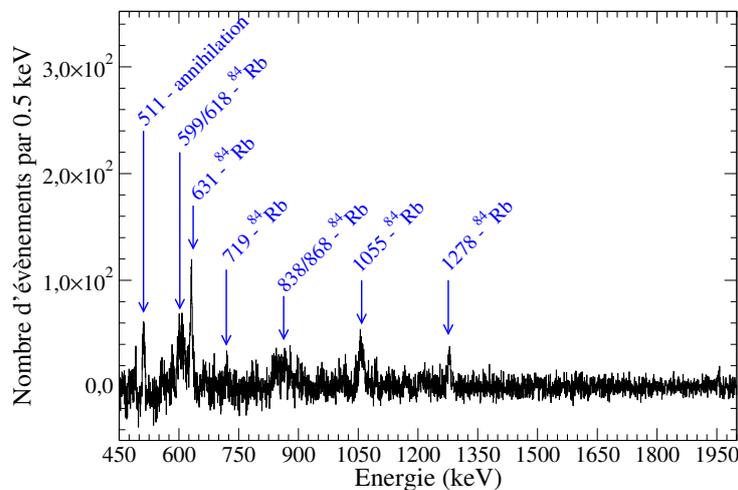


FIGURE 4.22 – Projection de la gate à 219 keV effectuée sur le spectre d'un Ge haut gain et projetée sur celui d'un Ge bas gain.

associées au 219 keV ( $5^- \rightarrow 3^-$ ).

#### 4.3.4 Analyse des spectres directs

Afin de déterminer précisément l'énergie de la transition  $5^- \rightarrow 3^-$ , nous avons branché la sortie du Ge GFOC24 d'ORGAM sur le système d'acquisition Ortec. Une source d' $^{152}\text{Eu}$  avait été placée devant ce détecteur en présence du faisceau pour pouvoir réaliser l'étalonnage à chaque run. Les ajustements des pics seront de nouveau réalisés avec gf3 avec la méthode décrite au paragraphe 4.2.2.

## Choix des énergies étalons

Pour réaliser l'étalonnage des spectres, nous pouvons utiliser les pics de l' $^{152}\text{Eu}$ , de l' $^{197}\text{Au}$  et ceux mesurés lors de la décroissance du  $^{84m}\text{Rb}$ . Afin de valider l'utilisation des pics du  $^{84m}\text{Rb}$  et de l' $^{197}\text{Au}$  pour l'étalonnage, nous déterminons les énergies des pics de l' $^{152}\text{Eu}$ . Pour ce faire, les énergies étalons suivantes sont utilisées : 248,013 (2), 279,010 (50) et 463,618 (3). Le pic à 215 keV n'est pas utilisé car mélangé avec le 214 keV du  $^{84}\text{Rb}$ . A partir de ces énergies, nous déterminons les énergies des  $\gamma$  à 244,6975 (8) et 344,2785 (12) keV de l' $^{152}\text{Eu}$ . Le pic du  $\gamma$  à 121,7817 (3) keV n'est pas utilisé car il présente une traîne du côté "haute énergie" du pic. Le  $\gamma$  à 443,965 (3) keV de l' $^{152}\text{Eu}$  n'est pas pris en compte car son pic de pleine énergie est mélangé avec celui du 445 keV du  $^{84}\text{Rb}$ .

A partir de 16 spectres, la moyenne pondérée et l'incertitude (à  $1\sigma$ ) associée est déterminée. Le tableau 4.7 récapitule ces résultats en comparaison avec ceux de la référence [99].

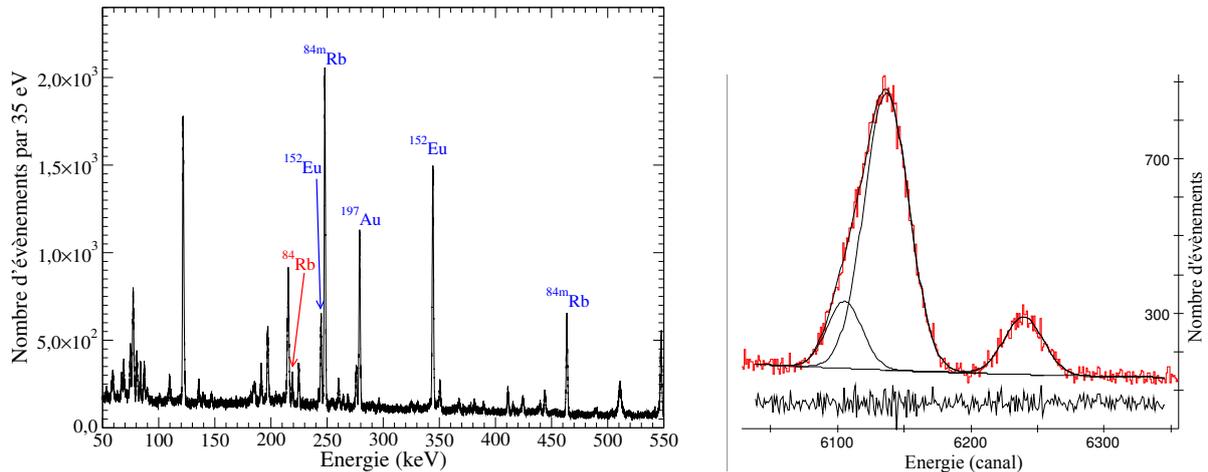
Ce travail (keV)	Référence [99]	Différence (ce travail-ref [99]) (eV)
244,694 (3)	244,6974 (8)	-3,4 (32)
344,277 (2)	344,2785 (12)	-1,5 (24)

TABLEAU 4.7 – Comparaison des énergies des  $\gamma$  à 244 et 344 keV de l' $^{152}\text{Eu}$  déterminées à partir des pics du  $^{84m}\text{Rb}$  et de l' $^{197}\text{Au}$ . Comparaison avec les valeurs des tables [99].

Les valeurs que nous obtenons sont compatibles, dans les barres d'erreur, avec celles des tables [99]. Il est donc possible d'utiliser les pics du  $^{84m}\text{Rb}$  et de l' $^{197}\text{Au}$  pour l'étalonnage des spectres.

## Détermination de l'énergie de la transition $5^- \rightarrow 3^-$

Un exemple de spectre obtenu avec le système d'acquisition Ortec est présenté sur la figure 4.23a. Les pics utilisés pour l'étalonnage sont signalés en bleu et le pic de Rb d'intérêt en rouge. Un exemple d'ajustement du pic à 219 keV est présenté sur la figure 4.23b. Les pics à 214 et 215 keV mélangés sont également ajustés car proches du pic d'intérêt afin de permettre une bonne évaluation du fond Compton.



(a) Exemple d'un spectre  $\gamma$ . Les pics étalons d' $^{152}\text{Eu}$  sont représentés en bleu et ceux de  $^{84m}\text{Rb}$  en rouge.

(b) Ajustement du pic à 219 keV avec gf3.

FIGURE 4.23 – Analyse d'un run obtenu avec l'acquisition Ortec.

A l'issue de l'analyse des 16 spectres obtenus avec l'acquisition Ortec, nous déterminons la valeur moyenne et l'incertitude associée (à  $1\sigma$ ) sur l'énergie du  $\gamma$  à 219 keV : 219,099 (5). Nous constatons un écart important entre notre résultat et celui de Schwengner et al. [86], retenu par l'évaluateur : 218,3 (2) keV. Notons que Schwengner et al. ont mesuré l'énergie du 248 keV à 247,5 (1) keV. Cette valeur est éloignée de  $520 \pm 142$  eV de celle obtenue après évaluation de Kondev [37] ce qui peut expliquer la différence entre nos résultats et ceux de la référence [86]

en ce qui concerne le  $\gamma$  à 219 keV. Notons que Döring et al. ont mesuré une énergie de 219 keV pour la transition  $5^- \rightarrow 3^-$  sans en préciser les barres d'erreur. Celles-ci ont été estimées à 500 eV par l'évaluateur.

La figure 4.24 présente l'énergie du pic à 219 keV pour les différents runs analysés ainsi que la valeur moyenne et l'incertitude associée. Elle illustre la bonne reproductibilité des ajustements effectués.

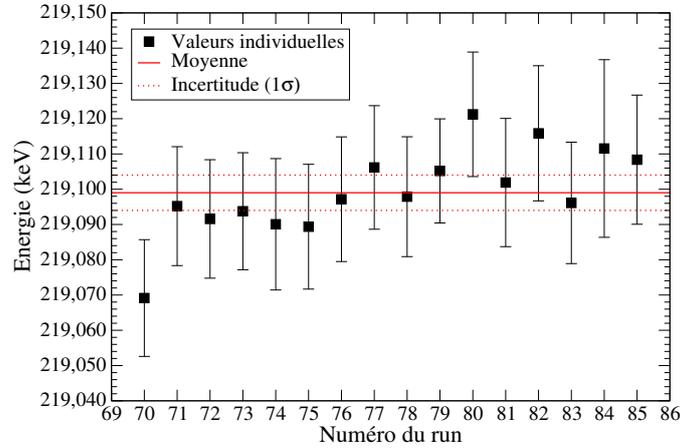


FIGURE 4.24 – Évolution de l'énergie mesurée du  $\gamma$  à 219 keV en fonction du numéro du run. La valeur moyenne et les barres d'incertitudes à  $1\sigma$  sont indiquées.

#### 4.4 Énergie de la transition $5^- \rightarrow 6^-$

A partir des résultats précédents, nous pouvons déterminer la valeur de l'énergie de la transition nucléaire entre les niveaux  $5^-$  et  $6^-$  du  $^{84}\text{Rb}$  :

$$\Delta E_{12} = 3,498 (6) \text{ keV}$$

Cette énergie est proche de celle conjecturée par Döring et al. [38] mais assez éloignée de celle que l'on peut calculer à partir de l'évaluation de Kondev. L'énergie de la transition  $5^- \rightarrow 6^-$  étant déterminée à partir de celles des  $\gamma$  de désexcitation, nous avons vérifié que l'énergie cinétique de recul  $E_n$  du noyau de  $^{84}\text{Rb}$  est négligeable ( $E_n = 0,31 \text{ eV}$ ).

#### 4.5 Probabilité de transition réduite de la transition $5^- \rightarrow 6^-$

##### Vérification expérimentale du rapport d'intensité des transitions à 3,498 et 219 keV

D'autres caractéristiques de la transition  $5^- \rightarrow 6^-$  sont importantes pour le calcul du taux d'excitation par effet NEET. Celles-ci sont la nature électromagnétique de la transition, sa multipolarité et sa probabilité de transition réduite.

La transition  $5^- \rightarrow 6^-$  du  $^{84}\text{Rb}$  est supposée de type  $M1$  par Döring et al. [38]. Elle n'a pas été mesurée. La probabilité de transition réduite a été déduite en effectuant un bilan d'intensité de toutes les transitions peuplant l'état  $5^-$  et de celles le dépeuplant.

En conjecturant une transition de type  $M1$ , la probabilité de transition réduite  $B_{5^- \rightarrow 6^-}(M1)$  a été déterminée à partir du taux de transition  $\lambda_{\gamma}^{5^- \rightarrow 6^-}(M1)$ . En effet, en considérant une désexcitation  $\gamma$  entre les états nucléaires  $I_1$  et  $I_2$ , le taux de transition  $\lambda_{\gamma}^{I_1 \rightarrow I_2}(\pi L)$  entre ces deux états, exprimé en  $\text{s}^{-1}$ , est relié à la probabilité de transition réduite  $B_{I_1 \rightarrow I_2}(\pi L)$  par :

$$\lambda_{\gamma}^{I_1 \rightarrow I_2}(\pi L) = 8\pi \frac{L+1}{L[(2L+1)!!]^2} \frac{(k_{12})^{2L+1}}{\hbar} B_{I_1 \rightarrow I_2}(\pi L) \quad (4.9)$$

où :

- $k_{12}$  est la norme du vecteur d'onde de la transition  $I_1 \rightarrow I_2$

—  $B_{I_1 \rightarrow I_2}(\pi L)$  est la probabilité de transition réduite associée à la transition  $I_1 \rightarrow I_2$  de type  $\pi L$

La probabilité de transition réduite proposée par Döring et al. [38] est :  $B_{5^- \rightarrow 6^-}(M1) = 0,4$  W.u. (Weisskopf unit, voir annexe E). Cependant, le coefficient de conversion interne utilisé par ces auteurs étant erroné, la probabilité de transition réduite obtenue a été corrigée par l'évaluateur [37]. Après correction, celle-ci est :  $B_{5^- \rightarrow 6^-}(M1) = 0,08$  W.u.

A partir des données obtenues avec le multidétecteur ORGAM, nous avons vérifié qualitativement la validité de la méthode utilisée par Döring et al. [38] pour obtenir le  $B_{5^- \rightarrow 6^-}(M1)$  publié après correction de l'évaluateur. Notre analyse confirme les résultats publiés. Le détail de cette dernière est donné dans l'annexe F.

### Calculs en utilisant le modèle en couches

Nous avons vérifié qualitativement la valeur du rapport  $\frac{\lambda_\gamma^{3,5}}{\lambda_\gamma^{219}}$  qui est utilisé pour la détermination de  $B_{5^- \rightarrow 6^-}(M1)$ . Cependant, nous avons fait, comme Döring et al. [38], l'hypothèse que la transition  $5^- \rightarrow 6^-$  était une transition  $M1$  pure. Afin de préciser la nature de cette transition, des calculs de type modèle en couches dans l'espace de valence  $f_{5/2} - g_{9/2}$  ont été effectués par N. Smirnova [102]. Dans le modèle en couches, les nucléons sont en interaction avec un champ moyen créé par un coeur inerte de nucléons. Des interactions résiduelles entre les nucléons de valence sont ajoutées au travers d'une interaction effective à deux corps ajustée sur les données expérimentales. Dans les calculs effectués par N. Smirnova, l'interaction effective développée par Honma et al. [103] pour l'espace  $f_{5/2} - g_{9/2}$  a été utilisée. Cette interaction a été ajustée sur les données expérimentales de 69 noyaux de nombres de masse compris entre 63 et 96. D'après les résultats des calculs effectués sur le  $^{84}\text{Rb}$  la transition  $5^- \rightarrow 6^-$  est de type  $M1 + E2$  avec :

$$\begin{aligned} B_{5^- \rightarrow 6^-}(M1) &= 3,312 \times 10^{-39} \text{ keV.cm}^3 = 0,116 \text{ W.u} \\ B_{5^- \rightarrow 6^-}(E2) &= 2,837 \times 10^{-61} \text{ keV.cm}^5 = 0,901 \text{ W.u} \end{aligned}$$

Nous constatons que la valeur théorique  $B_{5^- \rightarrow 6^-}(M1)$  est proche de la valeur déterminée par Döring et al. Ceci peut s'expliquer par la validité de l'hypothèse effectuée de négliger les coefficients de conversion interne des transitions à 136 et 147 keV. Pour que le bilan d'intensité réalisé par Döring et al. soit valide, il faut également que la composante  $E2$  de la transition à 3,498 keV n'induisse pas une modification drastique du coefficient de conversion interne  $\alpha_e^{3,4}$  associé à cette transition. Afin d'évaluer la valeur de  $\alpha_e^{3,4}$  en tenant compte de la composante  $E2$ , il est nécessaire de déterminer le rapport de mélange  $E2/M1$ ,  $\delta^2(E2/M1)$  défini par :

$$\delta^2(E2/M1) = \frac{\lambda_\gamma^{I_1 \rightarrow I_2}(E2)}{\lambda_\gamma^{I_1 \rightarrow I_2}(M1)} \quad (4.10)$$

où  $\lambda_\gamma^{I_1 \rightarrow I_2}(E2)$  et  $\lambda_\gamma^{I_1 \rightarrow I_2}(M1)$  désignent respectivement les taux de radiatifs des composantes  $E2$  et  $M1$  de la transition à  $I_1 \rightarrow I_2$ .

En introduisant (4.9) dans l'équation (4.10) il vient :

$$\delta^2(E2/M1) = \frac{3}{100} (k_{12})^2 \frac{B_{I_1 \rightarrow I_2}(E2)}{B_{I_1 \rightarrow I_2}(M1)} \quad (4.11)$$

Nous obtenons ainsi :  $\delta^2(E2/M1) = 8,075 \times 10^{-8}$  pour la transition à 3,4 keV. A partir de la valeur de  $\delta^2(E2/M1)$ , nous pouvons calculer un coefficient de conversion interne  $\alpha_e^{3,4}$  qui tient compte de la composante  $E2$ . Pour cela, nous utilisons le code BrIcc [104]<sup>5</sup>. En utilisant, comme Döring et al. une énergie de 3,4 keV, nous obtenons :  $\alpha_e^{3,4} = 361$ . La composante  $E2$  n'a donc pas d'influence sur la valeur du coefficient de conversion interne et l'hypothèse de Döring et al. est par conséquent justifiée. Comme nous avons mesuré l'énergie de la transition  $5^- \rightarrow 6^-$  précisément, nous pouvons recalculer un coefficient de conversion interne en utilisant la valeur de 3,498 (6) keV :  $\alpha_e^{3,498} = 332$ .

5. <http://bricc.anu.edu.au/index.php>

## Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté la mesure de la transition nucléaire  $5^- \rightarrow 6^-$  du  $^{84}\text{Rb}$ , impliquée dans le processus d'excitation par effet NEET. Les données nucléaires disponibles sur le  $^{84}\text{Rb}$  n'étant pas assez précises pour notre étude, nous avons réalisé deux expériences afin de les mesurer avec une meilleure précision. La première, réalisée auprès de l'accélérateur ELSA du CEA/DAM/DIF a permis de mettre en place les techniques expérimentales et d'analyse afin de déterminer l'énergie de la transition  $6^- \rightarrow 3^-$ . Cette mesure ayant été réalisée hors faisceau, les spectres obtenus présentaient peu de bruit de fond.

Ces techniques ont été utilisées lors de la mesure de l'énergie de la transition  $5^- \rightarrow 3^-$  réalisée auprès du Tandem de l'IPN d'Orsay. Une analyse des coïncidences  $\gamma - \gamma$  mesurées avec le multidétecteur ORGAM a permis de vérifier que le pic de pleine énergie associé à la transition d'intérêt n'était pas contaminé par le bruit de fond important puisque la mesure a été réalisée en présence du faisceau de production. Nous avons également vérifié que ce pic n'était pas contaminé par des transitions d'énergies proches non reportées dans le schéma de niveaux.

Les résultats de calculs de type modèle en couches ont montré que la transition  $5^- \rightarrow 6^-$  est une transition de nature  $M1 + E2$  dont les probabilités de transition réduites ont aussi été déduites. Tous ces éléments seront pris en compte dans l'évaluation du taux d'excitation NEET effectuée dans le chapitre 5.

Les premiers taux d'excitation par effet NEET dans le  $^{84}\text{Rb}$  ont été calculés à l'aide d'un modèle d'atome moyen relativiste avec une énergie de transition nucléaire de 3,05 keV [35]. Une augmentation de presque 450 eV de l'énergie de cette transition aura des conséquences importantes sur le calcul du taux d'excitation par effet NEET.



# Chapitre 5

## Calcul du taux d'excitation par effet NEET de la transition $6^- \rightarrow 5^-$ du $^{84}\text{Rb}$

### Introduction

Le travail présenté dans cette thèse a comme but de prédire un taux d'excitation par effet NEET dans un plasma de  $^{84}\text{Rb}$ .

La méthode de calcul des états atomiques développée dans le chapitre 2 et validée dans le chapitre 3 par l'interprétation des spectres X émis par un plasma de  $^{84}\text{Rb}$  sera utilisée pour déterminer les caractéristiques des états atomiques impliqués dans le processus NEET. Les propriétés du plasma (température, densité et distribution d'état de charge), nécessaires au calcul de ce taux, ont été estimées dans le cas du laser PHELIX dans le chapitre 3 à l'aide de simulations hydrodynamiques. Nous avons, par ailleurs, précisé les caractéristiques (énergie, nature multipolaire et probabilité de transition réduite) de la transition nucléaire impliquée dans le processus NEET dans le chapitre 4.

Nous avons développé dans le cadre de cette thèse un code de calcul du taux NEET avec une description des états atomiques basée sur les résultats de MCDF pour des ions isolés, ou dans des cibles solides, et pour des ions dans un plasma. La procédure de calcul dans chacun des cas est explicitée dans la première partie de ce chapitre. Les seules prédictions de taux NEET, pour le  $^{84m}\text{Rb}$  disponibles au début de ce travail de thèse étaient issues du code ISOMEX basé sur un modèle d'atome moyen relativiste [50]. Aussi, nous présentons également l'expression du taux NEET calculée dans ce modèle.

Pour valider notre code de calcul, une comparaison avec les résultats expérimentaux et théoriques disponibles a été effectuée, ces derniers ne concernant que des expériences sur cibles solides. Cette discussion fait l'objet du paragraphe 5.2. Les résultats obtenus pour l'excitation du  $^{84}\text{Rb}$  dans un plasma produit avec le laser PHELIX à une intensité de  $6 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$  sont ensuite présentés et discutés dans le paragraphe 5.3.

La faisabilité d'une expérience de mise en évidence de l'excitation nucléaire du  $^{84m}\text{Rb}$  dans un tel plasma sera discutée. Des calculs dans un cas de plasma produit à plus haute intensité laser seront également détaillés.

### 5.1 Expression du taux d'excitation par effet NEET

Dans ce qui suit, l'état initial d'un processus NEET est défini comme le noyau dans l'état 1 (état  $6^-$  dans le cas du  $^{84}\text{Rb}$ ) avec une énergie  $E_1$  et l'ion dans un état excité avec une énergie  $E_i$ . L'état final correspond au noyau dans l'état 2 ( $5^-$  pour le  $^{84}\text{Rb}$ ) avec une énergie  $E_2$  ( $E_2 > E_1$ ) et l'ion dans un état d'énergie  $E_f$  ( $E_f < E_i$ ). Dans la suite de ce chapitre, les indices  $i$  et  $f$  se rapporteront aux états atomiques initial et final tandis que les indices 1 et 2 désigneront les états nucléaires initial et final.

Pour un ion isolé, le taux d'excitation par effet NEET,  $\lambda_{NEET}$ , représente le nombre d'excitations par unité de temps. Il s'exprime comme le produit du taux de désexcitation total de l'état atomique initial  $\lambda_i$  et de la probabilité  $P_{NEET}$  :

$$\lambda_{NEET} = \lambda_i P_{NEET} \quad (5.1)$$

où  $P_{NEET}$  désigne la probabilité qu'une désexcitation atomique conduise à une excitation nucléaire.

### 5.1.1 Expression de la probabilité d'occurrence de l'effet NEET $P_{NEET}$

Une première description de l'effet NEET a été proposée par Morita en 1973 [14] et le calcul théorique de son taux d'excitation a fait, depuis, l'objet de nombreuses publications. Ce calcul pour un ion isolé ou *a fortiori* pour un ion dans un plasma reste un sujet d'étude actuel. En effet, il a été montré que l'expression de l'hamiltonien d'interaction atome-noyau proposée par Morita était fautive [105]. En 1992, Tkalya [106] a proposé, à partir des principes de l'électrodynamique quantique (QED), une expression de la probabilité d'occurrence de l'effet NEET. L'expression proposée par Tkalya a légèrement été corrigée en 2001 par Harston [24]. Celle-ci s'écrit :

$$P_{NEET} = \left(1 + \frac{\Gamma_{f2}}{\Gamma_{i1}}\right) \frac{|W_{i1,f2}|^2}{(\delta_{i1,f2})^2 + \left(\frac{\Gamma_{i1} + \Gamma_{f2}}{2}\right)^2} \quad (5.2)$$

où :

- $\Gamma_{i1}$  et  $\Gamma_{f2}$  sont respectivement les largeurs totales des états initial et final du système atome-noyau exprimées en unité d'énergie. Elles s'écrivent comme des sommes sur les largeurs des états nucléaires (initial  $\Gamma_1$  ou final  $\Gamma_2$ ) et celles des états atomiques (initial  $\Gamma_i$  ou final  $\Gamma_f$ ) :  $\Gamma_{i1} = \Gamma_i + \Gamma_1$  et  $\Gamma_{f2} = \Gamma_f + \Gamma_2$ . Les largeurs des états nucléaires sont beaucoup plus faibles que celles des états atomiques  $\Gamma_i$  et  $\Gamma_f$ . A titre d'exemple pour le  $^{84}\text{Rb}$  :  $\Gamma_2 = \Gamma_{5^-} = 5,1 \times 10^{-8}$  eV et  $\Gamma_1 = \Gamma_{6^-} = 3,8 \times 10^{-19}$  eV alors que les largeurs atomiques sont de l'ordre du meV en considérant seulement les largeurs dues aux collisions électroniques dans le plasma. Les largeurs nucléaires peuvent donc être négligées et nous avons :  $\Gamma_{i1} = \Gamma_i$  et  $\Gamma_{f2} = \Gamma_f$ .
- $W_{i1,f2}$  est l'élément de matrice de couplage atome-noyau. Son expression sera donnée plus loin dans ce chapitre.
- $\delta_{i1,f2}$  est la différence d'énergie entre l'état initial et l'état final, qui s'écrit :

$$\delta_{i1,f2} = (E_1 + E_i) - (E_2 + E_f) = \Delta E_{if} - \Delta E_{12} \quad (5.3)$$

où  $\Delta E_{if}$  et  $\Delta E_{12}$  sont respectivement les énergies des transitions atomique et nucléaire impliquées dans le processus NEET.  $\delta_{i1,f2}$  est couramment appelé *mismatch*.

En 2004, Morel et al. [1] ont publié une étude du taux d'excitation par effet NEET dans un plasma ETL en utilisant un formalisme basé sur la théorie formelle des réactions [107]. Cette approche permet d'exprimer l'évolution temporelle de la probabilité  $P_{NEET}$ . Cette probabilité atteint une expression asymptotique identique à celle de l'équation (5.2) au bout d'un temps  $\tau_\infty$ , défini par :

$$\tau_\infty = \frac{\hbar}{2} \left( \frac{1}{\Gamma_{i1}} + \frac{1}{\Gamma_{f2}} \right) = \frac{\hbar}{2} \left( \frac{1}{\Gamma_i} + \frac{1}{\Gamma_f} \right) \quad (5.4)$$

La probabilité  $P_{NEET}$  atteint ainsi une valeur asymptotique au bout d'un temps moyen de  $7 \times 10^{-13}$  s dans le cas du  $^{84}\text{Rb}$  en considérant les largeurs atomiques collisionnelles définies dans le paragraphe 5.1.4. Dans la suite de ce chapitre, nous ne considérerons pas cette évolution temporelle et calculerons seulement la probabilité  $P_{NEET}$  asymptotique à l'aide de l'équation (5.2).

Plus récemment (2013), Dzyublik [108] a utilisé la théorie des collisions pour exprimer la section efficace d'excitation par effet NEET. Il a également pris en compte la manière dont l'état

atomique initial est créé (lacune dans une sous-couche électronique) et la désexcitation nucléaire suivant l'excitation par effet NEET, ce qui n'avait pas été traité dans les études précédentes. A partir de ses calculs, Dzyublik [108] a pu interpréter le comportement de la section efficace NEET près du seuil d'absorption K observé par Kishimoto et al. dans l' $^{197}\text{Au}$  [109]. L'expression de  $P_{NEET}$  proposée par Dzyublik [108] est identique à celle de l'équation (5.2), obtenue par Morel et al. [1] et Harston [24].

### 5.1.2 Expression de l'élément de matrice de couplage atome-noyau

Afin d'exprimer l'élément de matrice de couplage atome-noyau, il est nécessaire de décrire les états initial et final d'un processus NEET. Comme ce processus couple les états nucléaires (initial  $|\Phi_1\rangle$  et final  $|\Phi_2\rangle$ ) et les états atomiques (initial  $|\Phi_i\rangle$  et final  $|\Phi_f\rangle$ ), les états initial  $|\Psi_{i1}\rangle$  et final  $|\Psi_{f2}\rangle$  d'un processus NEET s'écrivent :

$$|\Psi_{i1}\rangle = |\Phi_i\rangle \otimes |\Phi_1\rangle \text{ et } |\Psi_{f2}\rangle = |\Phi_f\rangle \otimes |\Phi_2\rangle \quad (5.5)$$

L'expression de  $W_{i1,f2}$  dépend des bases choisies pour exprimer les états  $|\Psi_{i1}\rangle$  et  $|\Psi_{f2}\rangle$  et par conséquent des bases utilisées pour exprimer les états nucléaires et atomiques.

Concernant les états atomiques, nous disposons de deux bases : la base des orbitales  $|n\kappa jm\rangle$  et la base des états  $|JM\Pi\rangle$ . La base des orbitales, correspondant à une description des états atomiques en terme de configurations, a été utilisée dans les premiers travaux dédiés aux calculs de la probabilité  $P_{NEET}$  [2, 24] pour des ions isolés. La base des états  $|JM\Pi\rangle$ , utilisée dans MCDF, permet une description plus précise des états atomiques par la prise en compte du couplage des moments cinétiques des électrons et de l'interaction de configuration. Elle est mieux adaptée à la description de la multitude des états atomiques présents dans les plasmas.

Nous avons procédé en deux étapes pour valider le code de calcul du taux NEET développé dans le cadre de cette thèse. Tout d'abord, nous avons calculé des taux NEET dans la base des orbitales et vérifié qu'ils étaient en accord avec les taux NEET expérimentaux et théoriques publiés dans le cas des expériences sur cibles solides. Nous avons ensuite vérifié que les résultats obtenus dans la base des états  $|JM\Pi\rangle$  pour ces mêmes expériences étaient compatibles avec ces derniers.

Nous détaillons ci-après l'expression de l'élément de matrice de couplage atome-noyau dans les deux bases utilisées.

#### Dans la base des orbitales

Dans les précédentes études [24, 1, 108], l'élément de matrice  $W_{i1,f2}$  est exprimé dans la base des orbitales atomiques. Considérons une transition  $\pi L$  à un électron entre l'orbitale  $\alpha$  d'une configuration initiale et l'orbitale  $\beta$  d'une configuration finale. Les états atomiques initial et final sont :

$$|\Phi_i\rangle = |\psi_\alpha\rangle = |n_\alpha \kappa_\alpha j_\alpha m_\alpha\rangle \text{ et } |\Phi_f\rangle = |\psi_\beta\rangle = |n_\beta \kappa_\beta j_\beta m_\beta\rangle$$

Le terme  $|W_{i1,f2}|^2$ , que nous renommons alors  $|W_{\alpha 1, \beta 2}|^2$ , est exprimé en  $\text{eV}^2$  et s'écrit [24, 108] :

$$|W_{\alpha 1, \beta 2}|^2 = 4\pi e^2 \frac{(k_{12})^{2L+2}}{[L(2L+1)!!]^2} \left\langle j_\alpha L \frac{1}{2} 0 \left| j_\beta \frac{1}{2} \right\rangle^2 B_{I_1 \rightarrow I_2}(\pi L) \left| M_{\beta\alpha}^e(\pi L) \right|^2 \quad (5.6)$$

où :

- $k_{12}$  est la norme du vecteur d'onde du photon de la transition nucléaire :  $k_{12} = \frac{\Delta E_{12}}{\hbar c}$
- $L$  désigne la multipolarité de la transition
- $j_\alpha$  est le moment cinétique total de l'orbitale initiale  $\alpha$
- $j_\beta$  est le moment cinétique total de l'orbitale finale  $\beta$
- $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle$  désigne un coefficient de Clebsch-Gordan
- $B_{I_1 \rightarrow I_2}(\pi L)$  est la probabilité de transition nucléaire réduite entre l'état nucléaire initial de moment cinétique total  $I_1$  et l'état final de moment cinétique total  $I_2$ .

- $M_{\beta\alpha}^e(\pi L)$  est l'élément de matrice électronique radial entre les orbitales  $\alpha$  et  $\beta$ . Son expression dépend du type de transition considéré. Pour une transition électrique, l'élément  $M_{\beta\alpha}^e(EL)$  est donné par :

$$M_{\beta\alpha}^e(EL) = \int_{r=0}^{+\infty} \left( L [P_\alpha(r)P_\beta(r) + Q_\alpha(r)Q_\beta(r)] h_L(k_{12}r) + [(\kappa_\alpha - \kappa_\beta - L)P_\alpha(r)Q_\beta(r) + (\kappa_\alpha - \kappa_\beta + L)P_\beta(r)Q_\alpha(r)] h_{L-1}(k_{12}r) \right) dr \quad (5.7)$$

où :

- $P_\alpha(r)$  et  $Q_\alpha(r)$  sont respectivement les grandes et petites composantes de l'orbitale  $\alpha$ .
  - $\kappa_\alpha$  est le nombre quantique relativiste de l'orbitale  $\alpha$
  - $h_L$  est la fonction de Hankel du premier type et d'ordre  $L$
- Pour une transition magnétique,  $M_{\beta\alpha}^e(ML)$  est donné par :

$$M_{\beta\alpha}^e(ML) = (\kappa_\alpha + \kappa_\beta) \int_{r=0}^{+\infty} \left( [P_\alpha(r)Q_\beta(r) + P_\beta(r)Q_\alpha(r)] h_L(k_{12}r) \right) dr \quad (5.8)$$

Notons que lorsque  $k_{12}r \rightarrow 0$ , la fonction de Hankel tend vers [2] :

$$h_L(k_{12}r) \approx \frac{(2L-1)!!}{(k_{12}r)^{L+1}} \quad (5.9)$$

Il est donc nécessaire d'avoir une bonne description des fonctions d'onde atomiques au voisinage du noyau ( $r \rightarrow 0$ ). Le code MCDF, permettant un calcul relativiste, est ainsi bien adapté pour déterminer ces fonctions d'onde.

Si la transition  $\alpha \rightarrow \beta$  est composée de plusieurs transitions de natures multipolaires différentes  $\pi L + \pi' L'$  ( $M1 + E2$  par exemple), alors  $|W_{\alpha 1, \beta 2}|^2$  et par conséquent  $P_{NEET}$  s'écrivent comme une somme sur ces transitions.

Notons que l'expression de  $|W_{i1, f2}|^2$  de Morel et al. [1] est légèrement différente puisque le terme  $(k_{12})^{2L+2}$  de l'équation (5.6) est remplacé par le terme :  $(k_{12})^2 \left( k_{12} + \frac{\delta_{i1, f2}}{2\hbar c} \right)^{2L}$ . Si  $\delta_{i1, f2} \ll \Delta E_{12}$ , ce qui est vérifié dans la cas du NEET, ces deux expressions sont équivalentes.

### Dans la base des états $|JM\Pi\rangle$

Dans le cadre de nos calculs MCDF, les fonctions d'onde atomiques sont exprimées dans la base des états  $|JM\Pi\rangle$  (voir chapitre 2). Nous avons :

$$|\Phi_i\rangle = |J_i M_i \Pi_i\rangle \quad \text{et} \quad |\Phi_f\rangle = |J_f M_f \Pi_f\rangle$$

L'expression de  $|W_{i1, f2}|^2$  dans la base des états atomiques  $|JM\Pi\rangle$  est donnée par (voir annexe G pour plus de détails) :

$$|W_{i1, f2}|^2 = \frac{1}{2J_i + 1} \sum_{j_a j'_a} \sum_{k_a k'_a} \sum_{j_b j'_b} \sum_{k_b k'_b} c_{ij_a} c_{fj'_a} a_{j_a j'_a k_a k'_a} c_{ij_b} c_{fj'_b} a_{j_b j'_b k_b k'_b} G_{k_a k'_a} G_{k_b k'_b}^* B_{I_1 \rightarrow I_2}(\pi L) \quad (5.10)$$

où :

- $J_i$  est le moment cinétique total de l'état initial  $i$
- $c_{ij}$  est le coefficient de décomposition de l'état  $|J_i M_i \Pi_i\rangle$  sur la base des CSF  $|\nu_j J_j M_j \Pi_j\rangle$  :

$$|J_i M_i \Pi_i\rangle = \sum_j c_{ij} |\nu_j J_j M_j \Pi_j\rangle \quad (5.11)$$

- $a_{ijkk'}$  est le coefficient permettant d'exprimer un élément de matrice réduit d'un opérateur tensoriel  $O$  dans la base des CSF en fonction des éléments de matrice réduits dans la base des orbitales  $|n_k \kappa_k j_k m_k\rangle$  :

$$\langle \nu_i J_i \Pi_i || O || \nu_j J_j \Pi_j \rangle = \sum_{kk'} a_{ijkk'} \langle n_k \kappa_k j_k || O || n_{k'} \kappa_{k'} j_{k'} \rangle \quad (5.12)$$

Ces coefficients sont calculés à partir des résultats de MCDF, à l'aide d'un code développé par G. Gosselin du CEA/DAM/DIF.

- $G_{kk'}$  est donné par :

$$G_{kk'} = \sqrt{4\pi(2j_k + 1)} e^{\frac{(k_{12})^{L+1}}{L(2L+1)!!}} \left\langle j_k L \frac{1}{2} 0 \left| j_{k'} \frac{1}{2} \right. \right\rangle M_{kk'}^e(\pi L) \quad (5.13)$$

où  $j_k$  est le moment cinétique total de l'orbitale  $k$

### 5.1.3 Expression du taux d'excitation par effet NEET

#### Dans la base des orbitales

##### Cas d'un ion isolé

Lorsque les états atomiques initiaux et finals sont décrits par des configurations électroniques c'est-à-dire dans la base des orbitales, l'expression du taux de désexcitation de la configuration initiale, permettant la transition  $\alpha \rightarrow \beta$ , fait intervenir les populations des sous-couches initiale  $\alpha$  et finale  $\beta$  de cette configuration. Dans ce cas, le taux NEET, qui s'exprime en  $s^{-1}$ , s'écrit :

$$\lambda_{NEET} = n_\alpha \left(1 - \frac{n_\beta}{g_\beta}\right) \frac{\Gamma_\alpha + \Gamma_\beta}{\hbar} \frac{|W_{\alpha 1, \beta 2}|^2}{(\delta_{\alpha 1, \beta 2})^2 + \left(\frac{\Gamma_\alpha + \Gamma_\beta}{2}\right)^2} \quad (5.14)$$

où  $n_\beta$  et  $g_\beta$  désignent respectivement la population et la dégénérescence de l'orbitale  $\beta$ .

##### Cas d'un plasma

Dans le cas d'un plasma, il faut effectuer une somme sur toutes les transitions de tous les états de charge  $Q$ , de probabilité  $P_Q$ , pour déterminer le taux d'excitation total. Celui-ci s'écrit donc :

$$\lambda_{NEET}(T_e, n_e) = \sum_Q \sum_{\alpha \rightarrow \beta} P_Q P_{\alpha \rightarrow \beta}^Q n_\alpha \left(1 - \frac{n_\beta}{g_\beta}\right) \frac{\Gamma_\alpha + \Gamma_\beta}{\hbar} \frac{|W_{\alpha 1, \beta 2}|^2}{(\delta_{\alpha 1, \beta 2})^2 + \left(\frac{\Gamma_\alpha + \Gamma_\beta}{2}\right)^2} \quad (5.15)$$

où  $P_{\alpha \rightarrow \beta}^Q$  désigne la probabilité d'existence de la configuration initiale effectuant la transition  $\alpha \rightarrow \beta$  dans l'état de charge  $Q$ . Toutefois, cette expression ne sera pas utilisée dans le cadre de nos calculs MCDF.

#### Dans la base des états $|JM\Pi\rangle$

##### Cas d'un ion isolé

Pour un ion isolé et si les états atomiques sont décrits par les états  $|JM\Pi\rangle$ , le taux NEET s'écrit :

$$\begin{aligned} \lambda_{NEET} &= \frac{\Gamma_i}{\hbar} P_{NEET} \\ &= \frac{\Gamma_i + \Gamma_f}{\hbar} \frac{|W_{i1, f2}|^2}{(\delta_{i1, f2})^2 + \left(\frac{\Gamma_i + \Gamma_f}{2}\right)^2} \end{aligned} \quad (5.16)$$

## Cas d'un plasma

Comme indiqué ci-dessus, dans un plasma,  $\lambda_{NEET}(T_e, n_e)$  s'écrit comme une somme sur toutes les transitions atomiques  $i \rightarrow f$  de tous les états de charge  $Q$  du plasma :

$$\lambda_{NEET}(T_e, n_e) = \sum_Q \sum_{i \rightarrow f} P_Q P_i^Q \frac{\Gamma_i + \Gamma_f}{\hbar} \frac{|W_{i1, f2}|^2}{(\delta_{i1, f2})^2 + \left(\frac{\Gamma_i + \Gamma_f}{2}\right)^2} \quad (5.17)$$

où  $P_i^Q$  désigne la probabilité d'existence de l'état initial  $i$  à l'état de charge  $Q$ . Ces quantités ont été définies au chapitre 2.

La valeur du taux d'excitation par effet NEET dans un plasma dépend ainsi des propriétés de ce plasma (température  $T_e$  et densité électronique  $n_e$ ). Plus précisément, les termes  $P_Q$ ,  $P_i^Q$ ,  $\Gamma_i$  et  $\Gamma_f$  dépendent de  $T_e$  et  $n_e$ . La valeur de  $\lambda_{NEET}$  va également dépendre des hypothèses réalisées pour décrire le plasma (ETL ou HETL) et du modèle de physique atomique utilisé (modèle de l'atome moyen, MCDF, SCO-RCG,...).

### 5.1.4 Méthode de calcul basée sur le code MCDF

La méthode de calcul basée sur le code MCDF présentée au chapitre 2 est utilisée pour déterminer un taux d'excitation par effet NEET dans la base des états  $|JM\Pi\rangle$  à partir de l'équation (5.17). La méthode de sélection des configurations basée sur les résultats des calculs avec le modèle de l'atome moyen a été utilisée pour réduire les temps de calcul des données atomiques. La probabilité  $P_i^Q$  de l'équation (5.17) est évaluée à l'aide de la fonction de partition de l'équation (2.13).

### Calcul des largeurs des niveaux atomiques

Au chapitre 2, nous avons présenté un formalisme permettant de calculer les largeurs en énergie des configurations électroniques initiale et finale. Nous avons considéré que les largeurs des configurations électroniques étaient uniquement dues aux collisions avec les électrons du plasma. Ces largeurs sont calculées à l'aide des travaux de Baranger [45]. Pour une transition entre les orbitales  $\alpha$  et  $\beta$ , la largeur totale de la transition  $\Gamma_{\alpha \rightarrow \beta}$  ne dépend que de celles des configurations initiale  $\Gamma_\alpha$  et finale  $\Gamma_\beta$ . Ces largeurs  $\Gamma_\alpha$  et  $\Gamma_\beta$  dépendent respectivement des fonctions d'ondes des orbitales  $\alpha$  (notée  $\psi_\alpha$ ) et  $\beta$  (notée  $\psi_\beta$ ) ainsi que des caractéristiques du plasma (voir chapitre 2) :

$$\Gamma_{\alpha/\beta} = \alpha^2 \hbar c \frac{4\sqrt{2}}{3\sqrt{3}} \pi^{3/2} n_e \sqrt{\frac{m_e c^2}{T_e}} \left( \langle \psi_{\alpha/\beta} | R^2 | \psi_{\alpha/\beta} \rangle \right) \quad (5.18)$$

Les mêmes largeurs collisionnelles seront utilisées pour les états  $|JM\Pi\rangle$ . Ces états ayant des énergies peu éloignées de celles des configurations dont ils sont issus, nous faisons l'hypothèse que leurs largeurs sont peu différentes de celles des configurations.

Une autre méthode possible pour évaluer les largeurs des niveaux atomiques consiste à répartir la largeur d'une configuration électronique sur celles des niveaux obtenus à partir de cette configuration. Afin de déterminer la méthode la plus adaptée, des comparaisons avec des profils de raies calculés avec des codes dédiés (code PPP [110] par exemple) devraient être réalisées. Ces comparaisons n'ayant pas pu être réalisées dans le cadre de cette thèse, nous avons choisi, dans un premier temps, d'utiliser la méthode d'évaluation des largeurs des niveaux la plus simple.

Dans ce qui suit, nous examinerons l'impact d'une variation de ces largeurs sur le taux NEET.

## 5.2 Comparaison avec les résultats expérimentaux en cible solide

### 5.2.1 Calculs de $P_{NEET}$ dans la base des orbitales

Nous avons comparé les probabilités  $P_{NEET}$  obtenues à l'aide du code MCDF avec celles mesurées sur des ions isolés (cibles solides soumises à un faisceau de particules) dans les noyaux de  $^{197}\text{Au}$ ,  $^{189}\text{Os}$ , d' $^{193}\text{Ir}$  et de  $^{137}\text{Np}$ . Les calculs de  $P_{NEET}$  sont réalisés dans la base des orbitales (équations (5.2) et (5.6)) et dans la base des états  $|JM\Pi\rangle$  (équations (5.2) et (5.10)). Pour l'évaluation de  $P_{NEET}$  dans la base des orbitales, le code MCDF est utilisé avec une option permettant d'inhiber l'addition des moments cinétiques et donc la détermination des CSF et des états propres  $|JM\Pi\rangle$ .

Les valeurs de  $P_{NEET}$  calculées dans ces deux bases sont comparées aux valeurs expérimentales dans le tableau 5.1. Dans ce tableau sont également reportées les valeurs de  $P_{NEET}$  précédemment calculées par d'autres auteurs dans la base des orbitales ainsi que les caractéristiques des transitions atomiques et nucléaire impliquées dans le NEET.

	<sup>197</sup> Au	<sup>189</sup> Os	<sup>193</sup> Ir	<sup>237</sup> Np
<b>Transition nucléaire</b>				
$I_1^\pi \rightarrow I_2^\pi$	$\frac{3}{2}^+ \rightarrow \frac{1}{2}^+$	$\frac{3}{2}^- \rightarrow \frac{5}{2}^-$	$\frac{3}{2}^+ \rightarrow \frac{1}{2}^+$	$\frac{5}{2}^+ \rightarrow \frac{7}{2}^-$
$\pi L$	$M1 + E2$	$M1 + E2$	$M1 + E2$	$E1$
$\Delta E_{12}$ (keV)	77,351	69,523	73,031	102,98
$B_{I_1 \rightarrow I_2}(\pi L)$ (W.u)	$2,045 \times 10^{-3}$ (M1)	$3,84 \times 10^{-3}$ (M1)	$4,9 \times 10^{-4}$ (M1)	$4,27 \times 10^{-6}$ (E1)
<b>Transition atomique</b>				
Transition $\alpha \rightarrow \beta$	$3s \rightarrow 1s$	$3s \rightarrow 1s$	$3s \rightarrow 1s$	$2p_{3/2} \rightarrow 1s$
Largeurs $\Gamma_\alpha - \Gamma_\beta$ (eV) [24]	51,1 – 20,9	43,7 – 20,4	51,1 – 20,9	98,8 – 8,0
Mismatch $\delta_{\alpha 1, \beta 2}$ (eV)	-83	1272	-120	-1952
$ W_{\alpha 1, \beta 2} ^2$ (eV <sup>2</sup> )	$1,02 \times 10^{-4}$	$1,33 \times 10^{-4}$	$1,91 \times 10^{-5}$	$6,78 \times 10^{-6}$
<b>Probabilité <math>P_{NEET}</math> publiée</b>				
$P_{NEET}^{exp}$ expérimentale	$(5,0 \pm 0,6) \times 10^{-8}$ [20]	$< 9 \times 10^{-10}$ [21]	$(2,8 \pm 0,4) \times 10^{-9}$ [22]	$(2,1 \pm 0,6) \times 10^{-4}$ [23]
$P_{NEET}$ calculée dans la base des orbitales	$3,57 \times 10^{-8}$ [24]	$1,13 \times 10^{-10}$ [24]	$2 \times 10^{-9}$ [22]	$2,19 \times 10^{-12}$ [24]
<b>Probabilité <math>P_{NEET}</math> calculée avec MCDF (ce travail)</b>				
$P_{NEET}$ calculée dans la base des orbitales	$1,75 \times 10^{-8}$	$1,20 \times 10^{-10}$	$1,73 \times 10^{-9}$	$1,92 \times 10^{-12}$
$P_{NEET}$ calculée dans la base des états $ JMII\rangle$	$8,80 \times 10^{-9}$	-	$8,65 \times 10^{-10}$	$9,34 \times 10^{-13}$

TABLEAU 5.1 – Caractéristiques des transitions atomiques et nucléaires et comparaisons des valeurs expérimentales et calculées de la probabilité  $P_{NEET}$  pour les noyaux d'<sup>197</sup>Au, <sup>189</sup>Os, <sup>193</sup>Ir et <sup>237</sup>Np. Les calculs de  $P_{NEET}$  sont effectués dans la base des orbitales et dans la base des états  $|JMII\rangle$  avec le code MCDF. Les valeurs des largeurs  $\Gamma_\alpha$  et  $\Gamma_\beta$  n'étant pas données pour l'<sup>193</sup>Ir, nous avons utilisé celles de l'<sup>197</sup>Au puisque les deux transitions atomiques ont des caractéristiques très similaires.

Nous constatons que dans le cas des noyaux d' $^{197}\text{Au}$  et de  $^{193}\text{Ir}$ , les résultats des calculs publiés sont proches des valeurs expérimentales. Dans le cas de  $^{189}\text{Os}$ , le résultat théorique est également compatible avec la borne supérieure donnée sur la probabilité  $P_{NEET}^{exp}$ . En revanche, nous notons un écart de six ordres de grandeur entre les valeurs expérimentale et calculée de  $P_{NEET}$  dans le cas du  $^{237}\text{Np}$ . Cet écart important suggère, selon Harston [24], une surestimation importante de la probabilité  $P_{NEET}$  expérimentale. Nous pouvons également noter que les valeurs de  $P_{NEET}$  calculées avec le code MCDF sont compatibles avec celles publiées par Harston [24] et Kishimoto et al.[22].

### 5.2.2 Calculs de $P_{NEET}$ dans la base des états $|JM\Pi\rangle$

La probabilité  $P_{NEET}$  peut également être calculée dans la base des états  $|JM\Pi\rangle$  à l'aide des équations (5.2) et (5.10). Dans ce cas, pour chaque transition  $\alpha \rightarrow \beta$  entre deux configurations électroniques, un nombre  $n_{raie}$  de raies est déterminé par MCDF. Pour chacune de ces raies, une probabilité  $P_{NEET}^i$  est calculée. La probabilité totale est alors la somme des différents  $P_{NEET}^i$  :

$$P_{NEET} = \sum_{i=1}^{n_{raie}} P_{NEET}^i \quad (5.19)$$

Le calcul de  $P_{NEET}$  dans la base des états a été réalisé pour les noyaux de  $^{197}\text{Au}$ , d' $^{193}\text{Ir}$  et de  $^{237}\text{Np}$ . Les valeurs obtenues sont également reportées dans le tableau 5.1. A titre d'exemple, le calcul de  $P_{NEET}$  dans le cas de  $^{197}\text{Au}$  est détaillé dans le tableau 5.2. La transition  $3s \rightarrow 1s$  conduit à quatre transitions entre niveaux  $|J\pi\rangle$ . Ce calcul n'a pas pu être réalisé pour le noyau d' $^{189}\text{Os}$  car le code effectuant l'évaluation des coefficients  $a_{ijkk'}$ , définis dans l'équation (5.12), ne permet pas actuellement de traiter quatre électrons dans l'orbitale  $5d_{5/2}$ .

Nous constatons que les valeurs de  $P_{NEET}$  calculées dans la base des états  $|JM\Pi\rangle$  sont du même ordre de grandeur que celles calculées dans la base des orbitales. Elles sont également compatibles avec les valeurs expérimentales.

Raie ( $J_i^\pi \rightarrow J_f^\pi$ )	$3^- \rightarrow 2^-$	$2^- \rightarrow 2^-$	$3^- \rightarrow 3^-$	$2^- \rightarrow 3^-$
Mismatch $\delta_{i1,f2}$ (eV)	-82,746	-82,746	-82,746	-82,746
Probabilité $P_{NEET}^i$	$2,44 \times 10^{-9}$	$9,78 \times 10^{-10}$	$1,96 \times 10^{-9}$	$3,42 \times 10^{-9}$
Probabilité $P_{NEET}$ totale	$8,80 \times 10^{-9}$			

TABLEAU 5.2 – Détails des calculs de la probabilité  $P_{NEET}$  dans la base des états atomiques  $|JM\Pi\rangle$  dans le cas du noyau de  $^{197}\text{Au}$ . Les largeurs en énergie des états atomiques ont été calculées à partir de celles des configurations [24] et de la méthode décrite au paragraphe 5.1.4.

## 5.3 Évaluation du taux d'excitation de la transition $6^- \rightarrow 5^-$ du $^{84}\text{Rb}$ dans un plasma produit par le laser PHELIX à une intensité de $\sim 6 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$

### 5.3.1 Taux d'excitations calculés par ISOMEX

Le code ISOMEX, développé par G. Gosselin et al., a permis les premières évaluations des taux d'excitations nucléaires dans un plasma (excitations par effet NEET, NEEC, diffusion inélastique d'électrons, photoexcitation). Dans ce code, la physique atomique est décrite à partir d'un modèle d'atome moyen relativiste avec un élargissement gaussien. Nous en rappelons ci-dessous les principales caractéristiques.

#### Énergie d'une transition atomique dans le modèle de l'atome moyen

Dans le modèle d'atome moyen relativiste (voir chapitre 2), une seule configuration électronique moyenne est déterminée à une température et une densité électronique donnée. Aussi, une transition à un électron  $\alpha \rightarrow \beta$  entre les orbitales  $\alpha$  et  $\beta$  de cette configuration moyenne ne

conduit qu'à une seule raie à l'énergie  $\overline{\Delta E}_{\alpha\beta}$ . Cette énergie peut être déterminée par analogie avec l'expression de l'énergie d'une transition entre deux configurations réelles et est donnée par [36] :

$$\overline{\Delta E}_{\alpha\beta} = \overline{U}_\alpha - \overline{U}_\beta - (\overline{V}_{\alpha\alpha} - \overline{V}_{\beta\alpha}) + \sum_k (\overline{V}_{\alpha k} - \overline{V}_{\beta k}) \overline{n}_k \quad (5.20)$$

où :

- $\overline{U}_k$  est l'énergie moyenne d'un électron de l'orbitale  $k$ . Cette énergie est la somme de l'énergie cinétique et de l'énergie d'interaction de l'électron avec le noyau.
- $\overline{V}_{kk'}$  est l'énergie moyenne d'interaction entre un électron de l'orbitale  $k$  et un électron de l'orbitale  $k'$ .
- $\overline{n}_k$  est la population moyenne de l'orbitale  $k$ .

### Le modèle de l'atome moyen gaussien

Considérons un ensemble de configurations électroniques réelles  $\{C_i\}$  (occupations des sous-couches entières) et une transition  $\alpha \rightarrow \beta$ . A l'aide du modèle de l'atome moyen, cet ensemble de configurations est représenté par une configuration moyenne et l'énergie de la transition  $\alpha \rightarrow \beta$  par l'énergie moyenne  $\overline{\Delta E}_{\alpha\beta}$ . Si plusieurs configurations de l'ensemble  $\{C_i\}$  peuvent réaliser la transition  $\alpha \rightarrow \beta$  (au moins un électron dans l'orbitale  $\alpha$  et un trou dans l'orbitale  $\beta$ ), plusieurs énergies  $\Delta E_{\alpha\beta}^i$  seront obtenues pour la transition  $\alpha \rightarrow \beta$ . Ces énergies seront légèrement différentes à cause du placement différent des électrons spectateurs et se répartiront autour de la valeur  $\overline{\Delta E}_{\alpha\beta}$  obtenue avec le modèle de l'atome moyen. La description de la dispersion des énergies  $\Delta E_{\alpha\beta}^i$  autour de celle obtenue avec l'atome moyen est réalisée de manière statistique à l'aide de la théorie classique des fluctuations. Pour cela, une distribution gaussienne, centrée sur la valeur de  $\overline{\Delta E}_{\alpha\beta}$  et caractérisée par une variance  $\sigma_{corr}^2$  est alors introduite. Celle-ci, appelée variance corrélée, prend en compte les interactions électron-électron, les occupations des orbitales et la température du plasma. L'expression de  $\sigma_{corr}^2$  peut être trouvée dans la référence [36] et sa démonstration complète dans la référence [111].

La prise en compte de la dispersion des énergies  $\Delta E_{\alpha\beta}^i$  autour de  $\overline{\Delta E}_{\alpha\beta}$  par une distribution gaussienne définit le modèle de l'atome moyen gaussien.

### Expression du taux d'excitation par effet NEET dans le modèle de l'atome moyen gaussien

La description de la physique atomique dans les plasmas à partir du modèle de l'atome moyen gaussien implique une modification de l'expression du taux d'excitation par effet NEET. Celui-ci s'exprime alors [1, 36] :

$$\lambda_{NEET}^{\alpha \rightarrow \beta} = \frac{2\pi}{\hbar} \overline{n}_\alpha (1 - \overline{p}_\beta) \left| \overline{W}_{\alpha 1, \beta 2} \right|^2 \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma_{corr}} \exp \left( \frac{-\overline{\delta}_{\alpha 1, \beta 2}^2}{2\sigma_{corr}^2} \right) \quad (5.21)$$

où  $\overline{W}_{\alpha\beta}$  est l'élément de matrice de couplage atome-noyau calculé à partir des fonctions d'onde atomiques moyennes et  $\overline{\delta}_{\alpha 1, \beta 2}$  est le désaccord moyen en énergie entre les transitions atomique et nucléaire :

$$\overline{\delta}_{\alpha 1, \beta 2} = \overline{\Delta E}_{\alpha\beta} - \Delta E_{12} \quad (5.22)$$

Notons qu'il est possible de faire une analogie entre l'expression (5.21) et la règle d'or de Fermi.

### Résultats obtenus avec ISOMEX

Le tableau 5.3 rassemble les caractéristiques du plasma de  $^{84}\text{Rb}$  produit avec le laser PHELIX et celles de la transition nucléaire évaluées (ou vérifiées) utilisées dans nos calculs.

<b>Propriétés du plasma</b>	
Température HETL (eV)	1400
Température ETL d'ionisation (eV)	270
Densité (g/cm <sup>3</sup> )	10 <sup>-2</sup>
État de charge moyen	27,4
<b>Propriétés de la transition nucléaire</b>	
Transition	6 <sup>-</sup> → 5 <sup>-</sup>
Énergie (keV)	3,498 (6)
Nature multipolaire	M1 + E2
$B_{6^- \rightarrow 5^-}$ (M1) (W.u)	0,068 (Döring et al. [38], ré-évaluée par Kondev [37])
$B_{6^- \rightarrow 5^-}$ (E2) (W.u)	0,762 (Calculée par N. Smirnova [102])

TABLEAU 5.3 – Récapitulatif des caractéristiques du plasma de Rb produit avec le laser PHELIX et celles de la transition nucléaire 6<sup>-</sup> → 5<sup>-</sup> du <sup>84</sup>Rb.

Les résultats de ces calculs, effectués par G. Gosselin du CEA/DAM/DIF [112], sont présentés sur la figure 5.1. Sur celle-ci les taux d'excitation par les processus de photoexcitation, NEEC, NEET et (e,e') ainsi que le taux total sont tracés en fonction de la température du plasma et pour une densité de 10<sup>-2</sup> g/cm<sup>3</sup>. Dans ces calculs, les transitions des couches  $n = 4$  à  $n = 6$  vers la couche  $n = 2$  ont été prises en compte.

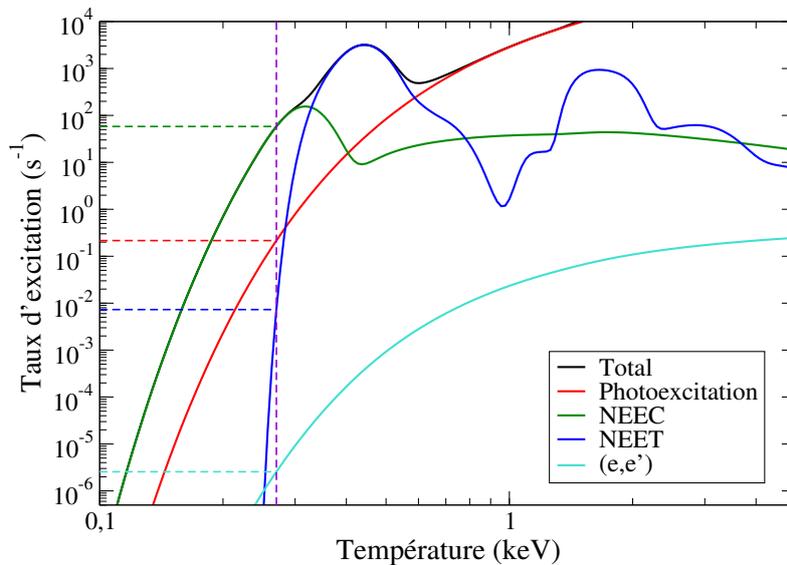


FIGURE 5.1 – Taux d'excitations de la transition 6<sup>-</sup> → 5<sup>-</sup> du <sup>84</sup>Rb par les processus de photoexcitation, NEEC, NEET et (e,e') en fonction de la température du plasma et pour une densité de 10<sup>-2</sup> g/cm<sup>3</sup>. Le taux d'excitation total est également représenté. Les transitions des couches  $n = 4$  à  $n = 6$  vers la couche  $n = 2$  ont été considérées.

A l'exception du NEET, les évolutions générales des taux d'excitations sont similaires à celles présentées sur la figure 1.7 du chapitre 1. Le taux NEET maximum de quelques 10<sup>5</sup> s<sup>-1</sup> à  $T = 400$  eV présenté sur la figure 1.7 passe à quelques 10<sup>3</sup> s<sup>-1</sup> principalement à cause de la nouvelle valeur de l'énergie de la transition nucléaire utilisée dans le calcul (rappelons qu'elle est passée de 3,050 keV à 3,498 keV). Le taux NEET présente deux maxima (à  $T = 440$  eV et  $T = 1700$  eV) ayant des valeurs comparables. Le maximum secondaire à haute température ( $T = 1700$  eV) avait une intensité beaucoup plus faible dans le calcul précédent. Cette température est hors d'atteinte à PHELIX. Notons, que l'épaule situé à  $T = 300$  eV sur la figure 1.7 n'est plus présent dans le nouveau calcul.

A  $T = 270$  eV, le processus d'excitation dominant est le NEEC avec un taux de 58,2 s<sup>-1</sup>. Le NEET est le troisième processus (après le NEEC et la photoexcitation) à contribuer au taux d'excitation total avec un taux  $\lambda_{NEET} = 7,31 \times 10^{-3}$  s<sup>-1</sup>. La diffusion inélastique d'électrons

est, quant à elle, négligeable. Tous ces taux sont précisés dans le tableau 5.4.

Processus	Taux d'excitation (s <sup>-1</sup> )
NEEC	58,2
Photoexcitation	0,215
NEET	$7,31 \times 10^{-3}$
( <i>e,e'</i> )	$2,56 \times 10^{-6}$
Total	58,4

TABLEAU 5.4 – Taux d'excitations du <sup>84m</sup>Rb par photoexcitation, NEEC, NEET, (*e,e'*) et taux d'excitation total pour un plasma de <sup>84m</sup>Rb créé avec le laser PHELIX et dont les propriétés sont décrites dans le tableau 5.3

Cependant, la question de la validité de l'emploi d'une méthode statistique pour décrire les états atomiques peut être posée :

- En ce qui concerne la photoexcitation, seules les caractéristiques de la transition nucléaire et la température du plasma interviennent dans le calcul du taux d'excitation. Aussi, aucune des approximations effectuées pour la détermination des états atomiques n'a d'influence sur le calcul du taux d'excitation.
- Concernant le NEEC, les états atomiques interviennent dans le calcul du taux d'excitation de ce processus puisqu'il faut tenir compte des différentes sous-couches sur lesquelles l'électron libre peut être capturé. Cependant, l'utilisation d'une méthode statistique pour l'évaluation du taux NEEC est plus adaptée que dans le cas du NEET. En effet, comme l'évaluation du taux NEEC est réalisée en intégrant sur la distribution en énergie des électrons du plasma, qui varie lentement et de façon continue en fonction de la température du plasma, la connaissance précise des énergies des transitions atomiques est moins cruciale.
- Dans le cas du NEET, processus résonant, il est nécessaire de décrire précisément les états atomiques et en particulier les énergies des raies X pouvant conduire à une excitation nucléaire. Nous confronterons ci-dessous les taux calculés avec ce code avec ceux évalués avec notre méthode de calcul détaillée basée sur le code MCDF.

### 5.3.2 Taux d'excitations par effet NEET calculés à l'aide de MCDF

Pour ces calculs, nous utilisons l'expression (5.17) et la distribution d'états de charge déterminée par AVERROËS à une température HETL de 1,4 keV (équivalent ETL de  $T = 270$  eV, voir figure 3.13 du chapitre 3). Dans ces conditions et pour une énergie nucléaire de 3,498 keV, nous obtenons un taux NEET total, en prenant en compte les composantes *M1* et *E2* des transitions impliquées, de :

$$\lambda_{NEET} = 2,22 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$$

A cette énergie, les taux NEET calculés avec MCDF et ISOMEX sont donc du même ordre de grandeur.

Dans ce qui suit, nous estimerons et utiliserons les incertitudes sur les grandeurs utilisées pour le calcul de  $\lambda_{NEET}$  afin de déterminer une plage d'évolution de ce taux. Nous discuterons de plus de l'effet de l'ouverture des couches électroniques supérieures à  $n = 6$  sur ce taux.

### Évolution du taux d'excitation NEET en fonction de l'énergie de la transition nucléaire

Bien que nous ayons réduit l'incertitude sur l'énergie de la transition nucléaire, celle-ci est encore déterminée avec une incertitude statistique de 6 eV (à  $1 \sigma$ ). Afin d'étudier la variation du taux NEET en fonction de l'énergie de la transition nucléaire, nous avons fait varier cette

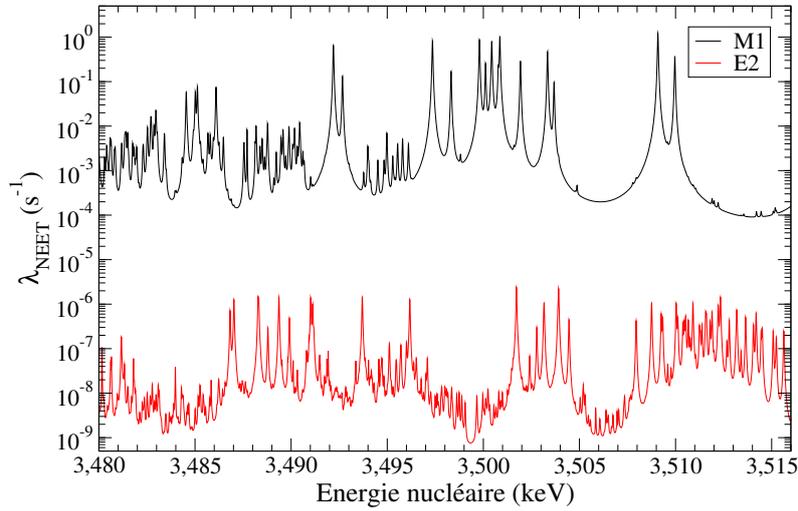


FIGURE 5.2 – Évolution du taux d’excitation NEET en fonction de l’énergie de la transition nucléaire pour les composantes  $M1$  et  $E2$  de cette transition. Calculs effectués à une température de 270 eV.

dernière de plus ou moins  $3\sigma$  autour de sa valeur moyenne par pas de 1 meV. Cette évolution est tracée sur la figure 5.2 pour les composantes  $M1$  et  $E2$  de ce taux NEET.

Nous constatons que la contribution de la composante  $E2$  à ce taux est négligeable. Aussi, nous ne discuterons que de la composante  $M1$  dans la suite de ce chapitre.

Le taux d’excitation NEET fluctue sur plusieurs ordres de grandeur en fonction de l’énergie de la transition nucléaire. En effet, pour la composante  $M1$ , celui-ci varie entre :

$$\lambda_{min} = 9,09 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1} \text{ et } \lambda_{max} = 1,22 \text{ s}^{-1} \quad (5.23)$$

pour une énergie de la transition nucléaire comprise entre 3,480 et 3,516 keV. Sur cet intervalle, les taux NEET moyens sont :  $1,56 \times 10^{-2} \text{ s}^{-1}$  (moyenne arithmétique) et  $1,38 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$  (moyenne géométrique). Aussi, pour étudier la faisabilité d’une expérience, la valeur moyenne du taux NEET seule n’est pas représentative quand elle est, comme dans notre cas, très éloignée des taux d’excitation minimal et maximal.

Les variations importantes du taux NEET en fonction de l’énergie de transition nucléaire ne peuvent pas être reproduites à l’aide de la méthode statistique implantée au sein d’ISOMEX. En effet, chaque transition atomique étant représentée par une gaussienne dont la largeur est supérieure à quelques eV, les variations du taux NEET observées sur la figure 5.2 sont fortement lissées. Le fait que les taux NEET calculés avec MCDF et ISOMEX pour une énergie de transition nucléaire de 3,498 keV sont proches est probablement fortuit.

La figure 5.3 présente les taux d’excitations NEET en fonction de l’énergie de la transition nucléaire pour les états de charge contribuant majoritairement au taux d’excitation total. Ce dernier est calculé comme la somme des taux correspondants aux états de charge compris entre  $Q = 29^+$  et  $Q = 34^+$ . Ces taux sont déjà pondérés par la distribution d’états de charge (voir formule (5.17)). D’après cette figure, ce sont les états de charge  $Q = 30^+$  et  $Q = 31^+$  qui contribuent majoritairement au taux d’excitation NEET pour des énergies de la transition nucléaire inférieures à 3,497 keV. Pour des énergies supérieures, la contribution de l’état de charge  $Q = 31^+$  domine. Ce sont donc les états de charge élevés qui participent au taux d’excitation NEET. Ceux-ci ne sont pas dominants à une température de 270 eV : les états de charge  $Q = 30^+$  et  $Q = 31^+$  sont présents dans le plasma avec des proportions de 1,05% et 0,036% respectivement. Par conséquent, le taux d’excitation NEET correspondant est faible à cette température.

Pour ces états de charge élevés et à basse température, les densités de raies sont assez faibles et le calcul du spectre radiatif à l’aide d’une méthode statistique est alors inadapté. En effet, même si la valeur du taux NEET obtenue avec ISOMEX est compatible avec la moyenne géométrique calculée à partir des résultats de MCDF, le taux NEET varie de plusieurs ordres de grandeur autour de cette valeur moyenne. Par ailleurs, comme les états de charge impliqués

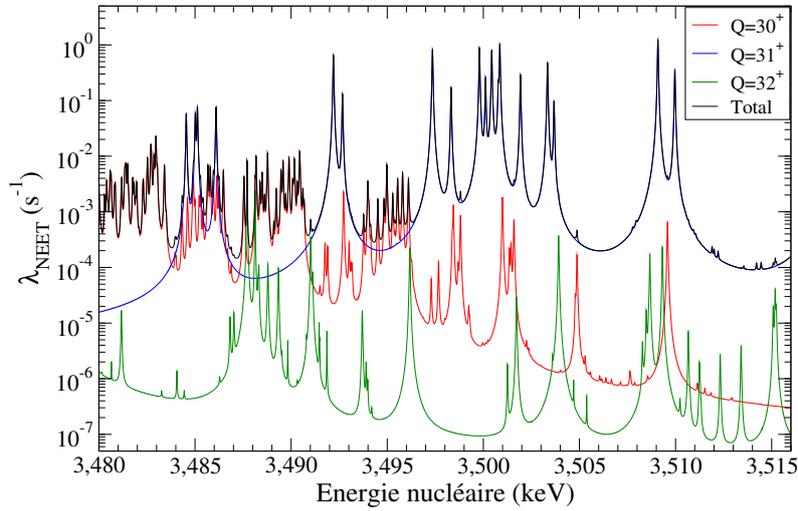


FIGURE 5.3 – Évolution du taux d’excitation NEET de la composante  $M1$  en fonction de l’énergie de la transition nucléaire pour les états de charge allant de  $Q = 30^+$  à  $Q = 32^+$  à une température de 270 eV. Le taux d’excitation total, correspondant à celui tracé sur la figure 5.2 est également reporté.

dans l’effet NEET sont éloignés de l’état de charge moyen, les résultats obtenus à partir du code d’atome moyen sont sujets à caution.

### Effet des incertitudes sur les probabilités de transition nucléaire réduites

La probabilité de transition réduite associée à la composante  $M1$  a été vérifiée à partir de nos données tandis que celle de la composante  $E2$  a été calculée à l’aide du modèle en couches. Les incertitudes sur ces deux probabilités ne sont pas connues. La probabilité de transition réduite apparaît comme un facteur multiplicatif dans les expressions du taux d’excitation NEET quelle que soit la base choisie pour décrire les états atomiques.

Pour la composante  $M1$  dominante, nous avons défini un encadrement de cette probabilité compatible avec la valeur de  $B_{5 \rightarrow 6^-}(M1) = 0,08$  W.u. déterminée par Döring et al. [38]. De plus, les calculs de type modèle en couches prédisent une valeur de 0,116 W.u. qui est également compatible avec celle de Döring et al. Il est difficile d’évaluer précisément les incertitudes sur cette probabilité avec les données dont nous disposons. Nous estimons que la valeur réelle de  $B_{5 \rightarrow 6^-}(M1)$  n’est pas éloignée de plus d’un facteur deux de celle obtenue par Döring et al. Le taux NEET calculé peut donc fluctuer au plus d’un facteur deux :

$$\lambda_{min} = 4,55 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1} \text{ et } \lambda_{max} = 2,44 \text{ s}^{-1} \quad (5.24)$$

### Effets des largeurs des niveaux atomiques

Les largeurs des niveaux atomiques ont été calculées, à l’aide des travaux de Baranger [45], en les considérant comme résultant uniquement des collisions électroniques dans le plasma. Afin d’étudier la sensibilité du taux NEET à ces largeurs, des calculs ont été effectués en prenant arbitrairement des largeurs collisionnelles  $\Gamma$  plus grandes et plus petites d’un ordre de grandeur par rapport au résultat obtenu avec le formalisme de Baranger. Les résultats de ces calculs sont présentés sur la figure 5.4 et précisés dans le tableau 5.5.

Le tableau 5.5 présente une comparaison des taux NEET minimal, maximal et moyen pour les trois courbes de taux NEET de la figure 5.4. Nous constatons qu’une augmentation des largeurs en énergie des niveaux atomiques conduit à diminuer les fluctuations du taux NEET. La valeur minimale de ce taux est, en effet, plus élevée d’un facteur dix tandis que le taux NEET atteint une valeur maximale dix fois plus faible. A l’inverse, une diminution des largeurs des états atomiques entraîne une augmentation du taux NEET maximum d’un ordre de grandeur et une diminution du taux minimum du même ordre. Nous tiendrons compte de cette variation possible

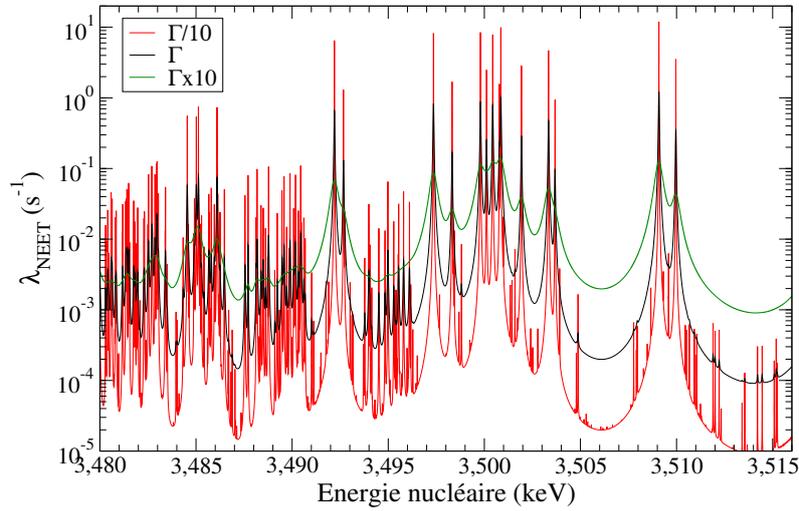


FIGURE 5.4 – Évolution du taux NEET en fonction de l'énergie de la transition nucléaire en augmentant ou en diminuant d'un ordre de grandeur les largeurs collisionnelles  $\Gamma$ .

Largeur collisionnelle	$\Gamma/10$	$\Gamma$	$\Gamma \times 10$
$\lambda_{NEET}$ maximum ( $s^{-1}$ )	11,9	1,22	0,142
$\lambda_{NEET}$ minimum ( $s^{-1}$ )	$9,09 \times 10^{-6}$	$9,09 \times 10^{-5}$	$9,04 \times 10^{-4}$
$\lambda_{NEET}$ moyen ( $s^{-1}$ )			
Moyenne arithmétique	$1,56 \times 10^{-2}$	$1,56 \times 10^{-2}$	$1,56 \times 10^{-2}$
Moyenne géométrique	$1,88 \times 10^{-4}$	$1,38 \times 10^{-3}$	$6,02 \times 10^{-3}$

TABLEAU 5.5 – Caractéristiques des taux NEET calculés en faisant varier d'un facteur 10 les valeurs des largeurs collisionnelles.

d'un ordre de grandeur sur le taux NEET maximum pour évaluer la faisabilité d'une expérience de mise en évidence de l'excitation nucléaire par effet NEET dans un plasma.

Les seules variations des largeurs atomiques conduisent à :

$$\lambda_{min} = 9,09 \times 10^{-6} \text{ s}^{-1} \text{ et } \lambda_{max} = 11,9 \text{ s}^{-1} \quad (5.25)$$

### Influence de l'ouverture de nouvelles couches électroniques

Les calculs ISOMEX et MCDF présentés jusqu'à présent prenaient en compte les transitions des couches  $n = 4$  à  $n = 6$  vers la couche  $n = 2$ . Ce choix était justifié par l'analyse des spectres X de  $^{84}\text{Rb}$  créés avec le laser PHELIX. Cependant, il est possible que des transitions ayant un taux radiatif très faible et donc non identifiées sur les spectres  $E1$  participent au taux d'excitation NEET. Pour étudier l'influence de l'ouverture de nouvelles couches électroniques, des calculs de taux d'excitation NEET ont été menés pour des transitions des couches  $n = 4$  à  $n = 8$  vers la couche  $n = 2$  avec MCDF. Les résultats de ces calculs sont présentés sur la figure 5.5. L'ouverture des couches  $n = 7$  et  $n = 8$  induit une augmentation du taux d'excitation NEET car de nouvelles transitions électroniques participent à ce taux. Le taux NEET maximal est, en effet, un ordre de grandeur plus important que celui calculé avec les couches  $n = 4$  à  $n = 6$ . Le tableau 5.6 présente une comparaison des taux NEET minimal, maximal et moyen pour les deux courbes de la figure 5.5.

D'après ce tableau, l'ouverture des couches  $n = 7$  et  $n = 8$  augmente le taux NEET maximum d'un ordre de grandeur de  $1,22 \text{ s}^{-1}$  à  $13,8 \text{ s}^{-1}$ . Le taux NEET minimum est augmenté d'un facteur cent et passe de  $10^{-4} \text{ s}^{-1}$  à  $10^{-2} \text{ s}^{-1}$ .

La figure 5.6 présente l'évolution de ces taux en fonction de l'énergie de la transition nucléaire pour les états de charge participant majoritairement au taux NEET total. Sur cette figure, les états de charge  $Q = 29^+$  à  $Q = 31^+$  participent majoritairement au taux d'excitation total. L'état de charge  $Q = 29^+$  contribue principalement à augmenter le taux NEET minimum. Avec

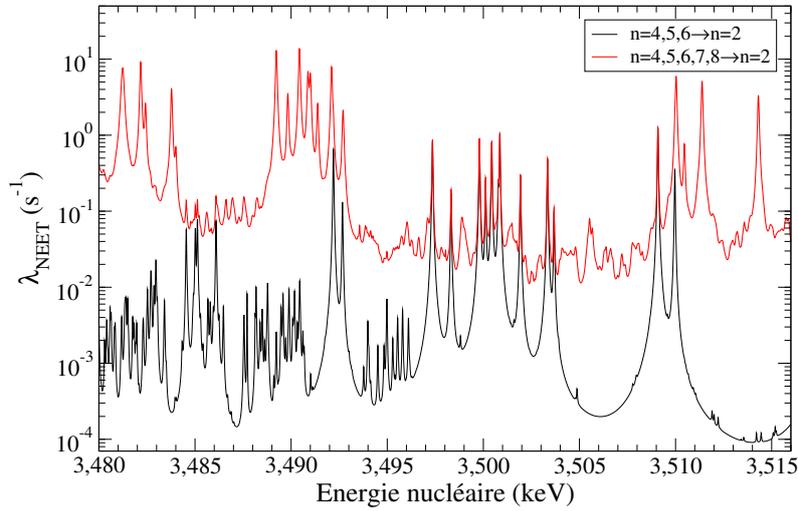


FIGURE 5.5 – Evolution du taux NEET en fonction de l'énergie de la transition nucléaire pour des transitions des couches  $n = 4$  à  $n = 6$  et  $n = 4$  à  $n = 8$  vers la couche  $n = 2$ .

Transitions	$n = 4,5,6 \rightarrow n = 2$	$n = 4,5,6,7,8 \rightarrow n = 2$
$\lambda_{NEET}$ maximum ( $s^{-1}$ )	1,22	13,8
$\lambda_{NEET}$ minimum ( $s^{-1}$ )	$9,09 \times 10^{-5}$	$1,12 \times 10^{-2}$
$\lambda_{NEET}$ moyen ( $s^{-1}$ )		
Moyenne arithmétique	$1,56 \times 10^{-2}$	$4,41 \times 10^{-1}$
Moyenne géométrique	$1,38 \times 10^{-3}$	$1,04 \times 10^{-1}$

TABLEAU 5.6 – Caractéristiques des taux NEET calculés avec MCDF pour des transitions  $n = 4,5,6 \rightarrow n = 2$  et  $n = 4,5,6,7,8 \rightarrow n = 2$  à une température de 270 eV.

l'ouverture des couches  $n = 7$  et  $n = 8$ , l'état de charge  $Q = 30^+$  a une contribution plus importante que celle de  $Q = 31^+$ , ce qui n'était pas le cas en ne considérant que les transitions  $n = 4,5,6 \rightarrow n = 2$ .

Pour tenter d'estimer l'apport éventuel des couches supérieures à  $n = 8$ , nous nous sommes basés sur l'évolution des spectres radiatifs  $M1$ . Ceux-ci ont été calculés avec MCDF pour l'état de charge  $Q = 30^+$  par G. Gosselin en utilisant le calculateur TERA100 du CEA/DAM/DIF et en autorisant au maximum des transitions depuis la couche  $n = 12$  vers la couche  $n = 2$  [112]. Ces spectres sont tracés sur la figure 5.7 dans la gamme d'énergie d'intérêt pour le calcul du taux NEET. Sur cette figure, l'effet de l'ouverture des couches  $n = 7$  et  $n = 8$  est clairement visible puisque le spectre comporte des raies absentes du spectre des transitions  $n = 4,5,6 \rightarrow n = 2$ . L'ouverture des couches supérieures à  $n = 8$  apporte de nouvelles raies dans la gamme d'énergie d'intérêt pour l'effet NEET. Il est donc probable que le taux NEET augmente en ouvrant ces couches. Il est cependant difficile d'estimer quantitativement cette augmentation. Notons cependant que l'ouverture des couches  $n = 11$  et  $n = 12$  n'apporte que peu de raies supplémentaires par rapport au spectre des transitions  $n = 4$  à  $n = 10$  vers  $n = 2$ . Les calculs du taux NEET en incluant les couches  $n > 8$  n'ont pas été réalisés à ce jour.

Afin d'évaluer l'effet de l'ouverture des couches  $n = 7$  et  $n = 8$  sur les taux d'excitations des autres processus en jeu dans le plasma, des calculs ISOMEX ont été effectués. Les résultats sont présentés dans le tableau 5.7. Le taux NEET calculé, pour une transition nucléaire de 3,498 keV, de  $2,18 s^{-1}$  est cette fois très éloigné du taux NEET calculé avec MCDF d'une valeur de  $2,5 \times 10^{-2} s^{-1}$ .

Comme attendu, le taux d'excitation associé au processus NEEC n'est pas sensiblement modifié.

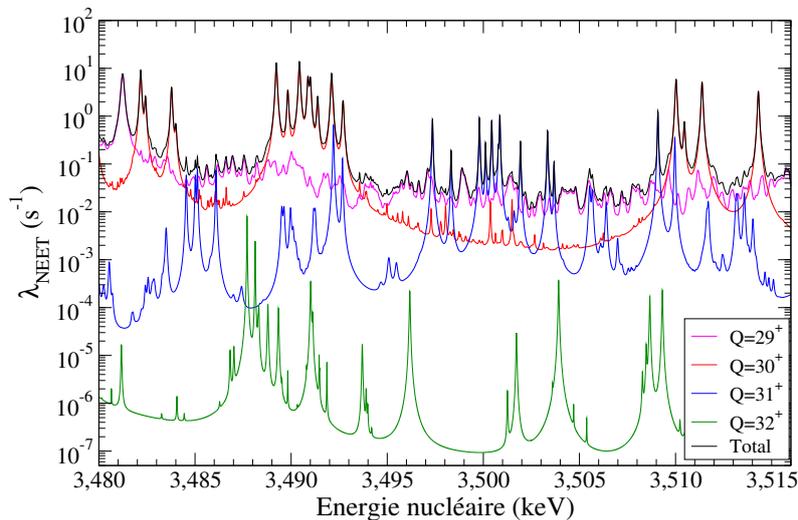


FIGURE 5.6 – Évolution du taux d’excitation NEET en fonction de l’énergie de la transition nucléaire pour les états de charge allant de  $Q = 29^+$  à  $Q = 32^+$  et une température de 270 eV. Le taux d’excitation total est également reporté.

Processus	Taux d’excitation ( $s^{-1}$ )	
	Transitions $n = 4,5,6 \rightarrow n = 2$	Transitions $n = 4,5,6,7,8 \rightarrow n = 2$
NEEC	58,2	58,2
NEET	$7,31 \times 10^{-3}$	2,18
Photoexcitation	0,215	0,215
$(e, e')$	$2,56 \times 10^{-6}$	$2,56 \times 10^{-6}$
Total	58,4	60,7

TABLEAU 5.7 – Taux d’excitations par photoexcitation, NEEC, NEET,  $(e, e')$  et taux d’excitation total pour un plasma de  $^{84m}\text{Rb}$  créé avec le laser PHELIX ( $T = 270$  eV) en considérant des transitions entre les couches  $n = 4$  à  $n = 8$  vers la couche  $n = 2$ . Le plasma possède une densité de  $10^{-2}$  g/cm<sup>3</sup>.

### 5.3.3 Estimation du nombre d’isomères excités

Pour l’évaluation du nombre d’isomères excités dans un plasma de  $^{84}\text{Rb}$  à  $T = 270$  eV, nous avons utilisé les taux d’excitation par NEEC ( $\lambda_{NEEC} = 58,2$  s<sup>-1</sup>) et photoexcitation ( $\lambda_{photo} = 0,215$  s<sup>-1</sup>) issus d’ISOMEX et le taux NEET maximum calculé avec MCDF ( $\lambda_{NEET} = 13,8$  s<sup>-1</sup>) dans le but de conclure sur la faisabilité d’une expérience au GSI. Compte-tenu des bornes de variation considérées pour les largeurs atomiques (facteur dix) et la probabilité de transition nucléaire réduite (facteur deux), un taux NEET de 276 s<sup>-1</sup> peut être atteint. Rappelons que nous n’avons pas pu évaluer l’apport éventuel des couches  $n > 8$ .

Le taux d’excitation nucléaire total est compris entre  $\lambda_{min}^{tot} = 58,4$  s<sup>-1</sup> et  $\lambda_{max}^{tot} = 334,4$  s<sup>-1</sup>. A partir de ce taux maximal, nous pouvons estimer l’ordre de grandeur du nombre d’isomères excités et déterminer si ce nombre est suffisant pour être mesuré. Pour cette estimation, nous devons, dans un premier temps, calculer le nombre d’isomères produits et déterminer le nombre de ceux d’entre eux excités lors du tir laser.

### Production des isomères

En considérant une production d’isomères par réactions nucléaires à l’aide d’un faisceau de particules incident sur une cible solide, le nombre d’isomères produits au cours du temps est donné par :

$$N_{iso}(t) = \frac{I\rho\epsilon\sigma\mathcal{N}_a}{M\lambda} (1 - e^{-\lambda t}) \quad (5.26)$$

où :

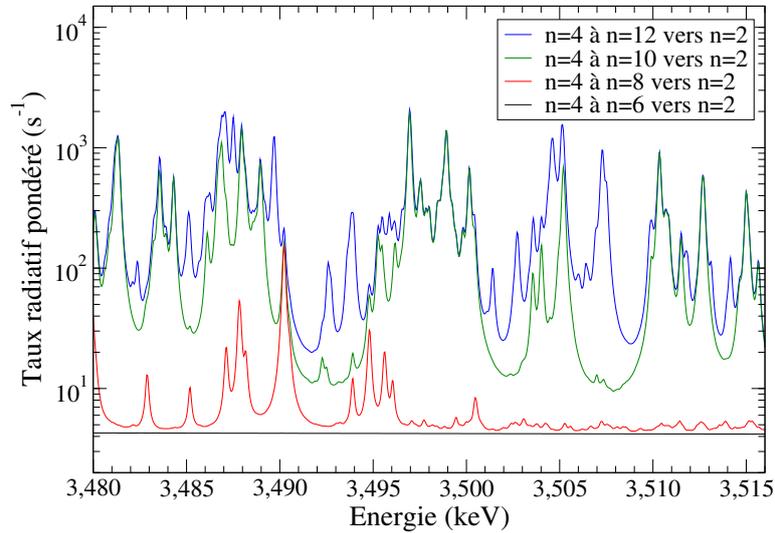


FIGURE 5.7 – Spectres de taux radiatifs  $M1$  pondérés tracés dans la gamme d'énergie d'intérêt pour le calcul du taux NEET pour différentes ouvertures de couches électroniques. Calculs effectués pour un plasma de  $^{84}\text{Rb}$  à l'état de charge  $Q = 30^+$ , pour une température  $T = 270$  eV et  $\rho = 10^{-2}$  g/cm $^3$ . La largeur à mi-hauteur des raies est de 0,2 eV.

- $I$  est l'intensité du faisceau de production, exprimée en particules/s
- $\rho$  est la densité de la cible
- $\epsilon$  est l'épaisseur de la cible
- $\sigma$  est la section efficace de production de l'état isomérique
- $\mathcal{N}_a$  est la constante d'Avogadro
- $M$  est la masse molaire de l'élément constituant la cible
- $\lambda = \frac{\ln 2}{T_{1/2}}$  avec  $T_{1/2} = 20,26$  minutes

Nous considérons la réaction  $^{76}\text{Ge} (^{12}\text{C}, p + 3n) ^{84}\text{Rb}$  avec une intensité de faisceau de  $1,7 \times 10^{11}$   $^{12}\text{C}$ /s obtenue auprès de l'accélérateur UNILAC du GSI [113]. Nous supposons que la section efficace de production de l'état isomérique est identique à celle de l'état fondamental et vaut, au maximum,  $\sigma = 340$  mb à un énergie de 60 MeV. La cible de  $^{76}\text{Ge}$  a une masse surfacique de  $\rho\epsilon = 6$  mg/cm $^2$ .

Le laser PHELIX permettant d'effectuer un tir toute les 90 minutes, il est possible de produire le  $^{84m}\text{Rb}$  pendant cette durée au maximum. Pour  $t = 90$  min, nous obtenons  $N_{iso}(90) = 0,95 N_{iso}(t \rightarrow \infty) = 4,5 \times 10^9$  isomères produits dans l'épaisseur  $\epsilon$  de la cible et dans une surface  $S_{acc}$  égale à celle du faisceau de  $^{12}\text{C}$ . Notons  $V_{acc}$  le volume dans lequel tous ces isomères sont produits.

### Excitation des isomères dans le plasma produit avec PHELIX à une intensité de $6 \times 10^{14}$ W/cm $^2$

Pour calculer un nombre d'isomères excités, il faudrait tenir compte de l'évolution temporelle du plasma au cours du tir laser et calculer un taux d'excitation pour chaque couple de température et de densité au cours de cette évolution. Pour estimer un ordre de grandeur du nombre d'isomères excités, nous supposons que les propriétés du plasma utilisées pour les calculs de taux d'excitation (voir tableau 5.3) n'évoluent pas pendant un temps  $\tau = 10$  ps. Nous faisons également l'hypothèse, que pendant cette durée  $\tau$ , les propriétés du plasma sont identiques en tout point de son volume. Ce temps  $\tau$  est probablement sous-estimé. Seuls des calculs hydrodynamiques couplés au code MCDF et tenant compte des effets HETL pourraient donner des valeurs de taux NEET plus précises. Sous ces hypothèses, le nombre d'isomères excités est estimé à l'aide de :

$$N_{exc} = N_{iso}(90)\tau \frac{V_{las}}{V_{acc}} \lambda_{max} \text{ avec } V_{las} < V_{acc} \quad (5.27)$$

où  $V_{las}$  désigne le volume de plasma créé. Si nous considérons un volume de plasma créé sur une tache focale de  $150\ \mu\text{m}$  de diamètre et sur une profondeur de  $10\ \mu\text{m}$ . Nous avons :  $V_{las} = 1,8 \times 10^{-4}\ \text{mm}^3$ . Si nous supposons, de plus, que la section du faisceau de  $^{12}\text{C}$  est de  $1\ \text{mm}$  de diamètre, nous avons alors  $V_{acc} = 8,9 \times 10^{-3}\ \text{mm}^3$ .

Sous ces hypothèses, nous obtenons :  $N_{exc} = 0,3$  isomère excité par tir laser en se plaçant au maximum du taux d'excitation NEET calculé par MCDF, au taux NEEC déterminé par ISOMEX ( $\lambda_{max} = 334\ \text{s}^{-1}$ ) et en prenant en compte les variations possibles du taux NEET en fonction des grandeurs utilisées pour son calcul. En considérant ce faible taux d'excitation, la mise en évidence d'une excitation nucléaire auprès du laser PHELIX à une intensité de  $6 \times 10^{14}\ \text{W/cm}^2$  est impossible.

## 5.4 Calculs du taux d'excitation nucléaire à une température de $T = 400\ \text{eV}$

Le taux d'excitation de la transition  $6^- \rightarrow 5^-$  du  $^{84}\text{Rb}$  obtenu en considérant les propriétés du plasma produit avec le laser PHELIX à une intensité de  $6 \times 10^{14}\ \text{W/cm}^2$  est très faible car les états de charge favorables à l'effet NEET ne sont pas majoritaires. Pour obtenir un taux NEET important, il est donc nécessaire que le plasma de  $^{84m}\text{Rb}$  soit à une température plus élevée. Nous avons considéré une température de  $T = 400\ \text{eV}$ , correspondant approximativement au maximum du taux NEET calculé avec ISOMEX.

### Taux d'excitations nucléaires calculés avec ISOMEX

A cette température, les taux d'excitations déterminés par ISOMEX sont présentés dans le tableau 5.8.

Processus	Taux d'excitation ( $\text{s}^{-1}$ )
NEET	$2,35 \times 10^3$
NEEC	18,1
Photoexcitation	14,5
$(e, e')$	$1,67 \times 10^{-4}$
Total	$2,38 \times 10^3$

TABLEAU 5.8 – Taux d'excitations du  $^{84m}\text{Rb}$  par photoexcitation, NEEC, NEET,  $(e, e')$  et taux d'excitation total pour un plasma de  $^{84m}\text{Rb}$  ayant une température de  $400\ \text{eV}$  et une densité de  $10^{-2}\ \text{g/cm}^3$ . Les transitions des couches  $n = 4$  à  $n = 8$  vers la couche  $n = 2$  ont été considérées.

### Taux NEET calculé avec MCDF

L'évolution du taux NEET obtenu avec MCDF en fonction de l'énergie de la transition nucléaire est donnée sur la figure 5.8. Ce taux est calculé pour des transitions des couches  $n = 4$  à  $n = 8$  vers  $n = 2$ . Ce taux NEET est compris entre :

$$\lambda_{min} = 48,4\ \text{s}^{-1} \text{ et } \lambda_{max} = 6,68 \times 10^4\ \text{s}^{-1} \quad (5.28)$$

Tenant compte du facteur vingt de variation possible de ces derniers et des taux évalués par ISOMEX, nous obtenons les bornes de variation suivantes pour le taux d'excitation nucléaire total :

$$\lambda_{min} = 35,0\ \text{s}^{-1} \text{ et } \lambda_{max} = 1,34 \times 10^6\ \text{s}^{-1} \quad (5.29)$$

Par les mêmes considérations qu'à  $T = 270\ \text{eV}$ , l'ouverture des couches supérieures à  $n = 6$  pourrait contribuer à augmenter les taux NEET maximal et minimal. La figure 5.9 présente le taux radiatif pondéré de l'état de charge  $Q = 30^+$  calculé à  $T = 400\ \text{eV}$  pour différentes transitions entre couches électroniques. Ces calculs ont été effectués par G. Gosselin [112] et pour une densité de  $10^{-2}\ \text{g/cm}^3$ . Nous constatons de nouveau que l'ouverture des couches  $n > 8$

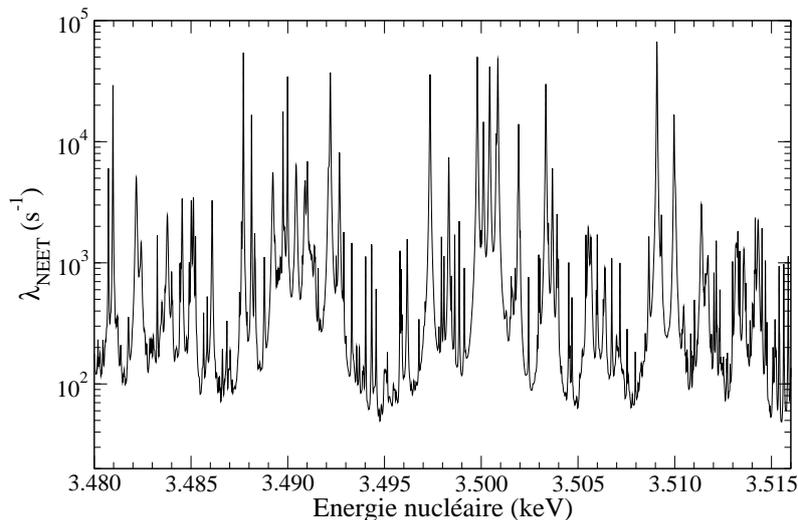


FIGURE 5.8 – Évolution du taux d’excitation NEET calculé avec MCDF en fonction de l’énergie de la transition nucléaire. Les calculs sont effectués pour un plasma de  $^{84}\text{Rb}$  ayant une température de 400 eV et une densité de  $10^{-2} \text{ g/cm}^3$ . Les transitions atomiques entre les couches  $n = 4$  à  $n = 8$  vers la couche  $n = 2$  ont été considérées.

conduit à l’apparition de nouvelles raies dans la gamme d’énergie d’intérêt pour le NEET. Il est alors possible que les valeurs de taux NEET soient plus élevées en prenant en compte les transitions avec  $n > 8$ . A cause du nombre plus important de configurations à traiter dans les calculs MCDF pour une température de 400 eV, les calculs en considérant des transitions des couches  $n > 8$  vers la couche  $n = 2$  n’ont pas pu être réalisés à ce jour.

En se basant sur le taux d’excitation maximal  $\lambda_{max} = 1,34 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$ , en supposant que la température de 400 eV peut être atteinte sur PHELIX en diminuant le diamètre de la tache focale et en prenant le même taux de production d’isomères que dans le paragraphe précédent (mais avec un volume de plasma différent), nous obtenons l’évolution du nombre d’isomères excités maximal en fonction du diamètre de la tache focale. Cette évolution est représentée sur la figure 5.10.

Pour une tache focale dont le diamètre est compris entre 80 et 100  $\mu\text{m}$ , le nombre d’isomères excités de quelques centaines est trop faible en l’état actuel des calculs pour envisager une expérience avec PHELIX. En effet, si l’on considère une efficacité de détection de quelques pourcents<sup>1</sup>, un nombre d’isomères excités de plusieurs milliers à plusieurs dizaines de milliers semble nécessaire pour mettre en évidence une excitation nucléaire.

## 5.5 Discussion des conditions expérimentales permettant d’optimiser le nombre d’isomères excités

### Configuration multi-tirs

Le laser PHELIX peut être utilisé en configuration multi-tirs. Dans celle-ci deux ou trois impulsions laser de 1,4 ns de largeur à mi-hauteur et espacées de 4 ns sont générées. Les spectres X mesurés sur la gamme 3,8 – 4,3  $\text{\AA}$  avec la configuration multi-tirs à deux impulsions sont présentés sur la figure 5.11. Sur cette figure, l’intensité du spectre obtenu avec les deux impulsions est approximativement deux fois plus importante que celle obtenue avec un seul tir. La forme des spectres (nombre et intensités relatives des raies) est très similaire entre les deux configurations de tir. Ceci montre que la distribution de charge n’est pas modifiée de façon drastique entre ces deux configurations.

Cette interprétation est confortée par les résultats des calculs hydrodynamiques réalisés avec le code CHIVAS. Ceux-ci montrent que la température atteinte n’est pas augmentée ( $T = 270$

1. Le système de détection  $\gamma$  qui sera utilisé auprès du laser PHELIX n’est pas encore défini.

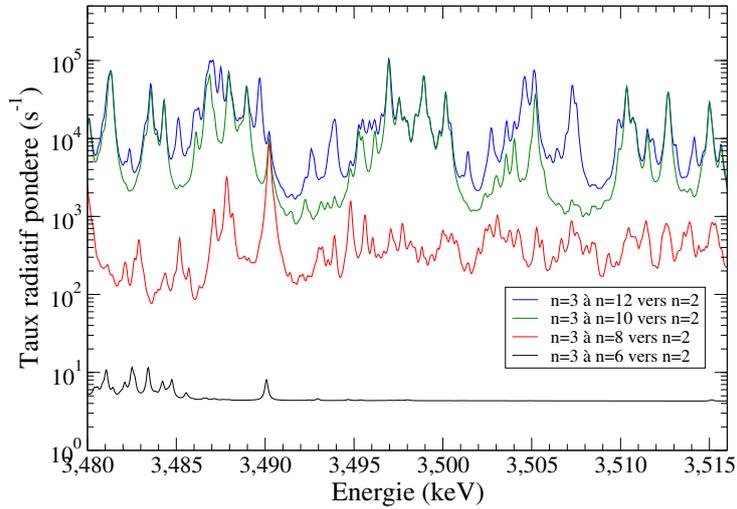


FIGURE 5.9 – Spectres de taux radiatif pondéré tracés dans la gamme d'énergie d'intérêt pour le calcul du taux NEET pour différentes ouvertures de couches électroniques. Calculs effectués pour un plasma de  $^{84}\text{Rb}$  à l'état de charge  $Q = 30^+$ , pour une température  $T = 400$  eV et  $\rho = 10^{-2}$  g/cm $^3$ .

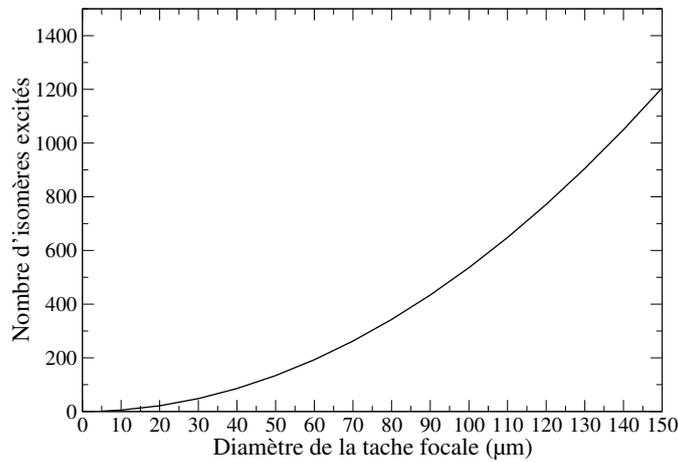


FIGURE 5.10 – Évolution du nombre d'isomères excités en fonction du diamètre de la tache focale du laser PHELIX en considérant une température de  $T = 400$  eV.

eV) mais que le volume du plasma est plus conséquent (d'un facteur cinq) lorsque l'on passe d'une configuration de tir à une impulsion à celle comportant deux impulsions.

La configuration multi-tirs permet donc d'augmenter le nombre d'isomères excités puisque qu'elle est équivalente à effectuer plusieurs tirs en un seul.

### Augmentation de la cadence des tirs laser

Une autre possibilité pour accroître le nombre d'isomères excités consiste à augmenter le nombre de tirs laser. Le laser PHELIX ne permet que de réaliser un tir toutes les 90 minutes. Les lasers actuellement en cours de construction (installations Apollon [114] en France et ELI [115] et Roumanie) devraient pouvoir atteindre une cadence de un tir par minute avec approximativement les mêmes caractéristiques que PHELIX : 150 J à  $\lambda = 532$  nm, durée d'impulsion de 900 ps. Dans ce cas, les isomères, dont il faudra évaluer le taux de production, seraient créés à l'aide de faisceaux d'ions ou de photons de Bremsstrahlung issus de la conversion de faisceaux d'électrons accélérés par laser. En effet, la focalisation de deux faisceaux lasers (de 10 PW chacun dans le cas d'ELI) dans la même chambre expérimentale permet d'utiliser un premier faisceau comprimé pour la production des isomères et un second faisceau non comprimé pour la production du plasma.

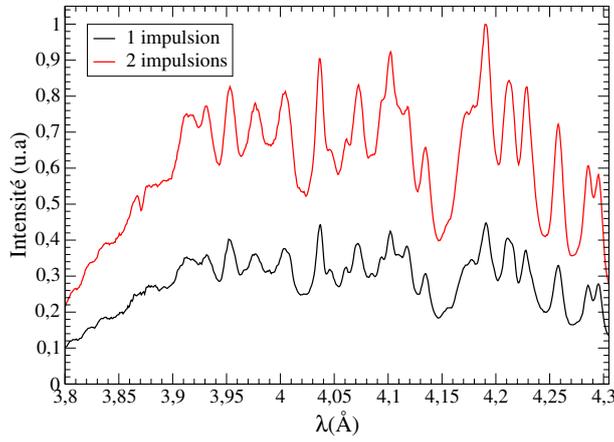


FIGURE 5.11 – Spectres X mesurés auprès du laser PHELIX en configuration de tir à une et deux impulsions. Chaque impulsion possède une énergie de 150 J sur une durée de 1,4 ns. Dans le cas du multi-tir, les deux impulsions sont séparées de 4 ns.

## Conclusion

Dans ce chapitre, les résultats obtenus dans ce travail ont été utilisés pour évaluer un taux d'excitation nucléaire dans un plasma de  $^{84}\text{Rb}$  produit à une intensité de  $6 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ . Les taux d'excitations par photoexcitation, effet NEEC et diffusion inélastique d'électrons ont été évalués à l'aide du code ISOMEX tandis que le taux NEET a été déterminé à l'aide de la méthode de calcul MCDF développée dans le cadre de cette thèse. Le code MCDF, permettant une description précise des états atomiques, a été utilisé pour déterminer les bornes de variation de taux NEET en prenant en compte les incertitudes sur les paramètres (énergie nucléaire, largeurs des niveaux atomiques et probabilité de transition nucléaire réduite) employés dans le calcul de ce dernier. L'influence éventuelle des ouvertures des couches électroniques  $n > 8$  sur ce taux n'a, par contre, pas pu être quantifiée à ce jour.

Dans le cas du  $^{84}\text{Rb}$ , le taux NEET varie sur plusieurs ordres de grandeur en fonction de l'énergie de la transition nucléaire. Le taux moyen calculé par ISOMEX peut être très différent de celui calculé avec MCDF à une énergie donnée. ISOMEX ne semble donc pas être adapté à la description du NEET dans le cas de noyaux légers comme le  $^{84}\text{Rb}$ . Cette description statistique est plus pertinente dans le cas de noyaux lourds.

Les calculs MCDF et ISOMEX présentés dans ce chapitre ont été réalisés en considérant un plasma de  $^{84}\text{Rb}$  à l'équilibre thermodynamique. Pour des faibles densités, comme à  $10^{-2} \text{ g/cm}^3$ , les plasmas créés par laser sont principalement hors de l'équilibre thermodynamique. En considérant un tel équilibre, les populations des configurations excitées sont généralement plus faibles que celles calculées à l'équilibre thermodynamique [116]. Ainsi, le nombre de transitions atomiques pouvant contribuer au NEET est diminué. Par conséquent, le taux NEET calculé sous une hypothèse HETL est plus faible. La quantification des effets HETL sur le taux NEET est complexe car elle nécessite l'emploi d'un code dédié, tel AVERROËS, et n'a pas été réalisée à ce jour pour le  $^{84}\text{Rb}$ .

Nous avons considéré les bornes de variation du taux NEET déterminées avec MCDF et des taux d'excitations obtenus par ISOMEX pour la température de 270 eV afin d'évaluer le nombre d'isomères excités attendu avec une production d'isomères avec UNILAC et un plasma de  $^{84}\text{Rb}$  créé avec le laser PHELIX à une intensité de  $6 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ . Le nombre d'isomères excités ainsi obtenu étant très faible, une expérience de mise en évidence de l'excitation du  $^{84m}\text{Rb}$  dans ces conditions est impossible.

Afin d'obtenir un nombre d'isomères excités significatif, il est nécessaire de créer un plasma plus chaud afin d'atteindre les états de charge élevés ( $Q \geq 29^+$ ) contribuant à l'excitation nucléaire par effet NEET. Nous avons discuté le cas d'un plasma à  $T = 400 \text{ eV}$ .

Il reste à étudier les conditions expérimentales d'obtention d'une telle température. Auprès de PHELIX, deux possibilités existent : diminuer la tache focale et/ou utiliser des cibles spécifiques

permettant le confinement du plasma.

La mise en évidence d'une excitation nucléaire du  $^{84m}\text{Rb}$  nécessite la détection des  $\gamma$  à 219 keV ou 248 keV émis lors de la désexcitation de l'état  $5^-$ . Cette détection, en environnement laser, reste un problème actuel. En effet, le plasma émet un grand nombre photons et d'électrons pouvant conduire à un dépôt d'énergie important dans le détecteur. Lors de l'expérience sur PHELIX, des détecteurs NaI blindés ont été testés. Les résultats de ces expériences préliminaires montrent que ces détecteurs n'étaient pas saturés lors du tir laser mais présentaient un bruit de fond important. Il reste à évaluer précisément leurs réponses lors d'un tir laser de plus haute intensité. D'autres types de détecteurs doivent être testés.



# Conclusion et perspectives

L'objectif de ce travail de thèse était le dimensionnement d'une expérience de mise en évidence de l'excitation de l'état isomérique  $6^-$  du  $^{84}\text{Rb}$  dans un plasma produit par un laser de haute énergie. Celle-ci est prévue en deux étapes : il faut produire l'état  $6^-$  par réactions nucléaires puis créer le plasma avec un laser adapté. Nous avons, dans un premier temps, considéré une expérience faisant intervenir l'accélérateur d'ions UNILAC pour la production des isomères et le laser PHELIX pour la création du plasma. Les faisceaux de ces deux installations, présentes au GSI peuvent, en effet, être focalisés dans la même enceinte expérimentale.

Au début de ce travail de thèse, seul le code ISOMEX, était à notre disposition pour évaluer les taux d'excitations nucléaires par les processus de photoexcitation, NEET, NEEC et  $(e, e')$ . Ce code utilise un modèle statistique pour décrire les états atomiques dans un plasma à l'équilibre thermodynamique. D'après les résultats d'ISOMEX, le processus NEET était dominant pour une température de plasma de 400 eV. Cependant, plusieurs questions demeuraient :

- La question de la validité d'une méthode statistique pour décrire un phénomène résonnant tel que le NEET, dans un noyau léger, était posée.
- La possibilité de produire un plasma de  $^{84}\text{Rb}$  à cette température auprès du laser PHELIX devait être discutée.
- La donnée clé pour l'étude du NEET qu'est l'énergie de la transition nucléaire, n'était pas connue avec suffisamment de précision et devait donc être mesurée.

Afin d'obtenir une description précise des états atomiques dans un plasma à l'équilibre thermodynamique, une méthode de calcul utilisant le code de physique atomique détaillé MCDF a été développée. Le traitement exhaustif des configurations électroniques des ions présents dans le plasma n'étant pas possible pour les états de charge faibles, une méthode de sélection a été mise en place. Celle-ci utilise les résultats d'un code d'atome moyen relativiste pour sélectionner les configurations électroniques les plus probables dans un plasma ayant une température et une densité données.

Une expérience a été menée auprès du laser PHELIX afin de valider notre méthode de calcul et de préciser les caractéristiques du plasma produit avec ce laser. Les spectres X émis par un plasma de Rb ont été mesurés sur une large gamme spectrale. Lors de l'analyse de ces spectres, des simulations hydrodynamiques ainsi que des calculs HETL ont été effectués afin de préciser aussi les caractéristiques du plasma produit avec PHELIX. Ces résultats ont été utilisés pour la génération des spectres théoriques, utilisés pour l'interprétation des spectres expérimentaux. A l'issue de cette expérience, la méthode de calcul développée dans le cadre de cette thèse a été validée et les propriétés du plasma de  $^{84}\text{Rb}$  créé par PHELIX ont été évaluées. Ce travail qui a aussi permis l'identification d'environ 70 raies X a fait l'objet d'une publication [77].

L'énergie de la transition nucléaire est une donnée importante pour évaluer les taux d'excitations associés à cette transition. Dans le cas du NEET, la connaissance précise de cette quantité est même primordiale. Les données présentes dans la littérature n'étant pas assez précises pour notre étude, nous avons mené deux expériences, auprès des accélérateurs ELSA du CEA/DAM/DIF et TANDEM de l'IPN d'Orsay afin de préciser l'énergie de la transition  $6^- \rightarrow 5^-$ . La première nous a permis de valider nos méthodes d'acquisition et d'analyse en obtenant le spectre de décroissance de l'isomère  $6^-$  et en particulier l'énergie de la transition  $6^- \rightarrow 3^-$ . L'état  $5^-$  ayant une durée de vie de 9 ns, la mesure de son spectre de désexcitation nécessite un dispositif de spectroscopie  $\gamma$  prompt. Nous avons utilisé le multi-détecteur  $\gamma$  ORGAM installé sur une aire expérimentale de l'accélérateur TANDEM de l'IPN d'Orsay. Nous

avons pu ainsi mesurer l'énergie de la transition  $5^- \rightarrow 3^-$ . A partir des deux expériences, nous avons obtenu l'énergie de la transition  $6^- \rightarrow 5^-$  avec une incertitude inférieure à la dizaine d'eV :  $E_\gamma = 3,498(6)$  keV. Cette énergie est environ 500 eV supérieure à celle utilisée pour les premières évaluations des taux d'excitations avec ISOMEX.

A partir des caractéristiques de la transition nucléaire et du plasma créé avec le laser PHELIX, nous avons calculé les taux d'excitations nucléaires attendus sur cette installation. Le code ISOMEX a été utilisé pour déterminer les taux d'excitations associés aux processus de photoexcitation, NEEC et  $(e, e')$ . Le taux d'excitation NEET a été évalué à l'aide de la méthode de calcul développée dans le cadre de cette thèse. Nous avons estimé les bornes de variations du taux NEET en tenant compte des incertitudes sur les quantités intervenant dans son calcul : l'énergie de la transition nucléaire, la probabilité de transition nucléaire réduite et les largeurs des niveaux atomiques. Certains effets n'ont pas pu être évalués, comme celui de l'ouverture des couches électroniques  $n > 8$  ou de la prise en compte des effets HETL.

En considérant les bornes de variation obtenues et les taux des autres processus calculés avec ISOMEX, le nombre d'isomères excités après un tir PHELIX est trop faible (moins de un isomère excité par tir laser) pour envisager une expérience sur cette installation dans les conditions expérimentales actuelles : il faut impérativement créer un plasma de  $^{84m}\text{Rb}$  plus chaud afin d'optimiser le nombre d'isomères excités. Pour envisager une expérience, ce nombre doit être au minimum de plusieurs milliers à plusieurs dizaines de milliers. Pour cela, des cibles spécifiques, actuellement en cours de développement, pourraient être utilisées.

La mise en évidence d'une excitation nucléaire dans un plasma requiert également un dispositif de détection adapté. Dans le cas du  $^{84}\text{Rb}$ , il est nécessaire de détecter, quelques nanosecondes après un tir laser, des  $\gamma$  à 219 et 248 keV. La conception d'un tel dispositif dépasse le cadre de cette thèse mais est en cours d'étude au sein du groupe ENL. La conception de détecteurs de physique nucléaire capable de fonctionner lors d'un tir laser est actuellement un enjeu expérimental important pour ouvrir la voie aux études de physique nucléaire dans les plasmas. Pour ces études, la mise en service des installations multi-faisceaux à haut taux de répétition Apollon et ELI en Europe sera déterminante.

# Annexes



# Annexe A

## Quelques éléments de structure atomique

### A.1 Description des états atomiques

Les énergies  $E_\mu$  des états atomiques s'obtiennent, dans le cas stationnaire, en résolvant une équation aux valeurs propres du type :

$$H\Psi_\mu = E_\mu\Psi_\mu \quad (\text{A.1})$$

où :

- $H$  désigne l'hamiltonien du système atomique.
- $\Psi_\mu$  est la fonction d'onde de l'état caractérisé par l'ensemble des nombres quantiques désigné par le symbole  $\mu$
- $E_\mu$  est l'énergie de l'état propre  $\mu$

La résolution formelle de l'équation (A.1) est possible dans le cas des ions hydrogénoïdes en se plaçant en coordonnées sphériques.

#### A.1.1 Cas non-relativiste

Dans le cas non-relativiste, un état électronique est décrit par la donnée de quatre nombres quantiques :  $n$ ,  $l$ ,  $m_l$  et  $m_s$ .  $n$  est le nombre quantique principal ( $n \geq 1$ ) définissant la *couche*. La notation d'une couche atomique suivant les valeurs de  $n$  est donnée dans le tableau A.1.

$n$	1	2	3	4	5	...
Nom	K	L	M	N	O	...

TABLEAU A.1 – Nom donné à une couche électronique suivant les valeurs de  $n$ .

$l$  est le nombre quantique secondaire ou orbital ( $l \in \llbracket 0, n-1 \rrbracket$ ) définissant une sous-couche. La notation des sous-couches est donnée dans le tableau A.2

$l$	0	1	2	3	4	...
Nom	$s$	$p$	$d$	$f$	$g$	...

TABLEAU A.2 – Nom donné à une sous-couche électronique suivant les valeurs de  $l$ .

$m_l$  est le nombre quantique magnétique ( $m_l \in \llbracket -l, l \rrbracket$ ) et  $m_s$  le nombre quantique de spin qui, pour un électron, (fermion de spin 1/2) ne peut prendre que deux valeurs :  $m_s = \pm 1/2$ . La parité d'une sous-couche  $nl$  est :  $(-1)^l$ .

#### A.1.2 Cas relativiste

Lorsque l'interaction spin-orbite devient importante (dans le cas des éléments lourds notamment), la description des états atomiques avec les nombres quantiques  $n$ ,  $l$ ,  $m_l$  et  $m_s$  n'est plus

appropriée. Il est alors nécessaire de prendre en compte le moment cinétique total  $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$ . Ainsi, les orbitales électroniques définies précédemment se séparent en deux composantes :  $j = l \pm 1/2$ .

Par conséquent, les états atomiques sont caractérisés par  $n, l, j$  et  $m$ .  $j$  est le nombre quantique associé au moment cinétique total.  $m \in \llbracket -j, j \rrbracket$  est la projection (en unité  $\hbar$ ) du moment cinétique total  $\vec{j}$  suivant l'axe de quantification.

## A.2 Description d'une configuration électronique

Dans le cas des atomes ou des ions à plus d'un électron, l'équation (A.1) n'est pas résoluble sans recourir à des approximations. Généralement, on se place dans le cadre de l'approximation du champ moyen. Dans cette approximation, les interactions électron-électron sont remplacées par un champ moyen avec lequel chaque électron interagit. A l'aide de cette approximation de particules indépendantes, la fonction d'onde du système total s'écrit comme un déterminant de Slater (pour respecter le principe d'exclusion de Pauli) construit à partir des orbitales individuelles. Ainsi, les nombres quantiques définis ci-dessus dans le cas monoélectronique sont utilisés pour décrire une *configuration électronique* d'un système à plus d'un électron. Une configuration électronique désigne la population, c'est-à-dire le nombre d'électrons, de chaque sous-couche électronique.

### A.2.1 Cas non-relativiste

Une configuration électronique non relativiste s'écrit :

$$(n_1 l_1)^{N_1} (n_2 l_2)^{N_2} \dots (n_k l_k)^{N_k}$$

où  $N_k$  représente le nombre d'électrons présents dans la sous-couche  $(n_k l_k)$ .  $n_k$  et  $l_k$  sont respectivement les nombres quantiques principal et secondaire définis plus haut dans le cadre de l'atome d'hydrogène. La dégénérescence d'une sous-couche  $(nl)$ , c'est-à-dire le nombre maximal d'électrons qu'elle peut contenir (à cause du principe d'exclusion de Pauli) est :  $g_{nl} = 4l + 2$ .

Pour des ions fortement ionisés, l'ordre de remplissage des sous-couches électroniques est le suivant :

- l'énergie des niveaux est croissante avec  $n$
- pour un  $n$  donné, l'énergie des niveaux est croissante avec  $l$

Ainsi, le remplissage d'une configuration électronique suit l'ordre suivant :

$$(1s)(2s)(2p)(3s)(3p)(3d) \dots$$

### A.2.2 Cas relativiste

Dans le cas relativiste, une configuration électronique s'écrit :

$$(n_1 l_1 j_1)^{N_1} (n_2 l_2 j_2)^{N_2} \dots (n_k l_k j_k)^{N_k}$$

Dans ce cas, à  $n$  et  $l$  fixés, l'énergie d'une sous-couche croit avec  $j$  et l'ordre de remplissage est le suivant :

$$(1s_{1/2})(2s_{1/2})(2p_{1/2})(2p_{3/2})(3s_{1/2})(3p_{1/2})(3p_{3/2})(3d_{3/2})(3d_{5/2}) \dots$$

Par exemple, la configuration électronique fondamentale du  $\text{Rb}^{27+}$  est :

$$1s_{1/2}^2 2s_{1/2}^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4$$

La dégénérescence d'une sous couche  $(nlj)$  est :  $g_{nlj} = 2j + 1$ .

### A.3 Addition des moments cinétiques

Dans un atome ou un ion à plusieurs électrons, chaque état propre est caractérisé, entre autres, par son moment cinétique total  $\vec{J}$  et sa projection  $M$  sur l'axe de quantification. Les vecteurs propres associés aux opérateurs  $\vec{J}^2$  et  $J_z$  sont  $|JM\rangle$  avec les valeurs propres (en unité  $\hbar$ )  $J(J+1)$  et  $M$  respectivement. Le moment cinétique total  $\vec{J}$  est la somme du moment orbital et du spin des  $N_e$  électrons liés :

$$\vec{J} = \sum_{i=1}^{N_e} \vec{l}_i + \sum_{i=1}^{N_e} \vec{s}_i \quad (\text{A.2})$$

$$= \sum_{i=1}^{N_e} \vec{j}_i \quad (\text{A.3})$$

Il existe deux schémas possibles d'addition des moments cinétiques : le couplage  $LS$  et le couplage  $jj$ .

#### A.3.1 Le couplage $LS$ ou couplage de Russel-Saunders

Le couplage  $LS$ , aussi appelé couplage de Russel-Saunders, consiste à additionner indépendamment les moments orbitaux et les spins des électrons pour déterminer le moment orbital total  $\vec{L}$  et le spin total  $\vec{S}$ . Puis  $\vec{L}$  et  $\vec{S}$  sont additionnés pour obtenir le moment cinétique total  $\vec{J}$  (équation (A.2)). Les niveaux atomiques qui diffèrent uniquement du nombre quantique  $J$  constituent le terme spectroscopique  $^{2S+1}L$ .  $L$  est noté suivant la convention alphabétique du tableau A.2 mais avec des lettres majuscules. La dégénérescence d'un terme spectroscopique est :  $(2L+1)(2S+1)$ . Les niveaux  $J$  sont alors notés à partir du terme spectroscopique :  $^{2S+1}L_J$ . Prenons l'exemple de la configuration  $2p^2$ . Les additions des moments orbitaux et des spins conduisent à :

$$L = 1 \oplus 1 = \begin{cases} 0 \\ 1 \\ 2 \end{cases} \text{ et } S = \frac{1}{2} \oplus \frac{1}{2} = \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases}$$

Toutes les combinaisons des valeurs de  $L$  et  $S$  ne sont pas possibles car il faut respecter le principe d'exclusion de Pauli. Ainsi,  $^3D_3$  n'est pas possible car impliquerait les deux électrons dans le même état quantique ( $m_l = 1$  et  $m_s = 1/2$ ). Les termes spectroscopiques et les niveaux associés possibles sont alors :  $^3P$  ( $^3P_0, ^3P_1, ^3P_2$ ),  $^1D$  ( $^1D_2$ ) et  $^1S$  ( $^1S_0$ ).

#### A.3.2 Le couplage $jj$

Le couplage  $jj$  consiste à additionner le moment orbital et le spin de chaque électron pour former le moment cinétique  $\vec{j}$ . Les moments cinétiques  $\vec{j}$  des  $N_e$  électrons sont alors sommés pour obtenir le moment cinétique total  $\vec{J}$  (équation (A.3)). Ainsi, pour une configuration relativiste, il suffit d'additionner les moments cinétiques  $\vec{j}_i$  de tous les électrons de cette configuration pour obtenir le moment cinétique total  $\vec{J}$ . Prenons l'exemple de la configuration relativiste  $2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^1$ . Nous avons :

$$J = \frac{1}{2} \oplus \frac{3}{2} = \begin{cases} 1 \\ 2 \end{cases}$$

En l'absence d'un champ magnétique ou électrique extérieur, les états  $|JM\rangle$  avec  $M \in \llbracket -J, J \rrbracket$  ont la même énergie (ils sont dégénérés). Aussi, ces états forment un niveau  $J$  de dégénérescence  $g_J = 2J + 1$ . L'exemple de la configuration électronique  $2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^1$  est représenté sur la figure A.1.

#### A.3.3 Choix du type de couplage

Les couplages  $LS$  et  $jj$  conduisent aux mêmes valeurs des moments cinétiques totaux  $J$  et donc aux mêmes nombres de niveaux. Par exemple, la configuration non-relativiste  $2p^2$  est

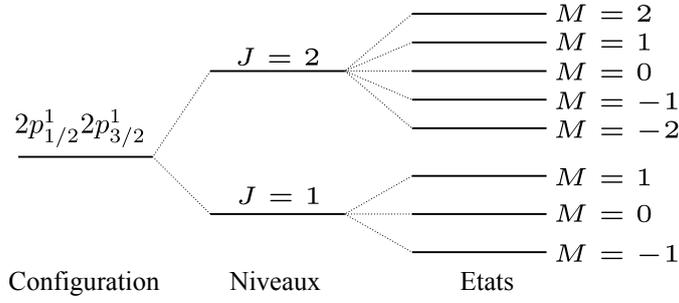


FIGURE A.1 – Représentation de la décomposition en niveaux et états de la configuration  $2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^1$ .

composée des trois configurations relativistes  $2p_{1/2}^2$ ,  $2p_{1/2}^1 2p_{3/2}^1$  et  $2p_{3/2}^2$ . Le couplage  $jj$  appliqué à ces configurations conduit aux mêmes niveaux  $J$  que ceux obtenus avec le couplage  $LS$  (voir figure A.2).

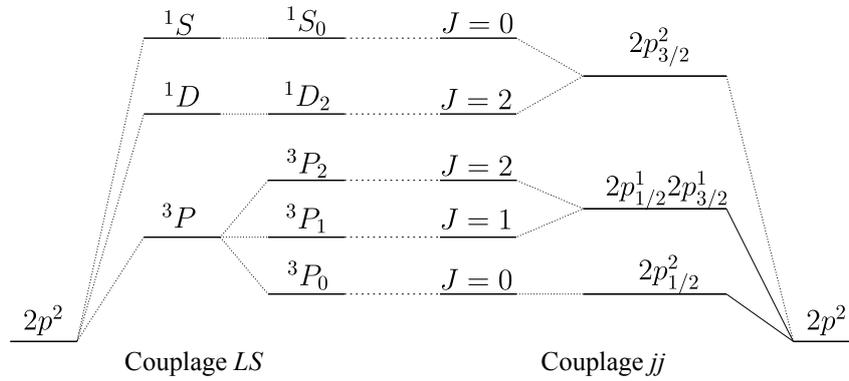


FIGURE A.2 – Exemple des constructions des niveaux atomiques de la configuration  $2p^2$  en appliquant le couplage  $LS$  et le couplage  $jj$ .

Le choix de l'utilisation du couplage  $LS$  ou du couplage  $jj$  dépend de l'importance de l'interaction électrostatique entre les électrons par rapport à l'interaction spin-orbite. Si la répulsion coulombienne entre les électrons domine l'interaction spin-orbite alors le couplage  $LS$  est utilisé. Cette situation se retrouve principalement dans les atomes légers. Si, au contraire, l'interaction spin-orbite est prépondérante, le couplage  $jj$  est employé. Ce couplage intervient principalement dans les éléments lourds.

Si les deux interactions sont du même ordre de grandeur, le couplage est dit "intermédiaire" et l'expression des énergies des niveaux ne s'exprime plus simplement dans une base construite par couplage  $LS$  ou  $jj$ .

## A.4 Règles de sélection des transitions

Lors d'une transition à un électron entre deux niveaux  $J$ , des règles de sélection doivent être vérifiées suivant le type de transition, électrique (notée  $EL$ ) ou magnétique (notée  $ML$ ). Lors d'une transition électrique  $EL$ , le photon émis possède un moment cinétique  $L$  et une parité de  $\Pi = (-1)^L$ . Dans le cas d'une transition magnétique  $ML$ , le photon possède aussi un moment cinétique  $L$  mais une parité  $\Pi = (-1)^{L+1}$ . Pour une transition ( $EL$  ou  $ML$ ) du niveau  $J_i^{\pi_i} \rightarrow J_f^{\pi_f}$ , la conservation du moment cinétique et de la parité impose :

$$|J_i - J_f| \leq L \leq J_i + J_f \text{ et } \Pi = \pi_i \pi_f \quad (\text{A.4})$$

Prenons l'exemple d'une transition  $\Pi L$  entre les orbitales  $3d_{3/2}$  ( $\pi_i = 1$ ) et  $2s_{1/2}$  ( $\pi_f = 1$ ). Les règles de sélection impliquent :  $1 \leq L \leq 2$  et  $\Pi = 1$ . Ces deux conditions sont vérifiées pour des transitions  $M1$  et  $E2$ .

Les transitions dipolaires électriques ( $E1$ ) dominent les spectres d'émission X. Des raies quadripolaires électriques ( $E2$ ) ont également été observées dans certains spectres de couche L [117]. Dans le cas de l'excitation par effet NEET de l'état  $6^-$  vers l'état  $5^-$  du  $^{84}\text{Rb}$ , des raies  $M1$  atomiques et nucléaires sont impliquées. Comme les raies  $M1$  d'intérêt pour l'effet NEET ne sont pas mesurables par spectroscopie X, la méthode de calcul des spectres X émis par un plasma développée dans le cadre de cette thèse (voir paragraphe 2.6) sera validée sur des spectres  $E1$ .



## Annexe B

# Procédures d'étalonnage spectral et d'alignement des spectres X

### B.1 Procédure d'étalonnage spectral

Comme indiqué dans le chapitre 3, une procédure itérative a été mise en place pour étalonner les spectres X afin de tenir compte des incertitudes sur les centroïdes des raies et d'évaluer la propagation de celles-ci au travers de toute cette procédure. Les différentes étapes qui la composent sont représentées sur la figure B.1 et sont décrites ci-dessous :

1. Pour chaque raie utilisée pour l'étalonnage du cristal HOPG, un tirage aléatoire est réalisé dans une distribution gaussienne centrée sur le centroïde de la raie étalon  $C_i^{etal}$  et dont l'écart type est  $\sigma_{C_i^{etal}}$ .
2. La loi de dispersion du cristal est ensuite calculée avec un ajustement polynomial sur ce nouveau jeu de centroïdes. A cette étape, le spectre X de RbCl est étaloné. Cependant, nous ne pouvons pas utiliser ce spectre pour l'identification des raies de Rb. En effet, les raies du Cl sont bien plus intenses que celles du Rb et rendent l'identification de ces dernières difficile.
3. Afin de réaliser l'alignement du spectre RbF sur le spectre RbCl, huit raies intenses de Rb, en commun entre ces deux spectres, sont identifiées et leurs centroïdes en position, notés  $C_i^{align}$  sont déterminés.
4. Un tirage aléatoire identique à celui effectué à l'étape 1 est réalisé sur les raies identifiées à l'étape précédente.
5. Un ajustement linéaire est réalisé afin d'aligner les positions des raies RbF sur celles des raies RbCl :  $X_{RbCl} = \alpha X_{RbF} + \beta$  où les positions dans les spectres de RbCl et de RbF sont notées  $X_{RbCl}$  et  $X_{RbF}$  respectivement. Le spectre RbF est aligné sur celui du RbCl à l'aide de ces paramètres  $\alpha$  et  $\beta$ .
6. Le spectre RbF est étaloné à l'aide de la loi de dispersion déterminée à l'étape 2.
7. La loi de dispersion du cristal PET plan est calculée ainsi : un tirage aléatoire des centroïdes des raies étalons de Si est effectué de la manière décrite à l'étape 1 puis le polynôme d'ajustement est déterminé. Cette loi de dispersion n'est cependant pas applicable sur le spectre de RbF à cause du décalage en position tir à tir.
8. Nous cherchons le décalage en position  $\delta X_p$  à appliquer sur le spectre RbF non-étaloné mesuré sur le cristal PET plan pour pouvoir appliquer la loi de dispersion calculée à l'étape précédente. Pour cela, nous utilisons la zone de recouvrement entre le spectre RbF mesuré sur le cristal HOPG (et désormais étaloné) et celui mesuré sur le cristal PET plan. Dans cette zone, sept raies de Rb communes ont été identifiées et leurs centroïdes (en position) ont été déterminés.
9. Nous effectuons un tirage aléatoire, identique à celui de l'étape 1, des centroïdes des sept raies identifiées à l'étape précédente. Ce tirage est réalisé à la fois sur les raies mesurées sur le cristal HOPG et sur le cristal PET plan.

10. La valeur du décalage  $\delta X_p$  utilisée est celle minimisant l'expression suivante :

$$\sum_{i=1}^7 \left( \lambda_{\text{HOPG}}^i - \lambda_{\text{PET}_p}^i(\delta X_p) \right)^2 \quad (\text{B.1})$$

où :

- les  $\lambda_{\text{HOPG}}^i$  sont les longueurs d'ondes des raies en commun entre le HOPG plan et le PET plan, calculées à partir de l'étalonnage du HOPG plan (réalisé à l'étape 6)
  - les  $\lambda_{\text{PET}_p}^i(\delta X_p)$  sont les longueurs d'ondes de ces même raies mais calculées avec l'étalonnage du cristal PET plan (étape 7) en introduisant le décalage  $\delta X_p$  sur les positions de ces raies.
11. Le spectre mesuré sur le cristal PET plan est étalonné en utilisant le décalage en position  $\delta X_p$  déterminé à l'étape précédente et la loi de dispersion calculée à l'étape 5.
  12. Les étapes 7 à 11 sont appliquées sur le spectre obtenu avec le cristal PET cylindrique. Nous déterminons ainsi la loi de dispersion et le décalage en position  $\delta X_c$  à l'aide de six raies situées dans la zone de recouvrement entre les spectres mesurés sur les cristaux PET plan (étalonné précédemment) et cylindrique.
  13. Pour chaque raie de Rb d'intérêt, nous effectuons un tirage aléatoire identique à celui de l'étape 1. Puis, la longueur d'onde de cette raie est déterminée à l'aide de la loi de dispersion et des coefficients d'alignements associés au cristal sur lequel cette raie a été mesurée.

Nous avons répété les étapes de la procédure ci-dessus un million de fois. A l'issue de ces itérations, nous avons calculé les moyennes et écart-types des paramètres d'étalonnage et d'alignement ainsi que ceux des longueurs d'onde des raies d'étalonnage et de Rb d'intérêt. Les moyennes et écart-types des raies de Rb sont reportés dans le tableau 3.7.

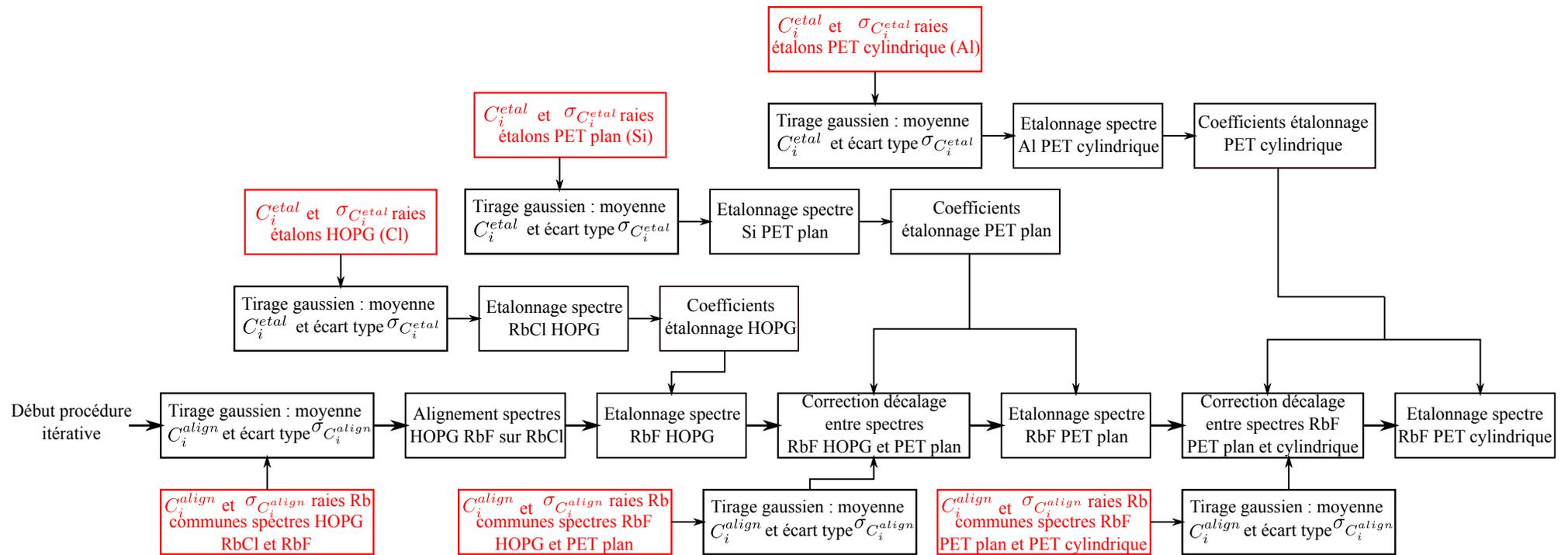


FIGURE B.1 – Diagramme de la procédure d'étalonnage. Les étapes en noir font partie de la procédure itérative tandis que celles en rouge ne sont réalisées qu'une seule fois.

## B.2 Validité des procédures d'étalonnage et d'alignement

### B.2.1 Étalonnage des cristaux

Afin de valider les lois de dispersions calculées lors de la procédure itérative, nous reportons sur la figure B.2, les lois de dispersion moyennes (chaque paramètre du polynôme est une moyenne sur les  $10^6$  itérations) ainsi que les points expérimentaux obtenus pour les raies étalons. Nous constatons un bon accord entre les lois de dispersion calculées et les valeurs des longueurs d'onde des raies étalons.

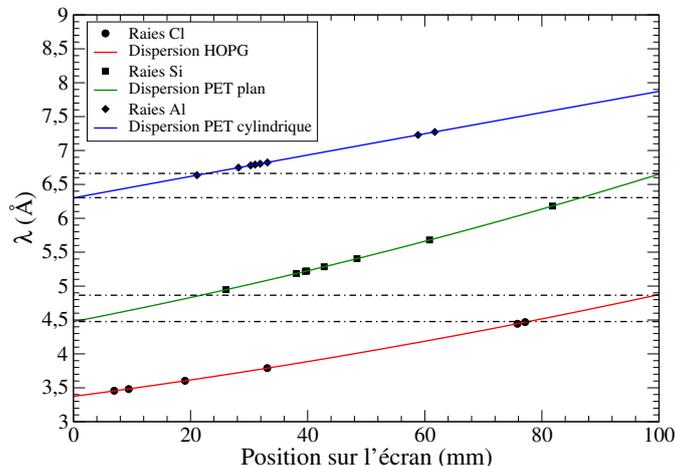


FIGURE B.2 – Relations de dispersion calculées avec les sources étalons pour les trois cristaux. Les zones de recouvrement entre les cristaux sont reportées en pointillés. Les points correspondant aux sources étalons sont indiqués par les symboles.

Afin de quantifier la qualité de ces ajustements pour chaque cristal, l'écart quadratique moyen  $\bar{\sigma}$  a été calculé. Celui-ci est défini par :

$$\bar{\sigma} = \sqrt{\frac{1}{n_{etal}} \sum_{i=1}^{n_{etal}} \left( \lambda_{tab}^i - \bar{\lambda}_{calc}^i \right)^2} \quad (\text{B.2})$$

où :

- $n_{etal}$  est le nombre de raies utilisées pour l'étalonnage (voir tableau 3.4)
- les  $\lambda_{tab}^i$  sont les longueurs d'onde tabulées des raies d'étalonnage
- les  $\bar{\lambda}_{calc}^i$  sont les longueurs d'onde de ces mêmes raies calculées à l'aide de l'ajustement polynomial. Ce sont des moyennes issues de la procédure itérative.

Ces écarts quadratiques moyens sont présentés dans le tableau B.1. Ils sont de l'ordre de grandeur du mÅ, ce qui est tout à fait raisonnable.

Cristal	HOPG plan	PET plan	PET cylindrique
$\bar{\sigma}$ (mÅ)	1,6	0,71	0,61

TABLEAU B.1 – Écarts quadratiques moyens calculés à l'issue de la procédure itérative pour les trois cristaux.

### B.2.2 Alignements des spectres dans les zones de recouvrement entre cristaux

Lors de la procédure itérative, le spectre non-étalonné de RbF a été aligné sur le spectre RbCl :  $X_{RbCl} = \alpha X_{RbF} + \beta$ . A l'issue de cette procédure, les paramètres suivants sont calculés :

$$\alpha = 0,9990 \pm 0,0009$$

$$\beta = -0,173 \pm 0,073 \text{ mm}$$

Le coefficient  $\alpha$  est très proche de l'unité. Le décalage observé tir à tir est bien uniquement du à une erreur de position de l'écran selon l'axe ( $Ox$ ). C'est pourquoi, pour les alignements des spectres des autres cristaux, nous avons imposé  $\alpha = 1$ . La qualité de l'alignement des spectres RbCl et RbF est illustré sur la figure B.3. Les intensités de ces spectres ont été modifiées afin de mieux mettre en évidence la pertinence de l'alignement. Sur cette figure, nous pouvons aussi noter la différence d'intensité entre les raies hydrogénoïdes et heliomoïdes du Cl et les raies du Rb.

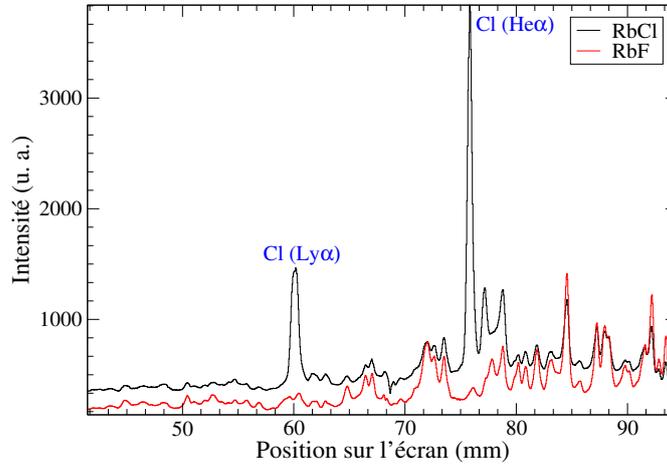


FIGURE B.3 – Alignement du spectre RbF sur le spectre RbCl. Spectres mesurés avec le cristal HOPG plan.

Les spectres mesurés avec les cristaux PET plan et cylindrique ont été alignés en position avec les paramètres de décalage  $\delta X_p$  et  $\delta X_c$  respectivement. Les valeurs moyennes de ces coefficients d'alignement sont :

$$\begin{aligned}\delta X_p &= 0,09 \pm 0,12 \text{ mm} \\ \delta X_c &= -1,98 \pm 0,23 \text{ mm}\end{aligned}$$

Le décalage introduit sur le spectre issu du cristal PET cylindrique est millimétrique. Un décalage similaire a été observé sur les spectres de la figure 3.8. La figure B.4 permet de vérifier la qualité de l'alignement de ces spectres en utilisant les zones de recouvrement en longueur d'onde des différents cristaux. Les raies utilisées pour le calcul du décalage en position sont indiquées par des flèches. Les intensités de ces spectres ont été modifiées pour mieux visualiser l'alignement des spectres.

Nous remarquons un bon accord dans les zones de recouvrement entre les différents spectres. Les incertitudes sur les longueurs d'onde des raies sont détaillées dans le tableau 3.7. Elles sont comprises entre 1 et 4 mÅ et sont croissantes avec la longueur d'onde. Ceci provient du fait que les raies mesurées aux grandes longueurs d'onde sont issues du cristal PET cylindrique. Le spectre de RbF obtenu avec ce cristal a été aligné sur celui mesuré avec le cristal PET plan. Ce dernier ayant été aligné sur le spectre obtenu avec le cristal HOPG. La propagation des incertitudes lors de la procédure d'alignement est à l'origine de l'accroissement de celles-ci avec la longueur d'onde.

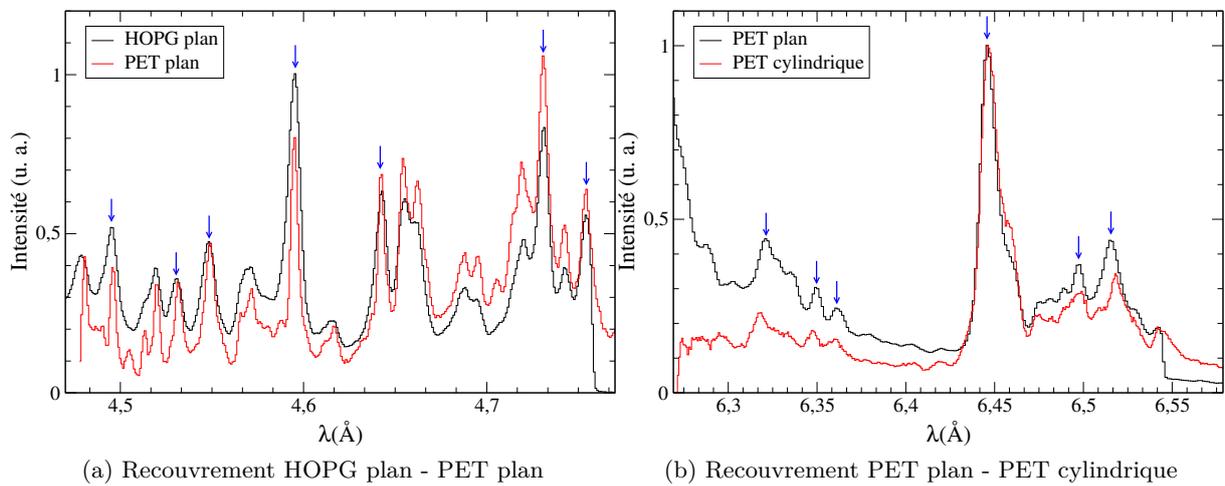


FIGURE B.4 – Alignement des spectres obtenus avec les différents cristaux. Les raies utilisées pour ces alignements sont signalées par des flèches. Les intensités de ces spectres ont été modifiées.

## Annexe C

# Procédure d'étalonnage en intensité des spectres X

Les méthodes utilisées pour évaluer les différents paramètres de l'équation 3.4 sont décrites ci-dessous.

### C.1 Correction du *fading*

La procédure de correction du *fading* a été décrite en détail dans les références [74, 118]. Les étapes de cette correction sont brièvement rappelées ci-dessous. Si l'écran photostimulable est irradié sur une durée  $\tau$  très brève, comme dans le cas d'un tir laser durant quelques ns, le *fading* peut être négligé durant l'irradiation. Le nombre de PSL lus à l'instant  $t_l$  après le tir laser qui définit l'origine des temps  $t = 0$ , s'écrit alors :

$$\chi(\tau, t_l) = Y f(t_l) \tau = \mathcal{Y} f(t_l) \quad (\text{C.1})$$

où :

- $Y$  est le taux de PSL produit par seconde d'irradiation. Dans le cas d'un tir laser, le nombre total de PSL produits,  $\mathcal{Y} = Y\tau$  est une donnée plus pertinente.
- $f(t)$  est la fonction de *fading* qui est la probabilité qu'un état métastable soit encore présent à un instant  $t$  après sa création. Par définition,  $f(0) = 1$  et  $\lim_{t \rightarrow \infty} f(t) = 0$ .
- $t_l$  est l'instant de la lecture de l'écran dans le scanner.

Afin d'évaluer  $\mathcal{Y}$ , il nous faut déterminer  $f(t_l)$ . Pour cela, nous utilisons une source radioactive dont l'activité est connue : du  $^{137}\text{Cs}$  dans notre cas. Cette source est placée à  $t = 0$  sur l'écran photostimulable pendant une certaine durée  $\tau$ . Le nombre de PSL lus à l'instant  $t_l$ , noté  $\chi(\tau, t_l)$  est donné par :

$$\chi(\tau, t_l) = \int_0^\tau Y f(t_l - t) dt = Y \int_0^\tau f(t_l - t) dt \quad (\text{C.2})$$

L'intégrale présente dans l'équation (C.2) permet de tenir compte du *fading* ayant lieu au cours de l'irradiation de l'écran par la source radioactive.

En renouvelant les irradiations avec la source radioactive pour une durée d'irradiation  $\tau$  constante et en faisant varier l'instant de lecture  $t_l$ , nous obtenons la décroissance du signal  $\chi(\tau, t_l)$  en fonction de l'instant de lecture  $t_l$ . Cette décroissance peut, en général, être ajustée par une somme de deux exponentielles décroissantes :

$$\chi(\tau, t_l) = A_1 \exp(-t_l/\beta_1) + A_2 \exp(-t_l/\beta_2) \quad (\text{C.3})$$

où  $A_1$ ,  $A_2$ ,  $\beta_1$  et  $\beta_2$  sont des paramètres ajustés.

Il a été montré que les constantes de temps  $\beta_1$  et  $\beta_2$  ont des ordres de grandeur de différence ; pour des écrans TR,  $\beta_1$  est de l'ordre de la dizaine de minutes tandis que  $\beta_2$  est généralement d'au moins deux ordres de grandeur supérieur[74]. Aussi, si les instants de lecture  $t_l$  sont limités

à une dizaine de minutes, le terme  $\exp(-t_l/\beta_2)$  de l'équation (C.3) peut être considéré comme constant et l'équation C.3 devient :

$$\chi(\tau, t_l) = A_1 \exp(-t_l/\beta_1) + A_2 \quad (\text{C.4})$$

Cette simplification permet de limiter à trois le nombre de paramètres de  $\chi(\tau, t_l)$  à ajuster et limiter ainsi le nombre de mesures nécessaires au tracé de la courbe de  $\chi(\tau, t_l)$  en fonction de  $t_l$ . Cette simplification n'est valable que pour des instants de lecture  $t_l \ll \beta_2$ .

Le tracé de  $\chi(5\text{min}, t_l)$  pour différentes valeurs de  $t_l$  est présenté sur la figure C.1. L'ajustement des données expérimentales par la fonction (C.4) y figure aussi. Nous constatons un bon accord entre les données expérimentales et l'ajustement. De plus, sur cette gamme restreinte de  $t_l$ , la simplification à une seule exponentielle (équation (C.4)) de la fonction d'ajustement est valide.

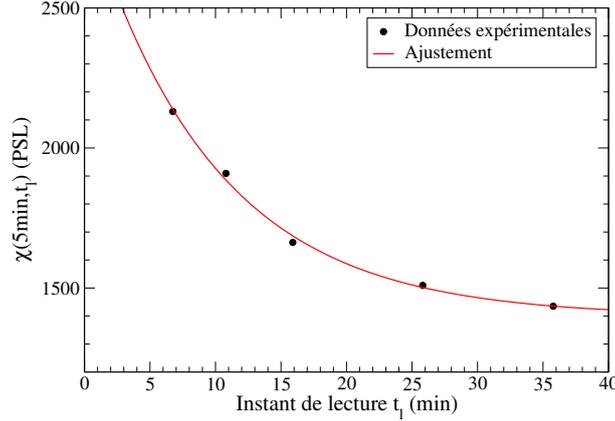


FIGURE C.1 – Tracé de  $\chi(5\text{min}, t_l)$  et de son ajustement en fonction de l'instant de lecture  $t_l$

Par identification avec l'équation (C.4),  $f(t)$  peut s'écrire comme :

$$f(t) = B_1 \exp(-t/\beta_1) + B_2 \quad (\text{C.5})$$

avec :

$$B_1 = \frac{A_1}{K\beta_1 [\exp(\tau/\beta_1) - 1]} \quad (\text{C.6})$$

$$B_2 = \frac{A_2}{K\tau} \quad (\text{C.7})$$

où  $K$  est une constante de normalisation provenant de la condition initiale  $f(0) = 1$  :

$$K = \frac{A_1}{\beta_1 [\exp(\tau/\beta_1) - 1]} + \frac{A_2}{\tau} \quad (\text{C.8})$$

La fonction  $f$  est tracée sur la figure C.2 en fonction de  $t_l$ . Les valeurs des paramètres de cette fonction déterminés par la méthode décrite ci-dessus sont présentées dans le tableau C.1 en comparaison avec celles déterminées par Bonnet et al. pour des écrans TR irradiés par un faisceau de protons de 1,5 MeV[74].

	Ce travail	Bonnet et al.[74]
$B_1$	0,45	0,49
$B_2$	0,56	0,51
$\beta_1$ (min)	9,7	17,9
$\beta_2$ (min)	$\infty$	1482

TABLEAU C.1 – Paramètres de la fonction  $f$  déterminés durant l'expérience sur PHELIX comparés à ceux de la référence [74]

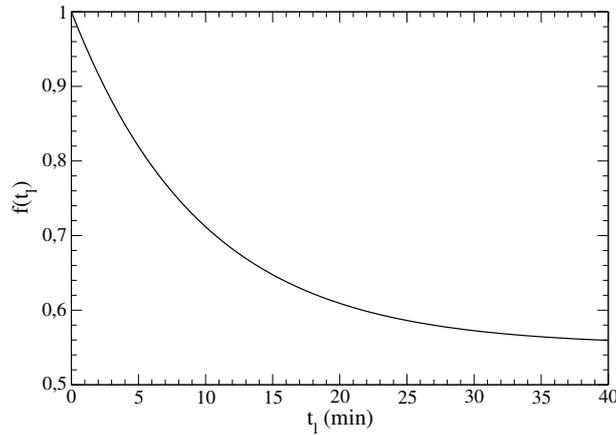


FIGURE C.2 – Tracé de  $f(t_l)$  en fonction de l’instant de lecture  $t_l$

Les paramètres déterminés par Bonnet et al. sont du même ordre de grandeur que les nôtres. Il est cependant normal de ne pas trouver exactement les mêmes paramètres puisque ceux-ci dépendent des conditions expérimentales : température [119] et scanner utilisé [120]. En revanche, il a été montré que le *fading* ne dépend pas du type de particule incidente [74, 120].

D’après l’équation (C.1), le facteur de correction de fading  $C_{fading}$  à appliquer aux spectres expérimentaux est donné par :

$$C_{fading} = 1/f(t_l) \quad (C.9)$$

Les valeurs de  $C_{fading}$  calculées à l’instant  $t_l$  après le tir laser ( $t = 0$ ) correspondant aux premières lectures des écrans sont données dans le tableau C.2. L’instant  $t_l$  de première lecture de chaque écran est déterminé lorsque le balayage (visualisé dans le logiciel d’acquisition) de cet écran dans le scanner atteint le milieu de l’écran.

Cristal	HOPG plan	PET plan	PET cylindrique
Instant de la première lecture $t_l$ (min)	11,22	11,93	12,47
$C_{fading}$	1,44	1,46	1,48

TABLEAU C.2 – Valeurs des coefficients de correction du *fading*

## C.2 Correction du nombre de lectures des écrans photostimulables

Comme nous l’avons évoqué précédemment, les écrans ont été lus plusieurs fois dans le scanner jusqu’à ce qu’il n’y ait plus de zones saturées dans la bande de projection du spectre. Cette saturation est liée au dispositif de lecture (photomultiplicateur) présent dans le scanner et non pas à celle du nombre d’états métastables qu’il est possible de créer au sein de la couche sensible. Ainsi, il est possible de corriger cette saturation pour déterminer le nombre de PSL créés dans les zones saturées.

Pour ce faire, des rectangles sont définis dans des zones non saturées sur l’image issue de la première lecture. Des rectangles de mêmes dimensions sont placés aux mêmes endroits sur l’image ayant été utilisée pour l’extraction des spectres. Ces régions d’intérêt sont présentées sur la figure C.3 pour les écrans associés aux trois cristaux. Sur cette figure, les zones saturées des images obtenues lors de la première lecture des écrans sont clairement visibles (couleur rose).

Pour chaque cristal, le coefficient de correction  $C_{lecture}$  est défini comme :

$$C_{lecture} = \frac{1}{n_{roi}} \sum_{i=1}^{n_{roi}} \frac{N_1^i}{N_s^i} \quad (C.10)$$

où :

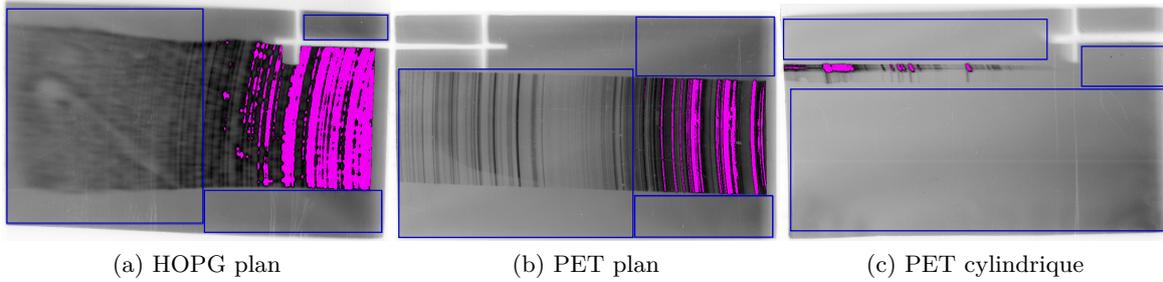


FIGURE C.3 – Images obtenues après la première lecture des écrans photostimulables. Les régions d'intérêt utilisées pour l'évaluation de  $C_{lecture}$  sont représentées en bleu. Les zones saturées de l'écran sont en rose.

- $n_{roi}$  est le nombre de région d'intérêt défini pour chaque cristal ( $n_{roi} = 3$ )
- $N_1^i$  est le nombre de PSL contenus dans la région d'intérêt  $i$ , déterminé sur l'image issue de la première lecture de l'écran
- $N_s^i$  est le nombre de PSL contenus dans la région d'intérêt  $i$ , déterminé sur l'image ayant servi à l'extraction du spectre (image sans zone saturée)

Les intégrales du nombre de PSL obtenues à chaque lecture des écrans ne sont pas corrigées du *fading*. En effet,  $C_{lecture}$  prend en compte la correction du *fading* ayant lieu après la première lecture. Le *fading* entre l'instant du tir laser et celui de la première lecture est corrigé avec le coefficient  $C_{fading}$  décrit au paragraphe précédent.

Les valeurs des coefficients  $C_{lecture}$  sont présentées dans le tableau C.3.

Cristal	HOPG plan	PET plan	PET cylindrique
Nombre de lectures de l'écran	3	3	6
$C_{lecture}$	4,09	4,08	9,80

TABEAU C.3 – Valeurs des coefficients de correction du nombre de lectures des écrans.

Nous pouvons vérifier la validité de cette correction en comparant l'évolution du nombre de PSL contenu dans une zone initialement saturée et une zone non saturée de l'image en fonction du nombre de lectures. Cette évolution est tracée sur la figure C.4 pour l'image issue du cristal HOPG. Pour plus de clarté, les intégrales de chaque zone sont normalisées à leurs valeurs respectives après six lectures.

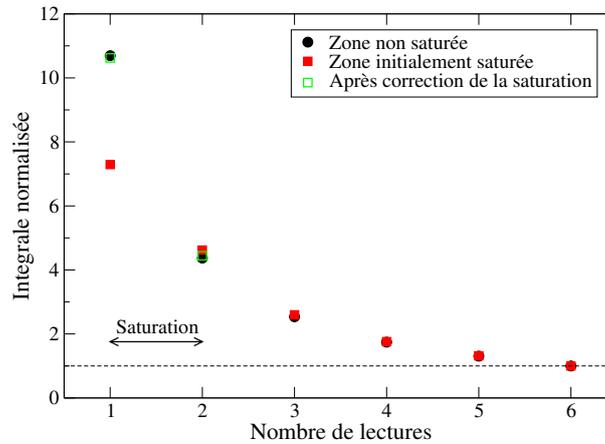


FIGURE C.4 – Intégrales du nombre de PSL contenus dans une zone initialement saturée et une zone non saturée de l'image en fonction du nombre de lectures. Ces intégrales sont normalisées à leur valeurs au bout de la sixième lecture. Les valeurs obtenues après correction de la saturation sont aussi indiquées.

Sur l'image, la saturation de la zone initialement saturée disparaît au bout de la troisième

lecture. A partir de cette lecture, l'évolution des nombres de PSL contenus dans les zones définies est similaire. La méthode de correction de la saturation appliquée sur les intégrales des première et deuxième lectures est donc correcte. Ceci confirme qu'il n'y a pas de perte d'information au niveau de l'écran dans les zones apparaissant saturées sur l'image. Cette saturation provient bien du scanner et non d'une saturation du nombre d'états métastables dans la couche sensible de l'écran.

### C.3 Correction de la largeur des bandes de projection

Afin de tenir compte du fait que les bandes de projection définies sur la figure 3.4 ne prennent pas en compte toute la longueur des raies suivant l'axe non-dispersif des cristaux, nous avons défini le facteur de correction  $C_{proj}$  comme :

$$C_{proj} = \frac{1}{n_{raie}} \sum_{i=1}^{n_{raie}} \frac{N_{tot}^i - n_{bdf} S_{tot}^i}{N_{proj}^i - n_{bdf} S_{proj}^i} \quad (C.11)$$

où :

- $n_{raie}$  est le nombre de raies isolées et utilisées pour le calcul de  $C_{proj}$
- $N_{tot}^i$  est le nombre total de PSL contenus dans la raie  $i$ , c'est-à-dire sur toute la longueur de la raie suivant l'axe non-dispersif du cristal
- $n_{bdf}$  est la densité de PSL (en PSL/mm<sup>2</sup>) dans des zones situées en dehors de l'image du cristal.
- $S_{tot}^i$  est la surface de la zone utilisée pour la détermination de  $N_{tot}(i)$
- $N_{proj}^i$  est le nombre de PSL contenus dans la zone de la raie  $i$  ayant pour longueur celle de la bande de projection et pour largeur celle de la raie  $i$
- $S_{proj}^i$  est la surface de la zone utilisée pour le calcul de l'intégrale  $N_{proj}(i)$

Les différentes zones nécessaires à l'évaluation de  $C_{proj}$  sont présentées sur la figure C.5.

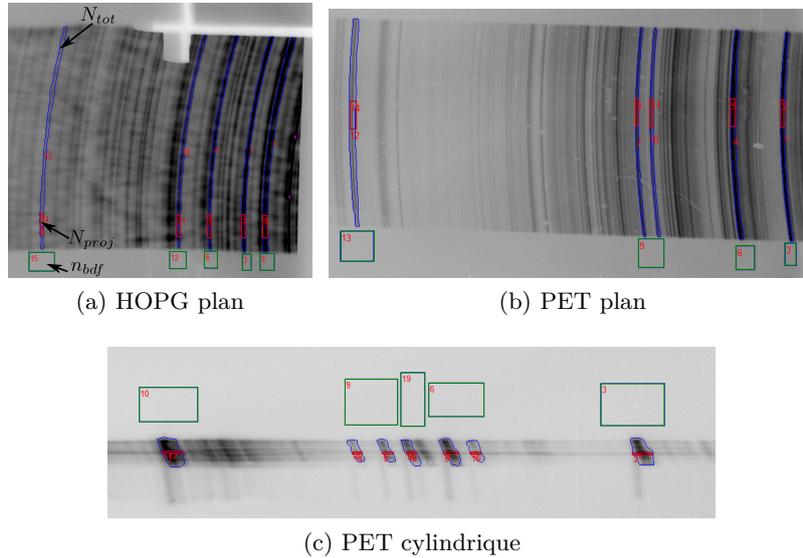


FIGURE C.5 – Définition des zones de calcul du nombre de PSL. En bleu, sont présentées les zones pour le calcul de  $N_{tot}$  et  $S_{tot}$ . En rouge, celles pour le calcul  $N_{proj}$  et  $S_{proj}$  et enfin en vert, celles pour l'évaluation de  $n_{bdf}$ .

Les valeurs obtenues pour chaque cristal sont présentées dans le tableau C.4.

Le coefficient  $C_{proj}$  du cristal PET cylindrique est inférieur à ceux des autres cristaux. Ceci provient de l'effet focalisant du cristal : en ne prenant qu'une petite bande de projection autour de la ligne focale de ce cristal, la majeure partie du signal est prise en compte.

Crystal	HOPG plan	PET plan	PET cylindrique
Largeur de la bande de projection (mm)	4	4	0,2
$n_{raie}$	5	5	7
$C_{proj}$	9,3	6,9	5,5

TABLEAU C.4 – Valeurs des coefficients de correction de la largeur des bandes de projection.

## C.4 Réflectivités des cristaux

Une caractéristique importante d'un cristal de Bragg est sa réflectivité  $R(\theta)$  qui est le rapport entre le nombre de photons réfléchis à l'angle  $\theta$  et le nombre de photons incidents d'un faisceau lumineux infiniment fin. Dans le cas d'un cristal de Bragg parfait, on aurait  $R(\theta) = 1$  à  $\theta = \theta_B$  et  $R(\theta) = 0$  sinon. En réalité, un cristal de Bragg n'est pas un monochromateur parfait et les photons incidents ayant un angle  $\theta$  compris dans un intervalle  $[\theta_B - \delta\theta_B, \theta_B + \delta\theta_B]$ , autour de l'angle de Bragg  $\theta_B$  sont réfléchis avec plus ou moins d'efficacité. La courbe représentant l'évolution de la réflectivité du cristal en fonction de l'angle  $\theta$  pour un angle  $\theta_B$  donné est appelée *rocking curve*. Un exemple de *rocking curve* (extraite de [121]) est présenté sur la figure C.6. Sur cette figure, les profils de réflexion en fonction de l'angle de Bragg relatif ( $\theta - \theta_B$ ) pour deux cristaux différents (LiF et HOPG) sont tracés pour une longueur d'onde de 2,75 Å. Ceci correspond à un angle de Bragg de 43,1° pour le cristal de LiF et de 24,2° pour le cristal de HOPG (cristaux utilisés à l'ordre  $n = 1$ ).

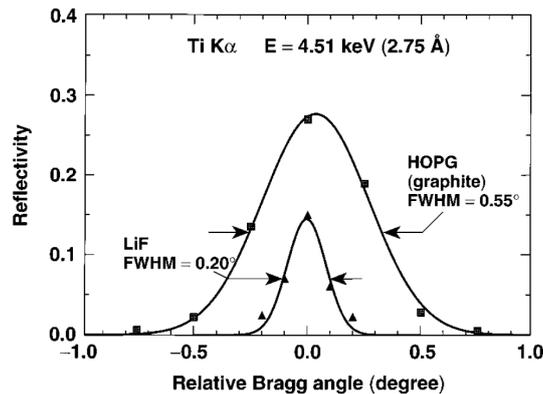


FIGURE C.6 – Exemple de profils de réflexion pour deux cristaux différents. Figure issue de [121].

Chaque profil de réflexion peut être ajusté par une fonction gaussienne dont la largeur à mi-hauteur ( $FWHM$ ) évalue la résolution du cristal de Bragg à l'angle  $\theta_B$ . Sur l'exemple de la figure C.6, le cristal de LiF ( $FWHM = 0,20^\circ$ ) a une meilleure résolution que le cristal de HOPG ( $FWHM = 0,55^\circ$ ).

La réflectivité intégrée  $R_{int}(\theta_B)$  est définie comme l'intégrale du profil de réflexion :

$$R_{int}(\theta_B) = \int_{\theta} R(\theta - \theta_B) d\theta \quad (C.12)$$

Plus celle-ci est élevée et plus le cristal est réfléchissant. Dans l'exemple de la figure C.6, le cristal de HOPG ( $R_{int}(24,2^\circ) = 2,9$  mrad) possède une réflectivité intégrée bien supérieure à celle du cristal LiF ( $R_{int}(43,1^\circ) = 0,52$  mrad). Les cristaux HOPG sont plus réfléchissants car ce sont des cristaux mosaïques qui peuvent être considérés comme une composition de plusieurs sous-cristaux plans ayant des orientations légèrement différentes. Ainsi, l'acceptance angulaire du cristal est plus importante puisque les différentes orientations des sous-cristaux plans peuvent conduire à une réflexion des photons même s'ils ont un angle d'incidence légèrement différent de l'angle de Bragg. Cet effet est représenté sur la figure C.7. En contrepartie, la résolution de ces cristaux est détériorée.

Les réflectivités intégrées des cristaux que nous avons utilisés n'ont pas été mesurées. Aussi, nous avons utilisé les données disponibles dans la littérature. Les réflectivités intégrées des

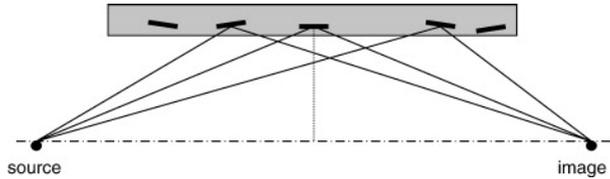


FIGURE C.7 – Représentation de l’effet d’un cristal mosaïque. Figure issue de [72].

cristaux HOPG et PET plans sont tracées sur la figure C.8 et sont respectivement issues des références [122] et [123]. Elles sont tracées en fonction de la longueur d’onde  $\lambda$  du rayonnement incident. L’équivalence entre l’angle de Bragg  $\theta_B$  et la longueur d’onde  $\lambda$  est immédiate en utilisant la relation de Bragg. Aussi, nous exprimerons la réflectivité intégrée indifféremment en fonction de l’angle de Bragg ( $R_{int}(\theta_B)$ ) ou de la longueur d’onde associée ( $R_{int}(\lambda)$ ). Sur la figure C.8, nous constatons de nouveau que la réflectivité intégrée d’un cristal HOPG est bien supérieure à celle d’un cristal PET.

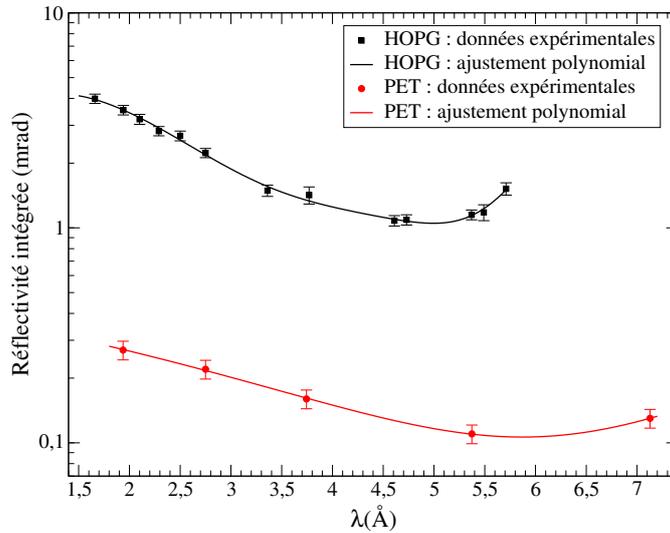


FIGURE C.8 – Réflectivités intégrées en fonction de la longueur d’onde pour des cristaux HOPG[122] et PET[123] plans.

Les réflectivités intégrées des cristaux HOPG et PET peuvent être ajustées par des polynômes d’ordre 3 et 5 respectivement. Dans ce travail, nous faisons l’hypothèse que la réflectivité d’un cristal cylindrique est identique à celle d’un cristal plan et utiliserons ainsi la même courbe de réflectivité intégrée pour les deux cristaux PET.

La réflectivité intégrée caractérise les propriétés de réflexion du cristal suivant son axe dispersif. Aussi, pour estimer le nombre de photons réfléchis par le cristal (et donc incidents sur l’écran photostimulable), il faut tenir compte de la longueur de celui-ci selon son axe non-dispersif. En effet, plus l’angle solide sous-tendu par le cristal est important et plus le nombre de photons réfléchis le sera. Le nombre de photons réfléchis  $N_r(\lambda)$  à la longueur d’onde  $\lambda$ , associée à l’angle  $\theta_B$  par la relation de Bragg, est donné par :

$$N_r(\lambda) = N_X(\lambda) \int_{\phi} \int_{\theta} R(\theta - \theta_B) d\theta d\phi = N_X(\lambda) R_{int}(\theta_B) \phi_{coll}(\lambda) \quad (\text{C.13})$$

où :

- $N_X(\lambda)$  est le nombre de photons par steradian émis par la source à la longueur d’onde  $\lambda$ .
- $R_{int}(\theta_B)$  est la réflectivité intégrée du cristal à l’angle de Bragg  $\theta_B$ .
- $\phi_{coll}(\lambda)$  est l’angle de collection du cristal.

D’après la figure C.9, l’angle de collection du cristal est donné par :

$$\phi_{coll}(\lambda) = 2 \arctan \left( \frac{L_{nd}}{2D(\lambda)} \right) \approx \frac{L_{nd}}{D(\lambda)} \quad (\text{C.14})$$

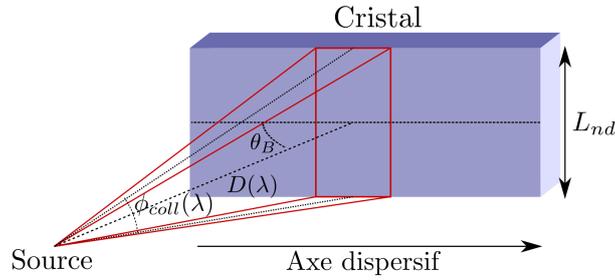


FIGURE C.9 – Représentation de l’angle solide effectif d’un cristal de Bragg plan à la longueur d’onde  $\lambda$  (en rouge) et de l’angle de collection du cristal  $\phi_{coll}(\lambda)$  (en pointillés).

où

- $D(\lambda)$  est la distance entre la source et le cristal pour une longueur d’onde  $\lambda$  donnée (ou un angle de Bragg  $\theta_B$  donné).
- $L_{nd}$  est la longueur du cristal suivant son axe non-dispersif.

A partir des équations (C.13) et (C.14), nous pouvons définir un angle solide effectif  $\Omega_{eff}(\lambda)$  du cristal à la longueur d’onde  $\lambda$  comme :

$$\Omega_{eff}(\lambda) = \frac{N_r(\lambda)}{N_X(\lambda)} = 2R_{int}(\lambda) \arctan\left(\frac{L_{nd}}{2D(\lambda)}\right) \quad (\text{C.15})$$

$\Omega_{eff}(\lambda)$  représente ainsi l’angle solide géométrique du cristal pondéré par la réflectivité intégrée de celui-ci à la longueur d’onde  $\lambda$ . L’évolution de l’angle solide effectif  $\Omega_{eff}(\lambda)$  en fonction de la longueur d’onde  $\lambda$  pour chaque cristal est représentée sur la figure C.10. Sur cette figure, nous constatons que le cristal HOPG possède un angle solide effectif plus important que les cristaux PET. Ceci provient de sa réflectivité qui est un ordre de grandeur plus élevée que celle d’un cristal PET.

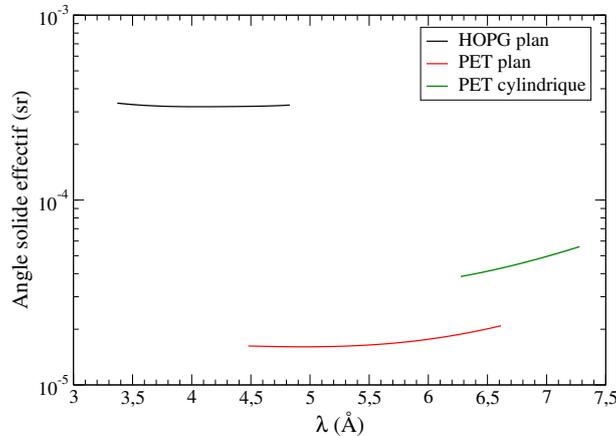


FIGURE C.10 – Évolutions des angles solides effectifs  $\Omega_{eff}(\lambda)$  des trois cristaux en fonction de la longueur d’onde  $\lambda$ .

## C.5 Détermination de la transmission des photons X au travers des feuilles de protection

Afin de protéger les cristaux des débris émis par la cible lors du tir laser, une feuille de protection a été placée devant chaque cristal. Des feuilles de même composition étaient placées devant les porte-écrans afin de constituer un blindage pour les particules de basse énergie. Les valeurs des transmissions des couches d’aluminium et de mylar sont issues de la base de données CXRO<sup>1</sup> (référence [124]) et sont tracées sur la figure C.11. La transmission totale des photons

1. voir [http://henke.lbl.gov/optical\\_constants/](http://henke.lbl.gov/optical_constants/)

en fonction de leur longueur d'onde  $\lambda$  au travers des deux feuilles de protection est aussi tracée sur la figure C.11.

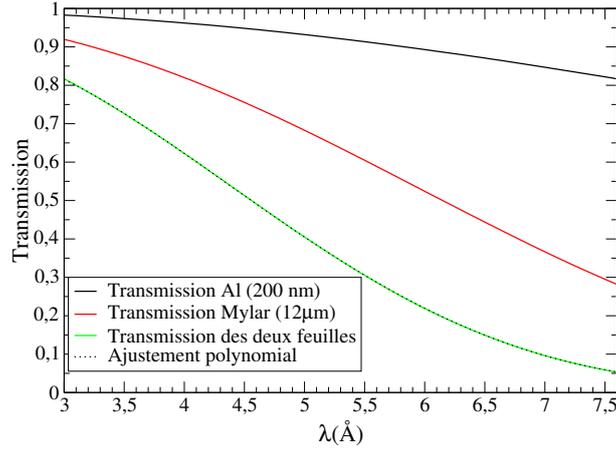


FIGURE C.11 – Transmission des photons au travers des couches composant une feuille de protection. La transmission totale au travers des deux feuilles de protection est aussi tracée ainsi que son ajustement polynomial.

Pour faciliter l'analyse numérique des données, cette transmission totale est ajustée, avec un bon accord, par un polynôme de degré 4, représenté en pointillés sur la figure C.11.

## C.6 Détermination de la fonction de réponse des écrans photo-stimulables

Afin de déduire le nombre de photons émis par la source, nous devons déterminer la réponse des écrans  $R_{IP}(\lambda)$ . Celle-ci exprime le nombre de PSL induit par le passage d'un photon incident de longueur d'onde  $\lambda$ . Le modèle permettant de calculer les fonctions de réponses en fonction des énergies et des différents types de particules a été décrit dans les références [73, 74, 118]. Dans ce modèle, le nombre de sites métastables créés et donc le nombre de PSL mesurés est proportionnel à l'énergie déposée par la particule incidente et par toutes les particules secondaires créées dans l'écran. De plus, l'absorption des PSL et des photons de lecture du scanner dans la couche sensible des écrans TR est décrite par une loi de Beer-Lambert. Dans ce modèle la réponse des écrans à un photon de longueur d'onde  $\lambda$  s'exprime donc par :

$$R_{IP}(\lambda) = \alpha_{\gamma} \int_0^W \frac{dE_{dep}}{dz}(\lambda, z) \exp\left(-\frac{z}{L}\right) dz \quad (C.16)$$

où :

- $\alpha_{\gamma}$  est la sensibilité de l'écran aux photons (exprimé en PSL/keV)
- $W$  est l'épaisseur de la couche sensible
- $\frac{dE_{dep}}{dz}(\lambda, z)$  est l'énergie déposée dans une épaisseur  $dz$  à la profondeur  $z$  de la couche sensible par le photon incident (de longueur d'onde  $\lambda$ ) et par les particules secondaires créées dans la couche sensible.
- $L$  est une longueur d'absorption linéique qui décrit l'atténuation des photons dans la couche sensible des écrans

Le terme  $\frac{dE_{dep}}{dz}(\lambda, z)$  de l'équation (C.16) est calculé à l'aide de simulations Monte-Carlo réalisées à l'aide du code Geant4 [125]. Dans ces simulations, la composition des écrans, décrite dans le tableau 3.3, est prise en compte et une liste de processus physiques est associée à chaque type de particules.

Les fonctions de réponse ont été déterminées dans des études précédentes pour différentes particules incidentes (électrons, photons, protons et particules  $\alpha$ ) et pour trois types d'écran (MS, SR et TR)[73, 74, 118]. Concernant les photons, elles ont été calculées sur une gamme en énergie allant de 5 keV ( $\lambda = 2,5 \text{ \AA}$ ) à 10 MeV ( $\lambda = 1,2 \text{ m\AA}$ ). Par conséquent, nous devons

déterminer ces fonctions de réponse pour des photons dont l'énergie est comprise entre 1,7 ( $\lambda = 3,8\text{\AA}$ ) et 3,3 keV ( $\lambda = 7,3\text{\AA}$ ) à l'aide de l'équation (C.16). D'après ces études, il a été montré que le paramètre  $\alpha_\gamma$  dépend du type d'écran, de la nature des particules incidentes et du scanner utilisé. Le paramètre  $L$ , quant à lui, ne dépend que de l'écran et du modèle de scanner utilisé.

Le scanner utilisé lors de la campagne expérimentale sur PHELIX était du même modèle (FLA-7000) que celui utilisé lors des mesures décrites dans les références [73, 74, 118]. Nous avons donc utilisé la valeur de la longueur d'absorption linéique déterminée dans la référence [118] :  $L = 44 \pm 4\text{ }\mu\text{m}$ . Comme il nous est impossible d'évaluer le paramètre  $\alpha_\gamma$ , nous avons aussi utilisé celui de la référence [118],  $\alpha_\gamma = 4,85 \pm 0,15(\text{stat}) \pm 1,20(\text{syst})\text{ PSL/keV}$ , pour calculer la fonction de réponse des écrans TR dans la gamme spectrale d'intérêt pour l'analyse des spectres X ( $3,5 - 7,5\text{\AA}$ ). Celle-ci est tracée sur la figure C.12. Ces calculs ont été réalisés à différentes longueurs d'onde à l'aide du code Geant4. Afin de faciliter l'analyse des spectres expérimentaux, la réponse des écrans en fonction de la longueur d'onde est ajustée à l'aide d'un polynôme de degré trois.

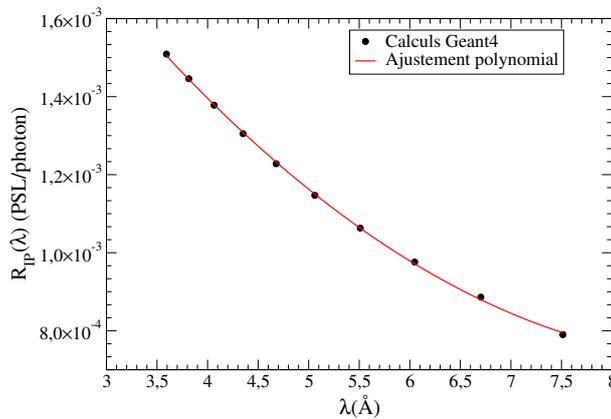


FIGURE C.12 – Réponse en photons des écrans TR dans la gamme spectrale  $3,5 - 7,5\text{\AA}$ .

La réponse des écrans TR décroît quand la longueur d'onde du rayonnement incident croît (énergie des photons décroissante). A ces longueurs d'onde, tous les photons sont absorbés dans l'épaisseur de la couche sensible. Ainsi, plus les photons sont d'énergie élevée et plus le nombre d'états métastables créés dans la couche sensible de l'écran est important.

Comme nous avons utilisé les paramètres  $\alpha_\gamma$  et  $L$  issus de la référence [118] pour évaluer la fonction de réponse présentée sur la figure C.12, un écart au maximum de 20% peut être attendu avec celle que l'on aurait mesurée lors de la campagne expérimentale. Cet écart sur la fonction de réponse affectera tous les spectres X par un même coefficient multiplicatif.

## Annexe D

# Sources radioactives utilisées

Les intensités  $\gamma$   $\mathcal{I}_\gamma$  sont données pour 100 désintégrations du noyau considéré.

### D.1 Source de $^{152}\text{Eu}$ [99]

Énergie (keV)	$\mathcal{I}_\gamma$ (%)
121,7817 (3)	28,53 (16)
244,6974 (8)	7,55 (4)
344,2785 (12)	26,59 (20)
443,965 (3)	3,13 (2)
778,9045 (24)	12,63 (8)
964,072 (18)	14,62 (6)
1112,076 (3)	13,67 (8)
1408,013 (3)	20,87 (9)

### D.2 Source de $^{133}\text{Ba}$ [94]

Énergie (keV)	$\mathcal{I}_\gamma$ (%)
160,6120 (16)	0,638 (5)
223,2368 (13)	0,453 (3)
276,3989 (12)	7,16 (5)
302,8508 (5)	18,34 (13)
356,0129 (7)	62,05 (19)
383,8485 (12)	8,94 (6)

### D.3 Source de $^{60}\text{Co}$ [126]

Énergie (keV)	$\mathcal{I}_\gamma$ (%)
1173,228 (3)	99,85 (3)
1332,492 (4)	99,9826 (6)



## Annexe E

# Probabilité de transition réduite nucléaire dans le modèle de Weisskopf

### E.1 Probabilité de transition réduite nucléaire

La probabilité de transition réduite entre les états nucléaires 1 et 2,  $B_{I_1 \rightarrow I_2}(\pi L)$  est généralement donnée dans les tables par rapport à sa valeur calculée dans le modèle à particules indépendantes de Weisskopf,  $B_W(\pi L)$  :

$$B_{I_1 \rightarrow I_2}(\pi L) = \gamma B_W(\pi L) \quad (\text{E.1})$$

où  $\gamma$  est une quantité exprimée en unité Weisskopf (W.u).  $B_W(\pi L)$  ne dépend pas des moments cinétiques des états nucléaires initial et final. A l'inverse,  $B_{I_1 \rightarrow I_2}(\pi L)$  dépend du sens de la transition entre les états nucléaires 1 et 2 (excitation ou désexcitation). La relation entre  $B_{I_1 \rightarrow I_2}(\pi L)$  et  $B_{I_2 \rightarrow I_1}(\pi L)$  est [1] :

$$B_{I_1 \rightarrow I_2}(\pi L) = \frac{2I_2 + 1}{2I_1 + 1} B_{I_2 \rightarrow I_1}(\pi L) \quad (\text{E.2})$$

où  $I_1$  et  $I_2$  désignent respectivement les moments angulaires totaux des états nucléaires 1 et 2.

Des valeurs de  $B_{I_1 \rightarrow I_2}(\pi L)$  très différentes de 1 W.u indiquent que la transition  $I_1 \rightarrow I_2$  est fortement influencée par un mouvement collectif des nucléons au sein du noyau.

### E.2 Expressions des probabilités de transition réduites nucléaires dans le modèle de Weisskopf

#### E.2.1 Transition électrique

Pour une transition électrique  $EL$ ,  $B_W(EL)$  s'exprime par [127] :

$$B_W(EL) = \frac{e^2}{4\pi} \left( \frac{3}{L+3} \right)^2 R^{2L} \quad (\text{E.3})$$

où  $e$  est la charge élémentaire et  $R$  le rayon du noyau. Généralement,  $R$  est calculé à partir de  $R = r_0 A^{1/3}$  avec  $r_0 = 1,2$  fm et  $A$  le nombre de masse du noyau.

#### E.2.2 Transition magnétique

Pour une transition électrique  $ML$ ,  $B_W(ML)$  s'exprime par [127] :

$$B_W(ML) = \frac{10}{\pi} \left( \frac{e\hbar}{2m_p c} \right)^2 \left( \frac{3}{L+3} \right)^2 R^{2L-2} \quad (\text{E.4})$$

où  $m_p$  est la masse du proton.



## Annexe F

# Méthode de détermination du rapport d'intensité des transitions à 3,4 et 219 keV

Dans un premier temps, nous écrivons le bilan des taux de transition peuplant et dépeuplant le niveau  $5^-$ . Comme les moments cinétiques des niveaux sont déterminés avec ambiguïté, nous utilisons les énergies des transitions pour la notation de ce bilan. Nous pouvons ainsi écrire :

$$\lambda^{77} + \lambda^{136} + \lambda^{147} = \lambda^{3,4} + \lambda^{219} \quad (\text{F.1})$$

où  $\lambda^E$  est le taux de désexcitation total de la transition d'énergie  $E$ . En introduisant les coefficients de conversion interne, il vient :

$$\lambda_\gamma^{77} (1 + \alpha_e^{77}) + \lambda_\gamma^{136} (1 + \alpha_e^{136}) + \lambda_\gamma^{147} (1 + \alpha_e^{147}) = \lambda_\gamma^{3,4} (1 + \alpha_e^{3,4}) + \lambda_\gamma^{219} (1 + \alpha_e^{219}) \quad (\text{F.2})$$

où  $\lambda_\gamma^E$  est le taux de désexcitation radiatif de la transition d'énergie  $E$  et  $\alpha_e^E$  le coefficient de conversion interne associé à la transition d'énergie  $E$ . D'après l'évaluation de Kondev, nous avons :  $\alpha_e^{77} = 0,212$ ,  $\alpha_e^{3,4} = 361$  (cette valeur a été calculée avec le code BrIcc[104] par Kondev) et  $\alpha_e^{219} = 0,0556$ . En revanche, les coefficients de conversion interne des transitions à 136 keV et 147 keV ne sont pas connus car les natures multipolaires de transitions ne sont pas déterminées. Dans un premier temps, nous considérons que  $\alpha_e^{136} = \alpha_e^{147} = 0$ . Ainsi, il vient :

$$\frac{\lambda_\gamma^{3,4}}{\lambda_\gamma^{219}} = \frac{1}{1 + \alpha_e^{3,4}} \left( \frac{\lambda_\gamma^{77}}{\lambda_\gamma^{219}} (1 + \alpha_e^{77}) + \frac{\lambda_\gamma^{136}}{\lambda_\gamma^{219}} + \frac{\lambda_\gamma^{147}}{\lambda_\gamma^{219}} - 1 - \alpha_e^{219} \right) \quad (\text{F.3})$$

Döring et al. ont obtenu expérimentalement [38] :  $\frac{\lambda_\gamma^{3,4}}{\lambda_\gamma^{219}} = (0,23 \pm 0,08)\%$ . Nous nous proposons de vérifier la valeur de ce rapport à l'aide des données obtenues auprès du TANDEM d'Orsay. Expérimentalement,  $\frac{\lambda_\gamma^{3,4}}{\lambda_\gamma^{219}}$  est déterminé à l'aide de :

$$\frac{\lambda_\gamma^{3,4}}{\lambda_\gamma^{219}} = \frac{1}{1 + \alpha_e^{3,4}} \left[ \left( \frac{A_{77}}{\epsilon(77)} (1 + \alpha_e^{77}) + \frac{A_{136}}{\epsilon(136)} + \frac{A_{147}}{\epsilon(147)} \right) \frac{\epsilon(219)}{A_{219}} - 1 - \alpha_e^{219} \right] \quad (\text{F.4})$$

où :  $A_E$  désigne l'intégrale du pic de pleine énergie d'énergie  $E$  et  $\epsilon(E)$  l'efficacité de pleine énergie de l'ensemble des Ge d'ORGAM à l'énergie  $E$ . Cette efficacité est déterminée à l'aide d'une source radioactive dont l'activité est connue. En relatif, cette efficacité est donnée par :

$$\frac{\epsilon(E)}{\epsilon(E_{ref})} = \frac{A_E \mathcal{I}_\gamma^{E_{ref}}}{A_{E_{ref}} \mathcal{I}_\gamma^E} \quad (\text{F.5})$$

où  $\mathcal{I}_\gamma^E$  est la probabilité qu'un  $\gamma$  d'énergie  $E$  soit émis lors d'une désintégration de la source radioactive (voir annexe D). Cette efficacité est déterminée sur un spectre  $\gamma$  total obtenu avec la source d' $^{152}\text{Eu}$ . Ce spectre total est la somme des spectres  $\gamma$  de cette source mesurés avec les

différents Ge haut gain d'ORGAM. L'efficacité ainsi calculée correspond à celle d'un Ge fictif constitué de l'ensemble des Ge haut gain d'ORGAM. La courbe d'efficacité  $\frac{\epsilon(E)}{\epsilon(443)}$  obtenue ainsi est présentée sur la figure F.1. D'après cette figure, nous ne disposons que de deux points (à

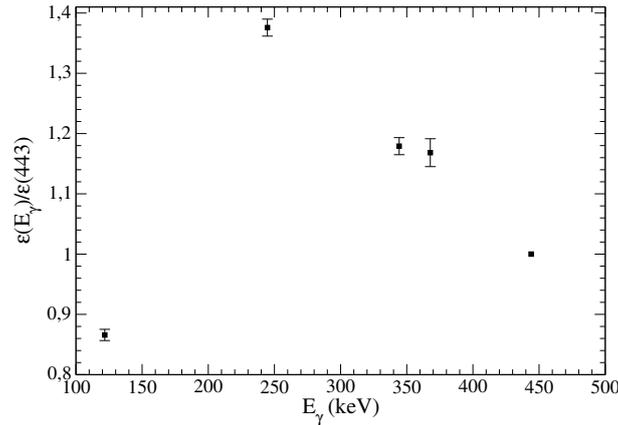


FIGURE F.1 – Évolution de l'efficacité totale normalisée à celle mesurée à 443 keV en fonction de l'énergie du  $\gamma$  incident.

121 et 244 keV) qui peuvent être utilisés pour déterminer les efficacités à 135, 147 et 219 keV. Celles-ci sont déterminées par une extrapolation linéaire des efficacités mesurées à 121 et 244 keV. Comme nous ne disposons pas de points expérimentaux proches de 77 keV, nous utilisons également cette extrapolation pour déterminer l'efficacité à cette énergie. Nous obtenons ainsi :

$$\frac{\epsilon(77)}{\epsilon(219)} \approx 0,53 \quad \frac{\epsilon(136)}{\epsilon(219)} \approx 0,73 \quad \frac{\epsilon(147)}{\epsilon(219)} \approx 0,76$$

A partir du spectre direct total créé en additionnant tous les spectres directs de  $^{84}\text{Rb}$  obtenus avec les Ge haut gain, présenté sur la figure F.2, nous déterminons les aires des pics  $\gamma$  d'intérêt.

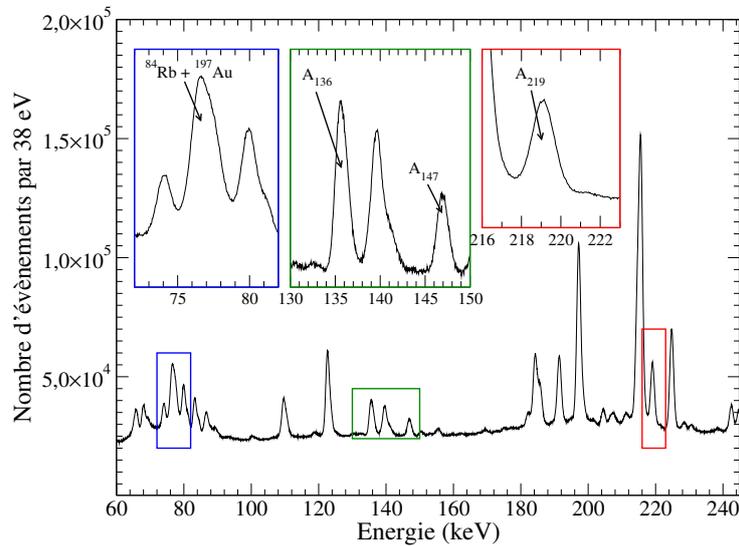


FIGURE F.2 – Spectre total issu de l'addition de tous les spectres  $^{84}\text{Rb}$  des Ge haut gain. Des agrandissements autour des pics  $\gamma$  d'intérêt sont présentés.

D'après la figure F.2, les aires des pics à  $\gamma$  à 136, 147 et 219 keV peuvent être déterminées. Elles sont calculées en intégrant les pics avec une soustraction de fond modélisé par une droite sous chaque pic. Le pic à 77 keV étant mélangé avec les raies (X et  $\gamma$ ) de l' $^{197}\text{Au}$  émises à cette même énergie, nous ne pouvons pas déterminer  $A_{77}$  à partir du spectre  $\gamma$  direct de la figure F.2.

Afin de diminuer le nombre coïncidences fortuites entre les pics à 77 keV de l' $^{197}\text{Au}$  et du  $^{84}\text{Rb}$ , nous utilisons le spectre obtenu avec la gate à 219 keV (figure 4.21). Sur ce spectre, nous évaluons le rapport des aires des pics à 136 et 77 keV :  $R_{77/136} \approx 0,145$ . Sur le spectre obtenu

par projection de la gate à 219 keV, le pic de l' $^{197}\text{Au}$  à 279 keV est encore visible. Il est donc possible que le pic à 77 keV soit encore contaminé par l' $^{197}\text{Au}$ . Nous allons considérer les deux cas extrêmes : le pic à 77 keV sur le spectre de la gate à 219 keV est constitué complètement soit de  $^{84}\text{Rb}$ , soit de  $^{197}\text{Au}$ .

Si l'on considère le cas où le pic à 77 keV est composé uniquement d'or, l'équation (F.4) permet d'obtenir la valeur minorante de  $\frac{\lambda_\gamma^{3,4}}{\lambda_\gamma^{219}}$  et devient :

$$\left(\frac{\lambda_\gamma^{3,4}}{\lambda_\gamma^{219}}\right)^{\min} = \frac{1}{1 + \alpha_e^{3,4}} \left[ \left( \frac{A_{136}}{\epsilon(136)} + \frac{A_{147}}{\epsilon(147)} \right) \frac{\epsilon(219)}{A_{219}} - 1 - \alpha_e^{219} \right] \quad (\text{F.6})$$

Nous obtenons ainsi la valeur minorante de  $\left(\frac{\lambda_\gamma^{3,4}}{\lambda_\gamma^{219}}\right)^{\min}$  suivante :

$$\left(\frac{\lambda_\gamma^{3,4}}{\lambda_\gamma^{219}}\right)^{\min} \approx 0,12\%$$

En considérant que le pic à 77 keV n'est composé que de  $^{84}\text{Rb}$ , la valeur majorante du rapport  $\frac{\lambda_\gamma^{3,4}}{\lambda_\gamma^{219}}$  est calculée par :

$$\left(\frac{\lambda_\gamma^{3,4}}{\lambda_\gamma^{219}}\right)^{\text{maj}} = \frac{1 + \alpha_e^{77}}{1 + \alpha_e^{3,4}} \frac{A_{136} R_{77/136} \epsilon(219)}{A_{219} \epsilon(77)} + \left(\frac{\lambda_\gamma^{3,4}}{\lambda_\gamma^{219}}\right)^{\min} \quad (\text{F.7})$$

Nous obtenons :

$$\left(\frac{\lambda_\gamma^{3,4}}{\lambda_\gamma^{219}}\right)^{\text{maj}} \approx 0,19\%$$

Les bornes minorante et majorante que nous obtenons sont compatibles avec la valeur obtenue par Döring et al.[38]. L'hypothèse selon laquelle  $\alpha_e^{136} = \alpha_e^{147} = 0$  a sans doute été effectuée par Döring et al. pour obtenir  $\frac{\lambda_\gamma^{3,4}}{\lambda_\gamma^{219}}$  puisqu'ils ne connaissaient pas les natures des deux transitions. Cette hypothèse semble valable si ces transitions sont des  $M1$  pures. En effet, les coefficients de conversion interne, calculés avec le code BrIcc [104]<sup>1</sup> sont :  $\alpha_e^{136} = 0,0633$  et  $\alpha_e^{147} = 0,051$ . Si les deux transitions sont de type  $E2$ , l'hypothèse  $\alpha_e^{136} = \alpha_e^{147} = 0$  est plus approximative :  $\alpha_e^{136} = 0,317$  et  $\alpha_e^{147} = 0,236$ .

Au travers de cette vérification qualitative de  $\frac{\lambda_\gamma^{3,4}}{\lambda_\gamma^{219}}$ , nous pensons avoir retrouvé les hypothèses utilisées par Döring et al. pour l'évaluation de ce rapport. Sous ces mêmes hypothèses, nous obtenons un rapport  $\frac{\lambda_\gamma^{3,4}}{\lambda_\gamma^{219}}$  compatible avec leur résultat.

---

1. <http://bricc.anu.edu.au/index.php>



## Annexe G

# Expression de l'élément de matrice de couplage atome-noyau

Le terme  $|W_{i1,f2}|^2$  est calculé comme une somme sur les sous-état magnétiques atomiques  $M_f$  et nucléaires  $M_2$  finals et une moyenne sur les sous-états magnétique atomiques  $M_i$  et nucléaires  $M_1$  initiaux :

$$|W_{i1,f2}|^2 = \frac{1}{(2I_1 + 1)(2J_i + 1)} \sum_{M_1 M_2} \sum_{M_i M_f} \left| \langle \Psi_{f2} | H_M^L | \Psi_{i1} \rangle \right|^2 \quad (\text{G.1})$$

où :

- $I_1$  et  $J_i$  sont les moments cinétiques totaux des états initiaux nucléaire et atomique respectivement
- $H_M^L$  est l'hamiltonien d'interaction atome-noyau. Il s'agit d'un opérateur tensoriel d'ordre  $L$  [9]
- $|\Psi_{i1}\rangle$  et  $|\Psi_{f2}\rangle$  sont les états initial et final du système total atome-noyau

L'élément de matrice  $\langle \Psi_{f2} | H_M^L | \Psi_{i1} \rangle$  dépend du type de transition et de la base choisie pour exprimer les états atomiques et nucléaires. Dans notre cas, nous disposons de deux bases pour exprimer les états atomiques : la base des orbitales et la base des états  $|JM\Pi\rangle$ .

Dans la base des orbitales, et pour une transitions  $\alpha \rightarrow \beta$  entre les orbitales  $\alpha$  et  $\beta$  de deux configurations électroniques, l'élément de matrice de couplage atome-noyau est noté  $\langle \Psi_{\beta2} | H_M^L | \Psi_{\alpha1} \rangle$ . Les états initial et final du système total atome-noyau sont alors  $|\Psi_{\alpha1}\rangle$  et  $|\Psi_{\beta2}\rangle$  respectivement.

Pour une transition  $i \rightarrow f$  entre deux états atomiques  $|JM\Pi\rangle$ , l'élément de matrice de couplage atome noyau est noté :  $\langle \Psi_{f2} | H_M^L | \Psi_{i1} \rangle$ .

Dans cette annexe, les résultats obtenus dans la base des orbitales à partir de la théorie développée dans le cadre de la conversion interne sont rappelés. Ceux-ci seront utilisés par la suite pour exprimer l'élément de matrice de couplage atome-noyau dans la base des états atomiques  $|JM\Pi\rangle$ .

## G.1 Expression de $\langle \Psi_{f2} | H_M^L | \Psi_{i1} \rangle$

### G.1.1 Expression dans la base des orbitales

Dans ce paragraphe, l'expression de l'élément de matrice de couplage atome-noyau dans la base des orbitales est rappelée. Celle-ci sera utilisée pour exprimer cet élément de matrice dans la base des états atomiques  $|JM\Pi\rangle$ .

Dans la base des orbitales, les états initial et final du système total atome-noyau s'expriment par :

$$\begin{aligned} |\Psi_{\alpha1}\rangle &= |\psi_\alpha\rangle \otimes |\Psi_1\rangle = |n_\alpha \kappa_\alpha j_\alpha m_\alpha\rangle \otimes |I_1 M_1 \Pi_1\rangle \\ |\Psi_{\beta2}\rangle &= |\psi_\beta\rangle \otimes |\Psi_2\rangle = |n_\beta \kappa_\beta j_\beta m_\beta\rangle \otimes |I_2 M_2 \Pi_2\rangle \end{aligned}$$

L'expression de  $\langle \Psi_{\beta 2} | H_M^L | \Psi_{\alpha 1} \rangle$  pour l'effet NEET est identique à celle de la conversion interne. En effet, seule la nature des fonctions d'onde électroniques (liée-libre dans le cas de la conversion interne et liée-liée dans le cas du NEET) est différente. Dans le cadre de la théorie de la conversion interne,  $\langle \Psi_{\beta 2} | H_M^L | \Psi_{\alpha 1} \rangle$  dans la base des orbitales s'exprime à partir des développements présentés dans la référence [9].

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\beta} \Psi_2 | H_M^L | \psi_{\alpha} \Psi_1 \rangle &= \langle n_{\beta} \kappa_{\beta} j_{\beta} m_{\beta} | H_M^L | n_{\alpha} \kappa_{\alpha} j_{\alpha} m_{\alpha} \rangle \langle I_2 M_2 | H_M^L | I_1 M_1 \rangle & (G.2) \\ &= \sum_{LM} (-1)^{M+1+I_2-M_2+m_{\beta}+1/2} i \sqrt{4\pi} e(k_{12})^{L+1} \frac{\sqrt{(2L+1)(2j_{\alpha}+1)(2j_{\beta}+1)}}{L(2L+1)!!} \\ &\quad \times \begin{pmatrix} I_2 & L & I_1 \\ -M_2 & -M & M_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_{\beta} & L & j_{\alpha} \\ -m_{\beta} & M & m_{\alpha} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_{\beta} & L & j_{\alpha} \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \\ &\quad \times \langle I_2 || \mathcal{M}(\pi L) || I_1 \rangle M_{\beta\alpha}^e(\pi L) & (G.3) \end{aligned}$$

Le terme  $\langle I_2 || \mathcal{M}(\pi L) || I_1 \rangle$  est relié à la probabilité de transition réduite nucléaire par :

$$B_{1 \rightarrow 2}(\pi L) = \frac{1}{2I_1 + 1} |\langle I_2 || \mathcal{M}(\pi L) || I_1 \rangle|^2 \quad (G.4)$$

où  $\mathcal{M}(\pi L)$  désigne l'opérateur de transition électromagnétique.

### G.1.2 Expression dans la base des états atomiques $|JM\Pi\rangle$

Dans ce paragraphe, nous allons exprimer l'élément de matrice  $\langle \Psi_{f2} | H_M^L | \Psi_{i1} \rangle$  dans la base des états atomiques  $|JM\Pi\rangle$ . Pour cela, les états atomiques sont d'abord exprimés dans la base des CSF à l'aide des coefficients calculés par MCDF. Puis les éléments de matrice réduits entre ces CSF sont déterminés dans la base des orbitales afin d'introduire les résultats obtenus dans cette base (paragraphe précédent).

Dans la base des états atomiques  $|JM\Pi\rangle$ , les états initial et final du système total s'écrivent :

$$\begin{aligned} |\Psi_{i1}\rangle &= |\Phi_i\rangle \otimes |\Psi_1\rangle = |J_i M_i \Pi_i\rangle \otimes |I_1 M_1 \Pi_1\rangle \\ |\Psi_{f2}\rangle &= |\Phi_f\rangle \otimes |\Psi_2\rangle = |J_f M_f \Pi_f\rangle \otimes |I_2 M_2 \Pi_2\rangle \end{aligned}$$

Afin d'alléger les notations, la parité  $\Pi$  des états atomiques et nucléaire ne sera pas précisée dans la suite car elle n'est pas nécessaire au calcul de  $\langle \Psi_{f2} | H_M^L | \Psi_{i1} \rangle$ . Il vient :

$$\langle \Psi_{f2} | H_M^L | \Psi_{i1} \rangle = \langle J_f M_f | H_M^L | J_i M_i \rangle \langle I_2 M_2 | H_M^L | I_1 M_1 \rangle \quad (G.5)$$

L'expression précédente est obtenue en supposant un noyau ponctuel, permettant ainsi de séparer les calculs des termes atomique  $\langle J_f M_f | H_M^L | J_i M_i \rangle$  et nucléaire  $\langle I_2 M_2 | H_M^L | I_1 M_1 \rangle$ . Cette hypothèse est également réalisée dans la référence [9] pour obtenir l'expression (G.3).

En utilisant le théorème de Wigner-Eckart sur le terme  $\langle J_f M_f | H_M^L | J_i M_i \rangle$ , il vient :

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{f2} | H_M^L | \Psi_{i1} \rangle &= (-1)^{J_f - M_f} \begin{pmatrix} J_f & L & J_i \\ -M_f & M & M_i \end{pmatrix} \langle J_f || H^L || J_i \rangle \\ &\quad \times \langle I_2 M_2 | H_M^L | I_1 M_1 \rangle & (G.6) \end{aligned}$$

En utilisant les coefficients (réels) de décomposition des états atomiques  $|J\rangle$  sur la base des CSF :

$$|J_i\rangle = \sum_j c_{ij} |\nu_j J_j\rangle$$

où  $\nu_j$  désigne les autres nombres quantiques nécessaires pour définir sans ambiguïté une CSF.

Il vient :

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{f2} | H_M^L | \Psi_{i1} \rangle &= (-1)^{J_f - M_f} \begin{pmatrix} J_f & L & J_i \\ -M_f & M & M_i \end{pmatrix} \\ &\times \sum_{jj'} c_{ij'} c_{fj} \langle \nu_j J_j || H^L || \nu_{j'} J_{j'} \rangle \langle I_2 M_2 | H_M^L | I_1 M_1 \rangle \end{aligned} \quad (\text{G.7})$$

L'élément de matrice réduit  $\langle \nu_j J_j || H^L || \nu_{j'} J_{j'} \rangle$ , exprimé entre deux CSF peut s'écrire dans la base des orbitales  $|n_k \kappa_k j_k\rangle$  à l'aide des coefficients calculés avec le code développé par G. Gosselin :

$$\langle \nu_j J_j || H^L || \nu_{j'} J_{j'} \rangle = \sum_{kk'} a_{jj'kk'} \langle n_k \kappa_k j_k || H^L || n_{k'} \kappa_{k'} j_{k'} \rangle \quad (\text{G.8})$$

Il vient alors :

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{f2} | H_M^L | \Psi_{i1} \rangle &= (-1)^{J_f - M_f} \begin{pmatrix} J_f & L & J_i \\ -M_f & M & M_i \end{pmatrix} \\ &\times \sum_{jj'} \sum_{kk'} c_{ij'} c_{fj} a_{jj'kk'} \langle n_k \kappa_k j_k || H^L || n_{k'} \kappa_{k'} j_{k'} \rangle \langle I_2 M_2 | H_M^L | I_1 M_1 \rangle \end{aligned} \quad (\text{G.9})$$

Le terme  $\langle n_k \kappa_k j_k || H^L || n_{k'} \kappa_{k'} j_{k'} \rangle$  est l'élément de matrice **réduit** de couplage atome-noyau exprimé dans la base des orbitales. L'expression (G.3) ne peut donc pas être utilisée directement dans l'équation (G.9) car, dans cette expression, l'élément de matrice de couplage atome-noyau n'est pas réduit. Nous devons donc appliquer le théorème de Wigner-Eckart dans la partie atomique de l'équation (G.2). En remplaçant les indices  $\alpha$  et  $\beta$  par  $k'$  et  $k$  respectivement dans cette équation, il vient :

$$\langle \psi_k \Psi_2 | H_M^L | \psi_{k'} \Psi_1 \rangle = \langle n_k \kappa_k j_k m_k | H_M^L | n_{k'} \kappa_{k'} j_{k'} m_{k'} \rangle \langle I_2 M_2 | H_M^L | I_1 M_1 \rangle \quad (\text{G.10})$$

En appliquant le théorème de Wigner-Eckart sur le terme  $\langle n_k \kappa_k j_k m_k | H_M^L | n_{k'} \kappa_{k'} j_{k'} m_{k'} \rangle$  de l'équation (G.10), nous avons :

$$\begin{aligned} \langle n_k \kappa_k j_k m_k | H_M^L | n_{k'} \kappa_{k'} j_{k'} m_{k'} \rangle &= (-1)^{j_k - m_k} \begin{pmatrix} j_k & L & j_{k'} \\ -m_k & M & m_{k'} \end{pmatrix} \\ &\times \langle n_k \kappa_k j_k || H^L || n_{k'} \kappa_{k'} j_{k'} \rangle \end{aligned} \quad (\text{G.11})$$

et ainsi :

$$\begin{aligned} \langle n_k \kappa_k j_k || H^L || n_{k'} \kappa_{k'} j_{k'} \rangle \langle I_2 M_2 | H_M^L | I_1 M_1 \rangle &= \frac{(-1)^{-j_k + m_k}}{\begin{pmatrix} j_k & L & j_{k'} \\ -m_k & M & m_{k'} \end{pmatrix}} \\ &\times \langle \psi_k \Psi_2 | H_M^L | \psi_{k'} \Psi_1 \rangle \end{aligned} \quad (\text{G.12})$$

En introduisant dans (G.12) l'expression (G.3) en remplaçant les indices  $\alpha$  et  $\beta$  par  $k'$  et  $k$  respectivement, nous obtenons l'expression de l'élément de matrice de couplage atome-noyau avec un élément de matrice atomique réduit :

$$\begin{aligned} \langle n_k \kappa_k j_k || H^L || n_{k'} \kappa_{k'} j_{k'} \rangle \langle I_2 M_2 | H_M^L | I_1 M_1 \rangle &= \sum_{LM} i (-1)^{M + I_2 - M_2 + 2m_k + 3/2 - j_k} \sqrt{4\pi} \\ &\times e(k_{12})^{L+1} \frac{\sqrt{(2L+1)(2j_{k'}+1)(2j_k+1)}}{L(2L+1)!!} \\ &\times \begin{pmatrix} I_2 & L & I_1 \\ -M_2 & -M & M_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_k & L & j_{k'} \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \\ &\times \langle I_2 || \mathcal{M}(\pi L) || I_1 \rangle M_{kk'}^e(\pi L) \end{aligned} \quad (\text{G.13})$$

En introduisant cette dernière expression dans l'équation (G.9), il vient :

$$\langle \Psi_{f2} | H_M^L | \Psi_{i1} \rangle = \sum_{LM} \sum_{jj'} \sum_{kk'} (-1)^{J_f - M_f + M + I_2 - M_2 + 2m_k + 3/2 - j_k} c_{ij'} c_{fj} a_{jj'kk'} \quad (\text{G.14})$$

$$\begin{aligned} & \times i\sqrt{4\pi} e(k_{12})^{L+1} \frac{\sqrt{(2L+1)(2j_{k'}+1)(2j_k+1)}}{L(2L+1)!!} \\ & \times \begin{pmatrix} J_f & L & J_i \\ -M_f & M & M_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_2 & L & I_1 \\ -M_2 & -M & M_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_k & L & j_{k'} \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \\ & \times \langle I_2 || \mathcal{M}(\pi L) || I_1 \rangle M_{kk'}^e(\pi L) \end{aligned} \quad (\text{G.15})$$

## G.2 Expression de $|W_{i1,f2}|^2$

A l'aide des expressions de l'élément de matrice de couplage atome noyau dans la base des orbitales et dans la base des états  $|JM\Pi\rangle$ , nous pouvons développer le terme  $|W_{i1,f2}|^2$  dans ces deux bases.

### G.2.1 Expression dans la base des orbitales

L'expression de  $|W_{\alpha 1, \beta 2}|^2$  dans la base des orbitales a déjà été publiée dans les références [106] et [1] à partir des principes de la QED et de la théorie formelle des réactions respectivement. Nous pouvons également formuler ce terme à l'aide des résultats de la théorie de la conversion interne. Dans la base des orbitales,  $|W_{\alpha 1, \beta 2}|^2$  s'exprime à l'aide des équations (G.1) et (G.3) :

$$\begin{aligned} |W_{\alpha 1, \beta 2}|^2 &= \frac{1}{(2I_1+1)(2j_\alpha+1)} \sum_{M_1 M_2} \sum_{m_\alpha m_\beta} \left| \langle \psi_\beta \Psi_2 | H_M^L | \psi_\alpha \Psi_1 \rangle \right|^2 \\ &= \frac{1}{(2I_1+1)(2j_\alpha+1)} \sum_{M_1 M_2} \sum_{m_\alpha m_\beta} \left| \sum_{LM} i(-1)^{M+1+I_2-M_2+m_\beta+1/2} \sqrt{4\pi} e(k_{12})^{L+1} \right. \\ & \times \frac{\sqrt{(2L+1)(2j_\alpha+1)(2j_\beta+1)}}{L(2L+1)!!} \begin{pmatrix} I_2 & L & I_1 \\ -M_2 & -M & M_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_\beta & L & j_\alpha \\ -m_\beta & M & m_\alpha \end{pmatrix} \\ & \left. \times \begin{pmatrix} j_\beta & L & j_\alpha \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \langle I_2 || \mathcal{M}(\pi L) || I_1 \rangle M_{\beta\alpha}^e(\pi L) \right|^2 \end{aligned} \quad (\text{G.16})$$

En développant l'expression contenue dans le module élevé au carré, il vient :

$$\begin{aligned} |W_{\alpha 1, \beta 2}|^2 &= \frac{4\pi e^2}{(2I_1+1)(2j_\alpha+1)} \sum_{M_1 M_2} \sum_{m_\alpha m_\beta} \sum_{L_a M_a} \sum_{L_b M_b} (-1)^{M_a + M_b + 2I_2 - 2M_2 + 2m_\beta + 1} \\ & \times (k_{12})^{L_a + L_b + 2} (2j_\alpha + 1)(2j_\beta + 1) \\ & \times \frac{\sqrt{(2L_a+1)}}{L_a(2L_a+1)!!} \begin{pmatrix} I_2 & L_a & I_1 \\ -M_2 & -M_a & M_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_\beta & L_a & j_\alpha \\ -m_\beta & M_a & m_\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_\beta & L_a & j_\alpha \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \\ & \times \langle I_2 || \mathcal{M}(\pi L_a) || I_1 \rangle M_{\beta\alpha}^e(\pi L_a) \\ & \times \frac{\sqrt{(2L_b+1)}}{L_b(2L_b+1)!!} \begin{pmatrix} I_2 & L_b & I_1 \\ -M_2 & -M_b & M_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_\beta & L_b & j_\alpha \\ -m_\beta & M_b & m_\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_\beta & L_b & j_\alpha \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \\ & \times \langle I_2 || \mathcal{M}(\pi L_b) || I_1 \rangle^* M_{\beta\alpha}^e(\pi L_b)^* \end{aligned} \quad (\text{G.17})$$

D'après la propriété des symboles  $3j$  suivante,

$$\sum_{m_\alpha m_\beta} \begin{pmatrix} j_\beta & L_a & j_\alpha \\ -m_\beta & M_a & m_\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_\beta & L_b & j_\alpha \\ -m_\beta & M_b & m_\alpha \end{pmatrix} = \frac{1}{2L_a+1} \delta_{L_a L_b} \delta_{M_a M_b}$$

il vient :

$$\begin{aligned}
|W_{\alpha 1, \beta 2}|^2 &= \frac{4\pi e^2}{(2I_1 + 1)} \sum_{M_1 M_2} \sum_{LM} (-1)^{2M+2(I_2-M_2)+2m_\beta+1} (k_{12})^{2L+2} (2j_\beta + 1) \\
&\times \frac{1}{[L(2L+1)!!]^2} \begin{pmatrix} I_2 & L & I_1 \\ -M_2 & -M & M_1 \end{pmatrix}^2 \begin{pmatrix} j_\beta & L & j_\alpha \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}^2 \\
&\times |\langle I_2 \| \mathcal{M}(\pi L) \| I_1 \rangle|^2 |M_{\beta\alpha}^e(\pi L)|^2
\end{aligned} \tag{G.18}$$

or  $M \in \mathbb{Z} \Rightarrow (-1)^{2M} = 1$  et  $(I_2 - M_2) \in \mathbb{Z} \Rightarrow (-1)^{2(I_2-M_2)} = 1$ . De plus,  $m_\beta \in \mathbb{Z} + \frac{1}{2}$  donc  $2m_\beta + 1 \in \mathbb{Z} \Rightarrow (-1)^{2m_\beta+1} = 1$ . En utilisant les propriétés des symboles  $3j$  :

$$\sum_{M_1 M_2} \begin{pmatrix} I_2 & L & I_1 \\ -M_2 & -M & M_1 \end{pmatrix}^2 = \frac{1}{2L+1}$$

On obtient :

$$|W_{\alpha 1, \beta 2}|^2 = 4\pi e^2 \sum_{LM} \frac{(k_{12})^{2L+2} (2j_\beta + 1)}{(2L+1) [L(2L+1)!!]^2} \begin{pmatrix} j_\beta & L & j_\alpha \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}^2 |M_{\beta\alpha}^e(\pi L)|^2 B_{I_1 \rightarrow I_2}(\pi L) \tag{G.19}$$

Où l'on a introduit, la probabilité de transition nucléaire réduite :

$$B_{I_1 \rightarrow I_2}(\pi L) = \frac{1}{2I_1 + 1} |\langle I_2 \| \mathcal{M}(\pi L) \| I_1 \rangle|^2$$

or  $M \in \llbracket -L, L \rrbracket$  et comme aucun des termes de la somme ne dépend de  $M$ , il suffit de multiplier un de ces termes par  $(2L+1)$  et il vient :

$$|W_{\alpha 1, \beta 2}|^2 = 4\pi e^2 \sum_L \frac{(k_{12})^{2L+2} (2j_\beta + 1)}{[L(2L+1)!!]^2} \begin{pmatrix} j_\beta & L & j_\alpha \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}^2 |M_{\beta\alpha}^e(\pi L)|^2 B_{I_1 \rightarrow I_2}(\pi L) \tag{G.20}$$

Afin d'obtenir une expression identique à celles publiées, nous utilisons les règles de symétrie des symboles  $3j$  :

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} j_\beta & L & j_\alpha \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} &= (-1)^{j_\alpha + L + j_\beta} \begin{pmatrix} j_\alpha & L & j_\beta \\ -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \\
&= (-1)^{2(j_\alpha + L + j_\beta)} \begin{pmatrix} j_\alpha & L & j_\beta \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{G.21}$$

or  $j_\alpha + L + j_\beta \in \mathbb{Z} \Rightarrow (-1)^{2(j_\alpha + L + j_\beta)} = 1$ . En remplaçant le symbole  $3j$  par le coefficient de Clebsch-Gordan associé, il vient :

$$\begin{pmatrix} j_\alpha & L & j_\beta \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j_\alpha - L - 1/2}}{\sqrt{2j_\beta + 1}} \left\langle j_\alpha L \frac{1}{2} 0 \left| j_\beta \frac{1}{2} \right\rangle$$

or, comme  $j_\alpha - 1/2 \in \mathbb{Z}$  et  $L \in \mathbb{N}$ , nous avons :

$$\begin{pmatrix} j_\alpha & L & j_\beta \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}^2 = \frac{1}{2j_\beta + 1} \left\langle j_\alpha L \frac{1}{2} 0 \left| j_\beta \frac{1}{2} \right\rangle^2 \tag{G.22}$$

Et enfin, pour une transition  $\pi L$  donnée, à partir de (G.21) et (G.22), l'équation (G.20) devient :

$$|W_{\alpha 1, \beta 2}|^2 = 4\pi e^2 \frac{(k_{12})^{2L+2}}{[L(2L+1)!!]^2} \left\langle j_\alpha L \frac{1}{2} 0 \left| j_\beta \frac{1}{2} \right\rangle^2 |M_{\beta\alpha}^e(\pi L)|^2 B_{I_1 \rightarrow I_2}(\pi L) \tag{G.23}$$

Nous obtenons bien l'expression de  $|W_{\alpha 1, \beta 2}|^2$  donnée dans les références [108, 24] et [1], à l'exception du terme en  $\delta_{i_1, f_2}$  présent dans cette dernière référence.

## G.2.2 Expression dans la base des états $|JM\Pi\rangle$

Le calcul de  $|W_{i1,f2}|^2$  dans la base des états  $|JM\Pi\rangle$  a fait l'objet d'une partie du stage d'E. Wagner au CEA/DAM/DIF[128]. Le développement est rappelé ici avec quelques corrections. En effet, E. Wagner a utilisé des expressions publiées dans la référence [1] qui présentent certaines erreurs. Aussi, l'expression de  $|W_{i1,f2}|^2$  dans la base des états  $|JM\Pi\rangle$  peut être déterminée à l'aide des résultats obtenus dans le cadre de la conversion interne [9].

En introduisant (G.15) dans l'équation (G.1), et en développant l'expression contenue dans le module élevé au carré, il vient :

$$\begin{aligned}
|W_{i1,f2}|^2 &= \frac{4\pi e^2}{(2I_1 + 1)(2J_i + 1)} \sum_{M_1 M_2} \sum_{M_i M_f} \sum_{L_a M_a} \sum_{j_a j'_a} \sum_{k_a k'_a} (-1)^{J_f - M_f + M_a + I_2 - M_2 + 2m_{k_a} + 3/2 - j_{k_a}} \\
&\times (k_{12})^{L_a + 1} c_{ij'_a} c_{fj_a} a_{j_a j'_a k_a k'_a} \frac{\sqrt{(2L_a + 1)(2j_{k'_a} + 1)(2j_{k_a} + 1)}}{L_a (2L_a + 1)!!} \\
&\times \begin{pmatrix} J_f & L_a & J_i \\ -M_f & M_a & M_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_2 & L_a & I_1 \\ -M_2 & -M_a & M_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_{k_a} & L_a & j_{k'_a} \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \\
&\times \langle I_2 \| \mathcal{M}(\pi L_a) \| I_1 \rangle M_{k_a k'_a}^e(\pi L_a) \sum_{L_b M_b} \sum_{j_b j'_b} \sum_{k_b k'_b} (-1)^{J_f - M_f + M_b + I_2 - M_2 + 2m_{k_b} + 3/2 - j_{k_b}} \\
&\times (k_{12})^{L_b + 1} c_{ij'_b} c_{fj_b} a_{j_b j'_b k_b k'_b} \frac{\sqrt{(2L_b + 1)(2j_{k'_b} + 1)(2j_{k_b} + 1)}}{L_b (2L_b + 1)!!} \\
&\times \begin{pmatrix} J_f & L_b & J_i \\ -M_f & M_b & M_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_2 & L_b & I_1 \\ -M_2 & -M_b & M_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_{k_b} & L_b & j_{k'_b} \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \\
&\times \langle I_2 \| \mathcal{M}(\pi L_b) \| I_1 \rangle^* M_{k_b k'_b}^e(\pi L_b)^*
\end{aligned} \tag{G.24}$$

or,  $(J_f - M_f) \in \mathbb{Z} \Rightarrow (-1)^{2(J_f - M_f)} = 1$  et  $(I_2 - M_2) \in \mathbb{Z} \Rightarrow (-1)^{2(I_2 - M_2)} = 1$

D'après la relations d'orthogonalités des coefficients  $3j$ , nous avons :

$$\sum_{M_i M_f} \begin{pmatrix} J_f & L_b & J_i \\ -M_f & M_b & M_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_f & L_b & J_i \\ -M_f & M_b & M_i \end{pmatrix} = \frac{1}{2L_a + 1} \delta_{L_a L_b} \delta_{M_a M_b}$$

Ainsi les doubles sommes sur  $L_a$  et  $L_b$  ainsi que sur  $M_a$  et  $M_b$  se simplifient et  $(-1)^{2M} = 1$  car  $M \in \mathbb{Z}$  :

$$\begin{aligned}
|W_{i1,f2}|^2 &= \frac{4\pi e^2}{(2I_1 + 1)(2J_i + 1)} \sum_{M_1 M_2} \sum_{LM} \sum_{j_a j'_a} \sum_{k_a k'_a} \sum_{j_b j'_b} \sum_{k_b k'_b} (-1)^{2(m_{k_a} + m_{k_b}) + 3 - j_{k_a} - j_{k_b}} \\
&\times (k_{12})^{2L + 2} c_{ij'_a} c_{fj_a} a_{j_a j'_a k_a k'_a} c_{ij'_b} c_{fj_b} a_{j_b j'_b k_b k'_b} \frac{\sqrt{(2j_{k'_a} + 1)(2j_{k_a} + 1)}}{(L_a (2L_a + 1)!!)^2} \\
&\times \begin{pmatrix} I_2 & L & I_1 \\ -M_2 & -M & M_1 \end{pmatrix}^2 \begin{pmatrix} j_{k_a} & L & j_{k'_a} \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_{k_b} & L_b & j_{k'_b} \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \\
&\times M_{k_a k'_a}^e(\pi L) M_{k_b k'_b}^e(\pi L)^* |\langle I_2 \| \mathcal{M}(\pi L) \| I_1 \rangle|^2
\end{aligned} \tag{G.25}$$

De même :

$$\sum_{M_1 M_2} \begin{pmatrix} I_2 & L & I_1 \\ -M_2 & -M & M_1 \end{pmatrix}^2 = \frac{1}{2L + 1}$$

Ainsi :

$$\begin{aligned}
|W_{i1,f2}|^2 &= \frac{4\pi e^2}{(2I_1 + 1)(2J_i + 1)} \sum_L \sum_{j_a j'_a} \sum_{k_a k'_a} \sum_{j_b j'_b} \sum_{k_b k'_b} (-1)^{2(m_{k_a} + m_{k_b}) + 3 - j_{k_a} - j_{k_b}} \\
&\times (k_{12})^{2L+2} c_{ij'_a} c_{fj_a} a_{j_a j'_a k_a k'_a} c_{ij'_b} c_{fj_b} a_{j_b j'_b k_b k'_b} \frac{\sqrt{(2j_{k'_a} + 1)(2j_{k_a} + 1)(2j_{k'_b} + 1)(2j_{k_b} + 1)}}{(2L + 1) [L(2L + 1)!!]^2} \\
&\times \begin{pmatrix} j_{k_a} & L & j_{k'_a} \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_{k_b} & L_b & j_{k'_b} \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} M_{k_a k'_a}^e(\pi L) M_{k_b k'_b}^e(\pi L)^* |\langle I_2 \| \mathcal{M}(\pi L) \| I_1 \rangle|^2 \quad (\text{G.26})
\end{aligned}$$

$M \in \llbracket -L, L \rrbracket$  et comme aucun des termes de la somme ne dépend de  $M$ , il suffit de multiplier un de ces termes par  $(2L + 1)$  :

$$\begin{aligned}
|W_{i1,f2}|^2 &= \frac{4\pi e^2}{(2I_1 + 1)(2J_i + 1)} \sum_L \sum_{j_a j'_a} \sum_{k_a k'_a} \sum_{j_b j'_b} \sum_{k_b k'_b} (2L + 1) (-1)^{2(m_{k_a} + m_{k_b}) + 3 - j_{k_a} - j_{k_b}} \\
&\times (k_{12})^{2L+2} c_{ij'_a} c_{fj_a} a_{j_a j'_a k_a k'_a} c_{ij'_b} c_{fj_b} a_{j_b j'_b k_b k'_b} \frac{\sqrt{(2j_{k'_a} + 1)(2j_{k_a} + 1)(2j_{k'_b} + 1)(2j_{k_b} + 1)}}{(2L + 1) [L(2L + 1)!!]^2} \\
&\times \begin{pmatrix} j_{k_a} & L & j_{k'_a} \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_{k_b} & L_b & j_{k'_b} \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} M_{k_a k'_a}^e(\pi L) M_{k_b k'_b}^e(\pi L)^* |\langle I_2 \| \mathcal{M}(\pi L) \| I_1 \rangle|^2 \quad (\text{G.27})
\end{aligned}$$

D'après l'équation (G.4) et en remplaçant les symboles  $3j$  par les coefficients de Clebsch-Gordan,

$$\begin{pmatrix} j_{k_a} & L & j_{k'_a} \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j_{k_a} - L + 1/2}}{\sqrt{2j_{k'_a} + 1}} \left\langle j_{k_a} L \frac{1}{2} 0 \left| j_{k'_a} \frac{1}{2} \right. \right\rangle$$

il vient :

$$\begin{aligned}
|W_{i1,f2}|^2 &= \frac{4\pi e^2}{2J_i + 1} \sum_L \sum_{j_a j'_a} \sum_{k_a k'_a} \sum_{j_b j'_b} \sum_{k_b k'_b} (-1)^{2(m_{k_a} + m_{k_b}) + 4 - 2L} \\
&\times (k_{12})^{2L+2} c_{ij'_a} c_{fj_a} a_{j_a j'_a k_a k'_a} c_{ij'_b} c_{fj_b} a_{j_b j'_b k_b k'_b} \frac{\sqrt{(2j_{k_a} + 1)(2j_{k_b} + 1)}}{[L(2L + 1)!!]^2} \\
&\times \left\langle j_{k_a} L \frac{1}{2} 0 \left| j_{k'_a} \frac{1}{2} \right. \right\rangle \left\langle j_{k_b} L \frac{1}{2} 0 \left| j_{k'_b} \frac{1}{2} \right. \right\rangle M_{k_a k'_a}^e(\pi L) M_{k_b k'_b}^e(\pi L)^* B_{I_1 \rightarrow I_2}(\pi L) \quad (\text{G.28})
\end{aligned}$$

or,  $m_{k_a} \in \mathbb{Z} + \frac{1}{2}$  et  $m_{k_b} \in \mathbb{Z} + \frac{1}{2}$  donc  $(-1)^{2(m_{k_a} + m_{k_b})} = 1$ . De plus,  $L \in \mathbb{N} \Rightarrow (-1)^{2L} = 1$ , il vient :

$$|W_{i1,f2}|^2 = \frac{1}{2J_i + 1} \sum_L \sum_{j_a j'_a} \sum_{k_a k'_a} \sum_{j_b j'_b} \sum_{k_b k'_b} c_{ij'_a} c_{fj_a} a_{j_a j'_a k_a k'_a} c_{ij'_b} c_{fj_b} a_{j_b j'_b k_b k'_b} G_{k_a k'_a} G_{k_b k'_b}^* B_{I_1 \rightarrow I_2}(\pi L) \quad (\text{G.29})$$

Dans l'équation (G.29), nous avons posé :

$$G_{kk'} = \sqrt{4\pi(2j_k + 1)} e \frac{(k_{12})^{L+1}}{L(2L + 1)!!} \left\langle j_k L \frac{1}{2} 0 \left| j_{k'} \frac{1}{2} \right. \right\rangle M_{kk'}^e(\pi L)$$

Lors d'un calcul de taux d'excitation par effet NEET où un seul type de transition est considéré, la somme sur  $L$  ne comporte qu'un seul terme et l'expression (G.29) se réduit à l'expression (5.10) :

$$|W_{i1,f2}|^2 = \frac{1}{2J_i + 1} \sum_{j_a j'_a} \sum_{k_a k'_a} \sum_{j_b j'_b} \sum_{k_b k'_b} c_{ij'_a} c_{fj_a} a_{j_a j'_a k_a k'_a} c_{ij'_b} c_{fj_b} a_{j_b j'_b k_b k'_b} G_{k_a k'_a} G_{k_b k'_b}^* B_{I_1 \rightarrow I_2}(\pi L)$$



# Annexe H

## Symboles $3j$ et théorème de Wigner-Eckart

### H.1 Symbole $3j$ de Wigner

#### H.1.1 Relation avec les coefficients de Clebsch-Gordan

Les symboles  $3j$  de Wigner sont reliés aux coefficients de Clebsch-Gordan par la relation :

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & -M \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j_1-j_2+M}}{\sqrt{2J+1}} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle$$

Les coefficients de Clebsch-Gordan  $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle$  sont utilisés pour le passage de la base  $|JM\rangle$  à la base  $|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$  où  $\vec{J} = \vec{j}_1 + \vec{j}_2$  :

$$|JM\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \quad (\text{H.1})$$

#### H.1.2 Propriétés

Soit le symbole  $3j$  suivant :

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$$

#### Règles de sélection

$$\begin{aligned} m_1 + m_2 + m_3 &= 0 \\ j_1 + j_2 + j_3 &\in \mathbb{Z} \\ |j_1 - j_2| &\leq j_3 \leq j_1 + j_2 \\ \forall i \in \{1,2,3\}, & |m_i| \leq j_i \end{aligned}$$

Si une des conditions n'est pas respectée, le symbole  $3j$  est nul.

#### Règles de symétrie

1. le symbole  $3j$  est invariant par permutation circulaire des trois colonnes
2. il est multiplié par  $(-1)^{j_1+j_2+j_3}$  si l'on permute deux colonnes
3. il est multiplié par  $(-1)^{j_1+j_2+j_3}$  si l'on change les signes de  $m_1, m_2$  et  $m_3$

## Relations d'orthogonalité

$$\sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j'_3 \\ m_1 & m_2 & m'_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{2j_3+1} \delta_{j_3 j'_3} \delta_{m_3 m'_3}$$

$$\sum_{j_3=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{m_3=-j_3}^{j_3} (2j_3+1) \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m'_1 & m'_2 & m_3 \end{pmatrix} = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2}$$

## H.2 Théorème de Wigner-Eckart

Dans une représentation standard  $\{J^2, J_z\}$  dont les vecteurs de base sont désignés par  $|jm\rangle$ , l'élément de matrice  $\langle j_1 m_1 | T_q^k | j_2 m_2 \rangle$  de la  $q^{\text{ème}}$  composante de l'opérateur tensoriel  $T$  d'ordre  $k$  s'écrit :

$$\langle j_1 m_1 | T_q^k | j_2 m_2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2j_1+1}} \langle j_1 || T^k || j_2 \rangle \langle j_2 k m_2 q | j_1 m_1 \rangle$$

où

- $\langle j_1 || T^k || j_2 \rangle$  est une quantité qui dépend de l'opérateur tensoriel  $T$  de  $j_1$  et de  $j_2$  mais qui est indépendante de  $m_1, m_2$  et  $q$ .  $\langle j_1 || T^k || j_2 \rangle$  est appelé élément de matrice réduit.
- $\langle j_2 k m_2 q | j_1 m_1 \rangle$  est le coefficient de Clebsch-Gordan.

# Bibliographie

- [1] M. J. MARTIN : Nuclear data sheets for  $A = 152$ . *Nucl. Data Sheets*, 114:1497, 2013.
- [2] Y. KHAZOV, A. RADIONOV et F. G. KONDEV : Nuclear data sheets for  $A = 133$ . *Nucl. Data Sheets*, 112:855, 2011.
- [3] E. BROWNE et J.K. TULI : Nuclear data sheets for  $A = 60$ . *Nuclear Data Sheets*, 114(12):1849 – 2022, 2013.
- [4] P. MOREL, V. MÉOT, G. GOSSELIN, D. GOGNY et W. YOUNES : Evaluation of nuclear excitation by electronic transition in  $^{235}\text{U}$  plasma at local thermodynamic equilibrium. *Phys. Rev. A*, 69(6):063414, 2004.
- [5] M. R. HARSTON et J. F. CHEMIN : Mechanisms of nuclear excitation in plasmas. *Phys. Rev. C*, 59(5):2462 – 2473, 1999.
- [6] F. ATTALLAH, M. AICHE, J. F. CHEMIN, J. N. SCHEURER, W. E. MEYERHOF, J. P. GRANDIN, P. AGUER, G. BOGAERT, J. KIENER, A. LEFEBVRE, J. P. THIBAUD et C. GRUNBERG : Charge state blocking of K-shell internal conversion in  $^{125}\text{Te}$ . *Phys. Rev. Lett.*, 75(9):1715 – 1718, 1995.
- [7] G. GOSSELIN, V. MÉOT et P. MOREL : Modified nuclear level lifetime in hot dense plasmas. *Phys. Rev. C*, 76(4):044611, octobre 2007.
- [8] M ARNOULD : Some comments about the  $^{76}\text{Lu}$ - $^{176}\text{Hf}$  pair. *A&A*, 22:311, 1973.
- [9] E. Margaret BURBIDGE, G. R. BURBIDGE, William A. FOWLER et F. HOYLE : Synthesis of the elements in stars. *Rev. Mod. Phys.*, 29(4):547 – 650, 1957.
- [10] N. KLAY, F. KÄPPELER, H. BEER et G. SCHATZ : Nuclear structure of  $^{176}\text{Lu}$  and its astrophysical consequences. ii.  $^{176}\text{Lu}$ , a thermometer for stellar helium burning. *Phys. Rev. C*, 44(6):2839 – 2849, 1991.
- [11] Alain COC, Marie-Geneviève PORQUET et Frédéric NOWACKI : Lifetimes of  $^{26}\text{Al}$  and  $^{34}\text{Cl}$  in an astrophysical plasma. *Phys. Rev. C*, 61(1):015801, 1999.
- [12] W.D. HAMILTON : *The electromagnetic interaction in nuclear spectroscopy*. North-Holland, 1975.
- [13] E. V. TKALYA, E. V. AKHRAMEEV, R. V. ARUTYUNAYN, L. A. BOL'SHOV et P. S. KONDRATENKO : Cross sections of electron excitation of atomic nuclei in plasma. *Phys. Rev. C*, 85(4):044612, 2012.
- [14] G. GOSSELIN, N. PILLET, V. MÉOT, P. MOREL et A. Ya. DZYUBLIK : Nuclear transition induced by low-energy unscreened electron inelastic scattering. *Phys. Rev. C*, 79(1):014604, 2009.
- [15] V.I. GOLDANSKII et V.A. NAMIOT : On the excitation of isomeric nuclear levels by laser radiation through inverse internal electron conversion. *Phys. Lett. B*, 62(4):393 – 394, 1976.
- [16] G. GOSSELIN et P. MOREL : Enhanced nuclear level decay in hot dense plasmas. *Phys. Rev. C*, 70(6):064603, 2004.
- [17] M. MORITA : Nuclear excitation by electron transition and its application to Uranium 235 separation. *Prog. of Theor. Phys.*, 49(5):1574 – 1586, 1973.

- [18] S. KISHIMOTO, Y. YODA, M. SETO, Y. KOBAYASHI, S. KITAO, R. HARUKI, T. KAWAUCHI, K. FUKUTANI et T. OKANO : Observation of nuclear excitation by electron transition in  $^{197}\text{Au}$  with synchrotron X-rays and an avalanche photodiode. *Phys. Rev. Lett.*, 85(9):1831 – 1834, 2000.
- [19] H. FUJIOKA, K. URA, A. SHINOHARA, T. SAITO et K. OTOZAI : Observation of nuclear excitation by electron transition (NEET) in  $^{197}\text{Au}$ . *Z. Phys. A*, 315(1):121 – 122, 1984.
- [20] K. OTOZAI, R. ARAKAWA et T. SAITO : Nuclear excitation by electron transition in  $^{189}\text{Os}$ . *Nucl. Phys. A*, 297(1):97 – 104, 1978.
- [21] A. SHINOHARA, T. SAITO, M. SHOJI, A. YOKOYAMA, H. BABA, M. ANDO et K. TANIGUCHI : Nuclear excitation in  $^{189}\text{Os}$  with synchrotron radiation. *Nucl. Phys. A*, 472(1):151 – 160, 1987.
- [22] T. SAITO, A. SHINOHARA, T. MIURA et K. OTOZAI : Nuclear excitation by electron transition in  $^{189}\text{Os}$  following K-shell ionization by bremsstrahlung. *Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry*, 43(9):1963 – 1966, 1981.
- [23] L. LAKOSI, N.C. TAM et I. PAVLICSEK : Photoexcitation of  $^{189}\text{Os}^m$  and  $^{193}\text{Ir}^m$  . i. excitation of  $^{189}\text{Os}^m$  by low-energy x rays. *Phys. Rev. C*, 52(3):1510 – 1515, 1995.
- [24] I. AHMAD, R. W. DUNFORD, H. ESBENSEN, D. S. GEMMELL, E. P. KANTER, U. RÜTT et S. H. SOUTHWORTH : Nuclear excitation by electronic transition in  $^{189}\text{Os}$ . *Phys. Rev. C*, 61(5):051304, 2000.
- [25] S. KISHIMOTO, Y. YODA, Y. KOBAYASHI, S. KITAO, R. HARUKI et M. SETO : Evidence for nuclear excitation by electron transition on  $^{193}\text{Ir}$  and its probability. *Nucl. Phys. A*, 748:3 – 11, 2005.
- [26] T. SAITO, A. SHINOHARA et K. OTOZAI : Nuclear excitation by electron transition (NEET) in  $^{237}\text{Np}$  following K-shell photoionization. *Phys. Lett. B*, 92(3-4):293 – 296, 1980.
- [27] M.R. HARSTON : Analysis of probabilities for nuclear excitation by near-resonant electronic transitions. *Nucl. Phys. A*, 690(4):447 – 455, 2001.
- [28] T. CARREYRE, M.R. HARSTON, M. AICHE, F. BOURGINE, J.F. CHEMIN, G. CLAVERIE, J.P. GOUDOUR, J.N. SCHEURER, F. ATTALLAH, G. BOGAERT, J. KIENER, A. LEFEBVRE, J. DURELL, J.P. GRANDIN, W.E. MEYERHOF et W. PHILLIPS : First direct proof of internal conversion between bound states. *Phys. Rev. C*, 62(2):243111 – 243118, 2000.
- [29] E. V TKALYA : Mechanisms for the excitation of atomic nuclei in hot dense plasma. *Laser Phys.*, 14:360 – 377, 2004.
- [30] I.M. BAND et M.B. TRZHASKOVSKAYA : Internal conversion coefficients for low-energy nuclear transitions. *At. Data Nucl. Data Tables*, 55(1):43 – 61, 1993.
- [31] J. A. BOUNDS et P. DYER : Search for nuclear excitation by laser-driven electron motion. *Phys. Rev. C*, 46(3):852 – 859, 1992.
- [32] Yasukazu IZAWA et Chiyoe YAMANAKA : Production of  $^{235m}\text{U}$  by nuclear excitation by electron transition in a laser produced uranium plasma. *Phys. Lett. B*, 88:59 – 61, 1979.
- [33] R.V. ARUTYUNYAN, L.A. BOL'SHOV, V.D. VIKHAREV, S. A. DORSHAKOV, V. A. KORNILO, A. A. KRIVOLAPOV, V. P. SMIRNOV et E. V. TKALYA : Cross-section for excitation of the isomer  $^{235m}\text{U}$  in the plasma produced by an electron-beam. *Soviet Journal of Nuclear Physics-Ussr*, 53(1):23 – 26, 1991.
- [34] G. CLAVERIE, M. M. ALÉONARD, J. F. CHEMIN, F. GOBET, F. HANNACHI, M. R. HARSTON, G. MALKA, J. N. SCHEURER, P. MOREL et V. MÉOT : Search for nuclear excitation by electronic transition in  $^{235}\text{U}$ . *Phys. Rev. C*, 70(4):044303, 2004.
- [35] A.V. ANDREEV, R.V. VOLKOV, V.M. GORDIENKO, A.M. DYKHNE, M.P. KALASHNIKOV, P.M. MIKHEEV, P.V. NIKLES, A.B. SAVEPEV, E.V. TKALYA, R.A. CHALYKH et O.V. CHUTKO : Excitation and decay of low-lying nuclear states in a dense plasma produced by a subpicosecond laser pulse. *J. Exp. Theor. Phys.*, 91(6):1163 – 1175, 2000.

- [36] F. GOBET, F. HANNACHI, M.M. ALÉONARD, M. GERBAUX, G. MALKA, J.N. SCHEURER, M. TARISIEN, G. CLAVERIE, D. DESCAMPS, F. DORCHIES, R. FEDOSEJEVS, C. FOURMENT, S. PETIT, V. MÉOT et P. MOREL : Particle characterization for the evaluation of the  $^{181m}\text{Ta}$  excitation yield in millijoule laser induced plasmas. *J. Phys. B : At., Mol. Opt. Phys.*, 41(14), 2008.
- [37] M.M. ALÉONARD, F. GOBET, G. CLAVERIE, M. GERBAUX, F. HANNACHI, G. MALKA, J.N. SCHEURER, M. TARISIEN, F. DORCHIES, D. DESCAMPS, C. FOURMENT, S. PETIT, R. FEDOSEJEVS, V. MÉOT et P. MOREL : Energetic electrons produced in the interaction of a kilohertz femtosecond laser with tantalum targets. 54(16-17):2585 – 2593, 2007.
- [38] F. GOBET, C. PLAISIR, F. HANNACHI, M. TARISIEN, T. BONNET, M. VERSTEEGEN, M.M. ALÉONARD, G. GOSSELIN, V. MÉOT et P. MOREL : Nuclear physics studies using high energy lasers. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res., Sect. A*, 653(1):80 – 83, 2011.
- [39] M. COMET : *Excitations du  $^{201}\text{Hg}$  dans les plasmas produits par laser*. Thèse de doctorat, Université de Bordeaux, 2014.
- [40] F. KONDEV : Nuclear data sheets for  $A = 84$ . *Nucl. Data Sheets*, 110(11):2815 – 2944, 2009.
- [41] J. DÖRING, G. WINTER, L. FUNKE, L. KÄUBIER et W. WAGNER : New isomers and states of  $(\pi g_{9/2} \otimes \nu g_{9/2})$  parentage in  $^{84}\text{Rb}$ . *Z. Phys. A*, 338(4):457 – 458, 1991.
- [42] B. DIU, D. LEDERER et B. ROULET : *Physique statistique*. 1996.
- [43] Hans-Joachim KUNZE : *Introduction to Plasma Spectroscopy*. 2009.
- [44] David SALZMANN : *Atomic Physics in Hot Plasmas*. Oxford University Press, 1998.
- [45] C. De MICHELIS et M. MATTIOLI : Soft-X-ray spectroscopic diagnostics of laboratory plasmas. *Nuclear Fusion*, 21(6):677, 1981.
- [46] Olivier PEYRUSSE : *La fusion thermonucléaire inertielle par laser*. Eyrolles, 1993.
- [47] M. BUSQUET : Mixed model : Non-local-thermodynamic equilibrium, non-coronal-equilibrium simple ionization model for laser-created plasmas. *Phys. Rev. A*, 25(4):2302 – 2323, 1982.
- [48] Michel BARANGER : General impact theory of pressure broadening. *Phys. Rev.*, 112:855 – 865, 1958.
- [49] A. V. DEMURA : Physical models of plasma microfield. *International Journal of Spectroscopy*, 2010, 2010.
- [50] J.-C. PAIN : Communication privée. 2014.
- [51] J. I. LANGFORD : A rapid method for analysing the breadths of diffraction and spectral lines using the Voigt function. *J. Appl. Crystallogr.*, 11(1):10 – 14, 1978.
- [52] Balazs F. ROZSNYAI : Relativistic Hartree-Fock-Slater calculations for arbitrary temperature and matter density. *Phys. Rev. A*, 5(3):1137 – 1149, 1972.
- [53] Balazs F. ROZSNYAI : Photoabsorption in hot plasmas based on the ion-sphere and ion-correlation models. *Phys. Rev. A*, 43(6):3035 – 3042, 1991.
- [54] J. BRUNEAU : MCDF calculation of argon Auger process. *J. Phys. B : At., Mol. Opt. Phys.*, 16(22):4135 – 4151, 1983.
- [55] J MITROY et I MORRISON : A relativistic structure model for heavy atoms. *J. Phys. B : At., Mol. Opt. Phys.*, 17(22):4449, 1984.
- [56] J. P. DESCLAUX : The multiconfiguration Dirac-Fock method. *AIP Conference Proceedings*, 189(1):265 – 271, 1989.
- [57] J. P. DESCLAUX : A multiconfiguration relativistic Dirac-Fock program. *Comput. Phys. Commun.*, 9(1):31 – 45, 1975.
- [58] I. P. GRANT : Relativistic calculation of atomic structures. *Advances in Physics*, 19(82):747 – 811, 1970.

- [59] K.G. DYALL, I.P. GRANT, C.T. JOHNSON, F.A. PARPIA et E.P. PLUMMER : GRASP : A general-purpose relativistic atomic structure program. *Comput. Phys. Commun.*, 55(3):425 – 456, 1989.
- [60] J P DESCLAUX, D F MAYERS et F O'BRIEN : Relativistic atomic wave functions. *J. Phys. B : At., Mol. Opt. Phys.*, 4(5):631, 1971.
- [61] Quentin PORCHEROT, Jean-Christophe PAIN, Franck GILLERON et Thomas BLENSKI : A consistent approach for mixed detailed and statistical calculation of opacities in hot plasmas. *High Energy Density Physics*, 7(4):234 – 239, 2011.
- [62] C. BAUCHE-ARNOULT, J. BAUCHE et M. KLAPISCH : Variance of the distributions of energy levels and of the transition arrays in atomic spectra. *Phys. Rev. A*, 20(6):2424 – 2439, 1979.
- [63] C. BAUCHE-ARNOULT, J. BAUCHE et M. KLAPISCH : Variance of the distributions of energy levels and of the transition arrays in atomic spectra. iii. Case of spin-orbit-split arrays. *Phys. Rev. A*, 31(4):2248 – 2259, 1985.
- [64] T. BLENSKI, A. GRIMALDI et F. PERROT : A superconfiguration code based on the local density approximation. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, 65:91 – 100, 2000.
- [65] R. D. COWAN : *The Theory of Atomic Structure and Spectra*. The Regents of the University of California, 1981.
- [66] Stephanie HANSEN, G.S.J. ARMSTRONG, S. BASTIANI-CECCOTTI, C. BOWEN, H.-K. CHUNG, J.P. COLGAN, F. de DORTAN, C.J. FONTES, F. GILLERON, J.-R. MARQUÈS, R. PIRON, O. PEYRUSSE, M. POIRIER, Yu. RALCHENKO, A. SASAKI, E. STAMBULCHIK et F. THAIS : Testing the reliability of non-LTE spectroscopic models for complex ions. *High Energy Density Physics*, 9(3):523 – 527, 2013.
- [67] O PEYRUSSE : A superconfiguration model for broadband spectroscopy of non-LTE plasmas. *J. Phys. B : At., Mol. Opt. Phys.*, 33(20):4303, 2000.
- [68] O. PEYRUSSE : On the superconfiguration approach to model NLTE plasma emission. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, 71:571 – 579, 2001.
- [69] O. PEYRUSSE : X-ray spectroscopy studies using the TRANSPEC code. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, 51:281 – 289, 1994.
- [70] O. PEYRUSSE : A model for the simulation of nonequilibrium line transfer in laboratory plasmas. *Phys. Fluids B*, 4(7):2007 – 2017, 1992.
- [71] Steven ELLIOTT, Peter BEIERSDORFER et Joseph NILSEN : Measurement of line overlap for resonant photopumping of transitions in neonlike ions by nickel-like ions. *Phys. Rev. A*, 47:1403 – 1406, 1993.
- [72] R. J. HUTCHEON, L. COOKE, M. H. KEY, C. L. S. LEWIS et G. E. BROMAGE : Neon-like and fluorine-like X-ray emission spectra for elements from Cu to Sr. *Phys. Scr.*, 21(1):89, 1980.
- [73] H. GORDON, M. G. HOBBY, N. J. PEACOCK et R. D. COWAN : Classification of X-ray spectra of 2-3 transitions in the Ne-like and Na-like isoelectronic sequences of the elements from krypton to molybdenum. *J. Phys. B : At., Mol. Opt. Phys.*, 12(6):881, 1979.
- [74] A. ZIGLER, U. FELDMAN et G. A. DOSCHEK : Identification of lines of ions belonging to the F I isoelectronic sequence for rubidium, strontium, and yttrium. *J. Opt. Soc. Am. B*, 3(9):1221, 1986.
- [75] V.A. ARKADIEV, A.A. BJEUMIKHOV, M. HASCHKE, N. LANGHOFF, H. LEGALL, H. STIEL et R. WEDELL : X-ray analysis with a highly oriented pyrolytic graphite-based von Hamos spectrometer. *Spectrochim. Acta Part B*, 62:577 – 585, 2007.
- [76] T. BONNET : *Caractérisation et optimisation de sources d'électrons et de photons produites par laser dans le domaine du keV et du MeV*. Thèse de doctorat, Université de Bordeaux, 2013.

- [77] T. BONNET, M. COMET, D. DENIS-PETIT, F. GOBET, F. HANNACHI, M. TARISIEN, M. VERSTEEGEN et M. M. ALÉONARD : Response functions of Fuji imaging plates to monoenergetic protons in the energy range 0.6-3.2 MeV. *Rev. Sci. Instrum.*, 84(1):013508, 2013.
- [78] S. JACQUEMOT et A. DECOSTER : Z scaling of collisional Ne-like X-ray lasers using exploding foils : Refraction effects. *Laser Part. Beams*, 9:517 – 526, 1991.
- [79] F. GILLERON et J.-C. PAIN : Communication privée. 2014.
- [80] D. DENIS-PETIT, M. COMET, T. BONNET, F. HANNACHI, F. GOBET, M. TARISIEN, M. VERSTEEGEN, G. GOSSELIN, V. MÉOT, P. MOREL, J.-C. PAIN, F. GILLERON, A. FRANK, V. BAGNOUD, A. BLAZEVIC, F. DORCHIES, O. PEYRUSSE, W. CAYZAC et M. ROTH : Identification of x-ray spectra in the Na-like to O-like rubidium ions in the range of 3.8-7.3 Å. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, 148:70 – 89, 2014.
- [81] J. E. SANSONETTI : Wavelengths, Transition Probabilities, and Energy Levels for the Spectra of Rubidium (RbI through RbXXXVII). *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 35(1):301 – 421, 2006.
- [82] S. BASTIANI-CECCOTTI, N. KONTOGIANNOPOULOS, J.-R. MARQUÈS, S. TZORTZAKIS, L. LECHERBOURG, F. THAIS, I. MATSUSHIMA, O. PEYRUSSE et C. CHENAIS-POPOVICS : Analysis of the X-ray and time-resolved XUV emission of laser produced Xe and Kr plasmas. *High Energy Density Physics*, 3:20 – 27, 2007.
- [83] V.A. BOIKO, A.Ya. FAENOV et S.A. PIKUZ : X-ray spectroscopy of multiply-charged ions from laser plasmas. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, 19(1):11 – 50, 1978.
- [84] E.P. IVANOVA et A.V. GULOV : Theoretical investigation of the neon isoelectronic sequence. *At. Data Nucl. Data Tables*, 49(1):1 – 64, 1991.
- [85] H. GORDON, M. G. HOBBY et N. J. PEACOCK : Classification of the X-ray spectra of transitions in the Ne, F and O I isoelectronic sequences of the elements from iron to bromine and in the Na I isoelectronic sequence of gallium to bromine. *J. Phys. B : At., Mol. Opt. Phys.*, 13(10):1985, 1980.
- [86] J. E. RICE, K. B. FOURNIER, J. A. GOETZ, E. S. MARMAR et J. L. TERRY : X-ray observations of 2 l - nl ' transitions and configuration-interaction effects from Kr, Mo, Nb and Zr in near neon-like charge states from tokamak plasmas. *J. Phys. B : At., Mol. Opt. Phys.*, 33(23):5435, 2000.
- [87] J. F. SEELY, T. W. PHILLIPS, R. S. WALLING, J. BAILEY, R. E. STEWART et J. H. SCOFFIELD : X-ray transitions in Br XXIV-XXVIII. *Phys. Rev. A*, 34:2942 – 2951, 1986.
- [88] J-F. WYART, M. FAJARDO, T. MIßALLA, J-C. GAUTHIER, C. CHENAIS-POPOVICS, D. KLOPFEL, I. USCHMANN et E. FÖRSTER : Observation and analysis of X-ray spectra of highly-ionized atoms produced by laser irradiation in the wavelength range 0.60 nm to 0.95 nm. *Phys. Scr.*, 1999(T83):35, 1999.
- [89] R. SCHWENGER, G. RAINOVSKI, H. SCHNARE, A. WAGNER, F. DÖNAU, A. JUNGCLAUS, M. HAUSMANN, O. IORDANOV, K. P. LIEB, D. R. NAPOLI, G. de ANGELIS, M. AXIOTIS, N. MARGINEAN, F. BRANDOLINI et C. ROSSI ALVAREZ : Magnetic rotation in  $^{82}\text{Rb}$  and  $^{84}\text{Rb}$ . *Phys. Rev. C*, 66(2):024310, 2002.
- [90] G. B. HAN, S. X. WEN, X. G. WU, X. A. LIU, G. S. LI, G. J. YUAN, Z. H. PENG, P. K. WENG, C. X. YANG, Y. J. MA et J. B. LU : High spin states and signature inversion in  $^{84}\text{Rb}$ . *Chin.Phys.Lett.*, 16:487, 1999.
- [91] A.S. CHAUCHAT, V. LE FLANCHEC, A. BINET, J.L. FLAMENT, P. BALLEYGUIER, J.P. BRASILE, S. MULLER et J.M. ORTEGA : Construction of a compton source for X-rays in the ELSA facility. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res., Sect. A*, 608(1, Supplement):S99 – S102, 2009.
- [92] C. PLAISIR, F. HANNACHI, F. GOBET, M. TARISIEN, M.M. ALÉONARD, V. MÉOT, G. GOSSELIN, P. MOREL et B. MORILLON : Measurement of the  $^{85}\text{Rb}(\gamma, n)^{84m}\text{Rb}$  cross-section in the energy range 10-19 MeV with bremsstrahlung photons. *Eur. Phys. J. A*, 48(5):1 – 5, 2012.

- [93] D. T. VO : Comparisons of the DSPEC and DSPEC Plus spectrometer systems. Rapport technique LA-13671-MS, Los Alamos National Laboratory, 1999.
- [94] D. C. RADFORD : *Notes on the use of the program gf3*, 2000.
- [95] I. ANTICHEVA, M. BALLINTIJN, B. BELLENOT, M. BISKUP, R. BRUN, N. BUNCIC, Ph. CANAL, D. CASADEI, O. COUET, V. FINE, L. FRANCO, G. GANIS, A. GHEATA, D. Gonzalez MALINE, M. GOTO, J. IWASZKIEWICZ, A. KRESHUK, D. Marcos SEGURA, R. MAUNDER, L. MONETA, A. NAUMANN, E. OFFERMANN, V. ONUCHIN, S. PANACEK, F. RADEMAKERS, P. RUSSO et M. TADEL : ROOT a c++ framework for petabyte data storage, statistical analysis and visualization. *Comput. Phys. Commun.*, 180(12):2499 – 2512, 2009.
- [96] G. GILMORE : *Practical Gamma-ray Spectrometry*. John Wiley & Sons, 2008.
- [97] O. PERRU : *Etude de fermetures de couches  $N=40$  et  $N=50$  dans les noyaux riches en neutrons*. Thèse de doctorat, Université Paris XI, 2004.
- [98] O.B. TARASOV et D. BAZIN : Development of the program LISE : application to fusion-evaporation. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res., Sect. B*, 204(0):174 – 178, 2003.
- [99] M. LEBOS : *Structure des noyaux de Germanium et de Gallium riches en neutrons au-delà de  $N=50$  à ALTO*. Thèse de doctorat, Université Paris XI, 2008.
- [100] M FERRATON : *Collisions profondément inélastiques entre ions lourds auprès du Tandem d'Orsay & Spectroscopie gamma des noyaux exotiques riches en neutrons de la couche fp avec le multidétecteur ORGAM*. Thèse de doctorat, Université Paris XI, 2011.
- [101] D. C. RADFORD : Background subtraction from in-beam HPGe coincidence data sets. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res., Sect. A*, 361:306 – 316, 1995.
- [102] D. C. RADFORD : ESCL8R and LEVIT8R : Software for interactive graphical analysis of HPGe coincidence data sets. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res., Sect. A*, 361:297 – 305, 1995.
- [103] N. SMIRNOVA : Communication privée. 2014.
- [104] M. HONMA, T. OTSUKA, T. MIZUSAKI et M. HJORTH-JENSEN : New effective interaction for  $f_5p_{g9}$ -shell nuclei. *Phys. Rev. C*, 80(6):064323, 2009.
- [105] T. KIBÉDI, T.W. BURROWS, M.B. TRZHASKOVSKAYA, P.M. DAVIDSON et C.W. NESTOR JR. : Evaluation of theoretical conversion coefficients using BrIcc. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res., Sect. A*, 589(2):202 – 229, 2008.
- [106] D. P. GRECHUKHIN et A. A. SOLDATOV : Institute of atomic energy report iae-2706. Rapport technique, 1976.
- [107] E. V. TKALYA : Nuclear excitation in atomic transitions (NEET process analysis). *Nucl. Phys. A*, 539(2):209 – 222, 1992.
- [108] M. L. GOLDBERGER et K. M. WATSON : *Collision Theory*. Wiley, 1964.
- [109] A. Ya. DZYUBLIK : General theory of nuclear excitation by electron transitions. *Phys. Rev. C*, 88(5):054616, 2013.
- [110] S. KISHIMOTO, Y. YODA, Y. KOBAYASHI, S. KITAO, R. HARUKI, R. MASUDA et M. SETO : Nuclear excitation by electron transition on  $^{197}\text{Au}$  by photoionization around the K-absorption edge. *Phys. Rev. C*, 74(3):031301, 2006.
- [111] A. CALISTI, F. KHELFAOUI, R. STAMM, B. TALIN et R. W. LEE : Model for the line shapes of complex ions in hot and dense plasmas. *Phys. Rev. A*, 42(9):5433 – 5440, 1990.
- [112] G. FAUSSURIER : *Traitement statistique des propriétés spectrales des plasmas à l'équilibre thermodynamique local dans le cadre du modèle hydrogénique écranté*. Thèse de doctorat, Ecole Polytechnique, 1996.
- [113] G. GOSSELIN : Communication privée. 2014.
- [114] GSI : Communication privée. 2014.

- [115] B. CROS, B.S. PARADKAR, X. DAVOINE, A. CHANCÉ, F.G. DESFORGES, S. DOBOSZ-DUFRENOY, N. DELERUE, J. JU, T.L. AUDET, G. MAYNARD, M. LOBET, L. GREMILLET, P. MORA, J. SCHWINDLING, O. DELFERRIÈRE, C. BRUNI, C. RIMBAULT, T. VINATIER, A. DI PIAZZA, M. GRECH, C. RICONDA, J.R. MARQUÁ"s, A. BECK, A. SPECKA, Ph. MARTIN, P. MONOT, D. NORMAND, F. MATHIEU, P. AUDEBERT et F. AMIRANOFF : Laser plasma acceleration of electrons with multi-PW laser beams in the frame of CILEX. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res., Sect. A*, 740(0):27 – 33, 2014.
- [116] N.V. ZAMFIR : Nuclear physics with 10 PW laser beams at extreme light infrastructure - nuclear physics (ELI-NP). 223(6):1221 – 1227, 2014.
- [117] P. MOREL, V. MÉOT, G. GOSSELIN, G. FAUSSURIER et C. BLANCARD : Calculations of nuclear excitation by electron capture (NEET) in nonlocal thermodynamic equilibrium plasmas. *Phys. Rev. C*, 81(3):034609, 2010.
- [118] J C GAUTHIER, J P GEINDRE, P MONIER, E LUC-KOENIG et J F WYART : Observation of electric quadrupole decays in the spectra of neon-like ions produced by laser irradiation. *J. Phys. B : At., Mol. Opt. Phys.*, 19(11):L385, 1986.
- [119] T. BONNET, M. COMET, D. DENIS-PETIT, F. GOBET, F. HANNACHI, M. TARISIEN, M. VERSTEEGEN et M. M. ALÉONARD : Response functions of imaging plates to photons, electrons and 4He particles. *Rev. Sci. Instrum.*, 84(10):103510, 2013.
- [120] Hiroko OHUCHI, Akira YAMADERA et Takashi NAKAMURA : Functional equation for the fading correction of imaging plates. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res., Sect. A*, 450:343 – 352, 2000.
- [121] H OHUCHI et A YAMADERA : Dependence of fading patterns of photo-stimulated luminescence from imaging plates on radiation, energy, and image reader. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res., Sect. A*, 490(3):573 – 582, 2002.
- [122] F. J. MARSHALL et J. A. OERTEL : A framed monochromatic x-ray microscope for ICF. *Rev. Sci. Instrum.*, 68(1):735 – 739, 1997.
- [123] H. L. KESTENBAUM : X-ray diffraction from graphite in the energy range 2 to 8 keV. *Appl. Spectrosc.*, 27(6):454 – 456, 1973.
- [124] J. V. GILFRICH, D. B. BROWN et P. G. BURKHALTER : Integral reflection coefficient of X-ray spectrometer crystals. *Appl. Spectrosc.*, 29(4):322 – 326, 1975.
- [125] B.L. HENKE, E.M. GULLIKSON et J.C. DAVIS : X-ray interactions : Photoabsorption, scattering, transmission, and reflection at  $E = 50\text{-}30,000$  eV,  $Z = 1\text{-}92$ . *At. Data Nucl. Data Tables*, 54(2):181 – 342, 1993.
- [126] S. AGOSTINELLI et OTHER : Geant4-a simulation toolkit. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res., Sect. A*, 506(3):250 – 303, 2003.
- [127] A. BOHR et B. R. MOTTELSON : *Nuclear Structure Volume 1 : Single-Particle Motion*. World Scientific, 1999.
- [128] E. WAGNER : Prise en compte de calculs multi-configurations dans les phénomènes d'excitation nucléaire. Mémoire de D.E.A., Centrale Paris, 2009.