



Christophe Morisset <chris.morisset@gmail.com>

## contact synthèse

4 messages

**Daniel Pequignot** <daniel.pequignot@obspm.fr>

15 août 2016 à 07:47

À : Christophe Morisset IA-UNAM <chris.morisset@gmail.com>

Cher Christophe,

J'espère que ton séjour en Pologne s'est bien passé, que tu as profité de vacances (comme d'hab) "bien méritées" et que le happening de Ferland s'est bien déroulé. Je profite de la fin du colloque de Mexico, pour me rappeler à ton bon souvenir et t'envoyer quelques réflexions sur la synthèse.

A part mes quelques notes/questions précédentes concernant init default, j'aimerais que nous convergions dès que possible vers une nouvelle numérotation/présentation des raies collisionnelles (interdites ou quelque fois permises). Je n'ai pas pu envoyer de liste\_phyat à Marcus car je dépends maintenant de ta tabulation à partir de PyNeb et tu étais occupé. Cette situation est d'ailleurs difficile à vivre pour moi. J'espère que tu pourras bientôt produire une version plus définitive et accessible. Comme tu le sais, je retourne à Santa Maria dans moins d'un mois.

Je repars donc de la tabulation en l'état actuel, bien entendu provisoire, que tu m'avais laissée le dernier jour à Meudon.

Concernant les groupes de raies issues d'un même niveau supérieur, je comprends ton souci d'homogénéisation. Je propose maintenant d'ABANDONNER TOTALEMENT ma présentation ancienne (influencée par les modèles de photoionisation) en terme de somme des intensités = 1.000, telle qu'elle apparaissait pour les raies 5 niveaux et que tu avais adoptée systématiquement dans ta dernière tabulation pyneb, p.ex. :

0803000004000	O_III	1.000	0.000	1.000e+00	1.000	0803000000000	1	1.00	5006.8+
0803000004001	O_III	4931.226	0.000	8.957e-05	1.000	0803000004000	1	1.00	4 1
0803000004002	O_III	4958.910	0.000	2.510e-01	1.000	0803000004000	1	1.00	4 2
0803000004003	O_III	5006.842	0.000	7.489e-01	1.000	0803000004000	1	1.00	4 3

et de revenir à une normalisation par la raie la plus intense du groupe, p.ex. :

0803000004000	O_III	1.000	0.000	1.000e+00	1.000	08030000000000	1	1.00	5006.8
0803000004001	O_III	4931.226	0.000	1.196e-04	1.000	0803000004000	1	1.00	4 1
0803000004002	O_III	4958.910	0.000	3.352e-01	1.000	0803000004000	1	1.00	4 2
0803000004003	O_III	5006.842	0.000	1.000e+00	1.000	0803000004000	1	1.00	4 3

qui est finalement plus facile à décrypter pour la plupart des utilisateurs et qui rejoindra la présentation que je favorisais déjà pour les atomes de plus de 5 niveaux, type Fell, Call, etc.

Un détail : il n'y a alors plus lieu d'attacher un "+" à la longueur d'onde rappelée en commentaire de la raie de référence. Cette remarque s'applique aussi à tous les atomes plus complexes.

Le cas de tous les atomes "complexes" serait donc réglé en même temps, y compris la numérotation des raies, mais il reste la présentation des 5 niveaux (qui devraient plutôt s'appeler 5+1 niveaux, s'il faut inclure un multiplet d'intercombinaison, presque toujours en UV). Je continue à trouver très gênant et non conforme à l'idée de la synthèse, de donner une intensité "phyat" toujours changeante à, p.ex., OIII 4363 par rapport à 5007 ou à OII 3726 par rapport à OII 3729, etc. On ne peut pas systématiquement laisser tous les "4363" en cosmetik. Je préconiserais donc que tous les atomes 5+1 niveaux collisionnels soient traités en plusieurs atomes indépendants comme jusqu'à présent, malgré que cela complique un peu la logique et casse un peu l'"uniformité" de la tabulation pySSN. C'est qu'un très grand nombre d'atomes 5 niveaux continuent à jouer un rôle à part dans les diagnostics, l'énergétique, etc.

Le plus simple a priori, serait de définir 5 "atomes" indépendants pour chaque atome 5+1. Je ne vois d'ailleurs pas d'autre solution viable pour des cas comme OIII ou NeIII (ions p2 et p4). Voir p3 ci-dessous. Mon phyat se cantonnait délibérément à l'optique et il n'y avait que 2 atomes nécessaires, mais il est temps de montrer au moins les raies collisionnelles importantes à toutes les longueurs d'onde potentiellement accessibles, même si une sélection continuera à s'imposer en ce qui concerne l'"infinité" des raies de recombinaison. Pour OIII collisionnel on aurait alors, sans aucun besoin de se référer aux conditions physiques :

90803200000000 O_III	1.000 0.000 1.000e+00 1.000 0000000000999	1 1.00 883322.3
0803200002001 O_III	883322.339 0.000 1.000e+00 1.000 0803200000000	1 1.00 2 1
90803300000000 O_III	1.000 0.000 1.000e+00 1.000 0000000000999	1 1.00 518003.8
0803300003002 O_III	518003.770 0.000 1.000e+00 1.000 0803300000000	1 1.00 3 2
90803400000000 O_III	1.000 0.000 1.000e+00 1.000 0000000000999	1 1.00 5006.8
0803400004001 O_III	4931.226 0.000 1.196e-04 1.000 0803400000000	1 1.00 4 1
0803400004002 O_III	4958.910 0.000 3.352e-01 1.000 0803400000000	1 1.00 4 2
0803400004003 O_III	5006.842 0.000 1.000e+00 1.000 0803400000000	1 1.00 4 3
90803500000000 O_III	1.000 0.000 1.000e+00 1.000 0000000000999	1 1.00 4363.2
0803500005002 O_III	2320.950 0.000 2.364e-01 1.000 0803500000000	1 1.00 5 2
0803500005004 O_III	4363.209 0.000 1.000e+00 1.000 0803500000000	1 1.00 5 4
90803600000000 O_III	1.000 0.000 1.000e+00 1.000 0000000000999	1 1.00 1666.1
0803600006002 O_III	1660.809 0.000 4.027e-01 1.000 0803600000000	1 1.00 6 2
0803600006003 O_III	1666.150 0.000 1.000e+00 1.000 0803600000000	1 1.00 6 3

et peut-être que les raies très faibles, telles OIII 2331 (5-3), se trouveront ré-intégrées (ce serait beaucoup mieux). Ce OIII serait immuable aussi longtemps que les données sur les énergies et les transitions radiatives ne changeraient pas. Aucun besoin de le re-générer à chaque construction d'un nouveau liste\_phyat. La cosmetik ne concernerait que les éventuels conflits entre ces données de base et l'observation. Idéal.

L'identification d'un "atome" se fait uniquement à partir des 6 premiers nombres, p.ex. 080360. Les niveaux supérieurs 2 à 6 apparaissent donc ici en colonne 5 pour que chaque "atome" soit identifié séparément de façon unique. En revanche le niveau inférieur de chaque transition ne doit pas se trouver parmi ces 6 premiers. Je l'ai laissé en dernière place. Dans un souci d'homogénéiser l'écriture, il ne m'a pas paru gênant de répéter le numéro du niveau supérieur en fin d'identificateur comme dans ta présentation actuelle (c'est ce que je fais ci-dessus et par la suite).

Il me reste un état d'âme concernant les niveaux 4 et 5 des ion p3 (tels OII, NeIV, SII), qui ont virtuellement la même énergie et que je trouvais intéressant de regrouper pour former le multiplet F2 traditionnel de Moore. Les rapports des raies y sont peu sensibles à T et les probabilités de transition sont grandes de telle sorte que, dans presque toutes les nébuleuses, les rapports doivent correspondre à la limite "basse N\_e", même pour un ion peu chargé comme OII. De plus l'écart des rapports entre basse et (très) haute N\_e est généralement faible. La présentation que j'aimais donnait les rapports des raies 4+5 dans la limite basse N\_e (taux de peuplement des niveaux virtuellement proportionnels aux poids statistiques, à multiplier par les énergies des transitions et leurs facteurs de branchement) et indiquait en commentaire ces mêmes rapports dans la limite haute N\_e (population des niveaux selon poids statistiques, à multiplier par les énergies des transitions et leurs Aij). Je trouve qu'ajouter une densité critique approximative, p.ex. du niveau 4, serait encore mieux pour orienter l'utilisateur -- à débattre :

90802000000000 O_II	1.000 0.000 1.000e+00 1.000 0000000000999	1 1.00 10000K 10**3cm-3
0802000002000 O_II	1.000 0.000 7.679e-01 1.000 0802000000000	1 1.00 3728.8+
0802000002001 O_II	3728.815 0.000 1.000e+00 1.000 0802000002000	1 1.00 2 1
0802000003000 O_II	1.000 0.000 1.000e+00 1.000 0802000000000	1 1.00 3726.0+
0802000003001 O_II	3726.032 0.000 1.000e+00 1.000 0802000003000	1 1.00 3 1
0802000004000 O_II	1.000 0.000 4.006e-02 1.000 0802000000000	1 1.00 2470.3+
0802000004001 O_II	2470.341 0.000 4.838e-01 1.000 0802000004000	1 1.00 4 1
0802000004002 O_II	7319.985 0.000 3.387e-01 1.000 0802000004000	1 1.00 4 2
0802000004003 O_II	7330.731 0.000 1.775e-01 1.000 0802000004000	1 1.00 4 3
0802000005000 O_II	1.000 0.000 1.479e-02 1.000 0802000000000	1 1.00 7329.7+
0802000005001 O_II	2470.219 0.000 2.962e-01 1.000 0802000005000	1 1.00 5 1
0802000005002 O_II	7318.918 0.000 2.650e-01 1.000 0802000005000	1 1.00 5 2
0802000005003 O_II	7329.661 0.000 4.388e-01 1.000 0802000005000	1 1.00 5 3

==> (numérotation 45 en colonnes 5 et 6 pour le regroupement 4-5)

```

90802200000000 O_II      1.000 0.000 1.000e+00  1.000 0000000000999  1  1.00 3728.8
0802200002001 O_II      3728.815 0.000 1.000e+00  1.000 0802200000000  1  1.00 2 1 Ne: low -> high
90802300000000 O_II      1.000 0.000 1.000e+00  1.000 0000000000999  1  1.00 3726.0 0.667 -> 2.900 (les
2 en f6.3) Chen07
0802300003001 O_II      3726.032 0.000 1.000e+00  1.000 0802300000000  1  1.00 3 1 log_Ne_crit = 3.1
(VOIR, en f4.1)
90802450000000 O_II      1.000 0.000 1.000e+00  1.000 0000000000999  1  1.00 2470.3 low Ne, log_Ne_crit
= 6.2 (VOIR, en f4.1)
0802450004001 O_II      2470.341 0.000 1.000e+00  1.000 0802450000000  1  1.00 4 1 high Ne:
0802450004002 O_II      7319.985 0.000 6.226e-01  1.000 0802450000000  1  1.00 4 2 idem
0802450004003 O_II      7330.731 0.000 3.370e-01  1.000 0802450000000  1  1.00 4 3 idem
0802450005001 O_II      2470.219 0.000 2.627e-01  1.000 0802450000000  1  1.00 5 1 2.052e-01
0802450005002 O_II      7318.918 0.000 2.097e-01  1.000 0802450000000  1  1.00 5 2 1.638e-01
0802450005003 O_II      7329.661 0.000 3.500e-01  1.000 0802450000000  1  1.00 5 3 2.734e-01

```

Tu vois aussi que pour le multiplet (F1) divisé en 2 "atomes" (3728, 3726), je trouve utile d'indiquer en commentaire l'intensité de 3726 par rapport à 3728 dans les limites basse et haute Ne, ainsi qu'une densité critique. Le traitement est particulier : les commentaires s'étagent sur plusieurs lignes, mais au moins sont-ils stables et intangibles tant que les données atomiques sont conservées. On s'est affranchi des conditions physiques et, comme pour OIII, le calcul ne serait à faire qu'une seule fois. Les limites basse et haute Ne nécessitent à peine un calcul 5 niveaux. Coder "en dur" dans la programmation ? Ajouter "à la main" et ne plus écraser le résultat (comme je le faisais jusqu'à présent) ? On en parle ?

Tous les log\_Ne\_crit sont ici donnés au pif. Donc CALCUL A VOIR. On doit pouvoir partir directement de la définition. Les formats f6.3 et f4.1 proposés en marge sont indicatifs. Si c'est vraiment trop compliqué, on peut conserver 3 atomes, avec le 3ème comportant deux sous-niveaux (4 et 5) de populations relatives dépendant de Ne. On peut aussi abandonner les guides low -> high, etc (dommage quand même).

REMARQUE : Les rapports d'intensités OII dans 4+5, déduits de ton 10kk 1e3/cc ne semblent pas coïncider exactement avec ceux de mon liste\_phyat pour OII (écarts > 10%). J'ai provisoirement gardé les miens parce que je les ai sous la main (en normalisant maintenant comme il se doit par 2470.3 au lieu de la somme des 4 raies 7320+30). VOIR ! Il faut surveiller les interversions de niveaux entre NI, OII et FIII. Est-ce que j'utilisais les Aij d'un Zeippen87 ? Y a-t-il vraiment mieux ? Chen07 ? Froese Fischer ? Les dernières forces de collisions sont de Kisielius, Storey et al 2009. Avec ton 10kk, on aurait à la place :

```

90802450000000 O_II      1.000 0.000 1.000e+00  1.000 0000000000999  1  1.00 2470.3 low Ne, log_Ne_crit
= 6.2 (VOIR, en f4.1)
0802450004001 O_II      2470.341 0.000 1.000e+00  1.000 0802450000000  1  1.00 4 1 high Ne:
0802450004002 O_II      7319.985 0.000 7.001e-01  1.000 0802450000000  1  1.00 4 2 idem
0802450004003 O_II      7330.731 0.000 3.669e-01  1.000 0802450000000  1  1.00 4 3 idem
0802450005001 O_II      2470.219 0.000 2.260e-01  1.000 0802450000000  1  1.00 5 1 ~1.800e-01 VOIR
0802450005002 O_II      7318.918 0.000 2.022e-01  1.000 0802450000000  1  1.00 5 2 ~1.600e-01 VOIR
0802450005003 O_II      7329.661 0.000 3.349e-01  1.000 0802450000000  1  1.00 5 3 ~2.600e-01 VOIR

```

Finalement, puisqu'on en est à parler des raies collisionnelles, il faudrait considérer la raie de structure fine des p1 (CII, OIV...) et p5 (NeII, MgIV...) comme un "atome" en soi, indépendamment des raies UV d'intercombinaison éventuelles (partant p.ex. de 4P) ou permises. Il ne serait pas raisonnable de représenter les raies UV d'intercombinaison en unité de la raie IR ! Je vois que c'est déjà le cas pour les p5 dans ta table (puisque'il n'y a pas d'intercombinaison ni de permise en deçà de 912A). Restent les p1. Concernant les p1, il pourrait être tentant de traiter les niveaux 3, 4 et 5 (4P) comme 4+5 de OII, mais ça ne marche pas très bien parce que la dépendance en T n'est pas si faible et surtout la dépendance en N\_e est très conséquente, non pas à cause des densités critiques des niveaux supérieurs (toutes transitions d'intercombinaison de très grands Aij), mais de celle du niveau inférieur (niv. 2) 2P1.5 (Ne\_crit ~ 3e3/cm3 pour O IV 26um VOIR) car les rapports des forces de collision sont très différents selon que l'excitation part de 2P0.5 ou de 2P1.5. Il faut donc plutôt garder une dépendance en T et N\_e explicite :

```

90804000000000 O_IV      1.000 0.000 1.000e+00  1.000 0000000000999  1  1.00 20000K 10**3cm-3

```

0804000002000 O_IV	1.000 0.000 1.000e+00 1.000 0804000000000	1 1.00 259063.6+
0804000002001 O_IV	259063.632 0.000 1.000e+00 1.000 0804000002000	1 1.00 2 1
0804000003000 O_IV	1.000 0.000 3.688e-02 1.000 0804000000000	1 1.00 1407.4+
0804000003001 O_IV	1399.780 0.000 4.959e-01 1.000 0804000003000	1 1.00 3 1
0804000003002 O_IV	1407.382 0.000 5.041e-01 1.000 0804000003000	1 1.00 3 2
0804000004000 O_IV	1.000 0.000 1.000e-01 1.000 0804000000000	1 1.00 1404.8+
0804000004001 O_IV	1397.232 0.000 1.338e-01 1.000 0804000004000	1 1.00 4 1
0804000004002 O_IV	1404.806 0.000 8.662e-01 1.000 0804000004000	1 1.00 4 2
0804000005000 O_IV	1.000 0.000 9.843e-02 1.000 0804000000000	1 1.00 1401.2+
0804000005002 O_IV	1401.157 0.000 1.000e+00 1.000 0804000005000	1 1.00 5 2

==> (numérotation 35 en colonne 5 et 6 pour le regroupement 3-5)

90804200000000 O_IV	1.000 0.000 1.000e+00 1.000 00000000000999	1 1.00 259063.6
0804200002001 O_IV	259063.632 0.000 1.000e+00 1.000 0804200000000	1 1.00 2 1
90804350000000 O_IV	1.000 0.000 1.000e+00 1.000 00000000000999	1 1.00 1401.2 20kK 1.0e3/cc
0804350003000 O_IV	1.000 0.000 1.889e-01 1.000 0804350000000	1 1.00 1407.4
0804350003001 O_IV	1399.780 0.000 9.837e-01 1.000 0804350003000	1 1.00 3 1
0804350003002 O_IV	1407.382 0.000 1.000e+00 1.000 0804350003000	1 1.00 3 2
0804350004000 O_IV	1.000 0.000 8.800e-01 1.000 0804350000000	1 1.00 1404.8
0804350004001 O_IV	1397.232 0.000 1.545e-01 1.000 0804350004000	1 1.00 4 1
0804350004002 O_IV	1404.806 0.000 1.000e+00 1.000 0804350004000	1 1.00 4 2
0804350005000 O_IV	1.000 0.000 1.000e+00 1.000 0804350000000	1 1.00 1401.2
0804350005002 O_IV	1401.157 0.000 1.000e+00 1.000 0804350005000	1 1.00 5 2

ou plus simple pour liste\_phyat, si tu veux bien :

90804200000000 O_IV	1.000 0.000 1.000e+00 1.000 00000000000999	1 1.00 259063.6
0804200002001 O_IV	259063.632 0.000 1.000e+00 1.000 0804200000000	1 1.00 2 1
90804350000000 O_IV	1.000 0.000 1.000e+00 1.000 00000000000999	1 1.00 1401.2 20kK 1.0e3/cc
0804350003001 O_IV	1399.780 0.000 1.858e-01 1.000 0804350000000	1 1.00 3 1
0804350003002 O_IV	1407.382 0.000 1.889e-01 1.000 0804350000000	1 1.00 3 2
0804350004001 O_IV	1397.232 0.000 1.360e-01 1.000 0804350000000	1 1.00 4 1
0804350004002 O_IV	1404.806 0.000 8.800e-01 1.000 0804350000000	1 1.00 4 2
0804350005002 O_IV	1401.157 0.000 1.000e+00 1.000 0804350000000	1 1.00 5 2

Ta liste\_phyat de PyNeb était naturellement un tout premier jet (déjà très convaincant !). Je risque quelques suggestions, qui pourraient te venir aussi bien qu'à moi :

Il faudra bien sur arranger un peu la logique pour supprimer les ions ne produisant pas de raies observables (tant qu'on ne s'intéresse pas aux X...).

Plutôt que l'ordre alphabétique, on pourrait évidemment au moins classer par numéro atomique croissant, puis par charge croissante.

Mais, je trouve beaucoup plus parlant le classement par séquences isoélectroniques successives pour les nombreux atomes simples (de Cl à XeVI, etc.). Est-ce difficile à mettre en œuvre ? Dis-moi ce que tu en penses. L'intérêt réside dans l'évolution lente et continue des longueurs d'onde et des rapports de raies dans un multiplet donné le long d'une séquence et d'une séquence à une autre similaire, fournissant des moyens de vérification, d'interpolation et de meilleur compréhension de la présence/absence de telle ou telle raie dans un spectre. Actuellement les 2 1ers atomes de ta liste\_phyat de PyNeb sont Al\_X et Al\_II. Ça ne me dis rien, mais savoir que Al\_X est comme C\_III et que Al\_II se trouve entre Mg\_I et Si\_III, donc aussi assimilable à C\_III, c'est lumineux. Je note aussi l'absence du Fluor entre O et Ne, de Ar\_X et \_XI, similaires à Ne\_II et \_III, de Mg\_I, etc. Voir ci-dessous.

Il faudrait essayer d'indiquer les conditions physiques en commentaire uniquement lorsqu'elles ont une raison d'être (comme dans les exemples ci-dessus).

Dans le numéro d'identification, les chiffres 2 à 6 apparaissent en 5e position pour les atomes 5+1 niveaux (cf

plus haut). Je pense toujours réserver les chiffres 0 et 1 pour les raies de recombinaison (ce sera parfois un peu juste, mais bon). Restent les chiffres 7 à 9 pour d'autres processus (échange de charge, fluorescence, fluorescence Bowen, etc.). La 6e position servait au départ à repérer les "multiplicités" de la recombinaison (0 puis 1, etc.) lorsqu'il n'y a pas encore dégénérescence des sous-niveaux de moment angulaire. Cette 6e position peut aussi compléter la 5e en cas d'embouteillage (p.ex. les 3 fluorescences Bowen de OIII). Je l'ai d'ailleurs utilisé ci-dessus pour "45" (ions p3, OII) et "35" (ions p1, OIV).

Pour les atomes complexes (FeII, etc.), on a pour l'instant le chiffre 0 en position 5, chiffre que je réserverais à la recombinaison. Mettre systématiquement à la place, p.ex., le chiffre 3 faciliterait les généralisations. On aurait à terme, p.ex., un FeII fluo (chiffre 7 ?). A part cela, le concept de structure stable le long d'une séquence isoélectronique peut s'étendre en partie au pic du fer, p.ex CrIV, MnV, FeVI, Ni\_VIII, Cu IX. A considérer ?

Je reviens au rangement par séquences isoélectroniques des atomes simples (Une Table de Mendeleïev à rentrer...). Chacune correspond à l'équation  $Z - I = K(s) + C(n)$ , où  $Z$  est le No atomique,  $I$  le No de l'ion (1 pour neutre, 2 pour ionisé une fois,...), et  $K(s)$  et  $C(n)$  sont deux constantes caractérisant la séquence. Il y a 8 structures "simples" possibles, dont seulement 7 sont à considérer car les gaz rares p6 n'ont pas de raie collisionnelle intéressante : s1-s2, p1-p5 correspondant à  $K(s) = 0$  à 6 resp. Chacune de ces structures peut se répéter jusqu'à 5 fois (5 séquences similaires), avec  $C(n) = 2, 10, 28, 46, 78$  pour les nombres quantiques principaux des électrons de valence  $n = 2$  à 6 resp. Certaines de ces 35 séquences (chacune repérée par un couple  $s, n$ ) ne seront pas à considérer. Il y a également lieu de limiter en  $Z$  (ou  $I$ ) selon les séquences ( $wl < 912\text{\AA}$  ; structure modifiée par inversion de niveaux ; élément trop peu abondant ?...).

Exemples, en considérant surtout l'aspect  $wl > 912\text{\AA}$  :

$K(s) = 0$ , s1, ion prototype C\_IV (permises résonnances 2S-2P UV). 1 atome. P-ê moins utile pour  $n > 3$  ?

$n = 2$  : Li\_I ?, (Be, B), C\_IV, N\_V, O\_VI (F\_VII... non)

$n = 3$  : Na\_I, -- S\_VI (Cl\_VII... non)

$n = 4$  : (Cu\_I Zn\_II str. non) Ga\_III, Ge\_IV, As\_V (Se\_VI... non)

$n = 5$  : Ag\_I, Cd\_II, In\_III, Sn\_IV, Sb\_V, Te\_VI (I\_VII... non)

$n = 6$  : (str. non)

$K(s) = 1$ , s2, ion prototype C\_III (intercomb 1S-3P souvent UV). 1 at. P-ê moins utile pour  $n > 3$  ?

$n = 2$  : C\_III, N\_IV, O\_V (F\_VI marginal, ... non)

$n = 3$  : Mg\_I, -- S\_V, Cl\_VI (Ar\_VII... non)

$n = 4$  : Ga\_II, Ge\_III, As\_IV, Se\_V (Br\_VI marg, ... non)

$n = 5$  : Cd\_I, In\_II, Sn\_III, Sb\_IV, Te\_V, I\_VI, (Xe\_VII marg, ... non)

$n = 6$  : (str. non)

$K(s) = 2$ , p1, ion prototype C\_II (str fine 2P IR, intercomb 2P-4P UV, +réson. 2P-2D pour C\_II ?). 2 at puis 1 at

$n = 2$  : C\_II, -- F\_V, Ne\_VI ; puis 1 at Na\_VII, Mg\_VIII, -- Ar\_XIV, K\_XV, Ca\_XVI (-- Fe\_XXII non)

$n = 3$  : Al\_I, -- P\_III, -- Ar\_VI ; puis 1 at K\_VII, Ca\_VIII, -- Fe\_XIV, Ni\_XVI

$n = 4$  : Ga\_I 1 at IR ; Ge\_II, As\_III, Se\_IV ; puis 1 at Br\_V, Kr\_VI, Rb\_VII, Sr\_VIII, (\*interp. : Y, Zr, Nb, Mo\_XI\_OK ?)

$n = 5$  : In\_I 1 at IR, ; Sn\_II, Sb\_III, Te\_IV, I\_V, Xe\_VI ; puis 1 at Cs\_VII, Ba\_VIII, (Ce\_IX -- non)

$n = 6$  : 1 at Pb\_II, Bi\_III

$K(s) = 3$ , p2, ion prototype O\_III (str fine 3P ; int 1D, 1S ; intercomb 3P-5S, +réson 3P-3P pour C\_I bof ?). 5 at puis 4 puis 2 at

$n = 2$  : C\_I, -- F\_IV, Ne\_V ; puis 4 at Na\_VI, -- Si\_IX -- Ca\_XV ; puis 2at str f Cr\_XIX, Mn\_XX, Fe\_XXI (Ni\_XXIII non)

$n = 3$  : Si\_I, P\_II, S\_III ; puis 4at (5S ?) Cl\_IV, -- Ca\_VII ; puis 4at Cr\_XI, Mn\_XII, Fe\_XIII, Ni\_XV (interpol : niv 1S = 111725cm<sup>-1</sup>)

$n = 4$  : 4 at (negl reson, interc UV) Ge\_I, As\_II, Se\_III, Br\_IV (interp niv 1S = 33700cm<sup>-1</sup>), Kr\_V, Rb\_VI, Sr\_VII, (\*interp. : Y\_VIII, Zr\_IX, Nb\_X, Mo\_XI\_OK ?)

$n = 5$  : 4 at (negl reson, interc UV) Sn\_I, Sb\_II, Te\_III, I\_IV, Xe\_V, Cs\_VI, Ba\_VII (\*extrap. : La\_VIII, Ce\_IX ?)

$n = 6$  : Pb\_I, Bi\_II

$K(s) = 4$ , p3, ion prototype O\_II (int. 2D, 2P ; +réson 4S-4P pr NI bof ?). 3 at. (selon OII plus haut)

$n = 2$  : N\_I, -- F\_III, Ne\_IV, Na\_V, Mg\_VI, Al\_VII -- Ar\_XII (K\_XIII, ... non)

$n = 3$  : P\_I, S\_II, Cl\_III, Ar\_IV, K\_V, Ca\_VI (précision niv ?), -- Cr\_X, Mn\_XI, Fe\_XII, Ni\_XIV (2P3/2 précis ?)

n = 4 : As\_I, Se\_II, Br\_III, Kr\_IV, Rb\_V, Sr\_VI, (\*interp Y\_VII, Zr\_VIII, Nb\_IX, Mo\_X\_OK)

n = 5 : Sb\_I, Te\_II, I\_III, Xe\_IV, Cs\_V, Ba\_VI, (La\_VII, Ce\_VIII, -- no data, extr ?)

n = 6 : (non)

K(s) = 5, p4, ion prototype Ne\_III (str fine 3P ; int 1D, 1S ; ? pr OI slmt : intercomb 3P-5S, perm 3P-3S ??). 4 at puis 2 at

n = 2 : O\_I, F\_II, Ne\_III, Na\_IV, Mg\_V, -- Ar\_XI, K\_XII, Ca\_XIII ; puis 2at f.str: Cr\_XVII, Mn\_XVIII, Fe\_XIX, Ni\_XXI

n = 3 : S\_I, Cl\_II, -- Ca\_V ; puis tjs 4 at Cr\_IX, Mn\_X, Fe\_XI, Ni\_XII

n = 4 : Se\_I, Br\_II, Kr\_III, Rb\_IV, Sr\_V, (\*interp. Y\_VI, Zr\_VII, Nb\_VIII, Mo\_IX\_OK ?)

n = 5 : Te\_I, I\_II, Xe\_III, Cs\_IV, Ba\_V, (La\_VI, Ce\_VII, -- no data, extr ?)

n = 6 : (non)

K(s) = 6, p5, ion prototype Ne\_II (str fine 2P). 1 at

n = 2 : F\_I, -- Ar\_X, K\_XI, Ca\_XII ; puis Cr\_XVI, Mn\_XVII, Fe\_XVIII, (Ni\_XX non)

n = 3 : Cl\_I, Ar\_II, K\_III, Ca\_IV ; puis Cr\_VIII, Mn\_IX, Fe\_X, Ni\_XII

n = 4 : Br\_I, Kr\_II, Rb\_III, Sr\_IV, Y\_V, Zr\_VI, Nb\_VII, Mo\_VIII, (-- non)

n = 5 : I\_I, Xe\_II, Cs\_III, Ba\_IV, La\_V, Ce\_VI, (-- non)

n = 6 : (non)

Pour certains ions éventuellement intéressants mais non considérés dans NIST et/ou CHIANTI, on peut envisager quelques compléments "stables" (je veux dire calculés une fois pour toute), avec inter/extrapolation à la main le long des séquences si nécessaire. Cf ci-dessous des suggestions pour les énergies.

Si certaines programmations te paraissent un peu lourdes ou trop spécialisées, je peux bien sûr reprendre les choses supposées stables "à la main", mais il vaudrait mieux savoir déjà ce que tu peux produire en un temps raisonnable, car l'automatisation maximale est évidemment à privilégier.

Je répète cependant mon inquiétude relative à une perte éventuelle de (ma) maîtrise du calcul des raies collisionnelles. Il faut que je puisse à nouveau calculer seul les rapports de raies aux T et N\_e qui me chantent...

A bientôt.

Bien amicalement.

Daniel

\*\*\*\*\* ENERGIES \*\*\*\*\*

Energies n = 4 à 6 avec qlq inter/extrapolations

Energies nivx interpolées pour 3 élmts n=4 : Sr\_OK, Y, Zr, Nb, Mo\_OK

n = 4

p1 Ga\_I Ge\_II As\_III Se\_IV Br\_V Kr\_VI Rb\_VII Sr\_VIII Y\_IX Zr\_X Nb\_XI Mo\_XII

2P1/2 0

2P3/2 826.190 1767.357 2940 4376 6090 8110 10467 13198 (16338 19917 23955) 28464

ATT: Très approché !

p2 Ge\_I As\_II Se\_III Br\_IV Kr\_V Rb\_VI Sr\_VII (Y\_VIII Zr\_IX Nb\_X) Mo\_XI

3P0 0

3P1 557.1341 1063.49 1741 2622.0 3742.86 5140 6845 (8880 11295 14170) 17634

3P2 1409.9609 2541.35 3937 5611.9 7595.34 9899 12545 (15580 19025 22880) 27144

1D 7125.2989 10095.82 13032 16190.4 19722.93 23746 28490 (34030 40325 47275) 54744

1S 16367.3332 22598.6 28430+ 33700: 39203.92 45201 51814 (59085 67020 75605) 84828

ATT: Très approché !

p3 As\_I Se\_II Br\_III Kr\_IV Rb\_V Sr\_VI Y\_VII Zr\_VIII Nb\_IX Mo\_X

4S 0

2D3/2 10592.5 13168.2 15042.0 17037.6 18639.1 20134.7 (21660 23270 25010) 26886

2D5/2 10914.6 13784.4 16301.0 18700.3 21080.4 23527.0 (26120 28935 32045) 35522

2P1/2 18186.1 23038.3 26915.0 31056.4 34794.3 38531.1 (42480 46635 50940) 55313

2P3/2 18647.5 23894.8 28579.0 33405.6 38317.8 43566.9 (49410 55880 62940) 70544

ATT: Approché ! ATT: P0 et P1 inversés pour (Y\_VI\* Zr\_VII\* Nb\_VIII\*) Mo\_IX\*

p4 Se\_I Br\_II Kr\_III Rb\_IV Sr\_V (Y\_VI\* Zr\_VII\* Nb\_VIII\*) Mo\_IX\*

3P2

0

3P1 1989.497 3136.4 4548.4 6260.38 8307.88 (10727 13554 16825) 20576.3

3P0 2534.36 3837.5 5312.9 6947.78 8718.47 (10597 12554 14560) 16588.8

1D2 9576.149 12089.1 14644.3 17357.66 20310.51 (23609 27284 31316) 35674.5

1S0 22446.202 27867.1 33079.6 38403.57 44050.41 (50200 57000 64550) 72884.6

NIST OK :

p5 Br\_I Kr\_II Rb\_III Sr\_IV Y\_V Zr\_VI Nb\_VII Mo\_VIII

2P3/2 0

1/2 3685.24 5370.10 7374.5 9727.9 12459.8 15602.8 19191 23274

\*\*\*\*\*

Energies nivx parfois extrapolées pour 2 élmts n=5 : Cs\_OK, Ba\_OK, --> La, Ce

NIST OK :

n = 5 p1 : In\_I Sn\_II Sb\_III Te\_IV I\_V Xe\_VI Cs\_VII Ba\_VIII, (La\_IX, Ce\_X -- non)

p1

2P1/2 0

2P3/2 2212.599 4251.494 6576 9223 12222.1 15599.0 19379.3 23592

NIST OK sf Te\_III 1S interpolé\* :

n = 5 p2 : Sn\_I , Sb\_II , Te\_III\* , I\_IV , Xe\_V , Cs\_VI , Ba\_VII (La\_VIII, Ce\_IX -- non)

3P0 0

3P1 1691.806 3054.6 4751 6828.0 9291.8 12176.0 15506.6

3P2 3427.673 5658.2 8165 10982.0 14126.7 17628.2 21499.2

1D 8612.955 12789.8 17358 22532.0 28411.2 35061.4 42514.2

1S 17162.499 23905.5 30430\* 37177.0 44470.4 52410.3 61082.5

p3 Sb\_I , Te\_II , I\_III , Xe\_IV , Cs\_V , Ba\_VI , (La\_VII\*, Ce\_VIII\*), ...

4S 0

2D

1/2 8512.125 10222.385 11710.6 13267.0 15077.4 17260.6 (19900 23060) .. 26780

3/2 9854.018 12421.854 14901.0 17510.7 20373.5 23547.2 (27060 30930 .. 35170

2P

1/2 16395.359 20546.591 24298.8 28036.4 31951.1 36155.7 (40730 45730 .. 51200

3/2 18464.202 24032.095 29636.6 35649.6 42273.7 49621.0 (57770 66780 .. 76690

ATT : \*Tous les P0 et P1 inversés

p4 Te\_I , I\_II , Xe\_III , Cs\_IV , Ba\_V , (La\_VI\*, Ce\_VII\*), ...

3P2 0

3P0\* 4706.495 6447.9 8130.08 9749.4 11301.9 (12783.6 14190.5) ...

3P1\* 4750.712 7086.888 9794.36 12902.0 16429.1 (20386.0 24775.0 ...

1D2 10557.877 13727.2 17098.73 20754. 24720.5 (29007. 33614. ...

1S0 23198.392 29501.3 36102.94 43279.4 51180.7 (59887. 69418. ...

NIST OK :

p5 I\_I, Xe\_II, Cs\_III, Ba\_IV, La\_V, Ce\_VI, (-- non)

2P3/2 0

1/2 7602.970 10537.01 13847.3609 17549.5 21634.1 25984

\*\*\*\*\*

NIST OK :

n = 6 p1 : Pb\_II , Bi\_III

14081.074 20788

\*\*\*\*\*

**Christophe Morisset** <chris.morisset@gmail.com>

15 août 2016 à 09:18

À : Daniel Pequignot &lt;daniel.pequignot@obspm.fr&gt;

Cher Daniel,

Le séjour en Pologne puis Gers s'est très bien passé, nous avons revu pas mal de monde, certain connus au Sénégal ou pendant le DEA...

Le retour à Mexico pour le congrès de Gary s'est très bien passé.

Je reprends cette semaine avec tout le retard accumulé à cette occasion...

Je mets la réponse à ton mail en bonne position. Je me demandais si au lieu d'un long integer, on ne pourrait pas plutôt utiliser une chaîne de caractères pour identifier les raies. Ça donnerait bien plus de possibilités.

Rien de ce que tu indiques ne semble très compliqué. On peut construire un tableau périodique pour l'occasion en spécifiant les caractéristiques de chaque atome (ion).

Je réfléchis au reste dans la semaine.

Saludos,

Christophe

[Texte des messages précédents masqué]

--

Dr. Christophe MORISSET                      Tel: +52 55 56 22 40 02

of. 12, Instituto de Astronomia      Fax: +52 55 56 16 06 53

UNAM Apdo. postal 70-264                      Chris.Morisset@Gmail.com

Ciudad Universitaria                      D.F.04510 MEXICO

<http://132.248.1.102/~morisset/>

---

**Daniel Pequignot** <daniel.pequignot@obspm.fr>

15 août 2016 à 10:54

À : Christophe Morisset &lt;chris.morisset@gmail.com&gt;

Cher Christophe.

Merci de ta rapide prise de date. Vous avez dit chaîne ? Ces integer n'ont-ils pas aussi du caractère ?!

Bon 15 août.

A+

Daniel

[Texte des messages précédents masqué]

---

**Christophe Morisset** <chris.morisset@gmail.com>

15 août 2016 à 10:56

À : Daniel Pequignot &lt;daniel.pequignot@obspm.fr&gt;

Oui, mais on peut facilement les extraire de la chaîne pour les traiter comme entiers.

On en parle...

Ch.

[Texte des messages précédents masqué]

[Texte des messages précédents masqué]