Résumé

La présence d'ions actinides dans des environnements radioactifs, astrophysiques et de laboratoire, suscite un intérêt particulier. En astrophysique, la matière éjectée par la fusion d'étoiles à neutrons (kilonovae) est considérée comme site de production par processus r d'éléments lourds tels que les lanthanides et les actinides, ou encore la présence d'éléments radioactifs de Z élevés dans les couches externes des étoiles chimiquement particulières (CP) a soulevé la question de la nucléosynthèse. Afin de modéliser ces environnements impliquant les actinides, la connaissance d'un nombre important de données atomiques, tels que les niveaux d'énergie et les probabilités de transition, est nécessaire.

Ce travail de thèse est consacré à l'interprétation de niveaux d'énergie appartenant à des configurations électroniques de trois ions d'actinides neutres (Cf I, Bk I, Pu I) et celles du thorium une fois chargé (Th II). L'étude repose sur l'approche paramétrique de Racah-Slater où les intégrales de Slater sont considérées comme des paramètres ajustables. Elle est implémentée dans la chaîne des codes Cowan. Dans le cas des trois spectres neutres, les configurations en interaction $5f^N7s7p + 5f^{N-1}6d7s^2$ se désexcitent radiativement vers les configurations en interaction de la configuration fondamentale $5f^N7s^2$ et les deux premières configurations excitées $5f^N7s7p$ et $5f^{N-1}6d7s^2$. En particulier du spectre du Cf I, 118 niveaux d'énergie impairs ont été interprétés avec seulement 20 paramètres libres et un écart quadratique moyen ne dépassant pas $100\,\mathrm{cm}^{-1}$. Ce qui nous a permis de confirmer 71 niveaux existant dans la littérature avec les mêmes désignations. Néanmoins, de nouvelles désignations concernent 48 des niveaux observés dont la plupart avec une bonne correspondance théorie-expérience des facteurs de Landé. Dans la parité paire, une déviation moyenne de $86\,\mathrm{cm}^{-1}$ est obtenue pour l'ajustement de 50 niveaux avec seulement 17 paramètres libres.

Comme application, les résultats obtenus dans le cas des transitions entre les configurations étudiées du californium neutre ont été appliqués aux calculs d'opacité des états lié-lié dans des conditions typiques de kilonovae. Ils révèlent des similitudes avec ceux de la littérature et montrent que l'opacité globale est dominée par les lanthanides. Cependant, l'opacité UV/visible du californium joue un rôle non négligeable en phase tardive neutre.

mots-clés : Actinides, structure atomique, Racah Slater, probabilités de transition, niveaux d'énergie, opacité, kilonova.

Abstract

The presence of actinide ions in radioactive, astrophysical and laboratory environments, is of particular interest. In astrophysics, matter ejected by the merger of neutron stars (kilonovae) is considered a site for the production, via r-process, of heavy elements such as lanthanides and actinides. Similarly, the presence of high-Z radioactive elements in the outer layers of chemically peculiar (CP) stars has raised the question of nucleosynthesis. To model these environments involving actinides, knowledge of a significant amount of atomic data, such as energy levels and transition probabilities, is necessary.

This thesis is devoted to the interpretation of energy levels belonging to the electronic configurations of three neutral actinide ions (Cf I, Bk I, Pu I) and those of singly charged thorium (Th II). The study is based on the Racah-Slater parametric approach, where Slater integrals are considered as adjustable parameters. It is implemented in the Cowan code suite.

In the case of the three neutral spectra, the interacting configurations $5f^N7s7p + 5f^{N-1}6d7s^2$ radiatively decay to the interacting configurations of the ground configuration $5f^N7s^2$ and the first two excited configurations $5f^N7s7p$ and $5f^{N-1}6d7s^2$. In particular, in the Cf I spectrum, 118 odd-parity energy levels were interpreted with only 20 free parameters and an rms deviation not exceeding $100\,\mathrm{cm}^{-1}$. This allowed us to confirm 71 levels existing in the literature with the same designations. Nevertheless, new designations concern 48 of the observed levels, most of which show good agreement between theory and experiment for the Landé factors. In even parity, an rms deviation of $86\,\mathrm{cm}^{-1}$ is obtained for the fit of 50 levels with only 17 free parameters.

As an application, the results obtained for the transitions between the studied configurations of neutral californium were applied to bound-bound opacity calculations under typical kilonova conditions. They reveal similarities with those in the literature and show that the overall opacity is dominated by lanthanides. However, the UV/visible opacity of californium plays a significant role in the neutral late phase.

key word : Actinides, atomic structure, Racah-Slater, transition probabilities, energy levels, opacity, kilonova.