

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

BADJI MOKHTAR-ANNABA UNIVERSITY

UNIVERSITE BADJI MOKHTAR ANNABA



جامعة باجي مختار-عنابة

Faculté des Sciences

Année 2006

Département de Physique

THESE

Présentée en vue de l'obtention du diplôme de **DOCTORAT**

Contribution à l'étude des structures atomiques et processus élémentaires dans les plasmas : Applications aux hydrogénoïdes et aux héliumoïdes

Option

Physique Théorique

Par

GUEDDA El Habib

DIRECTEUR DE THESE : KHELFAOUI Fethi Pr. Université Kasdi Merbah, Ouargla

DEVANT LE JURY

PRESIDENT :

GHERS Mokhtar

Pr. Université Badji Mokhtar Annaba

EXAMINATEURS:

DIAF Madjid

MEFTAH M. Tayeb

ROSMEJ Frank B.

ATALLAH Redha

Pr. Université Badji Mokhtar Annaba

Pr. Université Kasdi Merbah Ouargla

CR CNRS/Université de Provence France

Pr. Université Bochum Allemagne

MC Université Badji Mokhtar Annaba

ملخص

قدمنا خلال هذه الاطروحة مشاركتنا المتعلقة بدراسة و حساب التركيبات الذرية للذرات و الشوارد الشبيهة بالهيدروجين و الشبيهة بالهيليوم. حيث تعتبر هذه المعطيات مهمة بالنسبة للنماذج التي تستعمل حركية الاسكان. في حين نجد أن هذه المعطيات قليلة خاصة ما تعلق منها بالحالات الاكثر تأينا. عموما فالنتائج المقدمة التي خصت حسابات طاقات المستويات وقوى الهزازات كانت موافقة للنتائج المعروضة في المراجع. لقد تمت كذلك دراسة و حساب معدلات احتمالات الانتقالات الاشعاعية و كانت النتائج مقاربة للنتائج المنشورة. من جهة اخرى قدمنا قوانين السلم للاحتمالات المتوسطة للانتقالات الاشعاعية وقد اعطت هذه الاخيرة نتائج حسنة و متقاربة الى غاية الاعداد الكمومية الكبرى n . تجدر الاشارة ان المعطيات المتعلقة بالاحتمالات المتوسطة للانتقالات الاشعاعية غير متقاربة عموما و متواجدة بقلة بالمراجع خاصة ما تعلق منها بالانتقالات المختلطة (الاحادية-الثلاثية) ما بين الحالات ذات الاثارة العليا. ان استعمال هذه المعطيات من خلال نموذج تصادمي اشعاعي يمكننا من حساب خليط الاسكان للنظام الاحادي و الثلاثي للازدواج LS.

لقد تم التطرق كذلك الى اعادة التشكيل الثنائي الالكتروني بالنسبة للهيليوم وكذا الارقون الشبيه بالهيليوم. و منه طرحنا نتائج الحسابات العددية المتعلقة بمعاملات نسب اعادة التشكيل الثنائي الالكتروني و المرتبطة بالسبين بالنسبة للهيليوم بعدما قدمنا قوانين للسلم بالنسبة لمعاملات الشدة. لقد كانت نتائجنا المتعلقة باعادة التشكيل الثنائي الالكتروني بالنسبة للهيليوم وكذا الارقون الشبيه بالهيليوم جيدة و موافقة لنتائج المراجع. من جهة اخرى بينا ان البلازما الكثيفة تؤدي الى اعادة توزيع الاسكان للمستويات مما يؤثر كثيرا في سرعة تقارب نسب اعادة التشكيل الثنائي الالكتروني بالنسبة للهيليوم ومنه في المعدلات الذرية/ الايونية. ان هذه الاعتبارات سوف تؤثر حتما على كل التفسيرات التي تستعمل كثافات الاسكان الذرية خلال التحاليل السبكتروسكوبية.

Abstract

In this thesis we have contributed on the atomic structure study and calculation of the H-like and He-like atoms and ions. Indeed, these data are indispensable for a population kinetic approach. These data are rare particularly for highly excited states. However, generally the calculated energy levels and oscillator strengths are in good agreement with those presented in the literature. On the other hand we have studied and calculated the radiative transition rates taking into account configuration interactions and intermediate coupling effects, our results well agree with those published. Based on the numerical data we have developed spin dependent scaling relations for the averaged radiative transition rates. These relations have given good results, which are converging up to high n -quantum numbers. However, particularly intercombination transitions between high excited states are rare and non convergent. Their utilisation in a collisional radiative approach will permit to calculate the population mixing of the singlet and triplet system of the LS coupling.

The dielectronic recombination (DR) process and the related rates for the He I and Ar XVII are specially studied. We have presented spin dependent DR rate coefficients and developing intensity factor scale relations, which are converging for all spin (S), angular (L) and main (n) quantum numbers. Our results for the DR rate coefficients for He I and Ar XVII are in good agreement with other published methods. We have shown, that dense plasmas provoke population redistribution and level depression, which influence largely on the slowly converging dielectronic recombination rates of helium. These variations enter strongly into the atomic/ionic fraction determination of He. The present analysis is, therefore, important for all interpretations employing atomic population densities.

Résumé

Nous avons contribué au cours de cette thèse à l'étude et au calcul des structures atomiques d'atomes et d'ions hydrogénoïdes et héliumoïdes. En effet ces données sont indispensables pour un model utilisant la cinétique de population. Par ailleurs, ces données sont, généralement, indisponibles plus spécialement pour les états des hauts nombres quantiques principaux. Généralement nos résultats de calcul pour les niveaux d'énergie et les forces d'oscillateur sont en bon accord avec ceux présentés dans la littérature. D'autre part nous avons étudié et calculé les taux de transition radiative en tenant compte des interactions de configurations et des effets de couplage intermédiaire. Nos calculs sont comparables aux résultats publiés. Des lois d'échelle dépendantes de spin ont été développées pour les taux moyens de transition radiative de l'He I. Ces lois donnent des résultats satisfaisants et convergents jusqu'aux grands nombres quantiques n . Il est à noter que ces données pour les taux moyens de transition radiative sont généralement non convergentes et rarement publiées, plus particulièrement les transitions d'intercombinaison entre les états hautement excités. L'utilisation de ces données dans une approche collisionnelle radiative nous permet de calculer les mélanges des populations du système singulet et triplet du couplage LS.

La recombinaison diélectronique (RD) et les taux liés à ce processus ont été, plus spécialement, abordés pour l'He I et l'Ar XVII. Nous avons présenté nos résultats de calcul numérique pour les coefficients de taux de RD de l'He I qui sont dépendants de spin en développant des lois d'échelle pour les facteurs d'intensité qui sont convergents pour tous les nombres quantiques (n , L et S). Les résultats de calcul pour les coefficients de taux de RD sont en très bon accord avec ceux publiés pour l'He I et l'Ar XVII. D'autre part nous avons montré que les plasmas denses provoquent une redistribution des populations et une dépression des niveaux qui agissent largement sur la rapidité de convergence des taux de RD de l'He I et influent directement sur les fractions atomiques/ioniques. Ceci va, sans doute, perturber toutes les interprétations utilisant les densités de population atomique dans les diagnostics.

Dédicace

A mes parents

A ma femme

A mes enfants Aymen et Ahmed

A tous mes frères et sœurs

A toute la famille

Je dédie ce travail.

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier Monsieur Fethi Khelfaoui, Professeur à l'université Kasdi Merbah Ouargla, d'avoir accepté de diriger cette thèse et de m'avoir aidé à réaliser ce travail.

Je suis très reconnaissant au Ministère de l'Enseignement Supérieure et de la Recherche Scientifique d'avoir m'accorder une bourse (BAF) pour la finalisation de la thèse de doctorat.

La majorité de ce travail a été effectué au laboratoire des interactions ioniques et moléculaires (PIIM, DGP, UMR6633) de l'université de Provence (Marseille, France). Je tiens à remercier vivement Monsieur Roland Stamm, Professeur à l'université de Provence et directeur du laboratoire PIIM, d'avoir accepté de m'accueillir au sein du laboratoire et de mettre à ma disposition tous les moyens nécessaires pour mener à bien ce travail. Monsieur Frank B Rosmej, chargé de recherche/CNRS au laboratoire PIIM et Professeur à l'université Bochum (Allemagne), a été le codirecteur de la thèse pendant mon séjour en France. Je le remercie, notamment pour sa disponibilité, les idées et le savoir-faire que j'ai acquis. Je remercie également Monsieur Mohammed Koubiti, Maître des conférences à l'université de Provence, pour les nombreuses discussions scientifiques.

J'ai trouvé au sein de l'équipe DGP une atmosphère de sympathie. Je suis reconnaissant à tous les membres de l'équipe sans exception.

Je remercie Monsieur Mokhtar Ghers, Professeur à l'université Badji Mokhtar Annaba d'avoir accepté de présider le jury de la soutenance de la thèse. Messieurs les membres de jury Madjid Diaf et Redha Atallah, Professeur et Maître des conférences respectivement à l'université Badji Mokhtar Annaba ainsi que Monsieur M. Tayeb Meftah, professeur à l'université Kasdi Merbah Ouargla trouvent ici mes sincères remerciements

Table des matières

Introduction générale	1
Références.....	5
Chapitre I	
Généralités sur les plasmas	6
I.1 Introduction.....	6
I.2 Importance des données atomiques dans l'étude des plasmas.....	6
I.3 Historique et différents aspects des plasmas.....	8
I.4 Plasmas astrophysiques et spatiaux.....	9
I.5 Plasmas de basse énergie.....	9
I.6 Plasmas par confinement inertiel.....	9
I.7 La fusion nucléaire contrôlée et le tokamak.....	9
I.7.1 La fusion nucléaire.....	9
I.7.2 Le tokamak.....	11
I.7.3 Interaction plasma paroi et extraction des particules et de la chaleur.....	11
I.7.3.a Introduction.....	11
I.7.3.b Les matériaux.....	12
I.7.3.c Les différentes configurations du plasma de bord.....	12
I.7.3.d Extraction et injection de matière	13
I.8 Spectroscopie des plasmas.....	14
I.8.1 Mesures au cœur.....	14
I.8.2 Mesures au bord.....	14
I.8.3 Mesures spectroscopiques de la densité.....	14

I.8.4 Mesures spectroscopiques de températures.....	15
I.8.5 Autres applications des diagnostics.....	16
I.9 Transitions élémentaires.....	17
I.10 Modèles d'équilibre dans les plasmas.....	18
I.10.1 Equilibre thermodynamique complet.....	18
I.10.2 Equilibre thermodynamique local.....	19
I.10.3 Equilibre coronal.....	19
I.10.4 Les lois d'équilibre.....	20
I.10.4.a Loi de Maxwell.....	20
I.10.4.b Distribution de Boltzmann.....	20
I.10.4.c Loi de Saha.....	21
I.10.4.e Loi de Planck.....	21
I.11 Equilibre collisionnel radiatif (CR).....	21
I.12 Les constantes du temps (durées de vie).....	23
I.13 Choix des éléments.....	24
I.14 Conclusion.....	25
Références.....	26

Chapitre II

Structures atomiques des atomes et des ions à un et à deux électrons.....	28
II.1 Introduction.....	28
II.2 Atome d'hydrogène et ions hydrogénoïdes	28
II.2.1 Introduction.....	28
II.2.2 Termes supplémentaires dans l'Hamiltonien.....	29
II.2.3 Equation de Dirac.....	30
II.2.3.a Signification physique des termes et ordres de grandeur.....	31
II.2.4 Equation de Schrödinger.....	31
II.2.5 Termes supplémentaires.....	32
II.2.5.a Couplage spin-orbite.....	32
II.2.5.b Correction relativiste à l'énergie cinétique.....	33
II.2.5.c Terme de Darwin.....	34
II.2.5.d Ensemble des corrections.....	34
II.2.5.e Déplacement de Lamb (Lamb shift).....	35

II.3 Atome d'hélium et les ions héliumoïdes.....	36
II.3.1 Equation de Schrödinger pour les atomes à deux électrons.....	36
II.3.2 Méthodes d'approximation	36
II.3.2.a Méthode de variation de Ritz.....	37
II.3.2.b Théorie de perturbation.....	37
II.3.3 Approximations utilisées.....	39
II.3.3.a Développement en puissance de $1/Z$	39
II.3.3.b Méthode de Hartree.....	40
II.3.3.c Méthode de Fock.....	41
II.3.3.d Méthode de Hartree-Fock (HF).....	41
II.3.3.e Autres méthodes et approximations.....	43
II.3.4 Théorie relativiste.....	43
II.4 Calcul numérique et codes de calcul.....	44
II.4.1 Code ATOM.....	45
II.4.2 Code MZ.....	45
II.4.3 Code FAC.....	46
II.4.4 Code HFR modifié.....	47
II.5 Problèmes d'intérêt.....	47
II.5.1 Les niveaux hautement excités.....	47
II.5.2 Interactions de configurations.....	47
II.6 Conclusion.....	48
Références.....	50

Chapitre III

Processus atomiques élémentaires dans les plasmas.....	52
III.1 Introduction	52
III.2 Transitions radiatives.....	53
III.2.1 Probabilité de transition radiative d'Einstein.....	54
III.2.2 Force de raie dipolaire.....	56
III.2.3 Force d'oscillateur.....	57
III.2.4 Calcul de la force de raie.....	58
III.2.5 Configuration d'un seul électron.....	58
III.2.6 Lois d'échelle.....	59
III.3 Recombinaison diélectronique	60
III.3.1 Introduction.....	60

III.3.2 Stabilité radiative.....	62
III.3.3 Calcul numérique.....	63
III.4 Recombinaison radiative.....	64
III.4.1 Equations empiriques.....	64
III.5 Ionisation par l'électron d'impact.....	66
III.5.1 Les méthodes classiques.....	67
III.5.2 Approximation de Coulomb-Born.....	67
III.5.3 Les équations semi empiriques.....	68
III.6 Recombinaison par échange de charge.....	70
III.7 Excitation par l'électron d'impact.....	71
III.8 Application au calcul de distribution des états de charge.....	73
III.8.1 Model coronal.....	74
III.8.2 Equilibre thermodynamique local.....	74
III.9 Conclusion.....	75
Références.....	76

Chapitre IV

A. Calcul des structures atomiques	78
IV.A.1 Introduction.....	78
IV.A.2 Atome d'hydrogène et ions hydrogénoïdes.....	79
IV.A.2.1 Méthodes de calcul.....	80
IV.A.2.1.a Notre programme.....	80
IV.A.2.2.b Programme FAC.....	81
IV.A.2.2.c Calcul de Verner.....	81
IV.A.2.2.d Comparaison et discussion.....	82
IV.A.2.3 Etude du Lamb shift.....	86
IV.A.2.4 La loi d'échelle pour les taux de transition radiative.....	86
IV.A.2.5 Etude des forces d'oscillateur.....	87
IV.A.3 Calcul de structure atomique de l'He I	90
IV.A.3.1 Introduction.....	90
IV.A.3.2 Niveaux d'énergie de l'He I.....	90
IV.A.3.3 Transitions et forces d'oscillateur pour l'He I.....	90
IV.A.3.4 Couplage LS et jj pour l'He I.....	92
IV.A.3.4.a Position du problème.....	92
IV.A.3.4.b Les différents couplages.....	92

IV.A.3.4.c	Calcul des éléments des matrices de transformation	93
IV.A.3.4.d	Etude des états 2^3P_1 et 2^1P_1	94
IV.A.3.4.e	Etude des autres états P et D.....	95
IV.A.4	Calcul de structure atomique de l'Ar XVII.....	95
IV.A.4.1	Niveaux d'énergie et forces d'oscillateur de l'Ar XVII.....	96
IV.A.5	Conclusion	98
B.	Etudes des transitions radiatives	99
IV.B.1	Calcul des taux de probabilité de transition radiative pour l'He I.....	99
IV.B.1.1	Introduction.....	99
IV.B.1.2	Schéma de calcul.....	100
IV.B.1.3	Méthode de calcul.....	100
IV.B.1.4	Taux de transition radiative de résonance et d'intercombinaison...	100
IV.B.1.5	Etude des taux moyens de transition radiative.....	103
IV.B.1.5.a	Taux moyens de transition radiative.....	103
IV.B.1.5.b	Schéma de calcul.....	104
IV.B.1.5.c	Méthode de calcul.....	104
IV.B.1.5.d	Résultats de calcul et discussion.....	105
IV.B.2	Effets de mélange des fonctions d'onde.....	105
IV.B.3	Lois d'échelle.....	107
IV.B.4	Resultats et comparaisons.....	108
IV.B.5	Comparaison entre différentes données atomiques.....	109
IV.B.6	Conclusion.....	110
	Références.....	112
 Chapitre V		
	Etude de la recombinaison diélectronique	113
V.1	Introduction.....	113
V.2	Description de la recombinaison diélectronique.....	115
V.2.1	Choix de configurations.....	116
V.2.2	Programme de calcul.....	117
V.2.3	Etude des niveaux d'énergie.....	117
V.2.4	Taux d'autoionisation.....	118
V.2.5	Taux de transition radiative.....	121

V.3 Etude de la recombinaison diélectronique.....	121
V.3.1 Cas des atomes isolés aux faibles densités.....	121
V.3.1.a Coefficient de taux de RD.....	121
V.3.1.b Calcul des facteurs d'intensité.....	122
V.3.1.c Lois d'échelle pour l'He I.....	125
V.3.1.d Lois d'échelle pour l'Ar XVII.....	127
V.3.1.e Calcul du coefficient de taux de RD.....	128
V.3.1.f Comparaisons et discussions.....	131
V.3.2 Cas des hautes densités.....	134
V.3.2.a Facteur d'intensité Q à la limite de Boltzmann.....	134
V.3.2.b Lois d'échelle.....	134
V.3.2.c Résultats et discussions.....	136
V.3.3 Cas des densités intermédiaires.....	136
V.3.3.a Facteur d'intensité.....	136
V.3.3.b Résultats de calcul et discussions.....	137
V.4 Influence du coefficient de taux de RD sur l'équilibre atomique/ionique.....	137
V.4.1 Cinétique atomique.....	138
V.4.2 Cinétique de la population atomique.....	139
V.4.3 Effets de hautes densités.....	140
V.5 Conclusion.....	142
Références.....	143
Conclusion générale.....	145
Annexe A.....	147
Annexe B.....	152
Annexe C.....	157
Annexe D.....	171
Annexe E.....	177
Liste des publications.....	184

Introduction générale

La maîtrise et la compréhension de la physique liée à la fusion magnétique est un sujet de grand intérêt. En effet, le projet ITER (International Thermonuclear Experimental Reactor) a popularisé les recherches sur la fusion thermonucléaire par confinement magnétique et porte le défi mondial à venir en matière d'énergie, i.e., l'obtention d'une source d'énergie abondante et peu polluante.

L'étude des ions dans les plasmas est indispensable pour la connaissance du milieu lui-même et de ses lois physiques. Les ions d'impuretés y constituent un facteur important de perte d'énergie par rayonnement. Les mécanismes d'ionisation, de recombinaison, d'échange de charge, avec les coefficients de transport et les phénomènes de recyclage aux parois, déterminent l'évolution de chacune des espèces d'ions dans les plasmas. La physique atomique est très sollicitée pour les diagnostics de plasmas chauds. Ces diagnostics utilisent la relation de l'émission de rayonnement par les ions avec les propriétés de plasmas.

Plusieurs méthodes et approximations sont utilisées pour calculer les structures atomiques des atomes et des ions à un et à deux électrons. Le calcul du projet OP [1] (Opacité Project) est basé sur la méthode de couplage fermé (close-coupling) de la théorie de diffusion [2]. Berrington et al. [3] décrit les méthodes numériques utilisées pour le calcul des données atomiques pour l'OP. Verner et al. [4] donnent un calcul corrigé basé sur les données d'OP et des données expérimentales. Le site NIST (National Institute of Standards and Technology)

[5] présente, aussi, des données atomiques incluant les niveaux d'énergie de 56 éléments et les transitions observées de 99 éléments, les spectres, les états fondamentaux et les énergies d'ionisation. Godefroid et al. [6] donnent un tableau qui résume les différentes méthodes et les résultats de calcul concernant les niveaux d'énergie, les probabilités de transition radiative de quelques raies et les durées de vie de quelques niveaux pour les héliumoides. Un calcul de haute précision basé sur des méthodes variationnelles donne les valeurs des énergies, les forces d'oscillateur et taux de transition radiative pour tous les états de l'hélium jusqu'à $n=10$ et $L=7$ [7-8]. Actuellement il existe des programmes traitant les structures atomiques d'une façon complètement relativiste ou avec des approximations non relativistes. Parmi eux on peut citer le code d'interaction des configurations non relativistes CIV3 [9], le code Superstructure [10], le programme largement utilisé de Cowan [11] et le programme de multi-cofigurations de Hartree-Fock (MCHF) [12] ou celui de Dirac-Fock (MCDF) [13], etc. Cependant le calcul de structure atomique pose toujours un problème de convergence pour les hauts nombres quantiques n . Les effets relativistes et le problème d'interaction de configurations nécessitent aussi une étude détaillée.

D'autre part, des travaux récents [14] ont montré que des diagnostics avancées pour la caractérisation de diffusion, l'échange de charge et les effets de transport de radiation sont basées sur les émissions radiatives à partir des niveaux (singulets/triplets) de Rydberg de l'hélium neutre (He I). Les données atomiques concernant les transitions radiatives pour l'He I sont rares ou bien non convergents. L'hélium est l'un des plus importants éléments pour la spectroscopie de plasmas de fusion par confinement magnétique [14-15]. L'argon, aussi, peut se présenter sous forme des impuretés, suite à une injection d'un gaz de pompage dans les plasmas de tokamak [16] il peut être utilisé pour de fins de diagnostic dans les tokamaks [17-20]. Un résumé sur les différentes approximations proposées pour le calcul de la recombinaison diélectronique est donné par Ansari et al. [21]. Burgess [22] présente une équation pour le coefficient de taux de DR total qui est corrigée, ensuite, par un facteur dépendant de z [23]. Dans le rapport de NIFS [24], les coefficients de taux de recombinaison basés sur des différentes équations semi-empiriques sont comparés pour plusieurs ions.

C'est sur ces axes que nous proposons de contribuer à l'étude des structures atomiques des hydrogénoïdes et des héliumoides et quelques processus atomiques élémentaires associés. Cependant, ces problématiques sont loin d'être accomplis par une seule thèse.

Nous débuterons notre étude, au chapitre I, par une présentation des généralités sur les plasmas. Les différents aspects de plasmas existant sont exposés, en particulier les plasmas par confinement magnétique. Nous donnons, ensuite, un aperçu sur les méthodes spectroscopiques utilisées pour les diagnostics de plasmas. Les modèles d'équilibre fréquemment utilisés pour la modélisation des plasmas sont abordés ainsi que les arguments sur le choix des éléments étudiés dans la thèse.

Au chapitre II, nous développons les différentes méthodes utilisées dans le calcul des structures atomiques d'atomes et d'ions à un et à deux électrons. Les codes de calcul numériques sont aussi présentés.

Le chapitre III fait le point sur les différents processus atomiques élémentaires présents dans les plasmas. Les sections efficaces et/ou les coefficients de taux sont, également, exposés.

Nous calculons les structures atomiques des hydrogénoïdes et des héliumoïdes au chapitre IV et nous présentons des comparaisons entre les différentes méthodes de calcul. D'autre part, nous nous intéressons au calcul des taux de probabilité de transition radiative pour les transitions de résonance et d'intercombinaison pour l'He I jusqu'aux grands nombres quantiques n . Leur utilisation dans une approche collisionnelle radiative nous permet de calculer les mélanges de populations du système singulet et triplet du couplage LS. Cependant les transitions d'intercombinaison entre les états hautement excités sont plus particulièrement rares. Nous présentons notre calcul pour tout type de transition en tenant compte des interactions de configurations et des effets de couplage intermédiaire. Des lois d'échelle sont ensuite présentées.

Dans le chapitre V, nous étudions la recombinaison dielectronique (RD) de l'hélium neutre pour les états dépendant de spin et de grands nombres quantiques n . Ces données sont rarement présentes dans la littérature ou bien non convergentes. Ce qui permet, entre autre, un diagnostic efficace des raies satellites plus spécialement dans les tokamaks et un développement des codes incluant le model collisionnel radiatif. Nous étudions, également, la RD pour l'Ar XVII. Nous présentons les comparaisons avec les résultats de la littérature. Nous examinons, aussi, les différents cas de densités pour montrer les effets de haute densité sur ces coefficients. L'influence des erreurs sur les données atomiques, les chaînes

dépendantes de spin dans le calcul des taux de RD et les effets de collisions sur les fractions atomiques/ioniques est discutée pour l'hélium neutre.

Références

- [1] W. Cunto, C. Mendoza, F. Oschsenbein and C. J. Zeippen, *Astron. Astrophys.* **275** (1993) L5.
- [2] P. G. Burke, and M. J. Seaton *Meth. Comp. Phys.* **10**(1971) 1.
- [3] K. A. Berrington, P. G. Burke M. J. Seaton et al. *J. Phys. B. :At. Mol. Phys.* **20** (1987) 6379-6397.
- [4] D. A. Verner, E.M. Verner and G. J. Ferland, *Atomic Data Nucl. Data Tables*, **64** (1996) 1.
- [5] <http://physics.nist.gov>
- [6] M. Godefroid and G. Verhaegen, *J. Phys. B. At. Mol. Phys.* **13** (1980) 3082.
- [7] G. W. Drake and Z. C. Yan, *Chem. Phys. Lett.* **229** (1994) 786.
- [8] W. C. Martin and W. L. Wiese, *Atomic, Molecular and Optical Physics handbook*, ed. By G. W. Drake, AIP, NY, 1996.
- [9] A. Hibbert, *Comp. Phys. Comm.* **9** (1975) 141.
- [10] W. Eissner, M. Jones, and H. Nussbaumer, *Comp.Phys.Comm.* **8** (1974) 270.
- [11] R. D. Cowan, *Theory of Atomic Structure and Spectra*, University of California Press, Berkeley, 1981.
- [12] C. Froese Fischer, T. Brage, and P. Jonsson, *Computational Atomic Physics: An MCHF Approach*, IOP Publishing, Bristol (2000).
- [13] I. P. Grant, B.J. Mckenzie, P.H. Norrington, D.F. Mayers, and N.C. Pyper, *Comp.Phys.Comm.***21** (1980) 207.
- [14] F. B. Rosmej, R. Stamm, S. Fritzsche, H. Capes, M. Koubiti et al., *J. Nuc. Materials* **337-339** (2005) 1101.
- [15] N. Ohno, D. Nishijima, S. Takamura et al. , *Nuclear Fusion*, **41** (2001) 8.
- [16] F. B. Rosmej and V. S. Lisitsa, *Phys. Lett. A* 244 (1998) 401-406 1998.
- [17] F. P. Keenan and S. M. McCann, *J. Phys. B. At. Mol. Opt. Phys.*, **23**(1990)L423.
- [18] K. J. H. Philips et al., *J. Phys. B. At. Mol. Opt. Phys.*, **27**(1994) 1939.
- [19] J. E. Rice et al., *New Journal of Physics* **1**(1999)19.1-19.27.
- [20] F.B. Rosmej, V.S. Lisitsa, D. Reiter, M. Bitter, O. Herzog, G. Bertschinger, H.-J. Kunze, *Plasma Physics and Controlled Fusion* **41** (1999) 191.
- [21] G. M. R. Ansari, G. Elwert and P. Mucklich, *Z. Naturforsch* ,**259** (1970) 1781.
- [22] A. Burgess, *Astrophys. J.* **141** (1965) 1588.
- [23] A. Burgess and A.S. Tworkowki., *Astrophys. J.* **205**, L105-L107 (1976).
- [24] T. Kato and E. Asano, *NIFS-DATA Series*, **54** (1999).

Chapitre I

Généralités sur les plasmas

I.1 Introduction

Les plasmas composent 99% de l'univers. De l'astrophysique à la fusion contrôlée, des lasers au traitement de surface, leurs domaines d'application sont innombrables, tant en science pure qu'en technologie.

Les structures et les données atomiques décrivant les processus élémentaires dans les plasmas ont un intérêt primordial dans la modélisation des propriétés radiatives des ions et des atomes pour l'analyse et l'interprétation des spectres. Notre objectif est de contribuer au calcul des structures atomiques et des données atomiques des processus élémentaires dans les plasmas (radiatifs, collisionnels, etc.) pour les modèles d'interprétation et calcul des spectres et des profils de raies. Nous exposons dans ce qui suit un aperçu sur les plasmas existants, les méthodes spectroscopiques, les modèles décrivant les plasmas ainsi que l'intérêt du choix des éléments étudiés dans la thèse.

I.2 Importance des données atomiques dans l'étude des plasmas

Les ions observés dans la couronne solaire ou dans les décharges électriques ont été dans le passé à l'origine d'un développement spécifique de la physique atomique orienté vers l'étude des séquences isoélectriques. La recherche sur la fusion thermonucléaire contrôlée par le confinement magnétique a conduit à produire des plasmas de très haute température dans

lesquels ces ions jouent un rôle extrêmement important. Les lasers de grandes puissances ont permis d'entreprendre des recherches sur le confinement inertiel, comportant l'étude des plasmas à la fois très chauds et très denses où les systèmes atomiques sont soumis à des conditions très inhabituelles pour la physique de laboratoire. A ces facteurs de développement s'ajoute l'essor des observations astronomiques hors de l'atmosphère qui permettent de recevoir et d'analyser le rayonnement émis dans l'ultraviolet lointain et les rayons X par la matière chaude des étoiles et de l'espace interstellaire.

La physique atomique se trouve donc aujourd'hui de plus en plus sollicitée par une demande qui porte non seulement sur les propriétés spectrales d'un large éventail d'espèces ioniques, mais aussi sur des processus variés, notamment collisionnels, dont le rôle est caractéristique dans des conditions régnant dans les plasmas chauds. Cette demande suscite des méthodes théoriques et expérimentales pour l'étude des ions plongés dans le gaz d'électrons libres du plasma qui forment la base d'une discipline, la physique atomique dans les plasmas. Celle-ci fait fréquemment appel à des données qui doivent être acquises hors du milieu plasma lui-même, afin de pouvoir sélectionner soit une espèce d'ions soit un processus d'interaction soit encore un domaine limité d'énergie.

L'étude des ions dans les plasmas est nécessaire pour la connaissance du milieu lui-même et de ses lois physiques. L'exemple des quasars en astrophysiques qui se reposent sur leurs propriétés spectrales. En laboratoire, les ions multichargés jouent un rôle primordial dans le transport d'énergie au sein des plasmas de très forte densité. Quant aux plasmas de fusion magnétique, les ions d'impuretés y constituent un facteur important de perte d'énergie par rayonnement. Les mécanismes d'ionisation, de recombinaison, d'échange de charge, avec les coefficients de transport et les phénomènes de recyclage aux parois, déterminent l'évolution de chacune des espèces d'ions dans le plasma. Les mêmes mécanismes d'ionisation et de recombinaison, avec ceux d'excitation, interviennent aussi dans le bilan d'énergie électronique. L'échange de charge avec les atomes neutres intervient dans le bilan d'énergie ionique. Les phénomènes au bord du plasma sont spécialement importants : les atomes neutres émis ou ré-émis par recyclage par la paroi sont ionisés dans une couche ne dépassant pas quelques centimètres qui est donc le siège de sources ioniques beaucoup plus importantes que dans les autres parties du plasma. En raison des forts gradients de densité ionique, ces sources sont compensées par un flux vers l'extérieur qui donne lieu à une recombinaison sur la paroi et à un recyclage. Le contrôle de cette couche est un élément

important dans la réalisation d'un plasma thermonucléaire, en particulier parce qu'elle détermine l'énergie des particules atteignant la paroi et par conséquent l'importance du « sputtering » qui y prend place et engendre les impuretés.

La physique atomique montre aussi son importance au diagnostic des plasmas chauds. Ces diagnostics utilisent la relation de l'émission de rayonnement par les ions avec les propriétés du plasma. L'intensité des raies dépend de la température et de la densité électronique du plasma tandis que leur profil est influencé par les champs électrique et magnétique, par la température ionique et par le mouvement d'ensemble des ions provenant de leur diffusion ou de l'expansion du plasma. Les diagnostics nécessitent une abondance des données fiables sur les processus radiatifs et collisionnels qui commandent l'ionisation du plasma et l'excitation des ions.

Physique du confinement magnétique, physique des plasmas chauds et denses de confinement inertiel, physique des plasmas ionosphériques, magnétosphériques et astrophysiques, physique des plasmas de décharge, physique atomique et moléculaire des plasmas couvrent des domaines de densité et de température extraordinairement étendus.

I.3 Historique et différents aspects des plasmas

Sous des allures multiformes, la physique des plasmas conserve une unité profonde qu'explique son développement historique. Les premiers travaux sont théoriques et concernent les milieux stellaires ou interplanétaires. Ils donnent naissance à la magnétohydrodynamique et à la mécanique des particules chargées. Parallèlement les premières études expérimentales sur les décharges apparaissent. Entre 1955 et 1965, théoriciens et expérimentaux se trouvent réunis sur le programme de fusion thermonucléaire contrôlée. Avec les fusées et les satellites scientifiques, les astrophysiciens et géophysiciens découvrent l'observation directe des plasmas interplanétaires. Les années 70 voient s'affirmer la prépondérance des tokamaks et l'émergence du confinement inertiel comme concurrent possible du confinement magnétique. La physique des plasmas chauds et denses entre alors une phase productive. Simultanément, la physique des plasmas de décharge connaît un regain d'intérêt, né d'une série d'application importante (dépôt en couches minces, traitement de surface, séparation isotopique, gravures des circuits intégrés, etc.).

I.4 Plasmas astrophysiques et spatiaux

Les recherches effectuées en Astronomie, Géophysique externe ou planétologie fournissent l'occasion d'augmenter nos connaissances sur les propriétés des plasmas, dans des conditions difficilement voir non reproductibles en laboratoire (Plasmas sans collision, extrêmement denses ou extrêmement tenus, absence de parois, dimensions cosmiques).

La physique des plasmas joue un rôle important en astrophysique pour expliquer un certain nombre d'observations ou pour établir des modèles. On peut citer l'accélération et la diffusion des rayons cosmiques, les modèles d'étoiles à neutrons, les quasars, la physique solaire, etc.

I.5 Plasmas de basse énergie

Ces plasmas mettent en jeu des ions faiblement chargés. Les conditions sont similaires aux plasmas de bord existant dans les plasmas confinés magnétiquement. De plus c'est le domaine du milieu laser et de la physique des arcs électriques. Ces recherches impliquent le développement des connaissances de base sur les collisions atomiques et moléculaires aux énergies thermiques, notamment sur l'ionisation, la recombinaison et les processus à trois corps portant sur des états atomiques et moléculaires assez fortement excités.

I.6 Plasmas par confinement inertiel

Les conditions physiques prévalant dans ces plasmas couvrent un grand domaine de variation de température et de densité. La physique atomique des ions joue un rôle fondamental pour l'évaluation des bilans d'énergie et d'impulsion de la cible. Pour la mise en œuvre des diagnostics : les propriétés radiatives du plasma donnent les moyens de la mesure des densités et des températures en fonction de l'espace et du temps.

I.7 La fusion nucléaire contrôlée et le tokamak

I.7.1 La fusion nucléaire

La fusion nucléaire constitue le mécanisme à l'origine du rayonnement des étoiles et en particulier du Soleil. En effet, au sein des étoiles, les noyaux légers fusionnent et

produisent des noyaux plus lourds. Au cours de cette réaction de fusion, la masse du noyau produite est inférieure à la somme des masses de noyaux légers d'origine. La différence de masse, en vertu de la célèbre relation d'Einstein, $E=mc^2$, est alors convertie en énergie. On estime ainsi que, dans le Soleil, pas loin de 600 millions de tonnes d'hydrogène sont transformés en 596 millions de tonnes d'hélium chaque seconde. La différence est alors convertie en énergie et est à l'origine de la chaleur et de la lumière que nous recevons. Bien que l'énergie libérée par la fusion nucléaire soit considérable, les réactions de fusion ne se produisent pas spontanément, du moins dans les conditions de température et de pression auxquelles nous sommes habitués. Ainsi, la probabilité d'observer une réaction de fusion entre deux noyaux d'hydrogène à la surface de la terre est quasiment nulle. En effet, pour fusionner, les noyaux, qui sont chargés positivement, doivent d'abord vaincre leur tendance naturelle à se repousser. Ceci est possible lorsque la matière est dans des conditions extrêmes comme au cœur du Soleil (pression énorme et température de plusieurs millions de degrés).

Produire sur terre des conditions propices à la réalisation des réactions de fusion constitua rapidement un objectif important de recherche, compte tenu de l'immense potentiel énergétique de ce phénomène et de la très grande abondance de l'hydrogène. La fusion nucléaire contrôlée consiste ainsi à tenter de reproduire sur terre des conditions permettant d'exploiter de manière industrielle cette source d'énergie. Dans les conditions de température nécessaires pour obtenir la fusion nucléaire, soit plusieurs millions de degrés, les atomes sont alors séparés en leurs constituants fondamentaux - électrons et noyaux chargés positivement - et forment un gaz chaud appelé "plasma". Ces températures excluent l'utilisation d'un récipient pour maintenir le plasma dans un espace suffisamment petit pour qu'un nombre important de collisions entre noyaux légers donne lieu à des réactions de fusion. La solution la plus souvent retenue consiste alors à soumettre le plasma à un champ magnétique intense de géométrie toroïdale. Les particules chargées composant le plasma suivent alors approximativement le champ magnétique et ne peuvent explorer qu'une partie limitée de l'espace. Ceci favorise les collisions entre les noyaux légers tout en limitant le contact entre le plasma et les parois du réacteur. Cette technique est appelée le confinement magnétique du plasma. Les réacteurs de fusion basés sur cette approche sont connus sous le nom de tokamak et apparaissent aujourd'hui comme les plus prometteurs.

I.7.2 Le tokamak

Le tokamak est un instrument de fusion thermonucléaire d'abord développé en URSS. De grands tokamaks ont été construits et ont fonctionné dans plusieurs pays (France, Japon, Grande Bretagne) et plusieurs nouvelles machines sont en cours de construction. Dans un tokamak, les particules chargées qui constituent le plasma chaud sont confinées par un champ magnétique à l'intérieur d'un tore. Les forces magnétiques agissant sur les particules en déplacement du plasma empêchent le plasma de toucher les parois de la chambre. Le courant qui génère le champ magnétique est induit dans le plasma lui-même et le chauffe en même temps. Cependant, une réaction thermonucléaire *auto-entretenu*e n'a pu encore être obtenue (réaction qui produit plus d'énergie qu'elle n'en consomme).

La réaction qui semble la plus favorable dans les tokamaks serait la fusion d'un noyau de deutérium et d'un noyau de tritium. Le deutérium et le tritium sont deux isotopes de l'hydrogène. Le résultat de cette réaction est un noyau d'hélium et un neutron. Le noyau d'hélium étant chargé, il va être soumis au champ magnétique du tokamak et restera ainsi confiné dans l'enceinte du réacteur. Les collisions entre les noyaux d'hélium et autres constituants du plasma devraient permettre de maintenir une température suffisamment élevée dans le réacteur. Les neutrons n'étant pas porteur de charge électrique seront insensibles au champ magnétique et quitteront le tokamak à très grande vitesse. Leur énergie sera alors récupérée et transformée en chaleur qui, à son tour, sera transformée en électricité.

I.7.3 Interaction plasma paroi et extraction des particules et de la chaleur

I.7.3.a Introduction

Les particules chargées, qu'elles soient dans la zone centrale ou de bord, suivent toujours les lignes de champ et vont donc entrer en collision avec le solide : c'est ce qu'on appelle les interactions plasma/paroi. Lors de cette collision, les particules chargées se neutralisent (c'est à dire redeviennent des atomes ou des molécules en récupérant des électrons) et deviennent alors insensibles au champ magnétique, libres de se déplacer au gré des collisions avec les composants face au plasma ou les autres particules, jusqu'au moment où elles s'ionisent à nouveau par contact avec le plasma. Elles recommencent alors à suivre les lignes de champ, et peuvent soit ré-alimenter le plasma en particules si elles ont été

ionisées dans la zone centrale de la décharge, soit faire à nouveau une collision avec un solide si elles ont été ionisées dans la zone de bord. L'histoire se poursuit ainsi jusqu'à ce que la particule soit extraite du système, en étant absorbée soit par la paroi, soit par le système de pompage externe. On appelle l'ensemble de ces phénomènes le recyclage. On parcourt également toute une échelle de température, en passant de la centaine de millions de degrés pour le plasma central à 10 000 degrés pour le plasma de bord où se trouvent les molécules et les atomes, et à 1000 degrés pour la température de surface des composants face au plasma.

I.7.3.b Les matériaux

C'est avec l'augmentation de la puissance couplée au plasma qu'on s'est aperçu que la paroi, soumise au bombardement des particules, émettait des impuretés, arrachées par érosion, comme l'eau d'une rivière érode petit à petit la roche sur laquelle elle passe. Ces impuretés venaient polluer le plasma central et limiter les performances de la machine en rayonnant l'énergie couplée au plasma, qui est alors perdue au lieu de servir à chauffer la décharge. Une première idée a été de changer le matériau de la paroi, et on est passé des premières machines en métal à des composants en matériaux dits légers, comme le carbone ou le béryllium. En effet, en plus de leurs bonnes propriétés thermiques, ces matériaux présentent l'avantage de rayonner moins fortement que les métaux lorsqu'ils sont pulvérisés dans le plasma.

I.7.3.c Les différentes configurations du plasma de bord

Après l'optimisation des matériaux, une deuxième idée est d'éloigner la zone où a lieu l'interaction plasma/paroi du plasma central, afin d'éviter que les impuretés émises dans cette zone ne parviennent jusqu'au cœur de la décharge: c'est la configuration "divertor" axisymétrique, où la dernière surface magnétique fermée (DSMF) n'est plus définie par le point de contact avec un solide comme dans le cas de la configuration limiteur, mais par une frontière "magnétique" créée en rajoutant une bobine autour du tokamak.

Dans la configuration divertor axisymétrique, le flux sortant du plasma est dirigé en suivant les lignes de champ vers des plaques de neutralisation situées loin du plasma central. Les impuretés ont alors plus de chance d'être ré-ionisées dans la zone de bord, où elles suivent les lignes de champ pour être interceptées à nouveau par les plaques de neutralisation. Elles restent alors en circuit fermé sans perturber le cœur de la décharge : on parle d'écrantage

des impuretés. C'est en testant cette nouvelle configuration que le mode de confinement amélioré dit mode H a été découvert sur la machine allemande Asdex [1] en 1982, ce qui a définitivement assuré le succès de ce système. Les plus grandes machines actuelles, comme JET(Angleterre) et JT60-U(Japon) , sont équipées de ce type de dispositif. Sur Tore Supra (France) on trouve le divertor ergodique, dont l'idée de base reste la même - éloigner la zone d'interaction plasma/paroi du plasma central - mais qui utilise pour ce faire une perturbation magnétique [2] qui "ergodise" les lignes de champ au bord de la machine, c'est à dire qu'au lieu de la structure bien ordonnée en tores emboîtés, on obtient au bord un mélange chaotique des lignes de champ. L'interaction plasma-paroi n'est plus éloignée "géographiquement" mais "magnétiquement" de la zone centrale.

I.7.3.d Extraction et injection de matière

Les réactions de fusion D-T produisent des "cendres", les particules d'hélium. Ces particules, créées au centre de la décharge, cèdent une partie de leur énergie au plasma par collisions et servent donc à entretenir le plasma, avant de diffuser avec les autres particules vers le bord de la décharge. Afin d'éviter qu'elles ne s'accumulent et viennent étouffer la décharge, des dispositifs spéciaux sont prévus sur les composants face au plasma pour les extraire. Ils consistent à recueillir le flux ionique sur des gorges de neutralisation conçues pour diriger le flux de neutres ainsi créé et insensible à l'effet du champ magnétique vers un système de pompage situé à l'écart de la machine. On étudie le pompage de l'hélium en faisant des injections d'hélium dans la décharge depuis l'extérieur et en observant comment le système de pompage se comporte. Les performances atteintes sont compatibles avec les exigences de fonctionnement d'un futur réacteur (concentration en hélium au centre du plasma inférieure à 10%). Il est malheureusement difficile d'évacuer préférentiellement l'hélium au bord du plasma : on extrait donc tout ce qui arrive de la décharge, un mélange de combustible (deutérium et tritium), de cendres (hélium) et en faible proportion d'impuretés émises par les parois de la machine. On trie ensuite ce mélange, on supprime l'hélium et les impuretés, et on réinjecte en continu du combustible pour compenser ce qu'on a extrait de la décharge. Le système de pompage est donc destiné non seulement à extraire les cendres dans un futur réacteur mais aussi à contrôler la densité du plasma en combustible dans les machines actuelles, en jouant sur les quantités extraites et réinjectées.

I.8 Spectroscopie des plasmas

La spectroscopie des plasmas nous permet de déterminer plusieurs paramètres importants pour les plasmas tels que les températures et les densités ionique et électronique, la distribution des états de charge à partir de laquelle le transport des impuretés peut être déduit, la rotation du plasma (liés aussi aux champs intérieurs), les flux des particules, leurs longueurs de pénétration et distributions des vitesses (liés aux éléments combustibles et impuretés). Les détails sur les méthodes spectroscopiques utilisées peuvent être trouvés aux références [3-7].

I.8.1 Mesures au cœur

Parmi les applications de la spectroscopie des plasmas est la détermination des propriétés du plasma local à partir des mesures de l'émission ou de l'absorption.

Les mesures des intensités et les régions d'origine des raies spectrales peuvent fournir des informations sur le repérage de l'élément en considération. Deux méthodes de mesure passives sont actuellement utilisées pour la reconstitution de la région de l'émission à partir de l'intégration de la raie. La tomographie qui sollicite un nombre de raies vues à travers le rayon du plasma et un algorithme mathématique compliqué [8] et une modélisation décrivant la distribution des ions d'impureté en tenant compte de leur transport et le profil de température.

I.8.2 Mesures au bord

Les méthodes optiques sont les outils les plus favorables pour les diagnostics au bord des plasmas. Elles offrent la possibilité d'obtenir des informations sans aucune interférence entre la technique ou les quantités observées. Les domaines de densités et de températures couvrent : $10^{11} \text{ cm}^{-3} < n_e < 10^{13} \text{ cm}^{-3}$, $1 \text{ eV} < T_e < 100 \text{ eV}$.

I.8.3 Mesures spectroscopiques de la densité

La densité électronique et les quantités correspondantes peuvent être mesurées par plusieurs techniques. Ceci dépend, bien évidemment, des conditions du plasma telles que la

taille, la composition et les températures dans le plasma. Parmi ces techniques on peut citer les sondes de Langmuir [9-10], la diffusion Thomson de la lumière laser [11] et les techniques interférométriques basées sur le laser [12].

D'autre part la détermination de la densité par des moyens purement spectroscopiques est basée sur au moins une de ces méthodes: les largeurs des raies spectrales ou profils de raies, les intensités absolues de raies spectrales, les intensités du continuum ou les intensités relatives.

En effet les raies satellites diélectroniques ont été utilisées pour la détermination des densités [13-14]. Les profils de raies de $n=3$ à $n=1$ de l'argon héliumoïde sont aussi étudiés pour cet objectif [15].

Les raies de l'hélium neutre sont les mieux utilisées pour la détermination de la densité à basse densité et à basse température [6] mais, pour les hautes températures, les raies les mieux recommandées sont 4471 \AA [16] et 7281 \AA [17].

Une méthode proposée par König et al. [18] basée sur l'observation des transitions $\Delta n=1$ à partir des niveaux des ions multichargés correspondant aux raies satellites a été utilisée pour la détermination de la densité à partir des intensités observées de raies. Plusieurs spectres des ions héliumoïdes ont été exploités pour la détermination de la densité électronique [19].

La méthode des intensités relatives a été aussi appliquée aux raies d'hydrogène pour les plasmas de basse densité (plasma de bord) [20] et pour les raies de l'hélium neutre [21].

I.8.4 Mesures spectroscopiques de températures

Les excitations collisionnelles à partir de l'état fondamental sont dominantes pour les niveaux triplets à basse densité pour un plasma contenant de l'hélium neutre. Ainsi les rapports des raies de singulets et de triplets sont fonctions de la température électronique [22].

Un modèle complet a été proposé par Keane et al. [23] pour les mesures de températures à partir des intensités de l'argon hydrogéoïdes et héliumoïdes et autres ions

dans des plasmas de fusion inertielle. Cette méthode est utilisée pour un équilibre des états d'ionisation. Une méthode proposée aussi par Gabriel [24] pour la mesure de la température électronique basée sur l'observation relative des intensités relatives des raies satellites diélectroniques avec la raie de résonance de l'ion suivant dans la séquence isoélectronique d'ionisation. Le rapport d'intensités entre la raie de résonance ($1s^2 \ ^1S_0-1s2p \ ^1P_1$) et la raie satellite diélectronique ($1s^2 2p \ ^2P_{1/2} - 1s2p^2 \ ^2D_{3/2}$) peut fournir la valeur de la température électronique. En effet ceci est dû à la différence de dépendance en température des deux raies (la recombinaison diélectronique est un processus de recombinaison qui fait intervenir deux électrons simultanément) [24-25].

D'autres mesures à partir des intensités relatives du continuum, les rapports entre les intensités de raies et du continuum et à partir des profils Doppler peuvent être discutés dans la référence [6].

I.8.5 Autres applications de diagnostics

En plus des applications générales de méthodes spectroscopiques des mesures de densités et de températures, il existe aussi d'autres applications. Parmi elles on peut citer la recombinaison par échange de charge [6], la spectroscopie de l'émission de faisceau [26] et la spectroscopie de polarisation dont l'effet Stark "motionnel" est un exemple [27-28].

Les déplacements de raies peuvent être utilisés pour les mouvements des plasmas en exploitant l'effet Doppler. Un mouvement spécial est la rotation du plasma qui peut servir pour la détermination du champ électrique radial interne. Le spectre de l'Ar XVI-XVIII [29] dans la région des rayons X a été utilisé pour ce sujet aussi bien pour la détermination des températures ioniques par les largeurs de raies. Les expériences de pompage des gaz peuvent être aussi utilisées pour extraire les propriétés de transport. Il est aussi utile de noter la possibilité des mesures du champ magnétique [28] et les charges effectives [30] par spectroscopie.

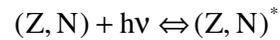
D'une autre part plusieurs sujets d'actualité peuvent être traités par des méthodes spectroscopiques de diagnostic. Parmi eux on peut citer les effets des électrons suprathermiques sur les intensités et les fréquences Doppler des raies de plasmas [31], ainsi

que le problème lié au transport de particules des impuretés et la distribution des états de charge des impuretés dans les plasmas [32,33].

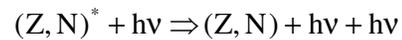
I.9 Transitions élémentaires

Nous allons préciser l'ensemble des interactions microscopiques qui conduisent aux transitions des processus prépondérants radiatifs et collisionnels [34].

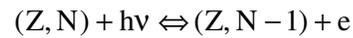
1. Photo excitation et émission spontanée



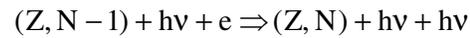
2. Emission induite



3. Photo ionisation et recombinaison radiative



4. Recombinaison radiative stimulée



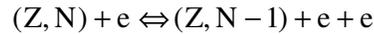
5. Capture diélectronique et auto ionisation



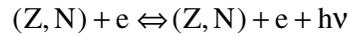
6. Excitation et désexcitation collisionnelles



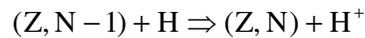
7. Ionisation et recombinaison à trois corps



8. Bremsstrahlung et Bremsstrahlung inverse (Emission et absorption libre-libre)



9. Recombinaison d'échange de charge (avec un atome d'hydrogène H)



(Z, N) c'est réfère à un ion de nombre atomique Z et de N électrons. $(Z, N)^*$ et $(Z, N)^{**}$ sont respectivement l'état excité et doublement excité de l'ion (Z, N) .

I.10 Modèles d'équilibre dans les plasmas

Le spectre d'un ion particulier dans un rayonnement contenant l'élément en question dépend fortement des propriétés du milieu. La densité et la température électroniques sont les paramètres les plus importants. Dans ce qui suit nous décrivons les différents cas d'équilibre des plasmas dépendant de la densité et la température.

I.10.1 Equilibre thermodynamique complet

Un état d'équilibre complet (ETC) peut être décrit par les lois statistiques simples. En effet les populations des différentes particules sont gouvernées par l'ensemble des processus collisionnel et radiatif et chacun d'eux est contrebalancé par son inverse. La température et la pression sont uniformes et suffisent pour définir cet état d'équilibre. Les températures électronique et ionique de rayonnement sont égales.

La distribution de Boltzmann (et Saha-Boltzmann) est utilisée pour la population atomique, la loi de Maxwell pour la distribution des particules et la loi de Planck pour la radiation.

I.10.2 Equilibre thermodynamique local

Un système en ETC peut perdre son équilibre complet lorsqu'il admet des pertes radiatives. Il présente, ainsi, des gradients de densité et de température et son rayonnement présente un ensemble des raies qui contredit la répartition continue de l'intensité spectrale dans les milieux ETC.

Cependant si le système unique à la température T , peut être remplacé par un ensemble de sous-systèmes à l'intérieur desquels la microréversibilité des transitions radiatives et collisionnelles est assurée, il est possible de définir un équilibre thermodynamique local (ETL) pour tout couple de densité et de température spécifique pour chaque sous-système. Ceci est vrai pour les plasmas denses et de faible température où les transitions radiatives sont négligeables devant les transitions collisionnelles. L'occupation relative des différents états j d'un ion (Z,N) est simplement proportionnelle au facteur de Boltzmann : $\exp(-E_j/kT)$. La distribution de Boltzmann et la loi de Saha peuvent être utilisées dans ce cas.

I.10.3 Equilibre coronal

Cette situation se réfère aux conditions de la couronne solaire 'solar corona' ($n_e \leq 10^8$ electrons/cm³). C'est les conditions de faible densité électronique où les excitations par collision sont trop faibles par rapport aux transitions radiatives (i.e. $C \ll A$). Tous les ions sont, presque, à l'état fondamental. La distribution des atomes entre les différents degrés d'ionisation n'est pas, purement, déterminée par des considérations statistiques. Cependant des équations d'équilibre entre les différents taux d'ionisation et de recombinaison est applicable dans ce cas.

En effet le prototype d'un modèle cinétique pour les niveaux atomiques et les distributions des états de charges est la relation d'ionisation coronale proposée par Wolley et Allen [35]. On supposant un état stable et négligeant tous transport d'ions, ces auteurs équilibrent le taux d'ionisation collisionnelle (par électron) des atomes ou des ions d'état de charge $z-1$ avec le taux de recombinaison radiative pour des ions dans l'état de charge z , i.e., par unité de volume on aura :

$$SN_a^{z-1}n_e = \alpha N_a^z n_e \quad (\text{I.1})$$

où S est le coefficient de taux d'ionisation et α est le coefficient de taux de recombinaison.

I.10.4 Les lois d'équilibre

Ces lois permettent de donner tout le détail des populations et ne dépendent que de l'énergie de chaque élément considéré.

I.10.4.a Loi de Maxwell

La loi de Maxwell établit la distribution des vitesses $f(v)$ pour les différentes particules :

$$f(v)dv = 4\pi v^2 \left(\frac{m}{2\pi T} \right)^{3/2} e^{-\frac{mv^2}{2T}} \quad (\text{I.2})$$

Elle s'écrit en fonction de l'énergie E ($E = \frac{1}{2}mv^2$) :

$$f(E)dE = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{E^{1/2}}{T^{3/2}} e^{-E/T} dE \quad (\text{I.3})$$

I.10.4.b Distribution de Boltzmann

La distribution de Boltzmann fixe les rapports des populations entre les différents niveaux d'un même ion :

$$\frac{n_i}{n_j} = \frac{g_i}{g_j} e^{-\frac{\Delta E_{ij}}{T}} \quad (\text{I.4})$$

où ΔE_{ij} est l'énergie de différence entre les deux niveaux i et j . g_i et g_j sont les poids statistiques des niveaux i et j respectivement. Cependant cette loi n'est applicable que pour des densités :

$$n_e \geq 7 \cdot 10^{18} \left(Z^7 / n^{17/2} \right) \left(KT / Z^2 \chi_H \right)^{1/2} \text{ cm}^{-3} \quad (\text{I.5})$$

où χ_H est l'énergie d'ionisation de l'hydrogène [3].

I.10.4.c Loi de Saha

La loi de Saha permet de déterminer le degré d'ionisation d'un milieu en équilibre thermodynamique. Elle permet entre autre de connaître le rapport des populations en fonction de la température du milieu.

Soit N_0 et N_1 les populations des niveaux fondamentaux de l'atome considéré et son ion lorsqu'il perd un électron. n_e représente la densité électronique du milieu. g_0 , g_1 , et g_e sont, respectivement, les poids statistiques. La loi de Saha s'écrit :

$$\frac{N_1 n_e}{N_0} = \frac{g_1 g_e}{g_0} \frac{(2\pi m_e KT)^{3/2}}{h^3} e^{-\chi_i / KT} \quad (\text{I.6})$$

χ_i est le potentiel d'ionisation.

I.10.4.d Loi de Planck

La loi de Planck régit la distribution de la densité de rayonnement en fonction de sa fréquence (valable pour le cas du corps noir). La densité spectrale par unité de volume ayant pour expression :

$$u(\omega, T) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{e^{\hbar\omega / KT} - 1} \quad (\text{I.7})$$

I.11 Equilibre collisionnel radiatif (CR)

L'état intermédiaire de densité électronique entre ETL et l'équilibre coronal peut exister. Les ions présentent des concentrations appréciables dans les états autre que l'état fondamental. L'équilibre d'ionisation devient, ainsi, plus complexe. En effet le problème n'inclus pas que le calcul des abondances d'ions mais aussi le calcul des populations de

différents états excités. Ceci est fait par l'inversion des matrices de très grands rangs de l'ordre de nombre des niveaux considérés pour tous les ions [36].

Dans ce cas un modèle dit collisionnel radiatif est utilisé pour prendre en compte de l'ensemble des transitions élémentaires précédentes et décrire, ainsi, les populations du plasma. Le modèle de base a été établi pour la première fois par Bates et al. [37]. L'évolution temporelle de la population de chaque niveau de chaque ion est gouvernée par la somme des processus de peuplement et de dépeuplement à partir de /ou vers les autres niveaux ou ions.

Dans le cas général les densités de population des niveaux atomiques sont déterminés à partir de [38] :

$$\frac{dn_j}{dt} = \sum_{i=1}^{N_s} n_i W_{ij} - n_j \sum_{k=1}^{N_s} W_{jk} \quad (I.8)$$

où n_j est la densité de population de l'état j . N_s est le nombre total des états.

Les éléments de matrice de transition radiatif-collisionnel sont donnés par :

$$W_{ij} = C_{ij} + R_{ij} + I_{ij} + T_{ij} + \Gamma_{ij} + D_{ij} \quad (I.9)$$

où :

C : taux d'excitation /de-excitation

I : taux d'ionisation collisionnelle

T : taux de recombinaison à trois corps

R : taux de recombinaison radiative (spontanée)

Γ : taux d'auto ionisation

D : taux de recombinaison diélectronique

Les éléments de matrice pour les processus inverses sont obtenus par l'application du principe d'équilibre ou micro-réversibilité. Si une transition n'existe pas suite à l'énergie ou à des considérations de symétrie, le taux correspondant est pris égal à zéro.

I.12 Les constantes du temps (durées de vie)

Les durées de vie des divers états des atomes, ions et électrons dans un plasma dans les processus radiatifs et collisionnels varient énormément. En particulier, concernant les études spectroscopiques, les états de translation des électrons libres, les atomes, les ions et les états excités (incluant les états d'ionisation) des atomes et ions. Ces durées de vie déterminent les temps de relaxation des diverses populations, leur ordre de grandeur comparée aux temps d'observation et les temps de développement dans un plasma déterminent l'approche de modélisation.

Il est indispensable, avant une modélisation d'un plasma de connaître les durées de vies des différents états et de faire les comparaisons nécessaires entre ces durées de vie du plasma et les paramètres atomiques. Le traitement quasi-statique ou dynamique des populations est extrêmement lié aux ordres des durées de vies.

Les durées de vie se divisent en deux grands groupes :

- Groupe atomique intrinsèque : Comprenant les transitions radiatives des états métastables τ_m , les transitions radiatives ordinaires des états excités τ_o et les transition des états d'autoionisation τ_a
- Groupe collisionnel extrinsèque : Comprenant la thermalisation des électrons libres τ_{e-e} , la thermalisation des ions positifs τ_{i-i} , l'équilibration ion-électron τ_{i-e} et l'ionisation τ_{ion} .

Il est évident que le premier groupe comporte des paramètres purement atomiques alors que le deuxième dépend des conditions du plasma. Le groupe intrinsèque est ordonné comme suit :

$$\tau_a \ll \tau_o \ll \tau_m \quad (\text{I.10})$$

Des valeurs typiques pour ces durées de vie sont données [39] :

$$\begin{aligned} \tau_m &\sim 10^1 / Z^8 \text{ s} \\ \tau_o &\sim 10^{-8} / Z^4 \text{ s} \\ \tau_a &\sim 10^{-12} \text{ s} \end{aligned} \quad (\text{I.11})$$

Les deux groupes peuvent être comparés entre eux et entre les temps de la diffusion ionique du plasma à travers la température ou les longueurs d'échelle de densité, τ_{dif} , le temps de relaxation du phénomène de plasma transitoire τ_{phen} (transient plasma phenomena) et le temps d'observation instrumental τ_{obs} . Pour un plasma de fusion on aura en général :

$$\tau_{\text{dif}} \sim \tau_{\text{ion}} \sim \tau_{\text{m}} \gg \tau_{\text{o}} \gg \tau_{\text{e-e}} \quad (\text{I.12})$$

I.13 Choix des éléments

Notre premier but était de générer une base de physique atomique pour les hydrogéoïdes et aussi pour les héliumoïdes. Les codes de calcul existants sont variés et complexes. Pour cela nous avons essayé d'élaborer un programme plus simple traitant les éléments hydrogéoïdes. Nous avons ainsi choisi des éléments hydrogéoïdes pour valider les résultats de notre programme. Cependant, pour les éléments héliumoïdes, nous avons utilisé un code de calcul de structure atomique, FAC [40]. Nous avons aussi étudié l'hélium neutre et l'argon héliumoïde pour plusieurs raisons qui vont être exposées ci-dessous et ultérieurement.

En effet les ions hydrogéoïdes et héliumoïdes sont les éléments de base existant dans tous les types de plasmas. Ils ont été utilisés pour les diagnostics en astrophysique [41-42], sur les plasmas laser [43] sur les plasmas denses [44] sur les plasmas chauds [45], sur les plasmas produits par laser [46], sur les plasmas des tokamak [47-48] et sur les plasmas aux basses températures [49-50].

D'autre part l'hélium neutre était l'élément le plus fréquemment utilisé pour la spectroscopie des plasmas d'astrophysique et de laboratoire. Actuellement avec l'utilisation du plasma D-T dans les plasmas de confinement magnétique, l'hélium est produit suite à la réaction de fusion entre D et T comme a été décrit auparavant. En effet dans ITER, les particules α produits par la réaction de fusion conduit à la formation des He^{1+} , He^{0+} et leurs raies d'émission correspondant. L'hélium a été utilisé aussi comme un gaz de pompage pour le control de densité. Récemment, des diagnostics avancées utilisent les émissions radiatives à partir des niveaux singulets et triplets de Rydberg de l'hélium neutre [38]. Dans les expériences des simulateurs de divertor, le plasma d'hélium et le gaz d'hélium de pompage

sont utilisés pour la compréhension du plasma de détachement [51-52]. Kubo et al. [53] ont observé aussi la raie singulet (667.82 nm) de l'He I dans la région du divertor.

L'argon héliumoïde, existe aussi dans les plasmas astrophysiques, dans les plasmas de laboratoire et plus spécialement dans les plasmas de confinement magnétique comme impuretés. Durant ces dernières années, l'argon héliumoïde est utilisé, entre autre, pour des fins des diagnostics : dans les tokamaks [54-56], dans les plasmas produit par laser [57-64], dans les plasmas de décharge [65] et dans les plasmas de haute densité [66], etc.

I.14 Conclusion

Nous avons abordé dans ce chapitre les différents aspects des plasmas existant. Cependant, nous avons présenté plus des détails sur les plasmas de fusion par confinement magnétique. Nous avons aussi résumé les différentes méthodes utilisées pour les diagnostics dans le but de la détermination des paramètres importants dans les plasmas. Les modèles d'équilibres dans les plasmas ont été énoncés. Les arguments sur le choix des éléments étudiés dans la thèse ont été aussi exposés.

Références

- [1] F. Wagner et al., Phys. Rev. Lett., **49**(1982) 1408.
- [2] Ph. Ghendrih, A. Grosman and H. Capes, Plasma Phys. Control. Fusion, **38** (1996) 1653.
- [3] H. R. Griem, Plasma Spectroscopy, McGraw-Hill Book Company, New York, 1964.
- [4] V. A. Boiko et al., J. Sov. Laser Research **6** (1985) 82.
- [5] H. R. Griem, Phys. Fluids B **4** (1992) 2346.
- [6] H. R. Griem, Principles of Plasma Spectroscopy, Cambridge University Press, New York, 1997.
- [7] C. deMichelis and M. Mattioli, Nuclear Fusion **21** (1981) 677.
- [8] L. C. Ingesson et al., Proc. EPS, Part I (1997) 113.
- [9] L. Tonks and I. Langmuir, Phys. Rev. **34**, (1929) 876.
- [10] I. H. Hutchinson, Principles of Plasma Diagnostics, Cambridge University Press, Cambridge, 1987.
- [11] H. J. Kunze, Plasma Diagnostics, ed. W. Lochte-Holtgreven, North Holland, Amsterdam, 1968.
- [12] F. Jahoda and G. A. Sawyer, Methods of Experimental Physics, Vol 9b, eds. H. R. Griem and R. H. Lovberg, Academic Press, NY, 1971.
- [13] L. A. Woltz et al., Phys. Rev. A **44**, (1991) 1281.
- [14] R. C. Manciani et al., Rev. Sci. Instrum., **63**, (1992) 5119.
- [15] D. A. Haynes et al., Phys. Rev. E **53** (1996) 1042.
- [16] J. D. Hey and H. R. Griem, Phys. Rev. A **12** (1975) 169.
- [17] C. Pérez et al., Phys. Rev. E **51** (1995) 3764.
- [18] R. König et al., Phys. Rev. Lett., **62** (1989) 1750.
- [19] H. J. Kunze, A. H. Gabriel and H. R. Griem, Phys. Fluids B **11**(1968) 662.
- [20] T. Fujimoto, S. Miyachi and K. Sawada, Nucl. Fusion **28** (1988) 1255.
- [21] B. Schweer et al., J. Nucl. Mat., **196-198** (1992) 174.
- [22] T. Fujimoto, J. Phys. Soc. Jap., **47** (1979) 273.
- [23] C. J. Keane et al., Phys. Rev. Lett., **72** (1994) 3029.
- [24] A. H. Gabriel, Mont. Not. R. Astron. Soc. **160** (1972) 99.
- [25] A. Pospieszczyk, Astron. & Astrophys., **39** (1975) 357.
- [26] W. Mandl et al., Plasma Phys. Contr. Fusion, **35** (1993) 1373.
- [27] H. A. Bethe and E. E. Salpeter, Quantum Mechanics of one-and Two-Electron Systems, Springer-Verlag, Berlin, 1957.
- [28] E. V. Condon and G. H. Shortley, The Theory of Atomic Spectra, Cambridge University Press, Cambridge, reprinted in 1970.
- [29] R. J. Fonck A. T. Ramsey and R. V. Yelle, Applies Optics, **21** (1982) 2115.
- [30] H. Röhr et al., Rev. Sci. Instrum., **59** (1988) 1875.
- [31] P. Guio and J. Liliensten, Annales Geophysicae, **17** (1999) 903-912.
- [32] V. A. Shurygin, Plas. Phys. Control Fusion, **41** (1999) 355-375.
- [33] V. A. Shurygin, Plasma Physics Reports, **30** (2004) 443.
- [34] F. De Gaufridy De Dortan, thèse de Doctorat, Université Paris XI, 2003.
- [35] v.d.R. Wolley and C. W. Allen, Mon. Not. R. Astron. Soc. **108** (148) 292.

- [36] A. Burgess and H.P. Summers, *Astrophys. J.* **157** (1969) 1007.
- [37] D. R. Bates et al., *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **267** (1962) 297.
- [38] F. B. Rosmej et al., *J. Nuc. Mat.* **337-339** (2005) 1101.
- [39] P. Bryans, PhD thesis, University of Strathclyde, UK, 2005.
- [40] M. F. Gu, FAC 1.0.7 Manual.
- [41] B. E. J. Pagel, *J. Phys. B. At. Mol. Opt. Phys.* **4** (1971) 279.
- [42] M. Peinbert, *Rep. Prog. Phys.*, **53** (1990) 1559.
- [43] V. A. Boiko, S. A. Pikuz and A. Ya Faenov, *J. Phys. B. At. Mol. Opt. Phys.* **12** (1979) 1889.
- [44] P. Gratreau, *Plasma Physics*, **15** (1973) 269-283.
- [45] F. B. Rosmej, *J. Phys. B. At. Mol. Opt. Phys.* **30** (1997) L819.
- [46] B. A. Tozer et al., *Proc. Phys. Soc.*, **84** (1965) 45.
- [47] E. Källne et al., *J. Phys. B. At. Mol. Opt. Phys.* **17** (1984) L115.
- [48] I. H. Coffey et al., **27** (1994) 1011-1020.
- [49] K. Behringer and U. Fantz, *New Journal of physics* **2** (2000) 23.1-23.19.
- [50] A. A. Matveyev and V. P. Silakov, *Plasma Sources Sci. technol.* **4** (1995) 606.
- [51] N. Ohno, D. Nishijima, S. Takumura et al., *Nuclear Fusion* **41** (2001) 8.
- [52] D. Nishijima et al., *Plasma Phys. Control. Fusion* **44** (2002) 597.
- [53] H. Kubo et al., *Plasma Phys. Control. Fusion*, **41** (1999) 747.
- [54] F. P. Keenan and S. M. McCann, *J. Phys. B. At. Mol. Opt. Phys.*, **23** (1990) L423.
- [55] K. J. H. Philips et al., *J. Phys. B. At. Mol. Opt. Phys.*, **27** (1994) 1939.
- [56] J. E. Rice et al., *New Journal of Physics* **1** (1999) 19.1-19.27.
- [57] J. G. Lunney and J. F. Seely, *J. Phys. B. At. Mol. Opt. Phys.*, **15** (1982) L121.
- [58] F.B. Rosmej, A. Calisti, R. Stamm, B. Talin et al., *JQSRT* **81**, 395 (2003)
- [59] F. B. Rosmej, H. R. Griem, R. C. Elton et al. *Phys. Rev.* **E 66** (2002) 056402.
- [60] F.B. Rosmej, D.H.H. Hoffmann, W. Süß et al., *Phys. Rev.* **A 63** (2001) 032716.
- [61] S.H. Glenzer, F.B. Rosmej, R.W. Lee et al., *Phys. Rev. Lett.* **81** (1998) 365.
- [62] F.B. Rosmej, V.S. Lisitsa, D. Reiter et al., *Plasma Physics and Controlled Fusion* **41** (1999) 191.
- [63] F.B. Rosmej, V.S. Lisitsa, *Phys. Lett. A* **244** (1998) 401.
- [64] F.B. Rosmej, J. Abdallah Jr, *Phys. Lett. A* **245** (1998) 548.
- [65] N. J. Peacock, R. J. Speer and M. G. Hobby, *J. Phys. B. At. Mol. Opt. Phys.*, **2** (1969) 798.
- [66] F. B. Rosmej *J. Phys. B. At. Mol. Opt. Phys.*, **28** (1995) L747.

Chapitre II

Structures atomiques des atomes et des ions à un et à deux électrons

II.1 Introduction

Dans ce chapitre nous présentons un aperçu sur les méthodes utilisées pour le calcul des énergies et les fonctions d'onde des systèmes à un et à deux électrons. Les termes de corrections et les cas relativistes seront aussi examinés. Les méthodes de variation et de perturbation seront discutées pour les systèmes à deux électrons. Les méthodes de calcul numériques seront aussi exposées.

Les données de structure atomique sont indispensables pour un model utilisant la cinétique atomique de population pour des fins de diagnostics précises.

II.2 Atome d'hydrogène et ions hydrogénoïdes

II.2.1 Introduction

Les forces les plus importantes qui existent au sein des atomes sont les forces électrostatiques de Coulomb. En prenant pour Hamiltonien de l'atome d'hydrogène l'expression :

$$H_0 = \frac{P^2}{2\mu} + V(r) \quad (\text{II.1})$$

Le premier terme représente l'énergie cinétique de l'atome dans le système du centre de masse (μ est la masse réduite), le deuxième terme :

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \quad (\text{II.2})$$

donne l'énergie d'interaction électrostatique entre l'électron et le proton. Il est facile de calculer les états propres et les valeurs propres de H_0 .

En fait l'expression (II.1) n'est qu'approchée; elle ne tient compte d'aucun effet relativiste; en particulier tous les effets liés au spin de l'électron sont ignorés. De plus on n'a pas introduit le spin du proton et les interactions magnétiques correspondantes. L'erreur, ainsi, commise est en réalité très petite, car l'atome d'hydrogène est un système faiblement relativiste de même le moment magnétique du proton est très faible.

Cependant la précision considérable des expériences de physique atomique permet de mettre facilement en évidence des effets que l'on ne peut pas expliquer à partir de l'Hamiltonien (II.1). Aussi allons nous tenir compte des corrections que nous venons de mentionner : nous écrivons l'Hamiltonien complet de l'atome d'hydrogène sous la forme :

$$H = H_0 + W \quad (\text{II.3})$$

où W représente l'ensemble des termes négligés jusqu'à ce niveau. Comme W est très petit devant H_0 , il est possible de calculer ses effets par la théorie de perturbation.

II.2.2 Termes supplémentaires dans l'Hamiltonien

Le spin apparaît de façon naturelle lorsqu'on essaie d'établir pour l'électron une équation satisfaisante à la fois aux postulats de la relativité restreinte et à ceux de la

mécanique quantique. Une telle équation existe, c'est l'équation de Dirac, qui a permis de rendre compte de nombreux phénomènes (spin de l'électron, structure fine de l'hydrogène, etc.).

La façon la plus rigoureuse d'obtenir l'expression de l'ensemble des corrections relativistes consiste donc à écrire l'équation de Dirac pour un électron plongé dans le potentiel créé par le proton puis à chercher la forme limite que prend cette équation lorsque le système est faiblement relativiste (cas de l'atome d'hydrogène).

II.2.3 Equation de Dirac

L'équation de Dirac indépendante du temps pour une particule libre est donnée par [1] :

$$(C\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{P} + \beta mc^2)\psi = E\psi \quad (\text{II.4})$$

$$\alpha_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \alpha_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \alpha_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{II.5})$$

$$\mathbf{P} = -i\hbar\nabla \quad (\text{II.6})$$

E est l'énergie relativiste.

L'équation (II.4) peut être modifiée en incluant les effets dus aux champs extérieurs.

Elle prend la forme [1] :

$$(E' + e\phi)\psi = \left[\frac{1}{2m} \left(\mathbf{P} + \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 + \frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \nabla \times \mathbf{A} - \frac{P^4}{8m^3c^2} - \frac{e\hbar^2}{8m^2c^2} \nabla \nabla \phi - \frac{e\hbar}{4m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \nabla \phi \times \mathbf{P} \right] \psi \quad (\text{II.7})$$

$$E' = E - mc^2 \text{ et } \boldsymbol{\sigma}(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z) \quad (\text{II.8})$$

\mathbf{A} et φ : Les champs vectoriel et scalaire respectivement.

m est la masse de l'électron au repos.

II.2.3.a Signification physique des termes et ordre de grandeur

$e\varphi$: Energie potentielle scalaire (10^5 cm^{-1})

$\frac{1}{2m} \left(\mathbf{P} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2$: Contient l'énergie cinétique et les termes d'interaction avec un champ représenté par le potentiel \mathbf{A} (10^5 cm^{-1})

$\frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \nabla \times \mathbf{A}$: Interaction du moment magnétique de spin avec un champ magnétique

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (1 \text{ cm}^{-1})$$

$\frac{\mathbf{P}^4}{8m^3c^2}$: Ce terme apparaît dans le développement de l'énergie relativiste, c'est une correction relativiste à l'énergie cinétique (0.1 cm^{-1})

$-\frac{e\hbar^2}{8m^2c^2} \nabla \nabla \varphi$: produit un déplacement en énergie sur les états s : terme de Darwin ($< 0.1 \text{ cm}^{-1}$)

$-\frac{e\hbar}{4m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \nabla \varphi \times \mathbf{P}$: interaction spin-orbite ($10 \cdot 10^3 \text{ cm}^{-1}$)

II.2.4 Equation de Schrödinger

Pour un électron dans un champ statique dont le potentiel est φ , l'équation (II.4) sans les corrections relativistes d'ordre supérieur se simplifie :

$$(E' + e\varphi)\psi = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} \psi \quad (\text{II.9})$$

En remplaçant E' par E (énergie non relativiste) $e\varphi$ par $(-V)$ et \mathbf{P} par $(-i\hbar\nabla)$

L'équation (II.9) devient :

$$H_0 \psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi = E \psi \quad (\text{II.10})$$

Cette équation admet comme valeurs propres E et fonctions propres $\psi(r, \theta, \varphi)$:

$$E = -\frac{Z^2}{n^2} \text{ (Ry)} \quad (\text{II.11})$$

$$|nlm\rangle \equiv \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{r} P_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (\text{II.12})$$

Les expressions de la fonction radiale $P_{nl}(r)$ et sphérique $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ sont données dans plusieurs références de mécanique quantique et physique atomique [1-5]

II.2.5 Termes supplémentaires

Les termes supplémentaires qui peuvent être traités dans la théorie de la perturbation par l'opérateur W sont :

II.2.5.a Couplage spin-orbite

L'électron se déplace à la vitesse $v = P/m$ dans le champ électrostatique créé par le proton. La relativité restreinte indique qu'il apparaît alors dans le référentiel propre de l'électron un champ magnétique et comme l'électron possède aussi un moment intrinsèque, il interagit avec ce champ, l'énergie d'interaction est donnée par son Hamiltonien H_{so} :

$$\begin{aligned} H_{so} &= -\frac{e\hbar}{4m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \nabla \varphi \times \mathbf{P} \\ &= -\frac{e\hbar^2}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{d\varphi}{dr} \mathbf{L} \mathbf{S} \end{aligned} \quad (\text{II.13})$$

Pour l'hydrogène, la correction apportée par le terme spin-orbite est traitée comme une perturbation. Ainsi les corrections de premier ordre en énergie donnent pour l'énergie de l'interaction spin-orbite :

$$E_{so} = \frac{Z^4 \alpha^2}{n^3} \frac{j(j+1) - l(l+1) - S(S+1)}{2l(l+1)(l+1/2)} \quad (\text{Ry}) \quad (\text{II.14})$$

où $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$ est la constante de structure fine et $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$ est le rayon de Bohr.

Pour les deux valeurs possibles du nombre quantique j on aura pour l'énergie de l'interaction spin-orbite ($l \neq 0$) :

$$E_{so} = E_{l \pm \frac{1}{2}} = \frac{Z^4 \alpha^2}{n^3} \frac{1}{2l(l+1)(l+1/2)} \begin{cases} 1 \\ -(l+1) \end{cases} \quad (\text{Ry}) \quad (\text{II.15})$$

II.2.5.b Correction relativiste à l'énergie cinétique

Ce terme provient du développement limité de l'expression relativiste de l'énergie. De plus de l'énergie au repos $m_0 c^2$ et de l'énergie cinétique non relativiste $P^2/2m$, on retrouve le terme $-P^4/8m^3 c^2$. Ce dernier représente donc la première correction à l'énergie due à la variation relativiste de la masse avec la vitesse.

L'Hamiltonien de correction relativiste H_r est donné par :

$$H = -\frac{P^4}{8m^3 c^2} = -\frac{1}{2mc^2} \left(\frac{P^2}{2m} \right)^2 \quad (\text{II.16})$$

qui donne les correction en énergie sous la forme :

$$E_r = -\frac{Z^4}{n^3} \alpha^2 \left[-\frac{3}{4n} + \frac{1}{l+1/2} \right] \quad (\text{Ry}) \quad (\text{II.17})$$

II.2.5.c Terme de Darwin

Dans l'équation de Dirac, l'interaction entre l'électron et le champ coulombien du noyau est locale. Le champ intervient par sa valeur au point r où se trouve l'électron. Cependant, l'approximation non relativiste (développement en puissance de v/c) conduit pour le spineur à deux composantes décrivant l'état de l'électron, à une équation où l'interaction entre l'électron et le champ est devenue non locale. L'électron est alors sensible à l'ensemble des valeurs prises par le champ dans un domaine centré au point r et dont l'extension est de l'ordre de la longueur d'onde de Compton de l'électron. C'est l'origine de la correction représentée par le terme de Darwin. Ce terme est donné par :

$$\begin{aligned} H_D &= -\frac{e\hbar^2}{8m^2c^2} \nabla \nabla \varphi \\ &= \frac{4\pi Ze^2 \hbar^2}{8m^2c^2} \delta(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (\text{II.18})$$

qui donne une correction pour $l = 0$

$$E_D = \frac{Z^4 \alpha^2}{n^3} \quad (\text{Ry}) \quad (\text{II.19})$$

II.2.5.d Ensemble des corrections

Nous avons présenté auparavant les corrections en énergie apportées par le couplage spin orbite, les corrections relativistes et le terme de Darwin. Ces corrections peuvent être rassemblées comme suit :

$$E_{so} + E_r + E_D = -\frac{Z^4 \alpha^2}{n^3} \left[\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right] \quad (\text{Ry}) \quad (\text{II.20})$$

ainsi l'énergie totale jusqu'à présent peut s'écrire sous la forme :

$$E = -\frac{Z^2}{n^2} - \frac{Z^4 \alpha^2}{n^3} \left[\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right] \quad (\text{Ry}) \quad (\text{II.21})$$

qui représente en fait les premiers ordres du développement de la solution exacte de l'équation de Dirac [6] :

$$E = mc^2 \left[1 + \alpha^2 \left(n - j - \frac{1}{2} + \sqrt{(j+1/2)^2 - \alpha^2} \right)^{-2} \right]^{-1/2} \quad (\text{II.22})$$

II.2.5.e Déplacement de Lamb (Lamb shift)

La théorie de Dirac prévoit pour les énergies des niveaux des atomes hydrogénoïdes de même nombre quantique j et qui diffèrent du nombre quantique orbital l , les mêmes valeurs des énergies, ainsi les niveaux se coïncident.

Dans le but de résoudre ce problème lié à la structure fine des ions hydrogénoïdes par des mesures optiques, plusieurs études [7-8] ont montré une faible différence entre les spectres observés et la théorie de Dirac. Le problème a été résolu par W. E. Lamb et R. C. Retherford [9] qui ont pu lancer une brillante expérience basée sur la technique micro-onde pour stimuler une transition radio-fréquence directe entre les niveaux $^2S_{1/2}$ et $^2P_{1/2}$.

Plusieurs théories ont prouvé entre autre la théorie électrodynamique quantique que les corrections radiatives à la théorie de Dirac ont été obtenues par la considération de l'interaction de l'électron avec le champ électromagnétique quantifié. Le calcul de Lamb shift incluant les corrections radiatives d'ordre supérieur, la taille nucléaire et les effets de recul donnent pour les atomes légers ($Z\alpha \ll 1$):

Pour $l = 0$

$$\Delta E(n,0) = \frac{8Z^4}{n^3} \frac{\alpha^3}{3\pi} \left[2 \log \frac{1}{Z\alpha} + \log \frac{Z^2 R_y}{K_0(n,0)} + \frac{19}{30} \right] \quad (\text{Ry}) \quad (\text{II.23})$$

pour $l \neq 0$

$$\Delta E(n,l) = \frac{8Z^4}{n^3} \frac{\alpha^3}{3\pi} \left[\log \frac{Z^2 R_y}{K_0(n,l)} + \frac{3}{8} \frac{c_{lj}}{2l+1} \right] \quad (\text{Ry}) \quad (\text{II.24})$$

où :

$$c_{lj} = \begin{cases} (l+1)^{-1} & \text{pour } j = l + 1/2 \\ -l^{-1} & \text{pour } j = l - 1/2 \end{cases} \quad (\text{II.25})$$

l'énergie moyenne K_0 est discutée dans les références [2,10]. D'autres expressions similaires sont exposées dans les références [11-12].

II.3 Atome d'hélium et les ions héliumoides

II.3.1 Equation de Schrödinger pour les atomes à deux électrons

Dans la théorie non relativiste, l'équation de Schrödinger pour un système à deux électrons s'écrit en unité atomique :

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla_{r_1}^2 - \frac{1}{2} \nabla_{r_2}^2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \right] \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (\text{II.26})$$

r_1 et r_2 sont, respectivement, les distances du premier et second électrons à partir du noyau, r_{12} leur séparation mutuelle.

Les fonctions d'onde des atomes à deux électrons resteront inchangées ou changeront de signe lors de l'inter-changement des coordonnées des deux électrons. Les états sont, ainsi symétriques (para) ou antisymétrique (ortho). Le schéma des niveaux de l'hélium et ions à deux électrons contient des niveaux triplets (ortho-hélium) et des niveaux singulets (para-hélium).

II.3.2 Méthodes d'approximation

L'équation différentielle (II.26) pour un système à deux électrons n'est pas séparable. Contrairement au cas de l'atome d'hydrogène, les solutions de cette équation pour les

fonctions d'onde et les énergies ne peuvent pas être exprimées sous une forme analytique. Pour résoudre ce problème, il est nécessaire d'utiliser des méthodes d'approximation.

II.3.2.a Méthode de variation de Ritz

On considère l'équation :

$$H\psi = E\psi \quad (\text{II.27})$$

où l'Hamiltonien H est un opérateur différentiel qui n'intervenant pas explicitement l'énergie E . Soit U une fonction arbitraire et considérant l'expression :

$$E[U] = \frac{\int d\tau U^* H U}{\int d\tau U^* U} \quad (\text{II.28})$$

Toute fonction U pour la quelle $E[U]$ possède une valeur stationnaire est une solution de l'équation (II.27).

La méthode de variation de Ritz débute par le choix d'une forme analytique appropriée pour U incluant des paramètres arbitraires et procède à la minimisation du fonctionnel $E[U]$ pour la détermination de U . Cependant cette méthode ne donne pas une bonne estimation pour les hautes valeurs propres.

II.3.2.b Théorie de perturbation

Pour l'application de la méthode de perturbation, on écrit l'Hamiltonien H dans l'équation (II.27) sous la forme :

$$\begin{aligned} H &= H_0 + \lambda H_1 \\ H &= -\frac{1}{2}(\Delta_1 + \Delta_2) + V_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \\ \lambda H_1 &= -\frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} - V_0 \end{aligned} \quad (\text{II.29})$$

II.3.3 Approximations utilisées

Plusieurs méthodes d'approximation sont utilisées pour résoudre l'équation de Schrödinger (II.27) pour l'hélium et les ions héliumoïdes. Les méthodes d'approximation sont basées sur le fait que les nombres quantiques n et l et la charge Z sont grands ou petits. Aussi bien les valeurs propres exactes ou les fonctions d'onde relativement simples sont importants et ainsi de suite.

La plupart des méthodes d'approximation sont basées sur la théorie de perturbation. Plus spécialement l'Hamiltonien d'ordre zéro H_0 est choisi sous la forme :

$$\begin{aligned}
 H_0 &= -\frac{1}{2}(\Delta_1 + \Delta_2) + V_1(r_1) + V_2(r_2) \\
 W &\equiv \lambda H_1 = -\left(\frac{Z}{r_1} + V_1(r_1)\right) - \left(\frac{Z}{r_2} + V_2(r_2)\right) + \frac{1}{r_{12}}
 \end{aligned}
 \tag{II.35}$$

L'avantage de ce choix est que l'équation d'onde d'ordre zéro est séparable.

II.3.3.a Développement en puissance de $1/Z$ (Z- Expansion)

La méthode de développement en $1/Z$ (Z-expansion) [13-14] utilise les bases des fonctions d'onde des hydrogénoïdes avec la charge nucléaire Z . Les interactions électrostatiques et les effets relativistes sont traitées comme perturbation. L'utilisation de la théorie de perturbation dans les bases des hydrogénoïdes est équivalente au développement en $1/Z$ des matrices des énergies et autres opérateurs.

Le choix le plus simple des potentiels V_1 et V_2 est obtenu en négligeant complètement l'interaction $1/r_{12}$ entre électrons dans H_0 ,

$$V_1(r) = V_2(r) = -\frac{Z}{r}, \quad W = \frac{1}{r_{12}}
 \tag{II.36}$$

Les fonctions d'onde d'ordre zéro sont, simplement, les produits des fonctions d'ondes des hydrogénoïdes pour la charge Z et l'énergie d'ordre zéro est :

$$E = -\frac{Z^2}{2} - \frac{Z^2}{2n^2} \quad (\text{II.37})$$

En principe on peut appliquer la théorie de perturbation conventionnelle pour n'importe quelle ordre avec $1/r_{12}$ comme Hamiltonien de perturbation. Cette méthode donne des excellents résultats pour les états fondamentaux [15] pour les ions à deux électrons de grande valeur de Z . Cependant elle n'est pas adaptée pour les faibles valeurs de Z , comme l'He.

II.3.3.b Méthode de Hartree

Dans la méthode de Hartree [16] l'énergie potentielle du premier électron est prise comme le champ Coulombien du noyau plus le potentiel de la distribution de charge du second électron:

$$V_1(r_1) = -\frac{Z_1}{r_1} + \int d\tau_2 \psi_2^2(2) \cdot \frac{1}{r_{12}} \quad (\text{II.38})$$

L'énergie potentielle exacte est ainsi moyennée sur toutes les positions possibles du second électron. L'énergie potentielle $V_2(r_2)$ du second électron est obtenue de la même façon.

La fonction d'onde ψ de l'atome donnée est écrite sous la forme d'un produit des fonctions d'onde de particules simples pour chaque électron : $\psi_1(1)\psi_2(2)$. Ainsi la méthode de Hartree donne les mêmes fonctions d'onde et énergies pour les états ortho et para (effets d'échange sont négligés). Deux équations seront ainsi obtenues pour ψ_1 et ψ_2 à partir du principe variationnel de Schrödinger. Plusieurs états (incluant les états doublement excités) sont étudiés par plusieurs auteurs par la méthode de Hartree [17].

II.3.3.c Méthode de Fock

La méthode de Fock [18] est similaire à celui de Hartree mais elle utilise des fonctions d'ondes totalement symétrisées :

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(1)\psi_2(2) \pm \psi_2(1)\psi_1(2)] \quad (\text{II.39})$$

La méthode de Fock prend en compte les effets d'échange mais le calcul numérique est considérablement lent par rapport à Hartree.

II.3.3.d Méthode de Hartree-Fock (HF)

Parmi les méthodes utilisées pour résoudre le problème des énergies et fonctions d'onde est la méthode de Hartree-Fock [19]. L'énergie et la fonction d'onde du système sont données par la résolution d'un système des équations différentielles et intégrales dans un champ auto-consistant. Pour chaque état $n_i l_i$, ces équations sont :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l_i(l_i+1)}{r^2} + \frac{Z}{r} - \sum_j V_{ij}(r) + \varepsilon_i \right] P_i(r) = \sum_j [V'_{ij}(r) - \varepsilon_{ij} \delta_{l_i, l_j}] P_j(r) \quad (\text{II.40})$$

V et V' sont respectivement le potentiel direct et le potentiel d'échange :

$$\begin{aligned} V_{ij}(r) &= \sum_{\kappa} \alpha_{ij}^{\kappa} \int_0^{\infty} P_j(r_1) P_i(r_1) \frac{r_1^{\kappa}}{r_{>}^{\kappa+1}} dr_1 \\ V'_{ij}(r) &= \sum_{\kappa''} \alpha_{ij}^{\kappa''} \int_0^{\infty} P_j(r_1) P_i(r_1) \frac{r_1^{\kappa''}}{r_{>}^{\kappa''+1}} dr_1 \end{aligned} \quad (\text{II.41})$$

Le système (II.40) est obtenu par le principe variationnel sur l'expression de l'énergie totale $\langle \Psi | H | \Psi \rangle$ du système atomique considéré. Les coefficients α et β sont les mêmes que ceux utilisés par Sobelman [20-21].

Les paramètres ε_{ij} sont obtenus par les conditions d'orthogonalité sur les fonctions d'onde P_i et P_j pour $l_i=l_j$ et $n_i \neq n_j$. Les équations (II.40) sont résolues numériquement par une méthode d'itération et l'énergie non relativiste totale est calculée pour tous les termes LS dans le couplage LS.

L'étape suivante est le calcul des corrections relativistes à l'énergie utilisant la théorie de perturbation et l'opérateur de Breit total ou réduit. La méthode HF, basée sur le principe variationnel, donne les bonnes fonctions d'onde construites par le couplage des moments de fonctions d'onde pour un électron pour une configuration donnée, i.e. pour un jeu de $n_i l_i$ donné, $i=1,2,\dots,N$, où N est le nombre total des électrons.

La méthode HF utilise des potentiels auto-consistents moyennés, mais elle ne prend pas en compte l'interaction électronique exacte. La différence entre eux est décrite par les effets de corrélation. Pour prendre en compte ces effets dans la base de la méthode HF, il est plus commode d'utiliser l'approximation de configuration d'interaction (CI) dans laquelle les fonctions d'onde sont représentées par une somme des différentes configurations :

$$\Psi_a = \sum_b C_{ab} \phi_b \quad (\text{II.42})$$

les coefficients C_{ab} sont obtenus par le principe variationnel ou la théorie de perturbation.

L'énergie atomique est donnée par :

$$E_a = \sum_{bb'} C_{ab} \langle \phi_b | H | \phi_{b'} \rangle C_{b'a} \quad (\text{II.43})$$

Mais malheureusement la somme sur b ne converge pas bien. Ce défaut peut être compensé par l'utilisation des plusieurs fonctions de correction.

La méthode la plus effective est celle de l'approche de multi-configurations HF (MCHF) où un système des équations est obtenu par la variation de l'éq. (II.43) sur ϕ_b et C_{ab} .

II.3.3.e. Autres méthodes et approximations

Dans la littérature on rencontre souvent plusieurs approximations et méthodes pour la génération des données atomiques. Parmi eux on peut citer l'approximation de couplage fermé (Close –coupling, CC) et la méthode de matrice R .

L'approximation CC de la théorie de collision électron -atome [22-23] est utilisée, entre autre, pour le calcul des fonctions d'onde pour les états de (N+1) électrons. Dans cette méthode les fonctions orbitales optimisées des N électrons sont obtenues en résolvant un système des équations différentielles et intégrales couplées [24-25]. Les solutions numériques sont obtenues en utilisant la méthode de matrice R (R-matrix) [23-24-25]. En effet cette méthode possède plusieurs avantages [24].

II.3.4 Théorie relativiste

L'équation de Breit [26-27] est donnée par :

$$\left(E - H_{(1)} - H_{(2)} - \frac{e^2}{r_{12}} \right) \psi = - \frac{e^2}{2r_{12}} \left(\boldsymbol{\alpha}_1 \cdot \boldsymbol{\alpha}_2 + \frac{(\boldsymbol{\alpha}_1 \cdot \mathbf{r}_{12})(\boldsymbol{\alpha}_2 \cdot \mathbf{r}_{12})}{r_{12}^2} \right) \psi \quad (\text{II.44})$$

où :

$$H_{(1,2)} = -e\phi(\mathbf{r}_{1,2}) + \beta_{1,2} mc^2 + \boldsymbol{\alpha}_{1,2} \cdot (\mathbf{c}\mathbf{p}_{1,2} + e\mathbf{A}(\mathbf{r}_{1,2})) \quad (\text{II.45})$$

et :

$$B = - \frac{e^2}{2r_{12}} \left(\boldsymbol{\alpha}_1 \cdot \boldsymbol{\alpha}_2 + \frac{(\boldsymbol{\alpha}_1 \cdot \mathbf{r}_{12})(\boldsymbol{\alpha}_2 \cdot \mathbf{r}_{12})}{r_{12}^2} \right) \quad (\text{II.46})$$

est l'opérateur de Breit.

Dans la théorie d'un électron (single-electron theory) et dans un potentiel extérieur faible, l'équation de Breit (II.44) donne le terme de corrections relativistes à l'interaction entre les deux électrons. Ceci est vrai si l'opérateur de Breit est traité par la théorie de

perturbation de premier ordre. Le terme de correction est de l'ordre de $\alpha(Z\alpha)(Z^2Ry)$. Cependant les corrections d'ordre supérieur sont traitées par la théorie de perturbation d'ordre supérieur pour l'interaction de l'électron avec un champ de radiation virtuel. Ce calcul commence à partir de l'éq. (II.44) dont on annule la partie droite.

Dans la théorie de paire (Pair theory) plusieurs méthodes basées sur l'équation de Breit sont utilisées et généralisées [28] pour le cas de deux électrons interagissant avec un champ Coulombien du noyau.

Une autre approche utilisée pour le calcul des corrections relativistes, il s'agit de l'approximation de Pauli pour les faibles Z [2].

II.4 Calcul numérique et codes de calcul

Plusieurs problèmes liés à l'étude des plasmas de laboratoire, d'astrophysique et de fusion thermonucléaire contrôlée nécessitent la connaissance au préalable de la structure atomique comme les énergies et longueurs d'onde des différents niveaux et les sections efficaces et les coefficients de taux des processus élémentaires dans les plasmas. Cependant, le calcul direct des ces données devient impossible pour les atomes à plusieurs électrons et aussi pour les grands nombres quantiques. Dans ce cas on fait recours aux programmes et codes de calcul basés sur des théories citées auparavant.

Malgré le nombre important des codes existant pour le traitement des données atomiques, ils sont tous en compétition pour donner des résultats proches de l'expérimental.

Pour les probabilités de transition (sections efficaces et coefficients des taux) une précision de l'ordre de 10% est acceptable, alors que pour les longueurs d'onde (énergies) une précision meilleure que $\Delta\lambda/\lambda = 10^{-4}$ est sollicitée spécialement pour le diagnostic en rayons X des plasmas denses [19].

Parmi les codes existants, nous avons choisi de travailler avec les trois codes ATOM, MZ [19] et plus spécialement FAC [29].

II.4.1 Code ATOM

Le programme ATOM [19] est utilisé pour le calcul des fonctions radiales et les caractéristiques collisionnelles et radiatives des atomes neutres et les ions positifs : les forces d'oscillateur, probabilités de transition, taux d'autoionisation, sections efficaces pour la photo recombinaison, excitation, ionisation par électron d'impact etc, i.e., les caractéristiques des interactions des photons avec les électrons.

Plusieurs approches sont utilisées dans ATOM, Coulomb-Born avec échange, méthode de matrice K, représentations des ondes partielles et autres.

Le code ATOM est utilisé pour le calcul des fonctions d'onde radiales et les caractéristiques collisionnelles et radiatives des atomes et des ions de charge $Z \leq 99$ avec un nombre quantique principal $n \leq 9$. Le code ATOM se base sur la méthode d'approximation d'un électron semi-empirique pour les fonctions d'onde radiales utilisant des valeurs expérimentales pour l'énergie de l'électron optique comme paramètre d'entrée. Le calcul des caractéristiques collisionnelles et radiatives des atomes et des ions sont obtenues par ATOM pour chaque transition arbitraire mais avec un nombre quantique principal n_1 du niveau haut limité : $n_1 \leq n_0 + 6$, où n_0 est le niveau fondamental.

II.4.2 Code MZ

Le code MZ (Méthode de développement en Z, Z-expansion) [19] est développé pour le calcul des énergies atomiques, probabilités de transitions, d'autoionisation, transitions radiatives et les intensités relatives de raies doublement excités (satellites). Le code utilise la théorie de perturbation avec des fonctions de base des hydrogénoïdes.

La méthode de développement en $1/Z$ est réalisée sur trois étapes :

- Calcul des coefficients en développement de $1/Z$ en utilisant les fonctions de Coulomb,
- Calcul des caractéristiques atomiques en utilisant ces coefficients,

- Calcul des corrections relativistes d'ordre supérieur et les corrections radiatives et les corrections empiriques possibles.

La méthode est bien adaptée pour les ions multichargés avec un nombre des électrons $N \ll Z$.

II.4.3 Code FAC

Le code FAC (Flexible Atomic Code) [29] est utilisé par la suite pour le calcul de structure atomique et les caractéristiques collisionnelles et radiatives de l'hélium neutre et les ions héliumoïdes. Les théories détaillées de chaque partie seront exposées ultérieurement.

Le code FAC permet aussi le calcul pour un grand nombre quantique n des niveaux d'énergie, les transitions radiatives, l'excitation collisionnelle et l'ionisation par l'impact électronique, la photoionisation, l'autoionisation, la recombinaison radiative et la capture diélectronique.

Le calcul de structure atomique dans FAC est basé sur l'interaction de configuration relativiste avec les fonctions d'onde des particules indépendantes. Ces bases des fonctions d'onde sont obtenues à partir d'un potentiel central local qui est déterminé d'une façon auto régulière (self-consistently determined). Ce dernier représente l'écran électronique du potentiel nucléaire. Les effets relativistes sont inclus par l'utilisation de l'Hamiltonien de Dirac-Coulomb. Les effets QED d'ordre supérieur sont aussi inclus avec l'interaction de Breit dans la limite de l'énergie zéro pour le photon d'échange, les approximations hydrogénoïdes pour l'auto-énergie et les effets de polarisation du vide. Les processus du continuum sont traités dans l'approximation des ondes déformées (Distored Wave, DW).

La figure II.1 montre la structure du programme FAC pour le calcul de structure atomique.

Dans l'annexe A Nous présentons des exemples utilisés des fichiers d'entrée (input) en langage python pour le calcul de structure atomique de l'hélium neutre. Les fichiers de sortie des niveaux d'énergie et les transitions correspondantes seront aussi exposés.

II.4.4 Code HFR modifié

Le code HFR modifié [4,30] utilise les fonctions d'onde simplement excitées $1snl$ jusqu'aux nombres quantiques principaux $n=30$. L'interaction de configuration avec une précision numérique améliorée des coefficients de mélange et des états des hauts moments angulaires est aussi employée.

II.5 Problèmes d'intérêt

Le calcul de structure atomique est un problème qui date depuis longtemps. Cependant plusieurs aspects sont à l'heure actuelle le sujet des plusieurs études. Parmi eux on peut citer le problème des états hautement excités (ou doublement excités) et l'aspect des interactions de configurations dans le calcul des données atomiques des atomes et des ions.

II.5.1 Les niveaux hautement excités

Le développement actuel des plasmas de laboratoire, plasma astrophysique et plasma par confinement magnétique sollicite entre autre une maîtrise et une connaissance des données atomiques sur les atomes et ions. Ces données doivent couvrir plus des états bas, les états aussi hautement ionisés (n et l grands). En effet ces états sont très peu étudiés ou ils présentent des anomalies dans la convergence de ces données.

Les états et molécules ayant ces énergies avec un des hauts nombres quantiques n et l ($l > 5$) ont un poids statistique dominant pour les plasma ionisés [31]. Les émissions pour les états des haut n et l ont été observés en radioastronomie [32]. En contraste ces états sont très peu étudiés. En conséquence, plusieurs études théoriques et expérimentales ont été lancées sur ces états [33-37].

II.5.2 Interactions de configurations

La théorie de calcul de structure atomique est basée entre autre sur le développement de la fonction d'onde ψ^k d'un état k sur la base des fonctions ψ_b :

$$\psi^k = \sum_b y_b^k \psi_b \quad (\text{II.47})$$

La somme peut contenir que les fonctions de base d'une seule configuration (single configuration). Pour utiliser des fonctions ψ^k plus exactes, la somme doit inclure des fonctions de base pour plus d'une configuration.

La théorie des interactions de configurations, prévoit pour le calcul des énergies et les quantités correspondantes des matrices contenant des blocs diagonaux et non-diagonaux. Ceci provient, bien évidemment, des connections entre différentes configurations. Dans ce cas la fonction bra est une fonction de base pour une seule configuration alors que la fonction ket est une fonction de base à partir des différentes configurations.

Ces interactions ont une importance accrue dans les données atomique et les spectres associés. En effet deux configurations particulières peuvent avoir une forte interaction électrostatique. Cette dernière peut changer l'ordre de grandeur donné par la théorie ordinaire de premier ordre. L'exemple est l'interaction des configurations sd et p^2 dans le Mg I [3]. Ufford [38] a montré que les interactions de configurations peuvent modifier les intervalles entre niveaux $nd^2n's$, nd^3 , $ndn's^2$ et $nd^2n's$ pour le Ti II et Zr II . D'une autre part, les irrégularités observées sur les séries de Rydberg-Ritz ont été expliquées par les interactions de configurations [39-40]. Il est à noter que le processus d'autoionisation est extrêmement influencé par les interactions de configurations [3]. Les intensités des alcalins présentent, aussi, des anomalies dues à l'interaction spin-orbite entre configurations.

Récemment, plusieurs calcul et modèles incluent les interactions de configurations et discutent leur effets sur les données atomiques et ces importances pour l'obtention des données atomiques plus exactes [41-43].

II.6 Conclusion

Nous avons exposé dans ce chapitre les différentes méthodes utilisées pur le calcul des niveaux d'énergie et fonctions d'ondes des systèmes à un et à deux électrons. Les termes de corrections et les cas relativistes sont aussi discutés. Les méthodes de calcul numérique et les codes de calcul utilisés sont, également, présentés.

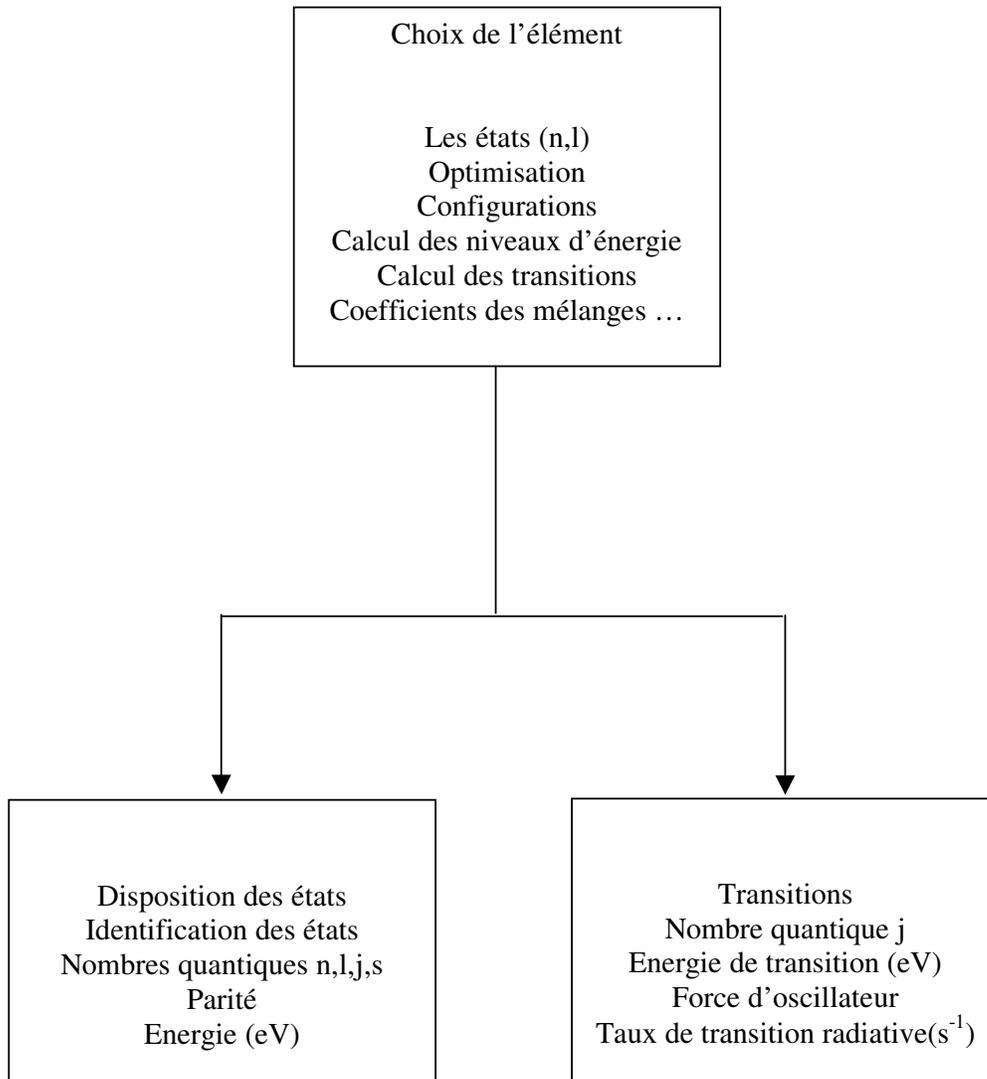


Fig. II. 1 Structure du programme FAC (Structure atomique)

Références

- [1] M. Weissbluth, *Atoms and Molecules*, Academic Press, NY, 1978.
- [2] H. A. Bethe and E. E. Salpeter, *Quantum Mechanics of one-and Two-Electron Systems*, Springer-Verlag, Berlin, 1957.
- [3] E.V. Condon and G. H. Shortley, *The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge University Press, Cambridge, reprinted in 1970.
- [4] R. D. Cowan, *the Theory of Atomic Structure and Spectra*, University of California Press, USA, 1981.
- [5] C. C. Tannoudji, B. Diu and F. Laloë, *Mécanique Quantique*, T1, ed. Hermann, Paris, 1973.
- [6] C. C. Tannoudji, B. Diu and F. Laloë, *Mécanique Quantique*, T2, ed. Hermann, Paris, 1973.
- [7] R. C. Williams *Phys. Rev.*, **54** (1938) 558.
- [8] S. Pasternack, *Phys. Rev.*, **54** (1938) 1138.
- [9] W. E. Lamb et R. C. Retherford, *Phys. Rev.*, **72** (1947) 241.
- [10] R.W. Huff, *Phys.Rev.* **186** (1969) 1367.
- [11] W. Greiner and J. Reinhardt, *Quantum Electrodynamics*, Springer, 2002.
- [12] P. Pyykkö et al., *Phys. Rev. A* **63** (2001) 024502.
- [13] L. A. Vainshtein and U. I. Safronova, *Phys. Scr.* **31** (1985) 519.
- [14] U. I. Safronova and J. Nilsen, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, **51**(1994) 853.
- [15] E. Hylleraas, *Z. Physik*, **65** (1930) 209.
- [16] D. R. Hartree, *Proc. Cambridge Phil. Soc.*, **26** (1928) 89.
- [17] W. S. Wilson and R. B. Lindsay, *Phys. Rev.*, **47** (1935) 681.
- [18] V. Fock, *Z. Physik*, **61** (1930) 126.
- [19] V. P. Shevelko and L. A. Vainshtein, *Atomic Physics for Hot Plasma*, IOP Publishing, UK, 1993.
- [20] I. I. Sobelman, *Atomic Spectra and Radiative Transitions* 2nd ed., Springer, Berlin, 1992.
- [21] Ch. Froese-Fischer, *the Hartree-Fock Method for Atoms*, Wiley, NY, 1977.
- [22] P. G. Burke, and M. J. Seaton, *Meth. Comp. Phys.*, **10** (1971)1.
- [23] K. A. Berrington et al., *J. Phys. B, At. Mol. Phys.*, **20** (1987) 6379.
- [24] M. J. Seaton *J. Phys. B, At. Mol. Phys.*, **18** (1985) 2111.
- [25] H. E. Saraph, P. J. Storey and K. T. Taylor, *J. Phys. B, At. Mol. Phys.*, **25** (1992) 4409.
- [26] G. Breit, *Phys. Rev.*, **34**, 553 (1929) 36.
- [27] G. Breit, *Phys. Rev.*, **39** (1932) 616.
- [28] G. Wentzel, *Phys. Rev.*, **89** (1952) 684.
- [29] M. F. Gu, FAC 1.0.7, <http://kipac-tree.stanford.edu/fac/>
- [30] F. B. Rosmej, R. Stamm, S. Fritzsche, T. Yamamoto, T. Kato et al., *Proceedings of the 4th International Conference on Atomic and Molecular Data and Their Applications*, Ceratopia Toki, Toki, Gifu, Japan, AIP **771** (2004) 42, invited talk.
- [30] U. Fano, *J. Phys. B, At. Mol. Phys.*, **7** (1974) 1401.
- [31] A. K. Dupree and L. Goldberg, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.*, **8** (1970) 231.
- [32] R-H. Tian, *Chi. Phys. Lett.*, **20** (2003) 493.
- [33] R. Shakeshaft, *J. Phys. B, At. Mol. Phys.*, **12** (1979) L139.

- [34] C. Fabre et al. Opt. Comm., **13** (1975) 393.
- [35] A. I. Ferguson and M. H. Dunn , Opt. Comm., **23** (1977) 227.
- [36] D. H. Tuan et al. Opt. Comm., **18** (1976) 533.
- [37] C. W. Ufford, Phys. Rev., **44** (1933) 732.
- [38] A. G. Shenstone and H. N. Russell, Phys. Rev., **39**(1932) 415.
- [39] R. M. Langer, Phys. Rev., **35** (1930) 649.
- [40] T. W. Gorzyca et al. Astrophys. J., **638** (2006) L121.
- [41] A. Toner et A. Hibbert, Mont. Not. R. Ast. Soc., **364** (2005) 683.
- [42] R. Rivelino and J. D. M. Vianna, J. Phys. B. At. Mol., **34** (2001) L645.

Chapitre III

Processus atomiques élémentaires dans les plasmas

III.1 Introduction

L'interprétation des spectres d'émission dans les plasmas nécessite un calcul au préalable des populations totales des différents états des ions et des différents espèces, ainsi que les populations des différents niveaux. Ce calcul lui-même utilise les différents coefficients de taux et sections efficaces de processus élémentaires dans les plasmas. En effet ces données sont indispensables pour un modèle collisionnel radiatif utilisant la cinétique des populations pour des fins de diagnostics.

Le coefficient du taux $\langle \sigma v \rangle$ est donné à partir de la section efficace $\sigma(v)$ sur une distribution Maxwellienne par :

$$\langle \sigma v \rangle = \int v \sigma(v) f(v) d^3v \quad (\text{cm}^3 \text{s}^{-1}) \quad (\text{III.1})$$

où v est la vitesse des particules en collision et $f(v)$ est la fonction de distribution de vitesse.

Dans le cas d'une distribution Maxwellienne isotrope :

$$\begin{aligned}
\langle \sigma v \rangle &= \int_{v_{\min}}^{\infty} v \sigma(v) f(v) dv \\
&= \int_{\Delta E}^{\infty} v \sigma(\epsilon) F(\epsilon) d\epsilon \\
&= k \int_{\Delta E}^{\infty} \frac{\sigma}{\pi a_0^2} e^{-\epsilon/T} \frac{\epsilon d\epsilon}{Ry^{1/2} T^{1/2}}
\end{aligned} \tag{III.2}$$

où : $k = 2\sqrt{\pi} a_0^2 c / 137 = 2.17 \cdot 10^{-8} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$, $\epsilon = \mu v^2 / 2$, $v_{\min} = (2\Delta E / \mu)^{1/2}$, μ la masse réduite et ΔE est l'énergie 'Threshold' pour le processus donné.

Les principaux processus atomiques élémentaires mentionnés auparavant au chapitre I vont être décrit brièvement dans ce chapitre. Nous présentons les formes des sections efficaces et /ou les coefficients de taux. Nous donnons plus des détails sur les taux traités aux applications faites au cours de cette thèse.

III.2 Transitions radiatives

Nous traitons dans cette section un paramètre atomique lié à un processus élémentaire dans les plasmas qui concerne l'émission spontanée et le phénomène inverse qui est la photo excitation. Ce processus est gouverné par le taux de probabilité de transition radiative représenté par :

$$(Z, N)^* \Leftrightarrow (Z, N) + h\nu \tag{III.3}$$

où (Z, N) représente un ion de charge Z possédant N électrons. L'étoile indique l'état d'excitation de l'ion.

Les probabilités de transition radiative sont, généralement, indispensables dans le calcul d'émission de raies. L'évaluation des probabilités de transition et les forces d'oscillateur correspondantes est associée au calcul atomique des niveaux d'énergie. Ces problèmes brièvement discutés au cours de la thèse sont abordés dans plusieurs références spécialisées [1-3]. Pour les ions hautement ionisés les effets relativistes doivent être inclus.

III.2.1 Probabilité de transition radiative d'Einstein (Taux de transition radiative)

Un atome dans un état excité j d'énergie E_j peut, généralement, avoir une transition radiative spontanée à un état i d'énergie plus bas E_i avec émission d'un photon d'énergie (voir Fig. III.1) :

$$h\nu_{ji} = E_j - E_i \quad (\text{III.4})$$

correspondant à une raie spectrale de nombre d'onde

$$\sigma_{ji} = \frac{1}{\lambda_{ji}} = \frac{E_j - E_i}{hc} \quad (\text{III.5})$$

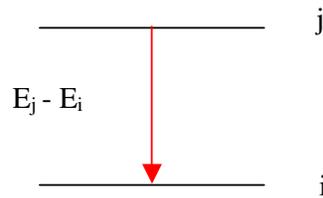


Fig. III.1 Description d'une transition radiative entre deux niveaux

Le taux de probabilité de transition d'émission spontanée d'Einstein est la probabilité totale par unité de temps qu'un atome dans un état j peut exécuter une transition radiative aux g_i états du niveau d'énergie i :

$$A_{ji} = \sum_{M_i} a_{ji} \quad (\text{III.6})$$

tels que M_i est le nombre quantique magnétique et g_i est le poids statistique du niveau i ($g_i=2J_i+1$). Généralement on utilise le taux de transition radiative en poids statistique :

$$g_i A_{ji} = g_i \sum_{M_i} a_{ji} = \sum_{M_j} \sum_{M_i} a_{ji} \quad (\text{III.7})$$

La durée de vie d'un atome dans un état de niveau j est :

$$\tau_j = \left(\sum_i A_{ji} \right)^{-1} \quad (\text{III.8})$$

Les transitions peuvent, aussi, avoir lieu en présence d'un champ de radiation. Ceci induit une transition, on parle alors d'une émission stimulée et une absorption correspondante. Dans ce qui suit on s'intéresse seulement à l'émission spontanée.

Le calcul de gA implique un développement des multipôles pour avoir la contribution de gA à partir de l'interaction entre le champ électromagnétique et les moments multipôles électriques ou magnétiques de l'atome. Les différentes contributions sont dipolaires, quadripolaires, ... (E1, E2, ... M1, M2, ...) électriques ou magnétiques. Nous intéressons par la suite qu'aux transitions dipolaires électriques. En effet les autres transitions sont faibles par rapport aux transitions dipolaires électriques et ne jouent pas un rôle significatif sur la recombinaison diélectronique.

La probabilité de transition d'une émission spontanée par unité de temps à partir d'un état excité $\gamma' J' M'$ à un état $\gamma J M$ d'énergie plus bas [2] est :

$$\begin{aligned} a &= \frac{64\pi^4 e^2 v^3}{3c^3 h} \left| \langle \psi_0 | r | \psi_0' \rangle \right|^2 \\ &= \frac{64\pi^4 e^2 a_0^2 \sigma^3}{3h} \sum_q \left| \langle \gamma J M | P_q^{(1)} | \gamma' J' M' \rangle \right|^2 \end{aligned} \quad (\text{III.9})$$

où :

$$P_q^{(1)} \equiv \sum_{i=1}^N r_q^{(1)}(i) = \sum_{i=1}^N r_i C_q^{(1)}(i) \quad (\text{III.10})$$

est la $q^{\text{ème}}$ composante du moment dipolaire d'un atome mesurée en unité de ea_0 (a_0 est le rayon de Bohr).

Les transitions radiatives dans l'approximation dipolaire électrique peuvent avoir lieu sauf si les éléments de matrice dans l'équation (III.9) sont non nuls. Plusieurs lois de sélection viennent de l'application du théorème de Wigner-Eckart. Les éléments de matrices sont donnés en fonction du symbole 3j par :

$$\langle \gamma J M | P_q^{(1)} | \gamma' J' M' \rangle = (-1)^{J-M} \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix} \langle \gamma J || P^{(1)} || \gamma' J' \rangle \quad (\text{III.11})$$

III.2.2 Force de raie dipolaire

Une quantité qui mesure l'intensité de raie est la force de raie définie comme [4] :

$$S = \left| \langle \gamma J || P^{(1)} || \gamma' J' \rangle \right|^2 \quad (\text{III.12})$$

La substitution de la relation (III.12) dans (III.9) donne une relation qui lie la probabilité de transition a par la force de raie S :

$$a = \frac{64\pi^4 e^2 a_0^2 \sigma^3}{3h} S \sum_q \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix}^2 \quad (\text{III.13})$$

Ainsi la probabilité totale de transition radiative A entre $\gamma' J' M'$ et tous les états M de γJ est reliée à la force de raie par :

$$A = \frac{64\pi^4 e^2 a_0^2 \sigma^3}{3h(2J'+1)} S \quad (\text{III.14})$$

et la probabilité de transition radiative en poids statistique est :

$$gA = \frac{64\pi^4 e^2 a_0^2 \sigma^3}{3h} S = 2.0261 \cdot 10^{-6} \sigma^3 S \quad (\text{s}^{-1}) \quad (\text{III.15})$$

où σ est en cm^{-1} et S en unité de $e^2 a_0^2$.

L'intensité d'une raie est proportionnelle à S :

$$I \propto \sigma^4 S \quad (\text{III.16})$$

III.2.3 Force d'oscillateur

Une autre quantité qui mesure la force de raie d'un spectre est la force d'oscillateur. Pour une absorption elle prend la forme :

$$f_{ij} = \frac{8\pi^2 m c a_0^2 \sigma}{3h(2J+1)} S = \frac{E_j - E_i}{3(2J+1)} S \quad (\text{III.17})$$

où les énergies sont en unité de Rydberg.

Pour l'émission, la force d'oscillateur est :

$$f_{ji} = -\frac{8\pi^2 m c a_0^2 \sigma}{3h(2J'+1)} S = \frac{E_j - E_i}{3(2J'+1)} S \quad (\text{III.18})$$

f_{ji} se réfère à la probabilité d'émission à partir d'un état spécifique du niveau haut j à tous les $(2J+1)$ états du niveau bas.

La force d'oscillateur en poids statistique gf est :

$$\begin{aligned} gf &= (2J+1)f_{ij} = -(2J'+1)f_{ji} \\ &= 3.0376 \cdot 10^{-6} \sigma S \end{aligned} \quad (\text{III.19})$$

Alors que gA peut s'écrire en fonction de gf :

$$\begin{aligned} gA &= \frac{8\pi^2 e^2 \sigma^2}{mc} gf \\ &= 0.66702 \sigma^2 gf \quad (\text{s}^{-1}) \end{aligned} \quad (\text{III.20})$$

g est le poids statistique du niveau initial.

III.2.4 Calcul de la force de raie

Plusieurs méthodes ont été développées pour le calcul théorique des probabilités de transition et des forces d'oscillateur [5-6]. Ces méthodes sont partiellement ou complètement empiriques. Lorsque les données expérimentales des niveaux d'énergie sont absentes, seuls les méthodes théoriques « ab initio » seront utilisées. Pour le calcul de gA ou gf , il est indispensable de calculer au préalable la force de raie S dans l'équation (III.12) ou bien sa racine :

$$S_{\gamma\gamma'}^{1/2} = \langle \gamma J \| \mathbf{P}^{(1)} \| \gamma' J' \rangle \quad (\text{III.21})$$

comme l'opérateur dipolaire électrique $\mathbf{P}^{(1)}$ n'inclus pas les coordonnées de spin, le calcul des éléments de matrice est plus simple dans les bases de couplage LS [2]. Soit :

$$\begin{aligned} D_{LS} &= \langle \dots LSJ \| \mathbf{P}^{(1)} \| \dots L' S' J' \rangle \\ &= \delta_{SS'} D_{\text{Line}} \langle \dots LS \| \mathbf{P}^{(1)} \| \dots L' S' \rangle \end{aligned} \quad (\text{III.22})$$

où le facteur de raie D_{Line} est :

$$D_{\text{line}} = (-1)^{L+S+J'+1} [J, J']^{1/2} \begin{Bmatrix} L & S & J \\ J' & 1 & L' \end{Bmatrix} \quad (\text{III.23})$$

où :

$$[J, J'] = (2J+1)(2J'+1) \quad (\text{III.24})$$

III.2.5 Configuration d'un seul électron

La racine de la force de raie est donnée pour les atomes et ions hydrogénoïdes par [2] :

$$\begin{aligned} S^{1/2} &\equiv D_{LS} = \langle nlsj \| \mathbf{r}^{(1)} \| n'l's'j' \rangle \\ &= (-1)^{l+j'+3/2} [j, j']^{1/2} \begin{Bmatrix} l & s & j \\ j' & 1 & l' \end{Bmatrix} \langle nl \| \mathbf{r}^{(1)} \| n'l' \rangle \end{aligned} \quad (\text{III.25})$$

L'élément de matrice réduit $\langle n'l \| \mathbf{r}^{(1)} \| n'l' \rangle$ peut être calculé par :

$$P_{n'l, n'l'}^{(1)} \equiv \langle n'l \| \mathbf{r}^{(1)} \| n'l' \rangle = (-1)^l [l, l']^{1/2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \int_0^\infty P_{n'l}(r) r P_{n'l'}(r) dr \quad (\text{III.26})$$

qui se simplifie en donnant :

$$P_{n'l}^{(1)} \equiv \langle n'l \| \mathbf{r}^{(1)} \| n'l' \rangle = \delta_{l', l \pm 1} (-1)^{l+l'} \int_0^\infty P_{n'l}(r) r P_{n'l'}(r) dr \quad (\text{III.27})$$

$l_>$ est la valeur la plus grande entre l et l' .

Des valeurs tabulées des intégrales radiales pour l'hydrogène peuvent être trouvées dans les références [7-8]. Pour les ions hydrogénoïdes de charge Z , il suffit de diviser les termes par Z . Pour les ions non hydrogénoïdes où les énergies sont connues les intégrales radiales peuvent être obtenues par l'approximation de Coulomb [9-10] ou bien la méthode de Thomas-Fermi [11]. Dans le cas échéant les valeurs seront calculées à partir des fonctions de Hartree-Fock ou autres.

III.2.6 Lois d'échelle

Le calcul numérique montre que pour les grands valeurs du nombre quantique n_j , les éléments de matrice réduit peuvent suivre une loi d'échelle comme suit [2] :

$$\langle n_i l_i \| \mathbf{r}^{(1)} \| n_j l_j \rangle^2 \propto (n_j)^{-3} \quad (\text{III.28})$$

Pour les forces d'oscillateur :

$$f_1(n_i l_i \gamma J - n_j l_j \gamma' J') \propto (n_j)^{-3} \quad (\text{III.29})$$

Ce résultat devient raisonnablement exacte sauf pour les grands valeurs du nombre quantique n_j [2]. Pour les ions hydrogénoïdes les forces d'oscillateur suivent [2]:

$$\bar{f}(n_i - n_j) \approx \frac{1.96}{n_i^5 n_j^3} \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_j^2} \right)^{-3} \quad (\text{III.30})$$

III.3 Recombinaison diélectronique

III.3.1 Introduction

La recombinaison diélectronique (RD) est un processus de collision electron-ion très important en astrophysique et dans les plasmas de fusion [12]. Elle gouverne, aussi fortement l'équilibre (balance) d'état de charge des ions dans la couronne solaire [13]. DR est très important, aussi, dans les plasmas de haute température influencés par l'équilibre de charge [14].

Pour le développement des models de calcul et diagnostic de plasmas, il est essentiel d'avoir des données exactes sur les sections efficaces ou les coefficients de taux des RD. Dans ce cadre, on note que plusieurs sections efficaces de RD sont mesurées par différentes expériences pour le ions héliumoïdes [15-17].

Les taux de recombinaison, entre autre, les RD sont utilisés pour l'analyse des données expérimentales, les modèles de plasmas [18-19] et le diagnostic de plasmas [20].

Dans La recombinaison, un électron libre est transféré à un état de bande de l'ion par l'intermédiaire d'un état doublement excité. Ce processus est composé par deux étapes, la première inclue une capture diélectronique suivi par une transition radiative vers un état au dessous de la limite d'ionisation :



La figure III.2 [2] montre bien les deux processus pour un ion (Z,N) de charge Z et de N électrons. k_0 est un état du niveau fondamental de l'ion (Z,N) . m_0 est un état de la limite d'ionisation de cet ion, qui est aussi le niveau fondamental de l'ion $(Z,N-1)$. Un électron de l'ion (Z,N) peut exciter vers un état k . Un électron (ou plus) peut, aussi, exciter au dessus de la limite d'ionisation et il sera dans un état dit doublement excité j . cet état peut autoioniser spontanément (transition non radiative) vers un état i pour une énergie moins que $E_i = E_j$ et donne lieu à un électron libre avec une énergie cinétique ε tel que :

$$\varepsilon = E_i - E_m \quad (\text{III.32})$$

La recombinaison diélectronique consiste en un électron dans un état i de l'ion $(Z,N-1)$, avec un électron libre d'énergie ε . Si l'énergie de cet électron libre est égale à l'énergie de l'état i et de l'état doublement excité j de l'ion $(Z,N-1)$, l'électron libre peut exciter un électron de l'ion $(Z,N-1)$ et peut être capturé vers une orbite de bande produisant l'état métastable j de l'ion (Z,N) . Ce dernier électron peut transiter vers un état de bande k par décroissance radiative.

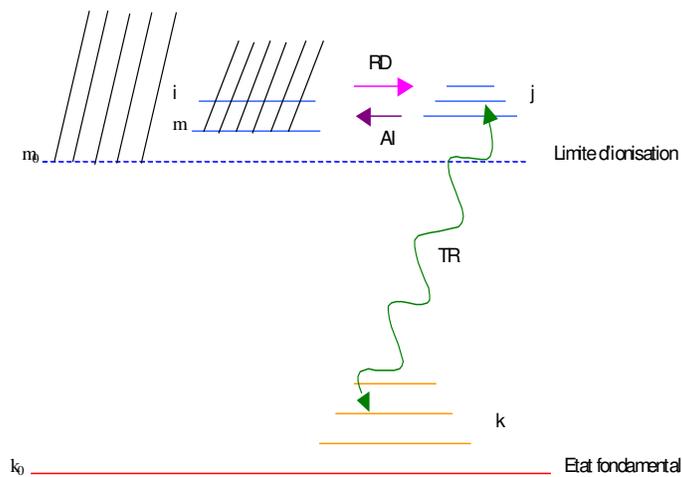


Fig.III.2 Diagramme des niveaux excités et doublement excités pour un ion (Z,N)
 RD : Recombinaison diélectronique, AI : Auto-ionisation, TR : Transition radiative

Le calcul de taux de capture diélectronique ou de recombinaison diélectronique se fait par l'utilisation des lois statistiques de Boltzmann et de Saha et par le principe d'équilibre avec le processus inverse qui est l'autoionisation, soit pour le coefficient de taux de RD [2]:

$$\beta_{mj}^d(T) = \frac{h^3}{2(2\pi mKT)^{3/2}} \frac{g_j \Gamma_{jm}^a}{g_m} e^{-E_{jm}/KT} \quad (\text{III.33})$$

$$= \frac{4\pi^{3/2} a_0^3}{T^{3/2}} \frac{g_j \Gamma_{jm}^a}{g_m} e^{-E_{jm}/T}$$

où dans le second expression $E_{jm}=E_j - E_m$, Γ_{jm}^a est le taux d'autoionisation du niveau j, a_0 est le rayon de Bohr, g_j et g_m sont les poids statistiques des niveaux j et m. T est la température en Rydberg.

III.3.2 Stabilité radiative

L'ion (Z,N) formé à l'état j peut se re-ioniser par auto ionisation. Ainsi le processus de recombinaison diélectronique se complète que par la de-excitation vers un niveau au dessous de la limite d'ionisation m_0 . Le processus le plus important, dans ce cas, est la transition radiative vers un niveau k avec un taux de transition radiative A_{jk}^r .

La probabilité de cette transition radiative vers un niveau k est donnée par le rapport de branchement :

$$B_{jk} = \frac{A_{jk}^r}{\sum_{m'} \Gamma_{jm'}^a + \sum_{k'} A_{jk'}^r} \quad (\text{III.34})$$

Ainsi le coefficient de taux de recombinaison net est donné par :

$$\alpha_{mjk}^d(T) = \beta_{mj}^d(T) B_{jk} \quad (\text{III.35})$$

Le taux de recombinaison effectif du chemin $j \rightarrow k$, moyenné sur tous les états m est :

$$\alpha_{jk}^d(T) = \frac{4\pi^{3/2} a_0^3}{T^{3/2}} e^{-E_s/T} \frac{g_j}{G_m} \frac{\sum_m \Gamma_{jm}^a A_{jk}^r}{\sum_{m'} \Gamma_{jm'}^a + \sum_{k'} A_{jk}^r} \quad (\text{III.36})$$

où E_s est une valeur moyenne de la différence $E_j - E_m$. G_m est le poids statistique total de la configuration fondamentale.

Le coefficient de taux de recombinaison total est :

$$\alpha^d(T) = \sum_j \sum_k \alpha_{jk}^d(T) \quad (\text{III.37})$$

Le taux d'autoionisation dans l'équation (III.36) peut être estimé de la façon suivante : $\Gamma_j^a = \sum_m \Gamma_{jm}^a$ qui est le taux d'autoionisation total de l'état j vers tous les niveaux de la configuration fondamentale de l'ion.

Le taux d'émission dans la raie spectrale $j \rightarrow k$ est donné par :

$$R(j \rightarrow k) = n_e n_{N-1} \alpha_{jk}^d(T) \quad (\text{III.38})$$

n_e et n_{N-1} sont, respectivement, la densité électronique et la densité des ions ($Z, N-1$). Cette expression peut être utilisée pour le calcul des intensités absolues ou relatives de raies spectrales résultantes à partir de ce mécanisme [21]. Ces raies s'appellent aussi raies satellites.

III.3.3 Calcul numérique

Les contributions résonantes dans les taux de recombinaison, excitation et ionisation sont, dans plusieurs cas, dominantes. Les méthodes les plus utilisées, récemment, pour traiter les résonances se basent sur l'approximation de couplage fermé (close-coupling) [22-23]. D'autre part, dans plusieurs applications, les méthodes basées sur l'approximation des ondes déformées (distorted waves DW) ont donné des résultats très satisfaisants pour les coefficients de taux de RD [24]. Dans ces méthodes les résonances sont traitées comme des processus multi-étapes. Parmi eux s'implique l'autoionisation ou le processus inverse qui est la capture diélectronique. Plusieurs codes sont développés pour ces genres de calcul utilisant les méthodes DW [25-26]. Le code FAC [27] est, aussi, similaire à celui de Oreg et al. [26] et

utilise une procédure d'interpolation de factorisation efficace pour le calcul des intégrales radiales d'autoionisation.

Les équations analytiques utilisées par différents auteurs ainsi que ceux utilisées par le présent travail vont être discutées au Chapitre V.

III.4 Recombinaison radiative

La recombinaison ainsi que l'ionisation sont indispensables pour la compréhension de l'équilibre d'ionisation aussi bien au laboratoire que pour les plasmas d'astrophysique. De point de vue expérimental et théorique la recombinaison est moins étudié que l'ionisation.

La recombinaison radiative (RR) consiste en un ion $(Z, N-1)$ de $(N-1)$ électrons dans son état fondamental capturant un électron d'énergie ε pour être dans un état excité de l'ion (Z, N) , il émet ainsi un photon d'énergie $h\nu$.

Ce processus est l'inverse de la photoionisation tel que :



III.4.1 Equations empiriques

Plusieurs équations empiriques sont présentées pour comparaison par Kato et al.[28]. Aldrovandi et Pequingot [29] ont calculé les taux de RR et RD pour tous les ions non hydrogénoïdes (He-Ar, Ca). Les résultats sont donnés pour un coefficient de taux de recombinaison radiative moyenné sur une distribution de Maxwell :

$$\alpha_r = a_r (T_e / 10^4)^{-\eta} \quad (\text{III.40})$$

où a_r et η sont des paramètres d'ajustement (fitting) donnés dans la référence [28].

Les données atomiques de Mewe [30] sont largement utilisées, plus spécialement dans les études astrophysiques. Le coefficient de taux de RR est estimé par :

$$\alpha_r = 10^{-10} \alpha z^{2\eta+1-\Delta} T_e^{-\eta} \quad (\text{III.41})$$

où α , η et Δ sont donnés dans la référence [30]. z est la charge ionique.

Arnaud et al. [31-32] ont évalué des sections efficaces pour les ions H, He, C-Si, S, Ar, Ca, Fe et Ni. La recombinaison radiative des ions hydrogénoïdes est calculée par une équation donnée par Seaton [33] :

$$\alpha_r = 5.197 \cdot 10^{-14} Z \lambda^{1/2} \{0.4288 + 0.5 \ln(\lambda) + 0.0469 \lambda^{-1/3}\} \quad (\text{III.42})$$

où $\lambda = 157890 Z^2 / T(\text{K})$ et Z est la charge nucléaire.

Le taux de recombinaison radiative pour un état n est donné par l'équation connue de Kramers [34] :

$$\begin{aligned} \kappa_v(n) &= \frac{64\sqrt{\pi} a_0 \hbar}{3\sqrt{3} m 137^3} z \beta_n^{3/2} [-\exp(\beta_n) E_i(-\beta_n)] \\ \beta_n &= z^2 \frac{Ry}{n^2 T} \end{aligned} \quad (\text{III.43})$$

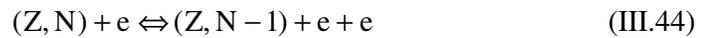
où $E_i(-\beta_n)$ est l'intégral exponentiel.

D'autres équations sont présentées par De Michelis et al. [35] pour les ions hydrogénoïdes. Pour les ions complexes les sections efficaces de recombinaison radiative sont, généralement, obtenues par le principe d'équilibre détaillé à partir du processus inverse, i.e. la photoionisation. Le taux de recombinaison est ainsi obtenu par une intégration (moyenne thermique) de la section efficace de photoionisation [36]

Le programme FAC [27] utilise l'approximation relativiste des ondes déformées pour les fonctions du continuum. Les opérateurs multipôles sont utilisés pour le calcul des forces d'oscillateurs différentielles (bande-libre).

III.5 Ionisation par l'électron d'impact

Dans le processus d'ionisation par l'électron d'impact, un atome ou ion peut heurter un électron, il s'ionise en cédant aussi un électron :



Le phénomène inverse de l'ionisation est la recombinaison à trois corps. Les sections efficaces et les coefficients de taux sont obtenus par le principe d'équilibre détaillé à partir des sections efficaces et les coefficients de taux des processus d'ionisation correspondants. Notons que la recombinaison à trois corps peut être négligée pour les densités électroniques basses (moins de 10^{16} cm^{-3}).

Les sections efficaces d'ionisation par l'électron d'impact peuvent être calculées par le programme FAC [27] utilisant l'approximation relativiste des ondes déformées avec une méthode d'interpolation-factorisation. Ceci permet d'inclure le mélange entre configurations. D'autres méthodes basées sur l'approximation d'échange de Coulomb-Born ou la théorie « Binary Encounter Dipole » sont aussi utilisées.

Les sections efficaces d'ionisation par électron d'impact peuvent être évaluées théoriquement comme fonction du rapport de l'énergie de l'électron d'impact ε et le potentiel d'ionisation χ_Z de l'ion de charge Z . Il existe trois différentes méthodes pour l'évaluation théorique des sections efficaces d'ionisation $\sigma_Z^{\text{ion}}(\varepsilon/\chi_Z)$ [35]: les méthodes classiques, les approximations de Coulomb-Born (CB) et les équations semi-empiriques.

III.5.1 Les méthodes classiques

La méthode classique la plus fréquemment utilisée est la méthode de paramètre d'impact classique d'échange, initialement développé par Burgess [37]. La section efficace d'ionisation est calculée pour « symmetrized binary encounters » (pour les petits paramètres d'impact) et la section efficace pour les collisions avec des grands paramètres d'impact traités par une approche semi-classique, i.e., par une théorie de perturbation avec un orbital classique proposé pour l'électron perturbateur.

III.5.2 Approximation de Coulomb-Born

Un travail considérable a été mené pour le calcul des sections efficaces d'ionisation utilisant l'approximation de Coulomb-Born. Ce travail a été résumé par Vainshtein et al. [38]. Les équations proposées pour la section efficace et le coefficient de taux sont :

$$\sigma_Z^{\text{ion}} = \pi a_0^2 \frac{\zeta}{2l_0 + 1} \left(\frac{\chi_H}{\chi_Z} \right)^2 \phi_i(u) \quad (\text{cm}^2) \quad (\text{III.45})$$

$$S_Z = 10^{-8} \frac{\zeta}{2l_0 + 1} \left(\frac{\chi_H}{\chi_Z} \right)^{3/2} e^{-\beta} G_i(\beta) \quad (\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}) \quad (\text{III.46})$$

où a_0 est le rayon de Bohr, ζ est le nombre des électrons périphériques dans la sous-couche considérée (de nombre orbital l_0) ayant une énergie χ_Z , $u = \varepsilon/\chi_Z$ et $\beta = \chi_Z/T_e$ (ε, χ_Z et T_e en eV).

Les fonctions ϕ_i et G_i sont définies par :

$$\phi_i(u) = \left(\frac{u-1}{u} \right) \frac{C_1}{(u-1) + C_2} \quad (\text{III.47})$$

$$G_i(\beta) = \frac{C_3 \sqrt{\beta}}{\beta + C_4} \quad (\text{III.48})$$

Les paramètres C_1 , C_2 , C_3 , et C_4 sont obtenus par une méthode de moindre carré à partir d'un calcul numérique et sont présentés sur des graphes ou des tableaux [38].

III.5.3 Les équations semi empiriques

Plusieurs équations sont présentées par Kato et al. [39] pour le calcul des sections efficaces et coefficients de taux d'ionisation. Parmi eux on peut citer l'équation de Lotz, Arnaud et al. [40] et celui du groupe de Belfast [41-42].

L'équation de Lotz a été largement utilisée pour le calcul des sections efficaces et les coefficients de taux d'ionisation [39,43]. Lotz déduit la section efficace d'ionisation en se basant sur des données expérimentales pour les ions faiblement ionisés avec des faibles charge Z :

$$\sigma = \sum_{j=1}^{N_{sc}} a_j \zeta_j \frac{\ln u_j}{u_j \chi_j^2} \{1 - b_j \exp[-c_j(u_j - 1)]\} \quad (\text{III.49})$$

où $u_j = \varepsilon/\chi_j$, ε est l'énergie de liaison d'un électron dans la j^{eme} sous couche, ζ_j est le nombre des électrons équivalents dans la sous couche j alors que a_j , b_j , et c_j sont des constantes qui peuvent être ajustées à partir des données expérimentales et des lois d'échelle. Pour les ions ionisés plus que quatre fois, Lotz donne pour $a_j = 4.5 \cdot 10^{-14} \text{ (cm}^2 \text{ eV}^2)$, $b_j = 0$ et $c_j = 0$, le nombre de sous couches N_{sc} est de 2 pour les ions H au Ca et de 3 pour les Sc au Zn.

Le coefficient de taux d'ionisation (en $\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$) est obtenu par intégration de la section efficace sur une distribution Maxwellienne :

$$S = 6.7 \cdot 10^7 \sum_{j=1}^N \frac{a_j \zeta_j}{T_e^{3/2}} \left\{ \frac{1}{\chi_j / T_e} \int_{\chi_j / T_e}^{\infty} \frac{\exp(-x)}{x} dx - \frac{b_j \exp c_j}{\chi_j / T_e + c_j} \int_{\chi_j / T_e + c_j}^{\infty} \frac{\exp(-y)}{y} dy \right\} \quad (\text{III.50})$$

Arnaud et Rothenflug [39] ont évalué des sections efficaces pour les ions H, He, C-Si, S, Ar, Ca, Fe et Ni. Ils utilisent une équation paramétrique proposée par Younger [44] pour la section efficace d'ionisation directe (en cm^2) :

$$\sigma_{\text{DI}} = \sum_j \frac{1}{u_j \chi_j^2} \left[a_j \left(1 - \frac{1}{u_j} \right) + b_j \left(1 - \frac{1}{u_j} \right)^2 + c_j \ln(u_j) + d_j \frac{\ln(u_j)}{u_j} \right] \quad (\text{III.51})$$

Les coefficients a_j , b_j , c_j et d_j sont des constantes tabulées (Arnaud et al.).

Le coefficient de taux d'ionisation directe (en $\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$) est donné par :

$$S_{\text{DI}} = \frac{6.69 \cdot 10^7}{T_e^{3/2}} \sum_j \frac{\exp(-x_j)}{-x_j} F(x_j) \quad (\text{III.52})$$

où :

$$F(x) = a_j [1 - x_j f_1(x_j)] + b_j [1 + x_j - x_j(2 + x_j) f_1(x_j)] + c_j f_1(x_j) + d_j x_j f_2(x_j) \quad (\text{III.53})$$

avec $x_j = \chi_j / T_e$; $f_1(x) = e^x \int_1^{\infty} \frac{dt}{t} e^{-tx}$ et $f_2(x) = e^x \int_1^{\infty} \frac{dt}{t} e^{-tx} \ln(t)$

Pindzola et al. [45] ont, aussi, utilisé l'équation donnée par Arnaud et al. [40]. Les coefficients de taux d'ionisation calculés sont ajustés à un développement direct des polynômes de Chebychev de premier type $T_n(x)$:

$$\ln S = \frac{C_0}{2} + \sum C_n T_n(x) \quad (\text{III.54})$$

où $x = \frac{[2 \ln(T_e) - \ln(E_{\text{max}}) - \ln(E_{\text{min}})]}{\ln(E_{\text{max}}) - \ln(E_{\text{min}})}$, T_e et E_{min} en eV, $E_{\text{max}} = 2.04 \text{ eV}$

E_{min} , C_0 et C_n sont donnés dans la référence [45].

Bell et al. [41] et Lennon et al. [42] donnent des sections efficaces d'ionisation pour les ions : dans la séquence H-O [41] et F-Ni [42].

Les sections efficaces sont obtenues par ajustement suivant l'équation :

$$\sigma = \frac{1}{u\chi^2} \left[a \ln u + \sum_{i=1}^N b_i \left(1 - \frac{1}{u} \right)^i \right] \quad (\text{III.55})$$

Les coefficients a et b_i sont obtenus par ajustement de moindre carré, ils sont donnés sur des tableaux pour $N=5$ [41-42].

Les coefficients des taux d'ionisation pour l'intervalle de température $\chi / 10 \leq T \leq 10\chi$ sont donnés par ajustement suivant l'équation :

$$S = \exp\left(-\frac{\chi}{T_e}\right) \left(\frac{T_e}{\chi}\right)^{1/2} \sum_{n=0}^5 a_n \left[\log_{10}\left(\frac{T_e}{\chi}\right) \right]^n \quad (\text{III.56})$$

et pour $T > 10\chi$:

$$S = \left(\frac{T_e}{\chi}\right)^{1/2} \left[\alpha \ln\left(\frac{T_e}{\chi}\right) + \sum_{n=0}^2 \beta_n \left(\frac{\chi}{T_e}\right)^n \right] \quad (\text{III.57})$$

Le potentiel d'ionisation χ et les coefficients a_i , α et β_i sont donnés dans leurs références [41-42].

III.6 Recombinaison par échange de charge

L'importance de la recombinaison d'échange de charge est très reconnue dans les plasmas de faible densité (principalement les tokamaks) [35,46]. Dans ce processus l'ion impurité capte un électron dans un état hautement excité :



Il a été démontré que les sections efficaces de transfert de charge présentent des pics pour les valeurs de nombre quantique principal n tel que $\bar{n} = Z^{0.77}$ [47]. Pour les conditions de plasma de tokamak, \bar{n} est au-dessous de la limite de collision, ainsi l'état excité résultant présente une décroissance radiative vers l'état fondamental.

Les méthodes théoriques sont généralement classifiées en terme de la vitesse de collision relative en tenant compte de la vitesse orbitale de l'état fondamental de l'hydrogène [35]. Le seul calcul couvrant les régions de la vitesse de collision utilise l'approximation de l'onde déformée (unitarized). De plus Ryufuku et al. [47] ont aussi proposé une courbe universel échelonnée où la section efficace d'échange de charge et l'énergie d'impact ε sont échelonnées suivant :

$$\begin{aligned}\sigma_Z^{\text{CX}} &= Z^{1.07} \tilde{\sigma}_Z^{\text{CX}} \\ \varepsilon^* &= Z^{0.464} \tilde{\varepsilon}^*\end{aligned}\tag{III.59}$$

où $\tilde{\sigma}_Z^{\text{CX}}$ et $\tilde{\varepsilon}^*$ sont les valeurs échelonnées, et les facteurs d'échelle sont obtenues par une procédure itérative.

Le calcul de taux de recombinaison d'échange de charge pour les ions impurétés avec un faisceau mono-énergétique d'hydrogène neutre est présenté par Hulse et al. [48]. Les sections efficaces sont calculées par Olson and Salop [49].

III.7 Excitation par l'électron d'impact

Les sections efficaces et les coefficients de taux d'excitation par électron d'impact (EIE) sont particulièrement importants pour l'interprétation des raies d'émission.

Un ion (Z, N) peut être dans un état excité $(Z, N)^*$ en rentrant en collision avec un électron :



La section efficace d'excitation, pour une transition à partir du niveau i d'énergie E_i' (évaluée à partir de la limite d'ionisation) au niveau j d'énergie E_j' (voir Fig.III.3) est donnée par [35] :

$$\sigma_{i \rightarrow j}^{\text{exc}} = \frac{1}{g_i} \left(\frac{\chi_H}{\varepsilon} \right) \Omega_{ij} \pi a_0^2 \quad (\text{III.61})$$

où Ω_{ij} est la force de collision.

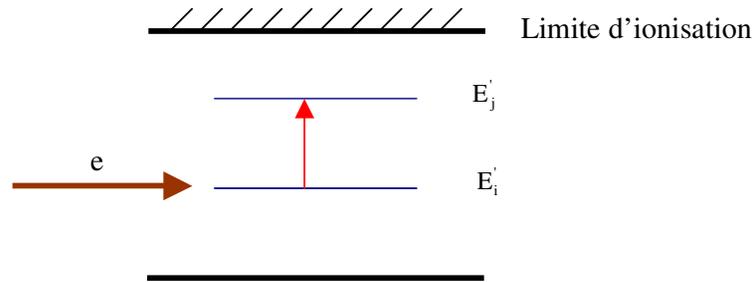


Fig.III.3 Description du processus d'excitation par électron d'impact

Le coefficient de taux d'excitation par l'électron d'impact est donné par [35] :

$$C_{i \rightarrow j} = \frac{8 \cdot 10^{-8}}{\sqrt{T_e}} \frac{1}{g_i} \int_{\Delta E_{ij}/T_e}^{\infty} \Omega_{ij} e^{-\varepsilon/T_e} d\left(\frac{\varepsilon}{T_e}\right) \quad (\text{III.62})$$

où $\Delta E_{ij} = E_i' - E_j'$.

La symétrie de la force de collision assure que l'équilibre détaillé pour le taux de de-excitation est satisfait :

$$C_{j \rightarrow i} = \frac{g_i}{g_j} C_{i \rightarrow j} e^{\Delta E_{ij}/T_e} \quad (\text{III.63})$$

Des sections efficaces et des coefficients de taux d'excitation par l'électron d'impact sont calculés pour la séquence isoélectronique à partir de H- jusqu'aux néonoïdes (Ne-like).

Pour ces données, il était plus commode, pour estimer les sections efficaces et les taux d'utiliser des équations analytiques simples [35,38].

Récemment, Ralchenko et al. [50] présentent une comparaison des sections efficaces pour les processus de collision pour l'atome d'hélium. La figure III.4 montre une comparaison faite par nos calculs utilisant les données du FAC avec NIFS [50] pour l'excitation par l'électron d'impact entre $2^1S - 3^1D$. Le calcul FAC utilise l'approximation relativiste des ondes déformées pour le calcul de l'excitation directe par l'électron d'impact. Le calcul des forces de collisions par la méthode d'interpolation-factorisation est plus rapide. Les contributions du continuum sont prises en compte.

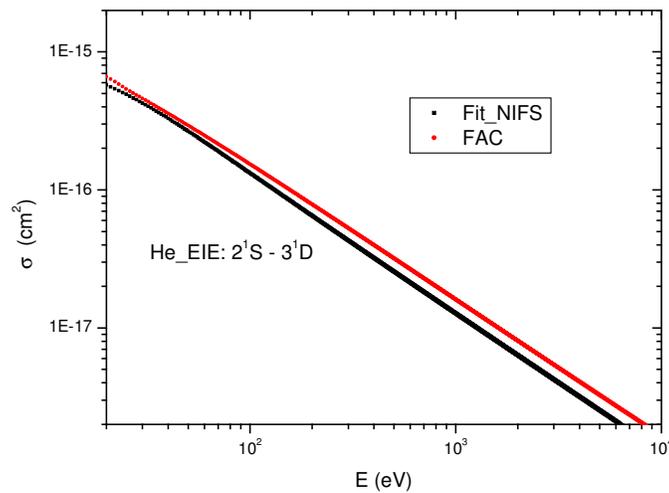


Fig.III.4 Comparaison des sections efficaces de EIE pour l'hélium neutre ($2^1S - 3^1D$)

III.8 Application au calcul de distribution des états de charge

Le diagnostic des spectres de raies émises par les ions et les atomes dans un plasma nécessite entre autre la connaissance des données atomiques relatives aux processus atomiques élémentaires ainsi que la distribution des états de charge. Ceci fait appelle à la solution d'un système complexe des équations de taux décrivant la population et la de-population des niveaux par tous les processus, i.e. ionisation, recombinaison, excitation collisionnel et de-excitation, transition radiative, etc.

L'évaluation de la distribution de l'état de charge (ou l'équilibre d'ionisation) est obtenue par les abondances fractionnelles $f_Z = N_Z / \sum N_Z$, des ions de charge Z comme fonction de n_e et T_e . Généralement trois modèles sont utilisés, i.e. le modèle coronal, l'équilibre thermodynamique local et le modèle collisionnel radiatif. Le calcul des densités par ce dernier modèle a été exposé au chapitre I.

III.8.1 Modèle coronal

Dans cette approximation il existe un équilibre entre l'ionisation collisionnelle (et excitation) et la recombinaison (et la transition radiative). L'équilibre entre ionisation et recombinaison (négligeant la recombinaison d'échange de charge) est donné par :

$$n_e N_Z S_Z(T_e) = n_e N_{Z+1} \alpha_{Z+1}(T_e, n_e) \quad (\text{III.64})$$

Ce modèle est applicable pour une faible densité électronique, soit :

$$\sum_{r < j} A_{jr} \gg n_e C_j^*(T_e) \quad (\text{III.65})$$

où $C_j^*(T_e)$ est le taux de dé-population collisionnelle du niveau j .

III.8.2 Équilibre thermodynamique local

L'équilibre thermodynamique local est l'approximation opposée au modèle coronal. Dans cette approximation, la distribution des états de charge est supposée déterminée seulement par les processus collisionnels. Pour une distribution Maxwellienne des électrons libres, l'état de charge est déterminé par l'équation de Saha :

$$n_e \frac{N_{Z+1}^f}{N_Z^f} = 2 \frac{g_{Z+1}^f}{g_Z^f} \left(\frac{2\pi m_e k T_e}{h^2} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{\chi_Z}{k T_e}\right) \quad (\text{III.66})$$

où f indique le niveau fondamental.

Les populations d'un ion sont déterminées par l'équation de Boltzmann :

$$\frac{N_z(j)}{N_z(i)} = \frac{g(j)}{g(i)} \exp\left(\frac{\Delta E_{ji}}{kT_e}\right) \quad (\text{III.67})$$

La condition pour que l'équilibre thermodynamique local soit satisfait est [51] :

$$n_e \geq 1.8 \cdot 10^{14} T_e^{1/2} \Delta E_{ij}^3 \quad (\text{cm}^{-3}, \text{eV}) \quad (\text{III.68})$$

III.9 Conclusion

Nous avons décrit dans ce chapitre les différents processus collisionnels et radiatives élémentaires dans les plasmas. Les sections efficaces et /ou les coefficients des taux ont été exposés et discutés. Ces derniers peuvent être utilisés, suivant le model utilisé, dans les calculs de distribution des états de charge et des populations de différents niveaux en vue de l'interprétation des spectres d'émission des ions dans les plasmas.

Références

- [1] E. V. Condon and G. H. Shortley, *The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge University Press, Cambridge, reprinted in 1970.
- [2] R. D. Cowan, *the Theory of Atomic Structure and Spectra*, University of California Press, USA, 1981.
- [3] I. I. Sobelman, *Atomic Spectra and Radiative Transitions*, 2nd ed., Springer, Berlin, 1992.
- [4] G. H. Shortley, *Phys. Rev.* **47** (1935) 295.
- [5] D. Layzer and R. H. Garstang, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.*, **6** (1968) 449.
- [6] O. Sinanoglu, *Nucl. Instrum. Methods*, **110** (1973) 193.
- [7] H. A. Bethe and E. E. Salpeter, *Quantum Mechanics of one-and Two-Electron Systems*, Springer-Verlag, Berlin, 1957.
- [8] B. W. Shore and d. H. Menzel, *Principles of Atomic spectra*, John Wiley, NY 1968.
- [9] D. R. Bates and A. Damgaard, *Phil. Trans. Roy. Soc. London A* **242** (1949) 101.
- [10] G. K. Ortel and L. P. Shomo, *Astrophys. J. Suppl. Ser.*, **1** (1968) 175.
- [11] J. C. Stewart and M. Rotenberg, *Phys. Rev.*, **140** (1965) 1508.
- [12] J. Dubau and S. Volonté, *Rep. Prog. Phys.* **43** (1980) 199.
- [13] A. Burgess, *Astrophys. J.* **139** (1964) 776.
- [14] B. E. O'Rourke, F. J. Currell, H. Kuramoto, Y. M. Li et al. *Nuc. Inst. and Meth. In Phys. Res. B* **205** (2003) 378.
- [15] D. A. Knapp, R. E. Marrs, M. B. Schneider, M. H. Chen, M. A. Levine, P. Lee, *Phys. Rev. A* **47** (1993) 2039.
- [16] T. Fuchs, C. Bidermann, R. Radtke, E. Behar, R. Doron, *Phys. Rev. A* **58** (1998) 4518.
- [17] A. J. Smith, P. Beiersdorfer, K. Widmann, M. H. Chen, J. H. Scofield, *Phys. Rev. A* **62** (2000) 052717.
- [18] D. R. Bates, A. E. Kingston and R. W. P. McWhirter, *Proc. R. Soc. A* **267** (1962) 297.
- [19] A. Burgess and H. Summers, *Mo. Not. R. Astron. Soc.* **174** (1976) 345.
- [20] H. R. Griem, *Spectral line Broadening by plasmas*, New York Academic, 1974.
- [21] A. H. Gabriel, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **160** (1972) 99.
- [22] D. G. Hummer, K. A. Berrington, W. B. Eissner, A. K. Pradhan, H. E. Saraph, and J. A. Tully, *Astron. Astrophys.* **279** (1993) 298.
- [23] K. A. Berrington, W. B. Eissner, and P. H. Norrington, *Comp. Phys. Comm.* **92** (1995) 290.
- [24] D. W. Savin, S. M. Kahn, J. Linkemann, A. A. Saghir, M. Schmitt, et al. *Ap. J. Suppl.* **123** (1999) 687.
- [25] M. S. Pindzola and S. L. Carter, *Phys. Rev. A* **22** (1980) 898.
- [26] J. Oreg, W. H. Goldstein, M. Klapisch, and A. Bar-Shalom, *Phys. Rev. A* **44**, 1750 (1991).
- [27] M. F. Gu, FAC 1.0.7, <http://kipac-tree.stanford.edu/fac/>
- [28] T. Kato and E. Asano, *NIFS-Data Series*, **54** (1999).
- [29] S. M. V. Aldrovandi and D. Pequignot, *Astron. Astrophys.* **25** (1973) 137.
- [30] R. Mewe et al. *Astron. Astrophys. Suppl.* **40** (1980) 323.
- [31] M. Arnaud and R. Rothenflug, *Astron. Astrophys. Supp. Ser.* **60** (1985) 425.
- [32] M. Arnaud and J. Raymond, *Astrophys. J.* **398** (1992) 394.
- [33] M. J. Seaton, *Mont. Not. Roy. Astron. Soc.* **119** (1959) 81.
- [34] I. I. Sobelman, L. A. Vanshtein and E. A. Yukov, *Excitation of Atoms and Broadening of Spectral lines*, Springer and Verlag, NY, 1981.

- [35] C. De Michelis and M. Mattioli, *Nuclear Fusion*, **21**(1981) 677.
- [36] D. R. Bates, A. Dalgarno, *Atomic and Molecular Processes*, D.R. Bates, ed., Acad. Press, NY (1962)245.
- [37] A. Burgess and I. C. Percival, *Advances in Atomic and molecular Physics*, eds. D. R. Bates and I. Estermann, Academic Press, NY, 1968.
- [38] L. A. Vainshtein , I. I. Sobelman and E. A. Yukov, *Cross-Sections of Excitation of Atoms and Ions by Electrons*, Nauka, Moscow (1973).
- [39] T. Kato et al. *NIFS-Data-Series*, **14** (1991).
- [40] M. Arnaud and R. Rothenflug, *Astron. Astrophys. Supp. Ser.* **60** (1985) 425.
- [41] K. L. Bell et al., *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **12**(1983) 891.
- [42] M. A. Lennon et al., *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **17**(1988) 1285.
- [43] V. P. Shevelko and L. A. Vainshtein, *Atomic Physics for Hot Plasmas*, IOP Publishing, london, 1993.
- [44] S. M. Younger, *JQSRT*, **26**(1981)329.
- [45] M. S. Pindzola, D. C. Griffin, C. Bottcher, S. M. Younger and H. T. Hunter, *Nuclear Fusion S.S.*, **21**(1987).
- [46] F. B. Rosmej, D. Reiter, V. S. Lisitsa, M. Bitter et al., *Plasma Phys. Control. Fusion* **41** (1999) 191-214.
- [47] H. Ryufuku and T. Watanabse, *Phys. Rev. A* **20** (1979) 1828.
- [48] R. A. Hulse, D. E. Post and D. R. Mikkelsen, *J. Phys. B.* **13** (1980) 3895-3907.
- [49] R. E. Olson and A. Salop, *Phys. Rev. A* **16** (1976) 531.
- [50] Yu. V. Ralchenko, R. K. Janev, T. Kato, D. V. Fursa et al. *NIFS-DATA Series*, **59** (2000).
- [51] R. W. P. Mc Whirter, *Plasma Diagnostic Techniques*, eds. R. H. Huddlestone and S. L. Leonard, Academic Press, NY, (1965) 201.

Chapitre IV

A. Calcul des structures atomiques

IV.A.1 Introduction

Le calcul et la connaissance des données atomiques exactes pour les atomes et les ions reconnaît un grand intérêt. Les atomes et les ions existant dans les plasmas d'astrophysique, les plasmas de laboratoire ou les plasmas de fusion thermonucléaire donnent au sujet un aspect de priorité dans les études avancées.

Le calcul de structure atomique des atomes et des ions hydrogéoïdes et héliumoïdes date depuis plusieurs années. Plusieurs méthodes et approximations sont utilisées pour générer les structures atomiques des atomes et des ions en question. Un grand projet international OP (Opacity Project) [1] a été créé pour le calcul des structures atomiques (niveaux d'énergie, forces d'oscillateur, sections efficaces de photoionisation, paramètres d'élargissement des raies, etc.). Le calcul est basé sur la méthode de couplage fermé (close-coupling) de la théorie de diffusion [2]. Berrington et al. Décrit les méthodes numériques utilisées pour le calcul des données atomiques pour le OP [3]. Verner et al. [4] donnent un calcul corrigé basé sur les données d'OP et des données expérimentales. Dere et al. [5] présentent des données atomiques (niveaux d'énergie, longueurs d'onde, taux de probabilité de transition, taux d'excitation par impact électronique) concernant plusieurs ions d'intérêt

astrophysique. Le site NIST (National Institute of Standards and Technology) [6] présente, aussi, des données atomiques incluant les niveaux d'énergie de 56 éléments et les transitions observées de 99 éléments, les spectres, les états fondamentaux et les énergies d'ionisation.

Godefroid et al. [7] Donnent un tableau qui résume les différentes méthodes et les résultats de calcul concernant les niveaux d'énergie, Les probabilités de transition radiative de quelques raies et les durées de vie de quelques niveaux pour les héliumoides. Un calcul de haute précision basé sur des méthodes variationnelles donne les valeurs des énergies, les forces d'oscillateur et taux de transition radiative pour tous les états de l'hélium jusqu'à $n=10$ et $L=7$ [8-9].

Vu la complexité du problème à N corps, plusieurs codes de calcul numérique ont été élaborés pour extraire les bases de physique atomique pour ces genres des atomes. Actuellement il existe des programmes traitant les structures atomiques d'une façon complètement relativiste ou avec des approximations non relativistes. Parmi eux on peut citer le code d'interaction de configurations non relativistes CIV3 [10], le code Superstructure [11], le programme largement utilisé de Cowan [12] et le programme de multi-cofigurations de Hartree-Fock (MCHF) [13] ou celui de Dirac-Fock(MCDF) [14], etc.

Cependant le calcul de structure atomique pose toujours un problème de convergence pour les hauts nombres quantiques n . Les effets relativistes et le problème d'interaction des configurations nécessitent aussi une étude détaillée.

IV.A.2 Atome d'hydrogène et ions hydrogéoïdes

L'état le plus simple du plasma est un gaz d'hydrogène ou des ions hydrogéoïdes. La connaissance de la physique atomique des ces types d'atomes ou d'ions est indispensable pour plusieurs intérêts (voir chap. I). L'étude des ions hydrogéoïdes a été incluse dans un contexte plus général qui concerne les atomes à N électrons.

Notre objectif est d'élaborer une formulation simple et analytique pour générer une base de physique atomique pour les hydrogéoïdes. Notre programme de calcul de structure atomique peut intégrer facilement un autre code avec le format sollicité. Les données

obtenues seront utilisées, entre autre, pour le diagnostic des plasmas, l'étude et la modélisation des profils de raies.

Nous calculons par la suite les structures atomiques, incluant les longueurs d'onde, les énergies, les probabilités de transition et les forces d'oscillateur de quelques raies de résonance d'absorption d'atomes et d'ions hydrogénoïdes (H au Si, S, Ar, Ca et Fe) par différentes méthodes.

IV.A.2.1 Méthodes de calcul

IV.A.2.1.a Notre programme

En premier lieu nous utilisons un programme basé sur des équations analytiques exposées au chapitre I. Les énergies seront calculées par la résolution de l'équation de Dirac aux premiers ordres de correction représentés par l'équation (II.21). L'expression finale de l'énergie inclue aussi le Lamb shift (eqs. II.23-II.25). Nous avons utilisé, pour le calcul du Lamb shift des états s, les expressions du rapport $K_0(n,0)/Z^2Ry$. Le tableau IV.A.1 donne quelques valeurs de ce rapport pour les états s et pour quelques nombres quantiques principaux [15]. Le tableau IV.A.2 donne le $\log(K_0/Z^2Ry)$ pour les autres états [15] :

n	1	2	3	4	∞
$K_0(n,0)/Z^2Ry$	19.770	16.640	15.921	15.640	15.2

Tableau IV.A.1 Valeurs du rapport $K_0(n,0)/Z^2Ry$ pour quelques nombres quantiques n

nl	2P	4P	3D
$\log(K_0/Z^2Ry)$	-0.0300	-0.0419	-0.0052

Tableau IV.A.2 valeurs de $\log(K_0/Z^2Ry)$ pour quelques états.

Le tableau IV.A.1 montre que le rapport $K_0(n,0)/Z^2Ry$, ne dépend pas fortement des valeurs de n (nombre quantique principal). Nous utilisons la valeur 15.2, pour ce rapport, pour les valeurs $n \geq 5$ des états s . Pour les autres états, il se rapproche de 1.

Nous reportons sur le tableau IV.A.3 nos résultats (la première ligne) de calcul des longueurs d'onde, des énergies, des probabilités de transition et les forces d'oscillateur suivant les équations exposées au chapitre II.

IV.A.2.2.b Programme FAC

Nous utilisons, aussi, pour le calcul de la structure atomique des atomes et des ions hydrogénoïdes le programme général FAC [16] (Flexible Atomic Code) qui va être utilisé par la suite pour le calcul et l'étude de la structure atomique et les processus atomiques élémentaires pour l'hélium neutre et les ions héliumoïdes.

Le programme est basé sur la diagonalisation de l'Hamiltonien relativiste de Dirac pour l'obtention des niveaux d'énergie. Les orbitales radiaux pour la construction des états de base sont obtenus à partir d'une itération de Dirac-Fock-Slater auto consistante modifiée dans une configuration principale (fictitious mean configuration) avec des nombres d'occupation fractionnels représentant (average electron cloud) des configurations incluses dans le calcul. Les probabilités de transition ou les taux de transition radiative sont calculées dans l'approximation multipôle (single) avec des rangs arbitraires.

Nous avons utilisé une diagonalisation de chaque état nl à part avec une optimisation radiale de l'état fondamental $1s$. Le choix de la diagonalisation n'influe pas sur les résultats de calcul des taux de transition radiative et des forces d'oscillateur. Les résultats de calcul sont exposés sur le tableau IV.A.3 en deuxième position.

IV.A.2.2.c Calcul de Verner

Les résultats de Verner et al. [4] rentrent dans le cadre du projet international « Opacity Project OP » [17]. Le calcul d'OP est basé sur des méthodes de haut niveau comme la méthode de matrice R [18] et les nouvelles techniques asymptotiques développées par

Seaton [19]. Dans le calcul OP, le couplage LS est utilisé et les effets relativistes sont négligés. Cependant Verner et al. [4] ont utilisé, dans leur calcul, la compilation des données obtenues à partir des niveaux d'énergie expérimentaux pour avoir des longueurs d'onde plus exactes pour les raies considérées. Ces longueurs d'onde seront utilisées pour améliorer les valeurs des forces d'oscillateur f calculées par OP. L'OP donne les valeurs de la force de raie S calculées par une intégration sur des fonctions d'onde atomiques n'incluant pas les énergies de transition E .

Les valeurs gf sont calculées donc par $gf = \text{const} \times S \times E$. Le calcul OP utilise les valeurs théoriques pour le calcul de gf . Verner et al. [4] utilisent les valeurs expérimentales plus exactes des longueurs d'onde à la place des valeurs théoriques de E . Les valeurs de f [4] seront calculées alors par :

$$f_v = f_{OP} (\lambda_{OP} / \lambda_{exp}) \quad (\text{IV.A.1})$$

Les probabilités de transition seront calculées par l'équation standard (III.14) exposée au chapitre III. Les résultats de calcul de Verner et al. [4] seront représentés en troisième position sur le tableau IV.A.3.

IV.A.2.2.d Comparaison et discussion

Une comparaison entre les différents résultats de calcul pour les longueurs d'onde, les énergies, les taux de transition radiative et les forces d'oscillateur montre une bonne concordance entre les différentes méthodes. Les erreurs relatives sont trop faibles. La longueur d'onde de la transition $1s_{1/2}-2p_{3/2}$ correspond bien avec la valeur de la longueur d'onde observée soit 1215.668 Å [6]. La valeur donnée par Verner et al. [4] pour la longueur d'onde (19.8261 Å) de la transition $1s_{1/2}-4p_{1/2}$ pour le N VII correspond bien avec celui publié par NIST [6]. Notre calcul donne la valeur 19.8360 Å. Cependant tous les taux A se coïncident avec le NIST. Les longueurs d'ondes données par les différentes méthodes pour la transition $1s_{1/2}-8p_{3/2}$ pour le Mg XII se concordent bien avec la valeur du NIST qui est de 6.417268 Å. Alors que la transition $2s_{1/2}-5p_{1/2}$ pour notre calcul se coïncide presque avec la valeur du NIST (30.0749-30.05929 Å). En général la comparaison donne des résultats très satisfaisants. On note que les chiffres (après la virgule) portés sur les tableaux ne sont pas significatifs.

Ion	Transition	G	λ (Å)	σ (cm ⁻¹)	A (s ⁻¹)	f
H I	1s – 2p	2 – 4	1215.6683	82259.282208	6.26E+08	2.77E-01
			1212.4365	82260.483256	6.26E+08	2.77E-01
			1215.6682	82259.286468	6.25E+08	2.77E-01
H I	1s – 10p	2 – 2	920.9631	108581.986984	4.21E+06	5.35E-04
			918.4907	108586.418872	4.21E+06	5.35E-04
			920.9630	108581.992445	4.21E+06	5.35E-04
H I	2s – 4p	2 – 4	4862.6449	20564.940020	9.66E+06	6.85E-02
			4849.8411	20564.717537	9.66E+06	6.94E-02
He II	1s – 3p	2 – 2	256.4221	389981.965343	2.67E+09	2.63E-02
			255.6363	390146.494368	2.68E+09	2.63E-02
			256.3177	390140.8316	2.67E+09	2.63E-02
He II	1s – 9p	2 – 4	230.7796	433313.924861	9.25E+07	1.48E-03
			230.0712	433498.793368	9.26E+07	1.48E-03
			230.6856	433490.4490	9.28E+07	1.48E-03
He II	2s – 5p	2 – 2	1085.3595	92135.371719	7.91E+07	1.40E-02
			1082.0476	92173.036	7.92E+07	1.39E-02
Li III	1s – 4p	2 – 4	108.0491	925505.04725	5.52E+09	1.93E-02
			107.7146	925924.4512	5.52E+09	1.93E-02
			107.9988	925936.307	5.52E+09	1.93E-02
Li III	1s – 8p	2 – 2	102.9043	971776.7442	6.68E+08	1.06E-03
			102.5854	972220.67376	6.68E+08	1.06E-03
			102.8564	972229.585	6.68E+08	1.06E-03
Li III	2s – 10p	2 – 4	422.0507	236938.3316	4.98E+07	2.66E-03
			420.7431	237046.2382	4.98E+07	2.66E-03
Be IV	1s – 5p	2 – 2	59.3483	1684967.48817	8.79E+09	4.64E-03
			59.1629	1685779.3514	8.80E+09	4.64E-03
			59.3197	1685781.035	8.81E+09	4.65E-03
Be IV	1s – 7p	2 – 4	58.1613	1719356.51673	3.16E+09	3.21E-03
			57.9784	1720219.22432	3.16E+09	3.21E-03
			58.1332	1720186.702	3.17E+09	3.21E-03
Be IV	2s – 9p	2 – 2	239.7191	417154.87781	2.16E+08	1.86E-03
			238.9680	417359.63982	2.16E+08	1.86E-03
B V	1s – 3p	2 – 4	41.0162	2438061.769247	1.04E+11	5.27E-02
			40.8876	2439262.47192	1.04E+11	5.27E-02
			40.9960	2439263.44	1.05E+11	5.27E-02
B V	1s – 10p	2 – 2	36.8279	2715332.663687	2.63E+09	5.35E-04
			36.7118	2716717.18552	2.63E+09	5.34E-04
			36.8098	2716671.53	2.63E+09	5.35E-04
B V	2s – 5p	2 – 4	173.5901	576069.7268	3.09E+09	2.79E-02
			173.0452	576355.7087	3.09E+09	2.79E-02

C VI	1s – 6p	2 – 2	26.0389	3840393.60265	2.55E+10	2.60E-03
			25.9570	3842344.50616	2.55E+10	2.59E-03
			26.0260	3842298.50	2.56E+10	2.60E-03
C VI	1s – 8p	2 – 4	25.7175	3888402.2280	1.07E+10	2.12E-03
			25.6368	3890380.7976	1.07E+10	2.12E-03
			25.7048	3890331.13	1.07E+10	2.12E-03
C VI	2s – 3p	2 – 2	182.2340	548744.9426	2.91E+10	1.45E-01
			181.2340	549021.5801	2.91E+10	1.45E-01
N VII	1s – 4p	2 – 2	19.8360	5041328.7870	1.64E+11	9.66E-03
			19.7736	5043868.5984	1.63E+11	9.64E-03
			19.8261	5043853.5	1.64E+11	9.67E-03
N VII	1s – 9p	2 – 4	18.8287	5311038.3276	1.39E+10	1.48E-03
			18.7694	5313741.6981	1.39E+10	1.48E-03
			18.8193	5313699.6	1.39E+10	1.48E-03
N VII	2s – 6p	2 – 2	83.6635	1195264.7348	6.87E+09	7.21E-03
			83.3995	1195878.2089	6.87E+09	7.20E-03
O VIII	1s – 2p	2 – 4	18.9766	5269638.67469	2.57E+12	2.77E-01
			18.9167	5272365.45736	2.57E+12	2.77E-01
			18.9671	5272284.4	2.57E+12	2.77E-01
O VIII	1s – 5p	2 – 2	14.8282	6743914.5718	1.41E+11	4.65E-03
			14.7813	6747392.1441	1.40E+11	4.63E-03
			14.8207	6747312.6	1.41E+11	4.65E-03
O VIII	2s – 10p	2 – 4	59.2964	1686441.43419	2.52E+09	2.66E-03
			59.1092	1687311.8048	2.52E+09	2.65E-03
F IX	1s – 5p	2 – 2	11.7136	8537113.2787	2.26E+11	4.65E-03
			11.6767	8541411.096	2.25E+11	4.63E-03
			11.7076	8541440.4	2.26E+11	4.65E-03
F IX	1s – 8p	2 – 4	11.4235	8753888.29897	5.43E+10	2.12E-03
			11.3874	8758374.2296	5.42E+10	2.12E-03
			11.4177	8758327.6	5.42E+10	2.12E-03
F IX	2s – 3p	2 – 2	80.9255	1235704.14382	1.48E+11	1.45E-01
			80.6683	1236367.23976	1.48E+11	1.45E-01
Ne X	1s – 6p	2 – 4	9.3663	10676554.329474	1.98E+11	5.20E-03
			9.3368	10682006.4736	1.98E+11	5.19E-03
			9.3616	10681954	1.98E+11	5.20E-03
Ne X	1s – 10p	2 – 2	9.1983	10871583.8682	4.22E+10	5.35E-04
			9.1692	10877192.6384	4.19E+10	5.32E-04
			9.1936	10877085	4.22E+10	5.35E-04
Ne X	2s – 4p	2 – 4	48.5297	2060594.540083	9.71E+10	6.86E-02
			48.3770	2061633.70184	9.67E+10	6.82E-02
Na XI	1s – 3p	2 – 2	8.4645	11814006.0465	2.46E+12	2.64E-02
			8.4378	11820054.732	2.44E+12	2.62E-02
			8.4603	11819965	2.45E+12	2.63E-02
Na XI	1s – 7p	2 – 4	7.6805	13020002.92805	1.82E+11	3.21E-03

			7.6563	13026660.1144	1.81E+11	3.21E-03
			7.6766	13026597	1.82E+11	3.21E-03
Na XI	2s – 10p	2 – 2	31.3337	3191448.4724	9.04E+09	1.33E-03
			31.2342	3193148.8696	9.02E+09	1.32E-03
Mg XII	1s – 2p	2 – 2	8.4288	11864094.6198	1.30E+13	1.39E-01
			8.4023	11870061.1048	1.38E+13	1.38E-01
			8.4246	11869972	1.31E+13	1.39E-01
Mg XII	1s – 8p	2 – 4	6.4205	15575087.2455	1.72E+11	2.12E-03
			6.4001	15583437.5624	1.72E+11	2.12E-03
			6.4173	15582939	1.72E+11	2.12E-03
Mg XII	2s – 5p	2 – 2	30.0749	3325034.9251	1.03E+11	1.40E-02
			29.9795	3326794.9337	1.03E+11	1.39E-02
Al XIII	1s – 4p	2 – 4	5.7420	17415491.6161	1.96E+12	1.93E-02
			5.7238	17424801.2576	1.95E+12	1.93E-02
			5.7391	17424232	1.95E+12	1.93E-02
Al XIII	1s – 7p	2 – 2	5.4957	18196063.63198	3.55E+11	1.61E-03
			5.4783	18205545.9168	3.51E+11	1.59E-03
			5.4929	18205213	3.54E+11	1.60E-03
Al XIII	2s – 8p	2 – 4	22.9524	4356832.957286	3.46E+10	5.47E-03
			22.8798	4359103.91024	3.44E+10	5.44E-03
Si XIV	1s – 5p	2 – 2	4.8336	20688423.6984	1.33E+12	4.65E-03
			4.8185	20698605.5672	1.31E+12	4.59E-03
			4.8312	20698744	1.33E+12	4.65E-03
Si XIV	1s – 6p	2 – 4	4.7727	20952300.1741	7.63E+11	5.21E-03
			4.7577	20963155.4104	7.61E+11	5.19E-03
			4.7704	20962765	7.62E+11	5.20E-03
Si XIV	2s – 8p	2 – 2	19.7823	5055030.92512	4.66E+10	2.73E-03
			19.7194	5057741.33152	4.63E+10	2.72E-03
S XVI	1s – 3p	2 – 4	3.9928	25045284.78871	1.11E+13	5.29E-02
			3.9802	25058032.0992	1.10E+13	5.25E-02
			3.9908	25057550	1.10E+13	5.27E-02
S XVI	1s – 9p	2 – 2	3.5943	27821421.054779	3.82E+11	7.41E-04
			3.5830	27835805.4528	3.75E+11	7.25E-04
			3.5926	27835160	3.81E+11	7.38E-04
S XVI	2s – 5p	2 – 4	16.8791	5924471.996416	3.29E+11	2.81E-02
			16.8254	5927690.90736	3.25E+11	2.77E-02
Ar XVIII	1s – 4p	2 – 2	2.9892	33453562.64228	7.24E+12	9.70E-03
			2.9798	33470394.4912	7.09E+12	9.48E-03
			2.9878	33469780	7.23E+12	9.67E-03
Ar XVIII	1s – 7p	2 – 4	2.8607	34956406.031177	1.31E+12	3.22E-03
			2.8517	34973811.8928	1.30E+12	3.20E-03
			2.8594	34972570	1.31E+12	3.21E-03
Ar XVIII	2s – 3p	2 – 2	20.1391	4965453.12867	2.40E+12	1.46E-01
			20.0751	4968133.13768	2.38E+12	1.45E-01

Ca XX	1s – 7p	2 – 4	2.3148	43199580.4220	2.01E+12	3.22E-03
			2.3076	43220830.6328	1.99E+12	3.20E-03
			2.3138	43218950	2.00E+12	3.21E-03
Ca XX	1s – 10p	2 – 2	2.2906	43656400.941205	6.83E+11	5.37E-04
			2.2834	43678146.9776	6.62E+11	5.20E-04
			2.2895	43677400	6.81E+11	5.35E-04
Ca XX	2s – 5p	2 – 4	10.7734	9282101.3454	8.09E+11	2.81E-02
			10.7387	9287473.916	7.94E+11	2.76E-02
Fe XXVI	1s – 4p	2 – 2	1.4260	70125396.58696	3.20E+13	9.74E-03
			1.4215	70159747.5928	3.05E+13	9.29E-03
			1.4254	70157900	3.17E+13	9.67E-03
Fe XXVI	1s – 8p	2 – 4	1.3580	73632595.041757	3.87E+12	2.14E-03
			1.3538	73669065.7872	3.81E+12	2.11E-03
			1.3575	73664800	3.84E+12	2.12E-03
Fe XXVI	2s – 10p	2 – 2	5.5562	17997761.6091	2.90E+11	1.34E-03
			5.5379	18009553.1976	2.83E+11	1.31E-03

Tableau IV.A.3 Comparaison entre les différents résultats de calcul par différentes méthodes (i.e. En première ligne : Notre programme, deuxième ligne : Programme FAC, troisième ligne : Verner et al. [4]).

IV.A.2.3 Etude du Lamb shift

Nous étudions l'apport de la correction radiative (Lamb shift) à l'énergie du fondamental 1s et pour un état du niveau excité supérieur ($10p_{1/2}$). Fig. IV.A.1. montre l'allure de la contribution de la correction radiative du Lamb shift à l'énergie du fondamental pour différents ions. Il est bien clair que cette contribution augmente très fortement avec la charge Z de l'élément considéré et elle est presque proportionnelle à Z^4 . Cependant la contribution est faible pour les niveaux 10p et elle prend aussi la même allure que celui du niveau fondamental (Fig. IV.A.2). La figure IV.A.3 la contribution du Lamb shift aux niveaux $np_{1/2}$ est plus grande pour les niveaux bas des ions les plus lourds (pour $n=2$, cette contribution est 30 fois plus grande pour le Si XIV que pour le C VI).

IV.A.2.4 La loi d'échelle pour les taux de transition radiative

Le calcul numérique montre [12] qu'il est possible de prévoir des données atomiques pour des états $n_j l_j$ et pour les grands n_j suivant la loi d'échelle :

$$\langle n_i l_i \| \mathbf{r}^{(1)} \| n_j l_j \rangle^2 \propto (n_j)^{-3} \quad (\text{IV.A.2})$$

Le tableau IV.A.4 montre bien la conservation de la loi d'échelle pour les différentes probabilités de transition de raies de résonance 1s-np des trois éléments pris (H I, C VI et Si XIV) comme exemples.

IV.A.2.5 Etude des forces d'oscillateur

Dans le but d'examiner les fonctions d'onde pour les hauts n, nous calculons les forces d'oscillateur des transitions 1s-np de l'O VIII jusqu'à n=14 par le FAC et notre propre programme et jusqu'à n=10 pour Verner et al. [4]. Notons que le calcul FAC correspond exactement avec un calcul exact non relativiste utilisant des relations récursives des fonctions hydrogénoïdes [20]. La figure IV.A.4 montre une bonne concordance entre les différentes méthodes

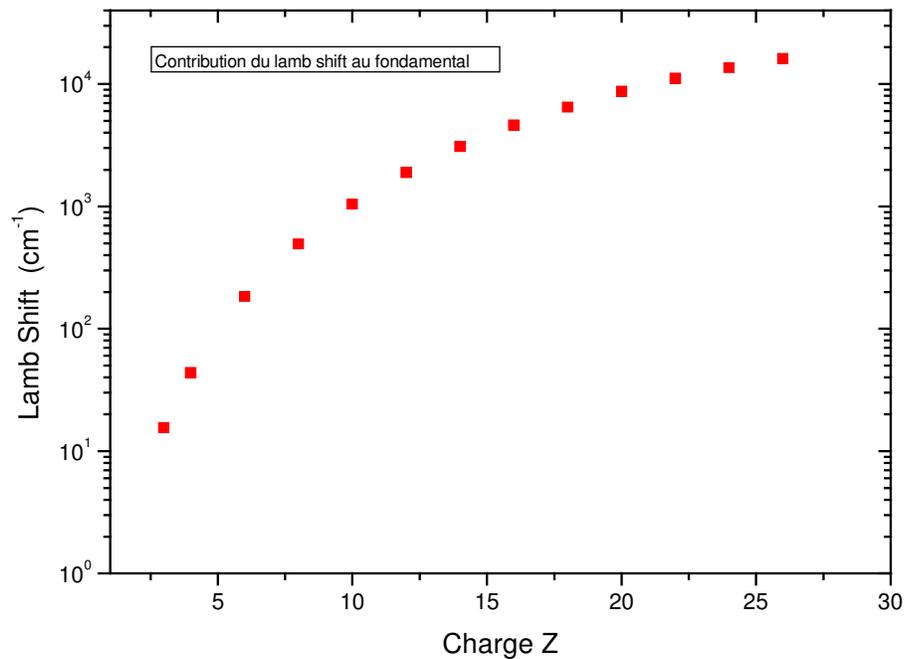
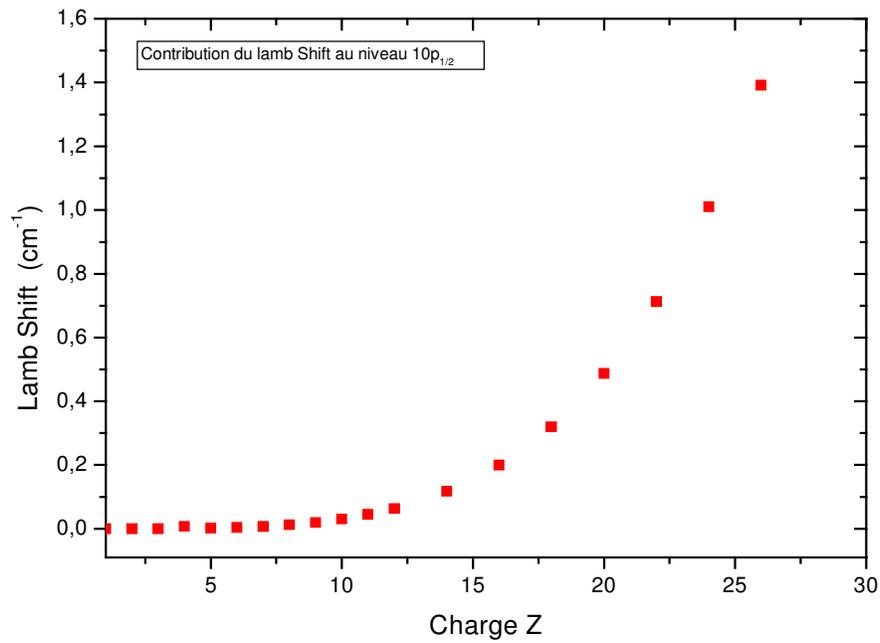
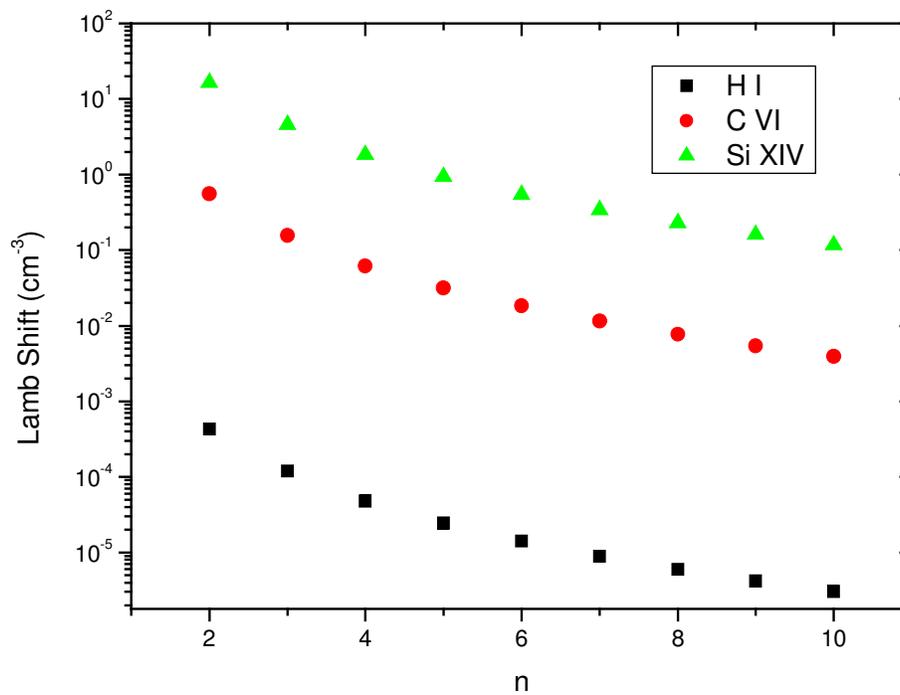


Fig. IV.A.1 Contribution du Lamb shift au fondamental

Fig. IV.A.2 Contribution du Lamb shift aux niveaux $10p_{1/2}$ Fig. IV.A.3 Contribution du Lamb shift aux niveaux $np_{1/2}$

transition	$A (s^{-1}) / \text{H I}$	$A (s^{-1}) / \text{C VI}$	$A (s^{-1}) / \text{Si XIV}$	A_{n+1}/A_n	$(n/n+1)^3$
1s-2p	6.258 E+08	8.117 E+11	2.420 E+13		
1s-3p	1.671 E+08	2.167 E+11	6.465 E+12	0.27	0.29
1s-4p	6.811 E+07	8.837 E+10	2.636 E+12	0.41	0.42
1s-5p	3.434 E+07	4.455 E+10	1.329 E+12	0.50	0.51
1s-6p	1.971 E+07	2.557 E+10	7.627 E+11	0.57	0.58
1s-7p	1.235 E+07	1.602 E+10	4.779 E+11	0.63	0.63
1s-8p	8246027	1.070 E+10	3.191 E+11	0.67	0.67
1s-9p	5778693	7.497 E+09	2.236 E+11	0.70	0.70
1s-10p	4206040	5.457 E+09	1.628 E+11	0.73	0.73
1s-11p	3156386	4.095 E+09	1.221 E+11	0.75	0.75
1s-12p	2429072	3.151 E+09	9.401 E+10	0.77	0.77
1s-13p	1909218	2.477 E+09	7.389 E+10	0.79	0.79
1s-14p	1527794	1.982 E+09	5.913 E+10	0.80	0.80

Tableau VI.A.4 Loi d'échelle pour quelques éléments.

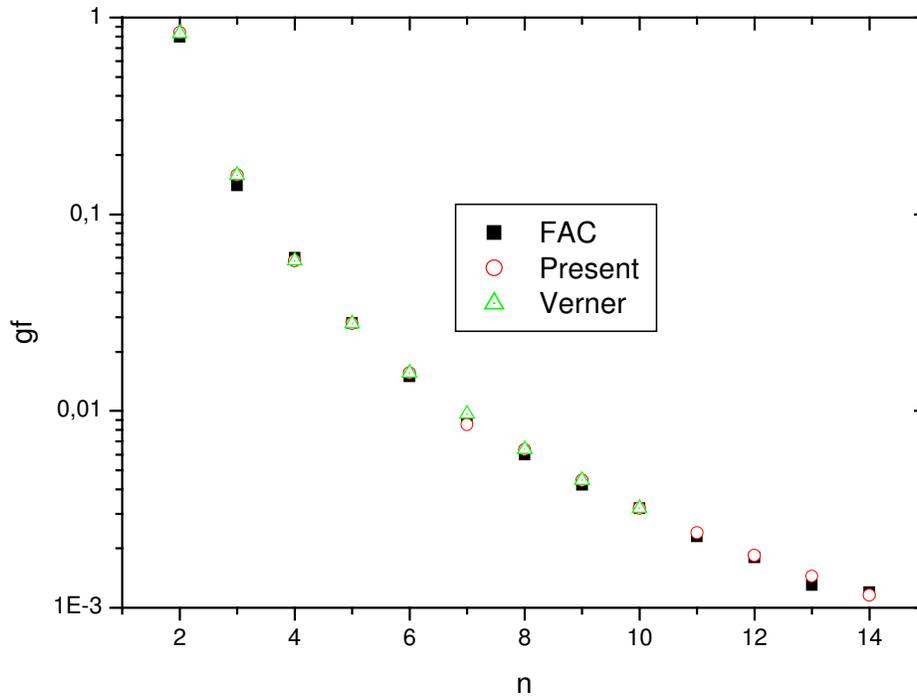


Fig. IV.A.4 Les forces d'oscillateur de 1s-np de l'O VIII.

IV.A.3 Calcul de structure atomique de l'He I

IV.A.3.1 Introduction

Nous utilisons pour le calcul de structure atomique de l'He I le programme FAC décrit auparavant. Notre but est de justifier l'exactitude des résultats donnés par le FAC pour la structure atomique de l'He I en les comparant avec d'autres méthodes et résultats de calcul disponibles. Ceci nous permet d'utiliser le programme FAC par la suite pour d'autres applications et données non disponibles (e.g., données atomiques pour les états de Rydberg de hautes n dépendant de spin).

IV.A.3.2 Niveaux d'énergie de l'He I

Nous utilisons le programme FAC pour le calcul de structure atomique de l'He I. Nous obtenons tous les énergies des niveaux $1snl$ aux grands nombres quantiques n . Nous étudions par la suite deux manières de diagonalisation des fonctions d'ondes des niveaux $1snl$ après avoir optimiser les deux niveaux les plus bas $1s^2$ et $1s2s$. Il s'agit de diagonaliser tous les fonctions d'ondes ensemble ou séparément (voir la fonction `fac.structure` dans l'annexe A). Le tableau IV.A.5 donne les longueurs d'ondes de quelques niveaux par rapport au niveau fondamental. Nous choisissons différents nombres quantiques orbitaux l et nombres quantiques principaux n . Notons que la calcul donne les énergies (longueurs d'ondes) de tous les niveaux et sous niveaux $1snl^{2S+1}L_j$.

Les résultats sur le tableau IV.A.5 montrent une concordance des résultats avec ceux publiés par NIST [6]. Les erreurs relatives ne dépassent pas le 5% pour le choix (*) alors qu'il n'excède pas le 3% pour le cas (+). La longueur d'onde (+) de la transition $1s^2 \ ^1S - 1s2p \ ^1P$ compare bien avec la valeur donnée par Verner et al. [4](583.8993-584-3340).

IV.A.3.3 Transitions et forces d'oscillateur pour l'He I

Dans le tableau suivant (IV.A.6) on étudie les séparations énergétiques ou les longueurs d'onde de quelques transitions de résonances (permises) ainsi que les forces

d'oscillateur gf. Les mêmes cas seront pris pour la diagonalisation des configurations 1snl que ceux prisent auparavant.

État	λ^* (Å)	λ^+ (Å)	λ_{NIST} (Å)	Err [*]	Err ⁺
1s2s ³ S	656.5631	640.1630	623.9089	0.052	0.026
1s2s ¹ S	623.5355	607.0786	599.8142	0.039	0.012
1s2p ³ P	609.0100	596.9127	589.8483	0.032	0.012
1s2p ¹ P	592.4967	583.8993	582.7892	0.017	0.002
1s4d ³ D	546.2122	536.4428	520.9634	0.048	0.030
1s4d ¹ D	546.2002	536.4309	520.9581	0.048	0.030
1s5f ³ F	540.0812	530.5276	514.3101	0.050	0.031
1s5f ¹ F	540.0790	530.5276	514.3101	0.050	0.031
1s7g ³ G	533.8764	524.5392	508.6697	0.049	0.031
1s7g ¹ G	533.8764	524.5392	508.6697	0.049	0.031
1s10f ³ F	530.6483	521.4227	505.7244	0.049	0.031
1s10f ¹ F	530.6483	521.4227	505.7244	0.049	0.031

Tableau IV.A.5 Comparaison des longueurs d'onde.

* se réfère à une diagonalisation de chaque configuration 1snl séparent

+ se réfère à une diagonalisation de tous les configurations 1snl ensemble.

Transition	λ^* (Å)	gf [*]	λ^+ (Å)	gf ⁺	λ_{HFR} (Å)	gf _{HFR}
1s3d ³ D ₂ -1s5f ³ F ₃	13001.8235	0.6134	12978.4855	0.6216	12698.2577	0.5382
1s6g ¹ G ₄ -1s8h ¹ H ₅	75253.4343	2.3280	75253.4343	2.3291	74979.3534	2.3482
1s9i ³ I ₆ -1s10k ³ K ₇	391243.572	25.3089	391243.572	25.3277	388498.740	25.5293

Tableau IV.A.6 Comparaison des longueurs d'onde et forces d'oscillateur.

La comparaison avec un calcul Hartree Fock Relativiste (HFR modifié) [12,21] nous montre une bonne concordance. A part les transitions D-F les erreurs relatives sur les longueurs d'onde et les forces d'oscillateur n'excèdent pas le 1%. Pour la transition D-F les

erreurs sont de l'ordre de 2% pour les longueurs d'onde et de 15 % pour les forces d'oscillateur. Ceci est dû probablement au problème de chevauchement entre les niveaux, i.e., aux mélanges entre fonctions d'onde.

IV.A.3.4 Couplages LS et jj pour l'He I

IV.A.3.4.a Position du problème

Actuellement, et dépendant de leurs rôles, les deux approches non relativistes ou relativistes sont utilisées pour l'étude de structure et propriétés des atomes et des ions à plusieurs électrons incluant aussi les atomes neutres lourds et les atomes fortement ionisés. L'approche non relativiste est basée sur le couplage LS alors que dans le cas relativiste, la théorie implique l'utilisation du couplage jj dès le départ. Cependant, des effets relativistes des processus physiques pour un large domaine des atomes sont très importants. Ces derniers ne peuvent pas être évalués comme des corrections relativistes d'ordre α^2 (α est la constante de structure fine) dans l'approximation de Hartree-Fock-Pauli [22-23] alors que les niveaux d'énergie des atomes et des ions en considération sont bien classifiés avec l'utilisation du couplage LS. Donc il est utile de disposer d'une méthode efficace qui combine les deux approches, e.g., un calcul qui débute par des fonctions d'onde de Dirac-Hartree-Fock dans le couplage jj et les résultats seront présentés dans le couplage LS.

IV.A.3.4.b Les différents couplages

Dans le couplage LS les interactions électrostatiques entre électrons sont plus fortes que les interactions entre le spin d'un électron et son propre mouvement orbital. Quand la charge Z augmente les interactions spin orbite deviennent plus importantes jusqu'à une limite où ces interactions deviennent plus fortes que les termes de Coulomb. Ainsi les conditions de couplage se rapprochent du couplage jj.

Cependant un couplage intermédiaire existe dans la limite où les termes de Coulomb sont comparables aux interactions spin orbite. La matrice de l'Hamiltonien n'est peut pas approximativement être diagonale ni dans la représentation LS ni dans la représentation jj. Les valeurs propres ne seront pas alors directement les éléments diagonaux du matrice dans la représentation appropriée. La seule procédure est d'écrire la matrice de l'Hamiltonien complet

dans une représentation appropriée. Ceci peut être fait, par exemple, par la transformation du matrice spin orbite à partir de la représentation jj à la représentation LS ou par une transformation similaire à partir du LS au jj.

IV.A.3.4.c Calcul des éléments des matrices de transformation

Dans le cadre de l'étude des fonctions d'onde des atomes d'hélium nous avons utilisé les matrices de transformation entre les deux couplages LS et jj pour les coefficients de mélange entre les états singulets et triplets. En effet la plus grande correction relativiste provient du mélange entre les états singulets et triplets de même nombres quantiques n, L et J dû à l'Hamiltonien de structure fine. Les fonctions d'onde obtenues par la diagonalisation des matrices 2x2 (Hamiltonien incluant les corrections relativistes) sont :

$$\psi(n^1L) = \cos \theta \psi_0(n^1L) + \sin \theta \psi_0(n^3L) \quad (\text{IV.A.3})$$

$$\psi(n^3L) = \sin \theta \psi_0(n^1L) + \cos \theta \psi_0(n^3L) \quad (\text{IV.A.4})$$

Les valeurs de $\sin \theta$ sont données au tableau suivant (IV.A.7) [9].

Etat	Sin θ	état	sin θ	Etat	Sin θ
2P	0.0002783				
3P	0.0002558	3D	0.0156095		
4P	0.0002498	4D	0.0113960	4F	0.6041024
5P	0.0002473	5D	0.0101143	5F	0.5499291
6P	0.0002460	6D	0.0095289	6F	0.5180737
7P	0.0002452	7D	0.0092067	7F	0.4984184
8P	0.0002447	8D	0.0090087	8F	0.4855768
9P	0.0002444	9D	0.0088777	9F	0.4767620
10P	0.0002442	10D	0.0087862	10F	0.4704595
5G	0.6934752				
6G	0.6931996	6H	0.6962385		
7G	0.6929889	7H	0.6962377	7I	0.6979315
8G	0.6928356	8H	0.6962372	8I	0.6979315
9G	0.6927195	9H	0.6962374	9I	0.6979316
10G	0.6926329	10H	0.6962353	10I	0.6979316
8K	0.6991671				
9K	0.6991671	9L	0.7001089		
10K	0.6991671	10L	0.7007089	10M	0.7008507

Tableau IV.A.7 Valeurs de $\sin \theta$ pour les différents états de l'He I.

On note que les corrections dues aux mélanges entre états sont particulièrement significatives pour les transitions D-F et F-G [9] où le couplage intermédiaire est dominant.

Dans ce qui suit on va utiliser les matrices T de transformation entre les deux couplages LS et jj (voir Annexe B) à savoir :

$$\langle LS | j_1 j_2 \rangle = [L, S, j_1, j_2]^{1/2} \begin{Bmatrix} l_1 & l_2 & L \\ s_1 & s_2 & S \\ j_1 & j_2 & J \end{Bmatrix} \quad (\text{IV.A.5})$$

où :

$$[L, S, j_1, j_2] = ((2L + 1)(2S + 1)(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)) \quad (\text{IV.A.6})$$

IV.A.3.4.d Etude des états 2^3P_1 et 2^1P_1

La matrice M_{LS} des coefficients de mélange dans la représentation LS dans les bases $|11\rangle$ et $|10\rangle$ est donnée par le tableau IV.A.7 à savoir :

$$\begin{pmatrix} |^3P_1\rangle \\ |^1P_1\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \pm 0.99999996 & -0.00027829 \\ 0.00027829 & \pm 0.99999996 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |11\rangle \\ |10\rangle \end{pmatrix} \quad (\text{IV.A.7})$$

La matrice T de passage est calculée par un code 369j [24], ce qui donne :

$$T \equiv \begin{pmatrix} 0.8164965 & -0.5773502 \\ 0.5773502 & 0.8164965 \end{pmatrix} \quad (\text{IV.A.8})$$

Ainsi la matrice M_{jj} des coefficients de mélange dans la représentation jj est alors obtenue par :

$$\begin{aligned}
 M_{jj} &= M_{LS}T \\
 &= \begin{pmatrix} 0.816335 & -0.57712 \\ \pm 0.57712 & \pm 0.81633 \end{pmatrix}
 \end{aligned}
 \tag{IV.A.9}$$

Le calcul par le programme FAC donne pour les coefficients de mélange dans la représentation jj pour les états 2^3P_1 et 2^1P_1 la matrice M_{jj} tel que:

$$M_{jj} = \begin{pmatrix} -0.81638 & 0.57751 \\ -0.57751 & -0.81638 \end{pmatrix}
 \tag{IV.A.10}$$

Les résultats ainsi obtenus par notre calcul se coïncident bien (à un facteur de phase près) avec ceux obtenus par Drake [9] après utilisation du matrice de passage entre les deux couplages.

IV.A.3.4.e Etude des autres états P et D

Par la même manière décrite auparavant nous avons étudié autres états P et D. A chaque fois on calcule la matrice de transformation T entre les deux bases de deux couplages et on compare ainsi les coefficients obtenus.

Le tableau IV.A.8 rassemble les résultats obtenus pour les coefficients de mélange obtenus par transformation des coefficients de Drake sur la base LS et les coefficients de mélange obtenus par le programme FAC sur la base jj.

Le tableau IV.A.8 montre une bonne concordance entre les coefficients de mélange entre les états singulets et triplets calculés par le programme FAC dans la base jj et ceux trouvés par transformation LS-jj des coefficients de Drake [9] dans la base LS. Cependant nous avons remarqué que le calcul pour les états F et G ne coïncide pas proprement pour les deux bases à cause du chevauchement des ces états F et G avec les autres états.

IV.A.4 Calcul de structure atomique de l'Ar XVII

Le choix de l'Ar XVII pour le calcul de structure atomique est justifié par la présence

Etat	Coefficients (LS→jj)		Coefficients (jj)	
3^3P_1	0.816348896	-0.5775590691	-0.81658757	0.57722156
3^1P_1	0.577559069	0.816348896	0.577221662	0.8165875045
3^3D_2	0.764629952	-0.644469571	0.776386032	-0.630257669
3^1D_2	0.644469571	0.764629952	-0.630257669	-0.776386032
4^3P_1	0.816352355	-0.577554178	-0.8165962	0.5772233
4^1P_1	0.577554178	0.816352355	0.5772231	0.8165864
4^3D_2	0.767338912	-0.641241758	-0.775931591	0.630817061
4^1D_2	0.641241758	0.767338912	-0.63081706	-0.77593159

Tableau IV.A.8 Comparaison des coefficients de mélange entre états

des spectres de l'Ar XVII dans les tokamaks [25] et l'utilisation de l'Ar XVII pour le diagnostic [26]. Il a été choisi aussi dans le but d'étudier la structure atomique d'un élément héliumoïde de grand Z.

IV.A.4.1 Niveaux d'énergie et forces d'oscillateur de l'Ar XVII

Nous calculons les niveaux d'énergie, les forces d'oscillateur pour l'Ar XVII par le programme FAC. Les deux configurations de diagonalisation ont été aussi étudiées. Une optimisation radiale a été faite sur le niveau fondamental seul $1s^2$.

Le tableau IV.A.9 donne les résultats de calcul des niveaux d'énergie pour quelques niveaux à partir du niveau fondamental, choisis pour être comparés à ceux disponibles dans la littérature.

Les résultats de notre calcul pour les énergies se coïncident bien avec ceux publiés par NIST. Les erreurs relatives sont très faibles comme les montre le tableau IV.A.9.

Etat	Energie_NIST (eV)	Energie (eV)	Erreur
1s2s 3S_1	3104.1407	3102.8425	0.00042
1s2p 3P_0	3122.8869	3122.0332	0.00027
1s2p 3P_1	3123.5208	3122.6926	0.00026
1s2p 3P_2	3126.2829	3125.4217	0.00027
1s2s 1S_0	3124.5224	3123.9989	0.00017
1s2p 1P_1	3139.5516	3139.3447	0.00007
1s3p 3P_0	3679.2299	3678.0855	0.00031
1s3p 3P_1	3679.4235	3678.2832	0.00031
1s3p 3P_2	3680.2433	3679.0983	0.00031
1s3d 3D_2	3683.1061	3681.8330	0.00035
1s3d 3D_1	3683.1075	3681.8279	0.00034
1s3d 3D_3	3683.4323	3682.1504	0.00035
1s3d 1D_2	3683.5840	3682.3238	0.00034
1s3p 1P_1	3683.8400	3682.8304	0.00027
1s4p 1P_1	3874.8900	3873.4961	0.00036
1s5p 3P_0	3962.3559	3960.9246	0.00036
1s5p 3P_1	3962.4000	3960.9675	0.00036
1s5p 3P_2	3962.5753	3961.1442	0.00036
1s5d 1D_2	3963.3000	3962.0217	0.00032
1s5p 1P_1	3963.3500	3961.9108	0.00036

Tableau IV.A.9 Niveaux d'énergie de quelques niveaux de l'Ar XVII .

Transition	λ (A)	λ_{Verner} (A)	Erreur
1s 2 1S -1s2p 1P_1	3.9389	3.9488	0.0025
1s 2 1S -1s3p 1P_1	3.3576	3.3654	0.0023
1s 2 1S -1s4p 1P_1	3.1924	3.1996	0.0023
1s 2 1S -1s5p 1P_1	3.1211	3.1281	0.0022
1s 2 1S -1s6p 1P_1	3.0837	3.0950	0.0036

Tableau IV.A.10 Comparaison des longueurs d'onde pour l'Ar XVII.

Les longueurs d'onde de transition de résonance présentent pratiquement les mêmes résultats pour les deux calculs. En effet le tableau IV.A.10 montre des très faibles erreurs entre les deux calculs. Les forces d'oscillateur calculées par une diagonalisation de tous les configurations $1s^2nl$ donne des très bon résultats comparés à ceux de Verner et al. [4]. Les erreurs relatives ne dépassent pas le 2% (tableau IV.A.11).

Transition	gf	gf_Verner	Erreur
$1s^2\ ^1S - 1s2p\ ^1P_1$	0.765	0.775	0.0129
$1s^2\ ^1S - 1s3p\ ^1P_1$	0.154	0.155	0.0064
$1s^2\ ^1S - 1s4p\ ^1P_1$	0.0575	0.0573	0.0035
$1s^2\ ^1S - 1s5p\ ^1P_1$	0.028	0.0276	0.0145
$1s^2\ ^1S - 1s6p\ ^1P_1$	0.0158	0.0155	0.0193

Tableau IV.A.11 Comparaison des forces d'oscillateur

IV.A.5 Conclusion

Dans cette partie nous avons calculé les structures atomiques de quelques atomes et ions hydrogénoïdes. Les résultats obtenus par notre calcul pour les énergies, les longueurs d'onde, les forces d'oscillateur et les taux de transition radiative de quelques raies donnent des résultats très satisfaisants et comparables aux résultats de la littérature. Cependant notre programme de calcul se limite à $n=14$ et il nécessite une amélioration pour prendre en compte les hauts nombres quantiques n et l .

D'autre part nous avons aussi calculé les structures atomiques de l'He I et de l'Ar XVII. Une comparaison entre les différents résultats de calcul pour les longueurs d'onde, les énergies, les taux de transition radiative et les forces d'oscillateur montre une bonne concordance entre les différentes méthodes. Les erreurs relatives sont trop faibles.

B. Etude des transitions radiatives

IV.B.1 Calcul des taux de probabilité de transition radiative pour l'He I

IV.B.1.1 Introduction

Les simulations cinétiques des populations atomiques montrent que les méthodes de diagnostic avancées comme le transport des particules et l'échange de charge nécessitent entre autre une connaissance approfondie des transitions d'intercombinaison jusqu'aux grands nombres quantiques principaux [27-28]. Ces transitions ne sont pas disponibles dans la littérature et le calcul de structure atomique est assez difficile. Cependant quelques valeurs pour les énergies et les probabilités de transition sont données par Drake [9] et d'autres par NIST [6], alors que des formules générales pour les transitions d'intercombinaison ne sont pas disponibles. Ces formules sont indispensables pour les simulations cinétiques de populations des états singulets et triplets de hauts nombres quantiques principaux n . Notons que le spectre de l'hélium neutre a été observé jusqu'au niveau $n=25$ dans les expériences de plasma de « divertor » NAGDIS-II [29].

Le développement des formules générales, même pour le cas de l'hélium neutre, rencontrent un problème lié au mélange des fonctions d'onde des singulets et des triplets du au couplage intermédiaire. Ce mélange présente une contribution très grande pour les hauts nombres quantiques, e.g. la fonction d'onde triplet $1s4f$ présente une contribution de 30 pour cent de la fonction d'onde singulet $1s4f$ et la fonction d'onde triplet $1s5g$ a une contribution de presque 50 pour cent à partir de la fonction d'onde singulet $1s5g$ [30]. Cette situation empêche de produire des lois simples plus particulièrement pour les transitions d'intercombinaison et semble nier une image simple de population du singulet et du triplet.

Nous allons présenter notre calcul pour tout type de transition en tenant compte des interactions de configurations et des effets de couplage intermédiaire. Des lois d'échelle seront ensuite présentées.

IV.B.1.2 Schéma de calcul

Nous calculons les taux de transition radiative pour les niveaux $1snl$ de l'He I jusqu'à $n = 10$ suivant le diagramme décrit sur la figure IV.B.1

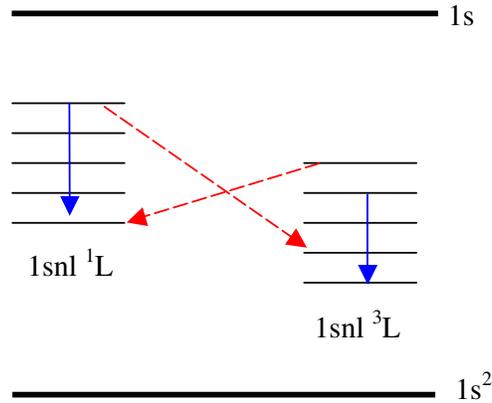


Fig. IV.B.1 Schéma de calcul des transitions

IV.B.1.3 Methode de calcul

Nous utilisons toujours le programme FAC pour le calcul des taux de transition radiative. Ces derniers sont calculés dans l'approximation « single multipôle » avec des rangs arbitraires. Nous testons plusieurs configurations de calcul pour avoir une bonne convergence et une bonne concordance des résultats avec la littérature. Il s'agit de changer à chaque fois le type de diagonalisation des états ainsi que les états utilisés pour une optimisation radiale.

Nous utilisons les dix premiers états $1snl$ pour le calcul des taux moyens de transition radiative. Les autres taux seront obtenus par des lois d'échelle.

IV.B.1.4 Taux de transition radiative de résonance et d'intercombinaison

Nous étudions plusieurs schémas de configuration pour le calcul par le programme FAC des taux de transition radiative de résonance ($1snl\ ^1L-1sn'l\ ^1L$ ou $1snl\ ^3L-1sn'l\ ^3L$) et d'intercombinaison ($1snl\ ^1L-1sn'l\ ^3L$ ou $1snl\ ^3L-1sn'l\ ^1L$). A chaque fois on vérifie la loi d'échelle pour une transition individuelle suivant :

$$A(1s_{n'l} - 1s_{(n'+1)l'}) / A(1s_{n'l} - 1s_{n'l'}) = (n'/n'+1)^3 \quad (\text{IV.B.1})$$

N	$1s^2 \ ^1S_0 - 1snp \ ^1P_1$			R_T	R_D	R_{HFR}	R_F
	Drake	HFR	FAC				
2	1.7989D+09	2.244 10+09	1.39367398E+09				
3	5.6634D+08	7.373 10+08	4.81425344E+08	0.29	0.31	0.33	0.35
4	2.4356D+08	3.303 10+08	2.02297264E+08	0.42	0.42	0.45	0.42
5	1.2582D+08	1.795 10+08	1.03173400E+08	0.51	0.51	0.54	0.51
6	7.3174D+07	11.003 10+7	5.94205040E+07	0.58	0.58	0.61	0.58
7	4.6224D+07	7.353 10+7	3.72636440E+07	0.63	0.63	0.69	0.63
8	3.1031D+07	5.236 10+7	2.48769060E+07	0.67	0.67	0.71	0.67
9	2.1826D+07	3.917 10+7	1.74213620E+07	0.7	0.7	0.74	0.70
10	1.5929D+07	3.05 10+7	1.26700760E+07	0.73	0.73	0.78	0.73

Tableau IV.B.1 Comparaison des taux de transition radiative.

On note que cette loi est valable pour les hydrogéoïdes. Elle est utilisée ici à titre estimatif. Les lois d'échelle adaptées pour l'hélium seront présentées ultérieurement.

Après plusieurs essais nous adoptons un schéma de diagonalisation de chaque configuration $1s_{n'l}$ et une optimisation radiale des deux niveaux du bas à savoir $1s^2$ et $1s2s$.

Le tableau IV.B.1 présente une comparaison entre nos résultats trouvés pour les taux de transition radiative de résonance comparés au calcul de Drake [9] et au calcul Hartree-Fock relativiste (HFR modifié) [12,21]. Les résultats ont les mêmes ordre de grandeur. La loi d'échelle est vérifiée pour ces transitions pratiquement à partir de $n=4$ pour nos calculs. En effet le rapport théorique $R_T=(n/n+1)^3$ coïncide bien avec les rapports de taux décrits à l'éq.IV.B.1 (Notons que R_D désigne le rapport de Drake, R_{HFR} le rapport de HFR et R_F le rapport FAC de notre calcul). D'une autre part les valeurs pour les taux montrent une bonne convergence.

Les tableaux IV.B.2 montrent les comparaisons faites entre les taux de transition des différents états (Les lettres d'exposant D se réfère au Drake et E au calcul FAC). Les résultats

sont aussi en bonne accord sauf pour quelques raies d'intercombinaison ($1s4p\ ^1P_1-1s5d\ ^3D_2$, $1s4p\ ^3P_1-1s5d\ ^1D_2$, $1s4d\ ^1D_2-1s5f\ ^3F_3$, etc). Ceci peut provenir des coefficients de mélange pour les états F et G.

	1s5p 1P1	1s5p 3P1	1s5d 1D2	1s5d 3D2	1s5f 1F3	1s5f 3F3
1s4s 1S0	2.9323D+05 1.5355E+05					
1s4s 3S1		1.2068D+05 2.6992E+05				
1s4p 1P1			1.5254D+06 1.1971E+06	1.5069D+02 7.0271E+02		
1s4p 3P1			9.1222D+01 9.4675E+02	9.5937D+05 1.6244E+06		
1s4d 1D2	1.6330D+05 3.5594E+05	3.0758D+01 1.2041E+01			1.8294D+06 1.6364E+06	7.5674D+05 1.6436E+05
1s4d 3D2	2.0046D+01 2.6319E+01	2.4530D+05 1.5781E+05			6.6970D+05 1.4792E+05	1.6288D+06 1.4623E+06
1s4f 1F3			3.3200D+04 2.6249E+04	1.6375D+04 1.4621E+04		
1s4f 3F3			1.8332D+04 1.6372E+04	2.9793D+04 2.3177E+04		

	1s7p 1P1	1s7p 3P1	1s7d 1D2	1s7d 3D2	1s7g 1G4	1s7g 3G4
1s4s 1S0	1.520D+05 1.069E+05					
1s4s 3S1		0.8595D+05 1.6575E+05				
1s4p 1P1			5.334D+05 4.861E+05	0.433D+02 3.116E+02		
1s4p 3P1			0.308D+02 3.362E+02	3.904D+05 5.263E+05		
1s4d 1D2	0.468D+05 1.079E+05					
1s4d 3D2		6.8335D+04 7.4567E+04				
1s4f 1F3			7.389D+03 4.514E+03	3.662D+03 2.530E+03	6.2114D+05 6.0433E+05	1.102D+04 1.033E+04
1s4f 3F3			4.094D+03 2.827E+03	6.636D+03 3.992E+03	6.3643D+03 5.90350E+03	6.148D+05 5.979E+05

	1s10d 1D2	1s10d 3D2	1s10f 1F3	1s10f 3F3	1s10g 1G4	1s10g 3G4
1s4s 1S0						
1s4s 3S1						
1s4p 1P1	1.7528D+05 1.5031E+05					
1s4p 3P1		1.3482D+05 1.5482E+05				
1s4d 1D2			1.735D+05 1.589E+05	4.680D+04 0.547E+04		
1s4d 3D2			4.147D+04 0.493E+04	1.547D+05 1.415E+05		
1s4f 1F3	1.978D+03 1.039E+03	9.8303D+02 4.9264E+02			1.4867D+05 1.4284E+05	2.619D+03 2.326E+03
1s4f 3F3	1.098D+03 0.557E+03	1.7780D+03 0.9266E+03			1.5084D+03 1.3075E+03	1.471D+05 1.413E+05

Tableaux IV.B.2 Comparaison entre les valeurs de taux de transition (Drake (D) et FAC (E))

IV.B.1.5 Etude des taux moyens de transition radiative

IV.B.1.5.a Taux moyens de transition radiative

Le taux total d'une transition entre deux niveaux est la somme moyenne de tous les transitions radiatives présent par leurs poids statistiques sur la somme des poids statistiques :

$$\bar{A}(n^{2S+1}L - n'^{2S'+1}L) = \frac{\sum_i g_i A_i}{\sum_i g_i} \quad (\text{IV.B.2})$$

La somme porte sur tous les transitions radiatives du niveau n vers le niveau n' . les poids statistiques prennent les valeurs des états du niveau n . Pour chaque deux niveaux différents n et n' on aura à calculer quatre valeurs différentes pour les taux moyens suivant le schéma suivant.

IV.B.1.5.b Schéma de calcul

La figure IV.B.2 décrit le schéma de calcul pour les taux moyens de transition radiative. Chaque niveau peut contenir des états singulets et triplets (bien évidemment, les états singulets portent la notation spectroscopique 1L alors que les triplets portent la notation 3L).

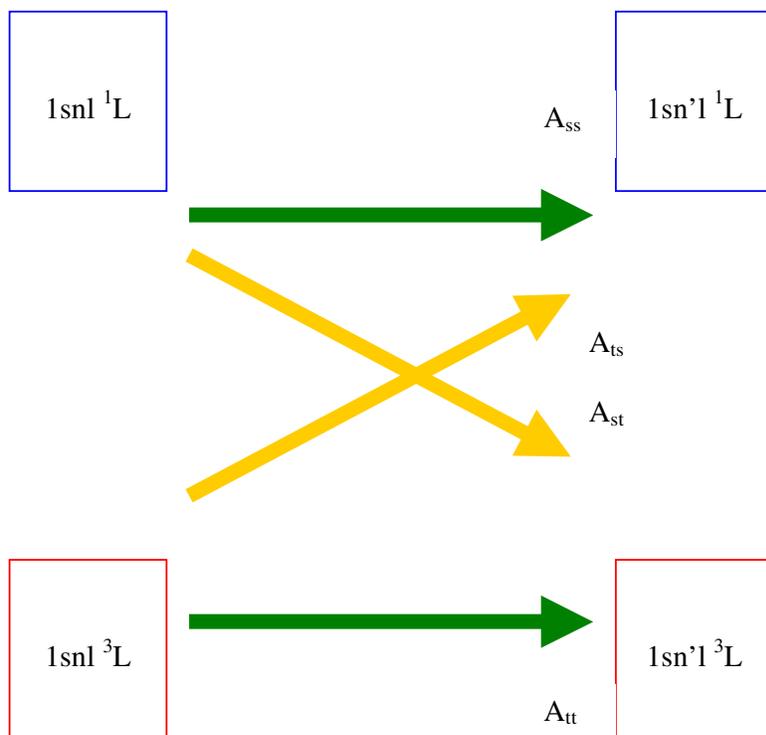


Fig. IV.B.2 Schéma de calcul des taux moyens.

IV.B.1.5.c Méthode de calcul

Nous développons un programme (Averate) pour le calcul des taux moyens entre tous les niveaux jusqu'à $n=10$. Ce programme se base sur les taux de transition radiative calculés par le programme FAC. Il fait la sélection entre les états singulets et triplets. Ce même programme permet aussi le calcul des taux moyens de transition radiative pour des données calculées par HFR (modifié) [12,21,30]. Pour les taux de Drake [9] nous faisons un calcul direct à part à partir des taux de transition radiative.

IV.B.1.5.d Résultats de calcul et discussion

Les résultats de calcul pour tous les taux moyens de transition radiative seront donnés sur l'annexe C. Les résultats des taux de transition singulet-singulet (Ass) présentés sur le tableau C.1 comparent bien en général avec ceux calculés par HFR (modifié) et Drake. Ils n'excèdent pas une erreur relative de 15% à partir des transitions $n=5$ à $n=3$. Le tableau C.2 pour les transitions triplets-singulets montre que les résultats de FAC pour les taux de transition radiative sont convergents. Cependant la correspondance entre les différents résultats des différentes méthodes est mieux pour les transitions entre les grands nombres quantiques n . Le calcul HFR (modifié) donne des résultats de même ordre que ceux calculés par Drake. les mêmes remarques se généralisent pour le tableau C.3 des taux de transition singulets-triplets. Les taux de transition entre les états triplets-triplets présentés sur le tableau C.4 sont en très bon accord. Les taux de FAC n'excèdent pas le 4% relativement aux taux de Drake.

IV.B.2 Effets de mélange des fonctions d'onde

Les fonctions d'onde $1s nl$ des états singulets (S) et triplets (T) simplement excités du système d'hélium peuvent être écrites sous les formes [30] :

$$\Psi_S(nl) = \sqrt{1 - \omega^2} \Psi_S^{LS}(nl) - \omega \Psi_T^{LS}(nl) \quad (\text{IV.B.3})$$

$$\Psi_T(n'l') = \omega' \Psi_S^{LS}(n'l') + \sqrt{1 - \omega'^2} \Psi_T^{LS}(n'l') \quad (\text{IV.B.4})$$

où ω et ω' sont les coefficients de mélange (définies comme positif) et LS indique les fonctions d'onde pures dans le couplage LS. Un élément de matrice d'intercombinaison d'un opérateur Θ prend la forme [30] :

$$\begin{aligned} \langle \Psi_T(n'l') | \Theta | \Psi_S(nl) \rangle = & \sqrt{1 - \omega^2} \quad \omega' \langle \Psi_S^{LS}(n'l') | \Theta | \Psi_S^{LS}(nl) \rangle + \\ & \sqrt{1 - \omega'^2} \sqrt{1 - \omega^2} \langle \Psi_T^{LS}(n'l') | \Theta | \Psi_S^{LS}(nl) \rangle - \\ & \omega \omega' \langle \Psi_S^{LS}(n'l') | \Theta | \Psi_T^{LS}(nl) \rangle - \\ & \omega \sqrt{1 - \omega'^2} \langle \Psi_T^{LS}(n'l') | \Theta | \Psi_T^{LS}(nl) \rangle \end{aligned} \quad (\text{IV.B.5})$$

Pour les transitions radiatives spontanées les éléments de matrice d'intercombinaison entre les fonctions d'onde LS disparaissent. En supposant (pour l'opérateur dipolaire électrique) que :

$$\langle \Psi_S^{LS}(n'l') | \bar{d} | \Psi_S^{LS}(nl) \rangle \cong \langle \Psi_T^{LS}(n'l') | \bar{d} | \Psi_T^{LS}(nl) \rangle \quad (\text{IV.B.6})$$

La probabilité de transition A peut être écrite:

$$A_{st,ts} \propto \left| \langle \Psi_S^{LS}(n'l') | \bar{d} | \Psi_S^{LS}(nl) \rangle \right|^2 \left[\omega'^2 (1-\omega^2) + \omega^2 (1-\omega'^2) - 2\omega\omega' \sqrt{1-\omega^2} \sqrt{1-\omega'^2} \right] \quad (\text{IV.B.7})$$

Si $\omega \ll \omega'$ la probabilité de transition d'intercombinaison est proportionnelle au carré du coefficient de mélange:

$$A_{st,ts} \propto \omega'^2 \quad (\text{IV.B.8})$$

Pour les grands nombres quantiques principaux n ce dépendance peut conduire à une destruction complète de la séparation de fonction d'onde singulet et triplet suite aux valeurs prises par les coefficients de mélange ω'^2 jusqu'aux 0.5. Cependant les probabilités de transition ne suivent pas cette tendance. Ceci est dû au terme d'interférence (dernier terme dans l'éq. IV.B.7 avec le signe négatif). Pour les grands nombres quantiques l'état le plus bas présente un coefficient de mélange considérable qui conduit à une augmentation radicale de la valeur de l'élément de matrice. Par conséquent pour les grands nombres quantiques n et n' les probabilités de transition d'intercombinaison n'augmentent pas suite à l'augmentation du nombre quantique angulaire l. ceci conduit à une convergence de la probabilité de transition [30]. Par exemple la transition d'intercombinaison à partir de l'état 6f est grande comme la transition autorisée de l'état de spin $A(1s6f \ ^3F_3 - 1s5d \ ^1D_2)/A(1s6f \ ^3F_4 - 1s5d \ ^3D_2) = 1.9 \cdot 10^5 / 4.8 \cdot 10^5 = 4.0 \cdot 10^{-1}$, alors que pour les hauts moments angulaires on observe une diminution radicale de probabilité de transition due aux effets d'interférence, $A(1s6g \ ^3G_4 - 1s5f \ ^1F_3)/A(1s6g \ ^3G_4 - 1s5f \ ^3F_3) = 4.2 \cdot 10^4 / 1.0 \cdot 10^6 = 4.2 \cdot 10^{-2}$ et $A(1s6h \ ^3H_5 - 1s5g \ ^1G_4)/A(1s6h \ ^3H_5 - 1s5g \ ^3G_4) = 3.2 \cdot 10^2 / 1.6 \cdot 10^6 = 2.0 \cdot 10^{-4}$. Pour les bas moments angulaires, les transitions d'intercombinaison sont faibles car les coefficients de mélange sont faibles, $A(1s6d \ ^3D_2 -$

$$1s5p \ ^1P_1)/A(1s6d \ ^3D_2 - 1s5p \ ^3P_1) = 4.1 \cdot 10^1 / 2.7 \cdot 10^5 = 1.5 \cdot 10^{-4}, A(1s6p \ ^3P_1 - 1s5s \ ^1S_0)/A(1s6p \ ^3P_1 - 1s5s \ ^3S_1) = 4.6 \cdot 10^{-3} / 3.2 \cdot 10^4 = 1.4 \cdot 10^{-7}.$$

Dans les simulations cinétiques de population pour les équations de taux qui sont généralement employées dans l'analyse des propriétés radiatives, les mélanges de fonctions d'onde sont représentées seulement à travers les probabilités de transition respectives [30]. Pour les grands nombres quantiques n et n' ces sont les transitions entre les niveaux de différents spin S et S' qui jouent le rôle primordial dans le processus radiative et collisionnel de population [30]. Par conséquent il est indispensable de considérer les probabilités de transition $1sn'l' \ L'S'J' \rightarrow 1snl \ LSJ$ moyennées sur L', L et J', J en laissant les états de spin pour tous les nombres quantiques principaux n', n :

$$A(n'S' \rightarrow nS) = \sum_{L'J'} \sum_{LJ} \frac{2J'+1}{g_{n'}} A(n'L'S'J' \rightarrow nLSJ) \quad (\text{IV.B.9})$$

$$g_{n'} = \sum_{J' \in 1sn'l'S'J'} 2J'+1 \quad (\text{IV.B.10})$$

IV.B.3 Lois d'échelle

Nous développons dans la suite des formules générales pour les probabilités de transitions autorisées et interdites pour les états de spin. Pour se faire nous avons utilisé les résultats de calcul des probabilités de transition radiative de trois différents calculs [30], i.e. FAC [16], Drake [9] et HFR modifié [12,21,30].

Les taux de transitions autorisées et interdites pour les états de spin dans l'approximation dipolaire électrique seront représentés par la forme suivante [30] :

$$A(n'S' \rightarrow nS) = A_{n'n} g(n'S' \rightarrow nS) \quad (\text{IV.B.11})$$

$$A_{n'n} = \frac{1.57 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1}}{n n'^3 (n'^2 - n^2)} \quad (\text{IV.B.12})$$

le facteur $A_{n'n}$ est une approximation hydrogénique analytique tandis que la fonction g décrit le cas particulier des transitions autorisées et interdites dans l'hélium.

Pour les transitions autorisées (des états de spin) du système des singulets ($S'=0 \rightarrow S=0$, i.e. ss-transitions) et des triplets ($S'=1 \rightarrow S=1$, i.e., tt-transitions) la fonction g prend la forme [30]:

$$g_{ss,tt} = c_1 \left(1 + \frac{c_2}{n'+n} + \frac{c_3 n'^2}{(n'+n)^2 (n'^2 - n^2)} \right) \quad (\text{IV.B.13})$$

Pour les transitions d'intercombinaison ($S'=0 \rightarrow S=1$ et $S'=1 \rightarrow S=0$, i.e. les transitions st- et ts respectivement) la forme suivante est proposée [30] :

$$g_{st,ts} = c_1 (n' - n)^{c_2} n'^{c_3} \quad (\text{IV.B.14})$$

le facteur g tient en compte deux effets d'interférence des fonctions d'onde des états du bas et du haut :

- Le facteur n'^{c_3} prend en compte le fait que les effets d'interférence augmentent avec l'augmentation du nombre quantique n' (c_3 est négatif),
- Le facteur $(n' - n)^{c_2}$ décrit le fait que les effets d'interférence sont plus effectifs quand les états du bas et du haut sont proches de eux-mêmes (c_2 est positif).

IV.B.4 Résultats et comparaisons

Nous utilisons l'algorithme génétique [31] pour les paramètres d'ajustement. Le tableau IV.B.3 montre ces paramètres pour les équations proposées (IV.B.13-14) et la précision représentée par :

$$\text{Précision} = \left| \frac{A_{\text{fit}} - A_{\text{input}}}{A_{\text{input}}} \right| \quad (\text{IV.B.15})$$

Les transitions ss et tt présentent des valeurs de faible pourcentage qui donnent des bonnes précisions. Une précision acceptable moins de 30 pour cent est obtenue pour les transitions d'intercombinaison.

De plus les paramètres du tableau IV.B.3 montrent que les probabilités de transition d'intercombinaison sont fortement convergentes pour les grands nombres quantiques n' , n . Par conséquent, le mélange fort entre les états des hauts nombres l du système des singulets et des triplets n'est pas appréciable dans les probabilités de transition d'intercombinaison respectives. Cette circonstance est liée aux forts effets d'interférence des états bas et hauts.

Transitions	c_1	c_2	c_3	Précision
	Drake/HFR	Drake/HFR	Drake/HFR	Drake/HFR
ss	0.9510/0.8398	1.6234/0.9954	-3.3480/-7.9278	$3.9 \cdot 10^{-2}/6.5 \cdot 10^{-2}$
tt	0.8598/0.8066	0.3796/1.9792	-5.3992/-8.4052	$3.7 \cdot 10^{-2}/4.9 \cdot 10^{-2}$
st	2.8856/2.4580	0.8862/0.79980	-2.2736/-2.2258	$3.1 \cdot 10^{-2}/2.9 \cdot 10^{-1}$
ts	1.2884/1.4020	0.9304/0.8224	-2.4436/-2.4956	$2.8 \cdot 10^{-2}/2.2 \cdot 10^{-1}$

Tableau IV.B.3 Les paramètres d'ajustement pour les eq. (IV.B.13-14)

IV.B.5 Comparaison entre différentes données atomiques

On se propose d'utiliser un seul paramètre d'ajustement pour les probabilités de transition pour obtenir une comparaison globale indispensable pour les applications dans la cinétique des plasmas. Pour cela, les formules suivantes sont proposées [30] :

$$A_{ss,tt} = c_1 \frac{1.57 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1}}{n n'^3 (n'^2 - n^2)} \quad (\text{IV.B.16})$$

pour les transitions singulets-singulets et triplets-triplets des hauts n et

$$A_{st,ts} = c_1 \frac{1.57 \cdot 10^{10}}{n n'^3 (n'^2 - n^2)} \frac{(n' - n)^{3/4} \text{ s}^{-1}}{n'^{5/2}} \quad (\text{IV.B.17})$$

pour les transitions d'intercombinaison singulets-triplets et triplets-singulets.

L'algorithme génétique [31] est utilisé pour le paramètre d'ajustement c_1 . Le tableau IV.B.4 montre que pour Drake [9] et HFR modifié [12,21,30], la précision est de l'ordre de 0.2-0.3 (voir tableaux C8 et C9 de l'annexe C) tandis que pour FAC (Tableaux C7 de l'annexe C) la précision est de l'ordre de 0.5 (ss et tt) et de 0.8 seulement (st et ts). Les probabilités de transition diffèrent, donc, largement de ceux du Drake et HFR modifié. Donc, les résultats du FAC montrent une grande déviation, par contre Drake [9] et HFR modifié [12,21,30] sont en bonne accord.

Transition	Drake	HFR	FAC
Ss	0.7566	0.8066	0.679
Tt	0.8154	0.8382	0.7902
St	5.1386	4.4766	1.1138
Ts	1.7204	1.492	0.3694

Tableau IV.B.4 Les paramètres d'ajustement pour les différentes méthodes de calcul

IV.B.6 Conclusion

Nous avons étudié dans cette partie les probabilités de transition radiative de l'hélium neutre. Les données obtenues pour les taux de transition radiative de l'He I par le programme FAC sont comparées aux calculs de Drake [9] et HFR modifié [12,21,30], ils présentent le même ordre de grandeur.

D'autre part nous avons développé des formules générales pour les probabilités de transitions autorisées et interdites des états de spin pour l'hélium neutre. Nous avons montré que les effets d'interférence entre les états hauts et bas compensent l'augmentation des transitions d'intercombinaison suite à l'augmentation du poids statistique des états de haut moment orbital. Par conséquent dans les cinétiques de populations atomiques le grand

mélange de fonction d'onde des états de haut l ne conduit pas à une augmentation du mélange du système singulet et triplet mais à une forte convergence des probabilités de transition spontanée d'intercombinaison. De point de vue cinétique du plasma ce comportement de convergence maintient une certaine séparation du système singulet et triplet jusqu'aux grands nombres quantiques principaux

Références

- [1] W. Cunto, C. Mendoza, F. Oschsenbein and C. J. Zeippen, *Astron. Astrophys.* **275** (1993) L5.
- [2] P. G. Burke, and M. J. Seaton *Meth. Comp. Phys.* **10**(1971) 1.
- [3] K. A. Berrington, P. G. Burke M. J. Seaton et al. *J. Phys. B. :At. Mol. Phys.* **20** (1987) 6379-6397.
- [4]] D. A. Verner, E.M. Verner and G. J. Ferland, *Atomic Data Nucl. Data Tables*, **64** (1996) 1.
- [5] K. P. Dere, E. Landi, P. R. Young and G. Del Zanna, *Astrophys. J. Supp. Series* **134** (2001) 331-354.
- [6] <http://physics.nist.gov>
- [7] M. Godefroid and G. Verhaegen, *J. Phys. B. At. Mol. Phys.* **13** (1980) 3082.
- [8] G. W. Drake and Z. C. Yan, *Chem. Phys. Lett.* **229** (1994) 786.
- [9] G.W.F. Drake, “High Precision Calculations for Helium”, p. 154-171, in “Atomic Molecular Optical Physics Handbook”, edited by G.W.F. Drake, AIP Press, New York 1996 .
- [10] A. Hibbert, *Comp. Phys. Comm.* **9** (1975) 141.
- [11] W. Eissner, M. Jones, and H. Nussbaumer, *Comp.Phys.Comm.* **8** (1974) 270.
- [12] R. D. Cowan, *Theory of Atomic Structure and Spectra*, University of California Press, Berkeley, 1981.
- [13] C. Froese Fischer, T. Brage, and P. Jonsson, *Computational Atomic Physics: An MCHF Approach*, IOP Publishing, Bristol(2000).
- [14] I. P. Grant, B.J. Mckenzie, P.H. Norrington, D.F. Mayers, and N.C. Pyper, *Comp.Phys.Comm.***21** (1980) 207
- [15] H. A. Bethe and E. E. Salpeter, *Quantum Mechanics of one-and Two-Electron Systems*, Springer-Verlag, Berlin, 1957.
- [16] M. F. Gu, FAC 1.0.7, <http://kipac-tree.stanford.edu/fac/>
- [17] M. J. Seaton, C. J. Zeippen, J. A. Tully et al. *Rev. Mex. Astron. Astrofis.* **23** (1992) 19.
- [18] P. G. Burke, A. Hibbert and W. D. Robb, *J. Phys. B.* **4** (1971) 153.
- [19] M. J. Seaton, *J. Phys. B.* **18** (1971) 2111.
- [20] P. J. Storey and D. G. Hummer, *Comp. Phys. Comm.* **66** (1991)129.
- [21] F. B. Rosmej, R. Stamm, S. Fritzsche, T. Yamamoto, T. Kato et al. , *Proceedings of the 4th International Conference on Atomic and Molecular Data and Their Applications*, Ceratopia Toki, Toki, Gifu, Japan, AIP **771** (2004) 42, invited talk.
- [22] A. A. Nikitin, Z. B. Rudzikas, *Foundations of the Theory of the Spectra of Atoms and Ions*, Nauka, Moscow, 1983.
- [23] Z. B. Rudzikas, *Theoretical Atomic Spectroscopy*, cambridge University press, cambridge, 1997.
- [24] <http://plasma-gate.weizmann.ac.il>
- [25] F.B. Rosmej, V.S. Lisitsa, D. Reiter, M. Bitter et al., *Plasma Physics and Controlled Fusion* **41** (1999) 191.
- [26] F. P. Keenan and S. M. McCann, *J. Phys. B.: At. Mol Opt. Phys.* **23** (1990) L423-L427.
- [27] F. B. Rosmej, R. Stamm, S. Fritzsche, H. Capes, M. Koubiti et al., *J. Nuc. Materials* **337-339** (2005) 1101.
- [28] F.B. Rosmej: “Non-Linear Response of Helium Emission to Particle Transport and non-Maxwellian Electrons”, submitted 2006.
- [29] D. Nishijima, U. Wenzel, M. Motoyama, N. Ohno et al., *J. Nucl. Materials* **290-293** (2001) 688.
- [30] F. B. Rosmej, E.H. Guedda et R. Stamm, soumis pour *J. Phys. B Letters*
- [31] P. Charbonneau, *Astrophys. J. Supp. Ser.*, **101**(1995) 309-334.

Chapitre V

Etude de la recombinaison diélectronique

V.1 Introduction

La recombinaison diélectronique (RD) est un processus collisionnel electron-ion gouverné par l'interaction électron-électron. Ce processus est un mécanisme de production des raies satellites observées dans la spectroscopie des plasmas [1-2]. Il influence, aussi, l'équilibre ionique dans les plasmas de hautes températures. Actuellement, l'importance de diagnostic des plasmas par spectroscopie s'avère être très intéressant avec le progrès des plasmas de fusion par confinement magnétique. En effet, les processus de recombinaison sont responsables de plasmas de détachement, ainsi leur étude est un problème de grand intérêt [3-5]. De plus, le plasma de détachement fournit une méthode pour la réduction de flux de chaleur des plasmas de fusion envers les composants du bord. Ceci est une activité très importante dans le future design de ITER. Il est évident, que le rayonnement des émissions de plasmas est le seul moyen approprié pour la caractérisation des plasmas (température, densité, diffusion, échange de charge, turbulence, etc). Ceci est basé, essentiellement, sur les rapports des intensités de raies et l'élargissement Stark à partir des raies de Rydberg.

L'hélium est l'un des plus importants éléments pour la spectroscopie des plasmas de fusion par confinement magnétique. En effet, dans ITER, les particules α produites à partir

des réactions de fusion donnent lieu à la formation de He^{1+} et He^{0+} et les raies d'émission correspondantes. Les plasmas d'hélium et le pompage de gaz d'hélium peuvent aider à une compréhension du phénomène de détachement dans les expériences sur le simulateur de divertor [6]. Des études récentes [7] ont montré que les raies d'émission de niveaux singulets et triplets de Rydberg de l'hélium neutre peuvent être utilisées pour un diagnostic avancé en vue d'une caractérisation de la diffusion, de l'échange de charge et des effets de transport de radiation.

D'autre part, l'argon peut se présenter sous forme des impuretés, suite à une injection d'un gaz de pompage dans les plasmas de tokamak [8]. L'argon héliumoïde est utilisé pour des fins de diagnostic dans les tokamaks [9-11].

Un résumé sur les différentes approximations proposées pour le calcul de la recombinaison diélectronique est donné par Ansari et al [12]. Burgess [13] présente une équation pour le coefficient de taux de DR total qui est corrigée, ensuite, par un facteur dépendant de z [14]. D'autre part, Aldrovandi et al. [15] proposent un ajustement de l'équation de Burgess pour les ions dans l'ordre isoélectronique et donnent les paramètres d'ajustement. Par ailleurs, Arnaud et al. [16] exposent une nouvelle évaluation des taux de recombinaison et ionisation collisionnelle pour les éléments d'abondance astrophysique. Dans le rapport de NIFS [17], les coefficients de taux de recombinaison basés sur des différentes équations semi empiriques sont comparés pour plusieurs ions.

Concernant le calcul théorique, plusieurs méthodes sont développées pour calculer le processus RD [18-21]. Bell et al. [22] donnent, dans une revue, la théorie générale de la RD. Les états doublement excités de l'hélium étaient les cibles de plusieurs approches théoriques. En effet l'importance de corrélation électron-électron dans ces états donne un intérêt primordial pour le test des méthodes théoriques. Dans ce cadre, les états doublement excités de l'hélium sont calculés par une théorie de perturbation de plusieurs corps (Many-body perturbation theory) pour tous les ordres dans l'interaction électron-électron [23]. D'autre part, Wang et al. [24-25] ont développé une méthode relativiste simplifiée d'interaction des configurations pour le calcul des sections efficaces de DR et les coefficients de taux pour l'He.

Des mesures expérimentales sont produites par Haar et al. [26] pour les sections efficaces intégrées de la RD de l'He⁺. Par ailleurs, des sections efficaces absolues de la RD de l'hélium hydrogénoïde ont été mesurées par Dewitt et al. [27], alors qu'une spectroscopie utilisant la RD des états doublement excités (hauts) a été présentée [28].

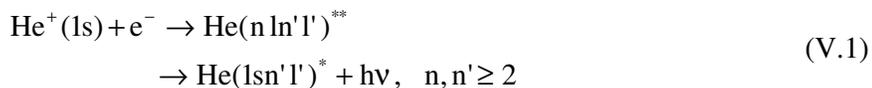
Dans ce qui suit on étudie la RD de l'hélium neutre pour les états dépendant de spin et de grands nombres quantiques n . Ces données sont rarement présentes dans la littérature ou bien non convergentes. Ce qui permet, entre autre, un diagnostic efficace des raies satellites plus spécialement dans les tokamaks et un développement des codes incluant le modèle collisionnel radiatif. En effet le code SOPHIA [29] basé sur un modèle collisionnel radiatif est en cours de développement pour simuler les émissions jusqu'aux grands nombres quantiques n à partir de l'hélium neutre et de l'hélium simplement ionisé en tenant compte des niveaux singulets et triplets. On note qu'un spectre expérimental dans les expériences de plasmas de divertor à NAGDIS-II [30] montre des raies de niveaux jusqu'à $n=25$.

Nous présentons un résumé théorique sur les méthodes et les équations utilisées pour le calcul de la RD. Nous exposons nos résultats, les comparaisons et les discussions pour les coefficients de taux de RD de l'hélium neutre et de l'argon héliumoïde.

L'influence des erreurs sur les données atomiques, les chaînes dépendantes de spin dans le calcul des taux de RD et les effets de collisions sur les fractions atomiques/ioniques sera discutée pour l'hélium neutre.

V.2 Description de la recombinaison diélectronique

La capture diélectronique (CD) est la première étape dans la RD. C'est le phénomène inverse de l'autoionisation (AI) (voir fig.V.1) dont un état intermédiaire doublement excité est formé par une capture simultanée dans le continuum et excitation d'un électron de l'état fondamental. Cet état peut s'autoioniser ou décroître par émission radiative. A partir du dernier processus, la recombinaison commence. Ce processus est décrit par la fig.V.1 et il est simplifié par l'équation :



l'étoile et le double étoile se réfèrent, respectivement, aux états simplement et doublement excités.

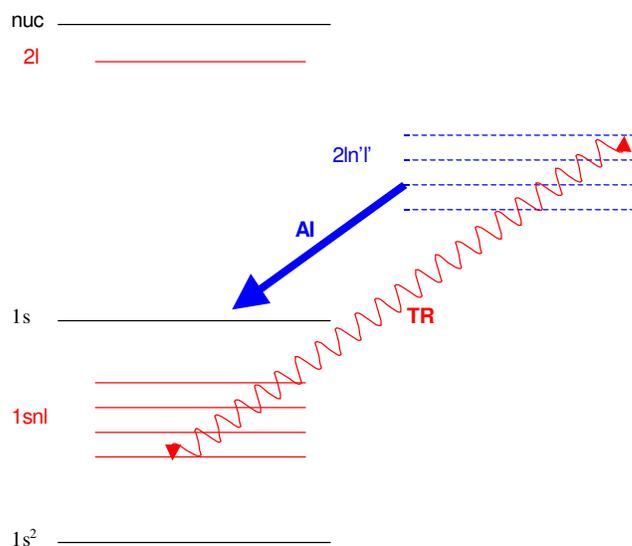


Fig.V.1 Diagramme des niveaux de l'He

V.2.1 Choix de configurations

Pour obtenir des résultats satisfaisants pour les coefficients de taux de RD, il est indispensable de disposer au préalable d'un calcul adéquat des taux de transition radiative et des taux d'autoionisation. En effet ces données seront utilisées dans le calcul des coefficients de taux de RD. Nous examinons par la suite l'effet de choix d'une configuration dans le programme de calcul sur les données, i.e., les énergies, les taux de transition radiative et les taux d'autoionisation.

V.2.2 Programme de calcul

Nous avons calculé les taux de transition radiative et les taux d'auto ionisation par le programme FAC [31]. Le calcul de structure atomique est basé sur l'interaction de configuration relativiste avec des fonctions d'onde de bases indépendantes. Les effets relativistes sont pris en compte ainsi que les effets QED de grand ordre par l'interaction de Breit. Les processus du continuum sont traités dans l'approximation des ondes déformées.

Le calcul FAC donne un accord raisonnable pour les taux de transition radiative (Ass et Att) des raies de résonance. D'une autre part les satellites diélectronique et la recombinaison diélectronique sont dominées par des raies de résonance. Par conséquent l'utilisation du programme FAC donne des résultats acceptables pour la recombinaison diélectronique.

Nous calculons la structure atomique incluant les niveaux d'énergie, les taux de transition radiative et les taux d'autoionisation. Nous avons pris en compte, dans le calcul, les niveaux excités $1snl$ et les niveaux doublement excités $2lnl'$ jusqu'à $n=10$.

V.2.3 Etude des niveaux d'énergie

Le choix d'une diagonalisation des configurations dans le calcul était très difficile. En effet les résultats obtenus pour les taux de transition radiative et l'autoionisation et les dispositions des niveaux d'énergie de capture étaient très sensibles au choix de diagonalisation des configurations. La fig.V.2 donne la disposition des niveaux doublement excités pour une diagonalisation (séparée) de chaque niveau $1snl$ seul et une diagonalisation, aussi, de chaque niveau doublement excité $2lnl'$ de l'He I. La fig.V.2 montre le problème de chevauchement entre niveaux doublement excités de l'He I, e.g., les niveaux $2l3l'$ et les niveaux $2l4l'$ se chevauchent fortement et c'est le cas aussi pour les autres niveaux $2lnl'$. La fig.V.3 expose une autre disposition des niveaux pour une diagonalisation d'ensemble. Cependant Le problème de chevauchement entre niveaux doublement excités ne se pose pas pour l'argon héliumode, comme le montre la fig. V.4. Après avoir comparé, avec la littérature, les différents résultats obtenus pour les données de structure atomique, nous avons choisi une diagonalisation (séparée) de chaque niveau $2lnl'$, i.e., $2l2l'$, $2l3l'$, $2l4l'$, etc. Le même choix a été pris pour les niveaux excités $1snl$.

Le tableau E.1 (Annexe E) donne les longueurs d'onde de transition entre les niveaux doublement excités et les niveaux excités pour l'Ar XVII. Nos résultats sont en très bon accord avec ceux calculés par HFR [32]. Les niveaux d'énergie des niveaux 2l2l' pour l'He I par rapport au niveau $2s^2\ ^1S$ sont comparables aux résultats de la littérature [26] comme les montre le tableau V.1.

Niveau Bas	Niveau haut	ΔE (eV)	$\Delta E[\text{Haar}]$ (eV)
$2s^2\ ^1S$	$2s2p\ ^3P$	0.33	0.44
	$2p2\ ^3P$	1.7	1.81
	$2p2\ ^1D$	1.73	2.01
	$2s2p\ ^1P$	2.47	2.26
	$2p2\ ^1S$	4.31	4.25

Tableau V.1 Comparaisons des énergies des niveaux 2l2l' pour l'He I

V.2.4 Taux d'autoionisation

Comme a été mentionné auparavant les taux d'autoionisation sont affectés par le choix de diagonalisation des niveaux doublement excités et le niveau d'optimisation radial utilisé dans le programme FAC. Le tableau E.2 (Annexe E) montre une comparaison faite pour les niveaux 2l2l' de l'He I entre nos résultats, un calcul basé sur une théorie de perturbation relativiste de plusieurs corps [33-34] et les résultats du code MZ [35]. Notre calcul est basé sur une diagonalisation d'ensemble des niveaux 2lnl' (mais pas des niveaux $2lnl' + 2ln'l'$) et une optimisation du niveau de bas de 2l2l'. Les résultats pour les taux d'autoionisation sont généralement de même ordre de grandeur sauf pour quelques sous niveaux donnés par MZ. Ces données sont acceptables vue les résultats obtenus pour les facteurs d'intensité Q qui vont être décrits ultérieurement.

Un calcul a été exécuté pour l'argon héliumoïde incluant le niveau 1s et les niveaux doublement excités 2l2l' et 2l3l' pour différentes configurations. Les résultats de calcul ont été reportés sur le tableau E.3 (Annexe E). Ceux de La première colonne ont été reproduits par

une configuration des niveaux $2l2l'$ et $2l3l'$ séparément et une optimisation du niveau du bas de $2l2l'$, ceux de la deuxième colonne ont été obtenu de la même façon, sauf que les niveaux ont été rassemblés dans une même configuration. La troisième colonne se diffère de la première par l'optimisation radiale du niveau fondamental $1s$. Le tableau E.3 confirme que les résultats de calcul pour l'argon héliuomöide sont peu sensibles aux différentes configurations. Une comparaison a été, aussi, faite avec un calcul HFR [32], les résultats se comparent bien.

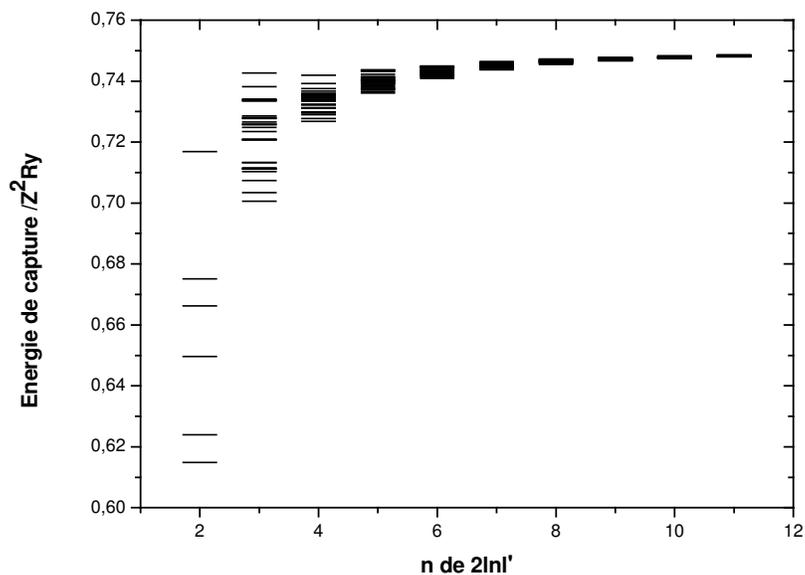


Fig.V.2. Energie de capture de l'He I pour une diagonalisation de chaque niveau $2lnl'$ seul

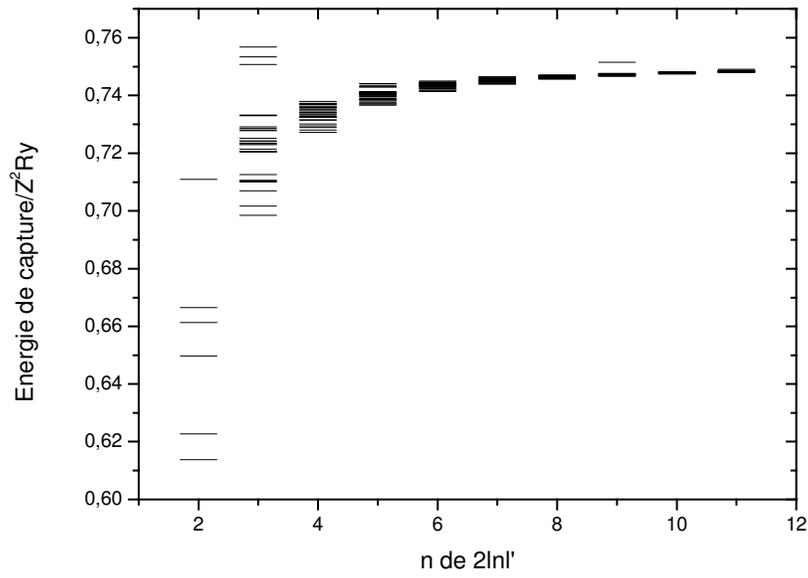


Fig.V.3. Energie de capture de l'He I pour une diagonalisation de tous les niveaux $2lnl'$ ensemble

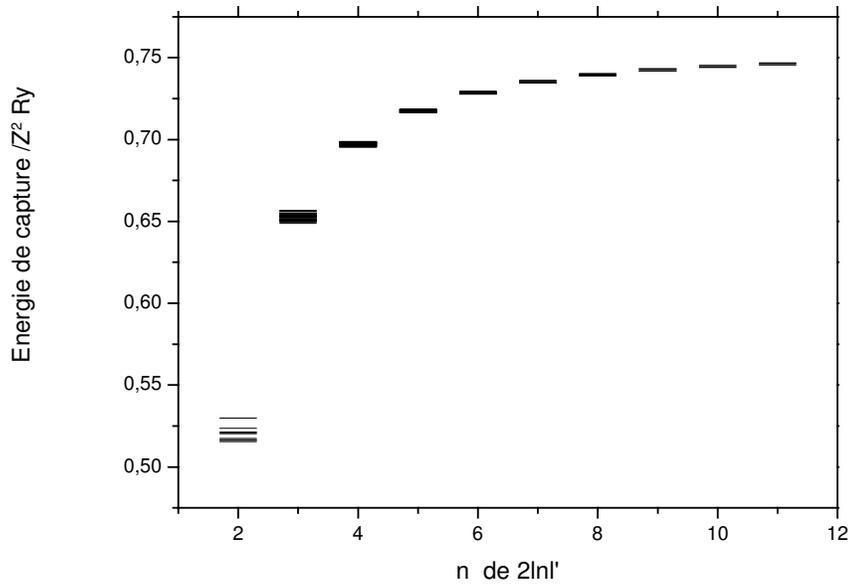


Fig.V.4. Energie de capture de l'Ar XVII

V.2.5 Taux de transition radiative

Le calcul des coefficients de taux de RD nécessite des données concernant les taux de transition radiative. Dans ce cadre, une étude détaillée a été menée en utilisant le programme FAC suivant plusieurs configurations. Pour la configuration choisie et discutée auparavant, les résultats obtenus pour les taux de transition radiative sont exposés au tableau E.2 de l'annexe E. Nos résultats sont généralement comparables aux calculs de Lindroth et al. [33,34,36] et les calculs MZ [35,36] pour l'He I. Le tableau E.1, donne une comparaison des nos résultats avec ceux calculés par HFR pour l'Ar XVII [32], les résultats sont en très bon accord.

V.3 Etude de la recombinaison diélectronique

Nous exposons dans ce qui suit la méthodologie adoptée pour le calcul de coefficient total de RD. Les calculs de ce même coefficient par d'autres méthodes vont être mentionnés par une comparaison avec nos résultats. Notre calcul est basé sur des quantités (facteur d'intensité) dépendants de spin et des lois d'échelle donnant des résultats convergents pour tous les nombres quantiques n, L et S.

V.3.1 Cas des atomes isolés aux faibles densités

V.3.1.a Coefficient de taux de RD

Dans l'approche coronale aux faibles densités, tous les niveaux autoionisés sont considérés indépendants entre eux et participent au coefficient de taux de RD par :

$$\alpha_{d,ji} = 1.656 \cdot 10^{-22} \frac{1}{g_s} Q_{d,ji} \frac{e^{-E_{s,j}/kT}}{(kT)^{3/2}} \quad (\text{V.2})$$

où $E_{s,j} = E_{2lnl} - E_{1s}$, est l'énergie de capture en eV. kT est la température électronique en eV et g_s est le poids statistique de l'état $1s$.

Le facteur d'intensité satellite $Q_{d,ji}$ pour une transition satellite est défini par :

$$Q_{d,ji} = \frac{g_j \Gamma_j A_{ji}}{\Gamma_j + \sum_i A_{ji}} \quad (\text{V.3})$$

Γ_j est le taux d'autoionisation de l'état j , g_j est le poids statistique et A_{ji} est le taux de transition radiative de $j \rightarrow i$.

Le coefficient de taux de RD total est :

$$\alpha_d = \sum_{ji} \alpha_{d,ji} \quad (\text{V.4})$$

V.3.1.b Calcul des facteurs d'intensité

Nous avons procédé au calcul des facteurs d'intensité Q de l'équation (V.3) suivant le schéma descriptif de la fig.V.5. Les taux de transition radiative et les taux d'autoionisation sont calculés par le programme FAC. Plusieurs configurations ont été étudiées, comme a été indiqué auparavant.

Nous avons développé un programme de calcul des facteurs d'intensité Q (FactSumQ) qui donne tous les types de facteurs Q dépendant de spin jusqu'à $n=10$ et plus. En effet en se contentant de calculer les facteurs jusqu'à $n=10$ et chercher les autres valeurs par des lois d'échelle.

Notre programme inclus dans le calcul les chaînes directes ($2lnl' - 1snl''$ et $2lnl' - 1s2l''$) et les chaînes indirectes ($2lnl' - 1sn'l''$, $n' < n$). Les effets de ces dernières sur les facteurs Q sont faibles pour l'He I (e.g., Q total pour $2l7l'$ prend les valeurs $0.52460932 \times 10^{12}$ et $0.52471457 \times 10^{12}$ pour tous les chaînes présent en compte et les chaînes directes respectivement, pour un calcul fait jusqu'à $n=7$). Cependant l'interaction des configurations sur le coefficient de taux de RD a comme effet de diminuer les valeurs de facteurs d'intensité correspondants d'un ou deux ordres de grandeur comparées aux facteurs impliquant des transitions d'un seul électron pour l'He I.

Le tableau E.4 dans l'annexe E donne les résultats de calcul des facteurs Q pour tous type de transition suivant la fig.V.5 de l'He I. Il est bien clair que les résultats sont convergents. Ces données vont être utilisées pour développer des lois d'échelle générant les données aux hautes valeurs de n. Les valeurs de facteurs d'intensité Q total, calculées pour chaque niveau $2lnl'$ sont comparées à ceux calculées par MZ [35,36] dans le tableau V.2. Les résultats sont de même ordre de grandeur.

Une comparaison a été faite pour les facteurs Q des niveaux doublement excités $2l2l'$. Ces derniers présentent six formes des facteurs Q suivant la fig.V.5. Les résultats du tableau V.3 se réfèrent au tableau E.2 de l'annexe E. Nos résultats sont de même ordre de grandeur avec ceux de MZ [35,36] et Lindroth et al. [33,34,36]. Cependant les différences qui apparaissent pour $Q_{4_2x2y}(T)$ pour les $1s2p\ ^3P$ sont connectés aux valeurs de taux d'autoionisation dans le couplage LS, i.e., $\Gamma(2p\ ^3P) = 0$ [36]. Les valeurs de Q obtenus par différentes méthodes [33-35] comparées à nos résultats pour les états $2l2l'$ sont détaillées sur le tableau E.2 de l'annexe E.

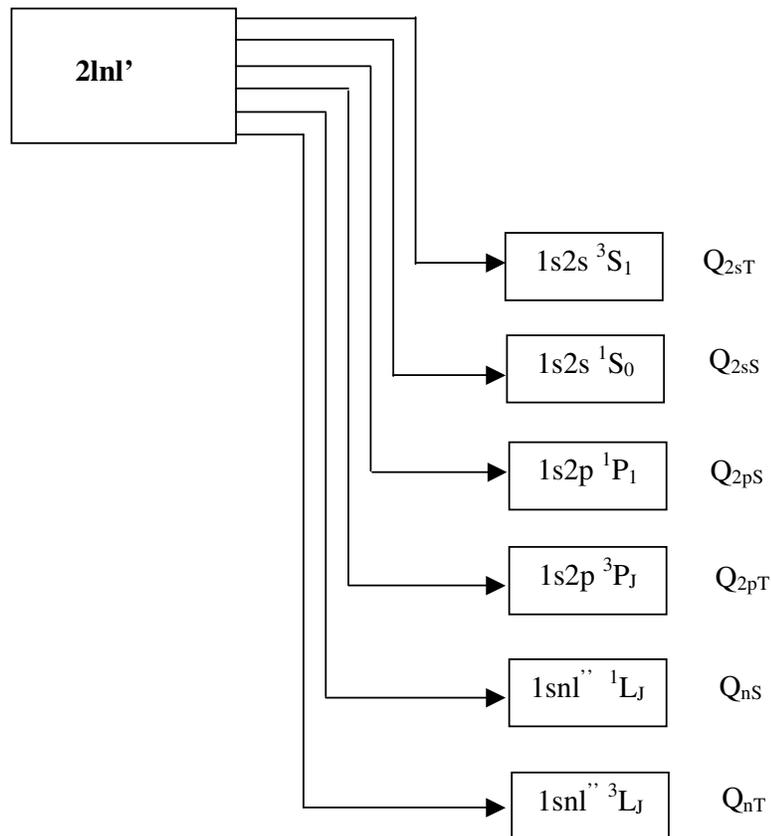
Configuration	Q_{tot} [FAC]	Q_{tot} [MZ]
2l2l'	0.1651E+12	0.1897E+12
2l3l'	0.6603E+12	0.7606E+12
2l4l'	0.6465E+12	0.7000E+12
2l5l'	0.5560E+12	0.6684E+12
2l6l'	0.5803E+12	0.6459E+12
2l7l'	0.5307E+12	0.6285E+12
2l8l'	0.5150E+12	0.6138E+12
2l9l'	0.4723E+12	
2l10l'	0.4128E+12	

Tableau V.2 Comparaison des valeurs de facteur Q total pour l'He I.

Calcul	$Q_{1_2x2y}(T)$	$Q_{2_2x2y}(S)$	$Q_{3_2x2y}(S)$	$Q_{4_2x2y}(T)$	Sum $Q_{_2x2y}$
LIND	5,59E+10	1,93E+10	6,14E+10	4,98E+08	1,37E+11
FAC	6,16E+10	2,23E+10	8,10E+10	9,09E+07	1,65E+11
MZ	6,15E+10	2,45E+10	8,68E+10	1,68E+10	1,90E+11

Tableau V.3 Comparaison des valeurs de facteurs Q pour les niveaux $2l2l'$ de l'He I.

De la même manière, nous avons, aussi, calculé les facteurs d'intensité Q pour l'Ar XVII. Comme c'est prévu, le calcul présente un très bon accord avec les autres méthodes, comme le montre le tableau V.4, où les résultats sont comparés à ceux de MZ [35,36] et HFR [32]. En effets les résultats pour les ions multichargés, comme l'argon héliumoïde, sont rapidement convergents et présentent des lois d'échelle plus simple. Ceci va être discuté ultérieurement.

Fig. V.5 Schéma de calcul des facteurs Q entre les niveaux $2lnl'$ et les niveaux $1snl$

Config.	Q _{tot} (FAC)	Q _{tot} (MZ)	Q _{tot} (HFR)	Scale(FAC)	Scale(MZ)	Scale(HFR)	Scale_Th
2121'	8.23E+14	8.64E+14	8.35E+14				
2131'	7.20E+14	8.36E+14	7.99E+14	8.75E-01	9.68E-01	9.57 E-01	2.96E-01
2141'	4.35E+14	4.78E+14	4.77E+14	6.04E-01	5.72E-01	5.97 E-01	4.20E-01
2151'	2.72E+14	2.97E+14	2.96E+14	6.25E-01	6.21E-01	6.20 E-01	5.12E-01
2161'	1.71E+14	1.88E+14	1.89E+14	6.29E-01	6.33E-01	6.38 E-01	5.79E-01
2171'	1.13E+14	1.24E+14	1.29E+14	6.61E-01	6.60E-01	6.82 E-01	6.30E-01
2181'	7.79E+13	8.54E+13		6.89E-01	6.89E-01		6.70E-01
2191'	5.57E+13			7.15E-01			7.02E-01
21101'	4.10E+13			7.36E-01			7.29E-01

Tableau V.4 Comparaison des valeurs de Q_{tot} et les lois d'échelle par différentes méthodes pour l'Ar VXII.

V.3.1.c Lois d'échelle pour l'He I

Les valeurs de facteurs d'intensité Q étant calculées jusqu'à n=10. Nous cherchons à générer le reste des valeurs de Q pour toutes les valeurs de n. Ceci nous permet de calculer, suivant l'équation V.4, le coefficient de taux de RD. Pour se faire nous proposons une loi d'échelle qui donne toutes les valeurs de Q pour toutes les valeurs de n et tout type de transition dépendante de spin S. Cette loi prend la forme suivante :

$$Q_d(n) = \frac{C_1 10^{10} C_2 10^{13}}{C_3 10^9 + \frac{C_2 10^{13}}{n^3}} \quad \begin{cases} \alpha = 3 \text{ pour les états } 1s2l(^1S, ^3S, ^1P \text{ et } ^3P) \\ \alpha = 0 \text{ pour les états } 1snl(^1L \text{ et } ^3L) \end{cases} \quad (V.5)$$

Les constantes C₁, C₂ et C₃ sont obtenues par un ajustement des paramètres à partir d'un algorithme génétique [37] (voir Annexe D). Le tableau V.5 présente les valeurs de ces paramètres pour tous type de transition [36].

Nous présentons sur les tableaux E.5(a-f) les comparaisons faites entre les résultats de notre calcul obtenus pour tous type de Q (dépendant de spin et de l'état final) jusqu'à n=10 et ceux obtenus par la loi d'échelle (V.5). En général les résultats présentent une bonne concordance. Les erreurs relatives ne dépassent pas le 24% pour quelques états.

Etat final	C ₁	C ₂	C ₃
1s2l ³ P	19.44	171.88	1483.16
1s2l ¹ S	6.24	189.48	1873.41
1s2l ¹ P	12.97	3.35	4.798
1s2l ³ P	19.95	1.43	9.89
1snl ¹ L	21.4	70.84	99.96
1snl ³ L	39.9	6.0	39.99

Tableau V.5 Paramètres d'ajustement pour la loi d'échelle.

La loi d'échelle a été utilisée avec succès pour la génération des valeurs de Q jusqu'aux grandes valeurs de n. Le tableau V.6 montre les valeurs générées par la loi d'échelle jusqu'à n=50. Notons que cette loi peut être appliquée jusqu'aux grands n, i.e., $n \gg 50$. La convergence des résultats va être discutée ultérieurement. Nous constatons une coïncidence entre les résultats de calcul et ceux de la loi d'échelle.

(2lnl') n :	Q _d	Q _{d_scale}
2	0.16 E+12	
3	0.66 E+12	
4	0.65 E+12	
5	0.56 E+12	0.58 E+12
6	0.58 E+12	0.56 E+12
7	0.53 E+12	0.53 E+12
8	0.52 E+12	0.50 E+12
9	0.47 E+12	0.47 E+12
10	0.41 E+12	0.43 E+12
15		0.27 E+12
20		0.16 E+12
25		0.10 E+12
30		0.65 E+11
40		0.30 E+11
50		0.16 E+11

Tableau V.6 Valeurs des Q_d calculées et ceux de la loi d'échelle.

V.3.1.d Lois d'échelle pour l'Ar XVII

Les lois d'échelle pour les ions multichargés sont plus simples et suivent une allure de $1/n^3$. Pour les ions de l'argon héliumoïdes nous avons utilisé les résultats de calcul des facteurs d'intensité Q présentés sur le tableau V.4 par différentes méthodes de calcul. Par la suite nous avons employé une loi d'échelle de la forme :

$$Q_d(n) = \frac{C}{n^3} \quad (\text{V.6})$$

Les valeurs de Q à partir de $n=6$ ont été utilisées par l'algorithme génétique [37] pour l'ajustement du paramètre C . Nous exposons sur le tableau V.7 les valeurs du paramètre d'ajustement obtenus pour les différentes méthodes.

Méthode	C
FAC	4.000 E+16
MZ	4.323 E+16
HFR	4.430 E+16

Tableau V.7 Paramètres d'ajustement de la loi d'échelle par différentes méthodes

Ces lois d'échelle reproduisent pratiquement les mêmes valeurs que ceux obtenues par les différentes méthodes de calcul. En effet le tableau V.7 montre bien cette concordance. Le tableau V.4 confirme l'application de la loi d'échelle suivant :

$$\frac{Q(n+1)}{Q(n)} = \left(\frac{n}{n+1} \right)^3 \quad (\text{V.7})$$

Les colonnes « scale » donnent les valeurs de rapports $Q(n+1)/Q(n)$, alors que la dernière colonne expose les valeurs du rapport théorique $(n/n+1)^3$. Ce qui montre que les lois d'échelle peuvent être appliquées avec succès à partir de $n=7$.

Configuration	Q _{FAC}	Q _{FAC_scale}	Q _{MZ}	Q _{MZ_scale}	Q _{HFR}	Q _{HFR_scale}
2I2I'	8.23E+14		8.64E+14		8.35E+14	
2I3I'	7.20E+14		8.36E+14		7.99E+14	
2I4I'	4.35E+14	6.25E+14	4.78E+14	6.75E+14	4.77E+14	6.92E+14
2I5I'	2.72E+14	3.19E+14	2.97E+14	3.45E+14	2.96E+14	3.54E+14
2I6I'	1.71E+14	1.85E+14	1.88E+14	2.00E+14	1.89E+14	2.05E+14
2I7I'	1.13E+14	1.16E+14	1.24E+14	1.26E+14	1.29E+14	1.29E+14
2I8I'	7.79E+13	7.81E+13	8.54E+13	8.44E+13		8.65E+13
2I9I'	5.57E+13	5.48E+13		5.93E+13		6.07E+13
2I10I'	4.10E+13	3.99E+13		4.32E+13		4.43E+13
2I15I'		1.18E+13		1.28E+13		1.31E+13
2I20I'		4.99E+12		5.4E+12		5.53E+12

Tableau V.7 Vérification des lois d'échelle pour les différentes méthodes de calcul pour l'Ar XVII.

V.3.1.e Calcul du coefficient de taux de RD

Nous avons utilisé les équations (V.2-V.4) pour le calcul du coefficient de taux de RD dans l'intervalle des températures ($1 - 10^4$ eV). Pour valider notre calcul nous allons exposer les différentes méthodes de calcul du coefficient de taux RD ainsi que les résultats expérimentaux.

- **Calcul FAC**

Nous faisons référence au calcul FAC car nous utilisons les différents taux (taux d'autoionisation, taux de transition radiative). Comme a été mentionné auparavant nous calculons les facteurs d'intensité Q par notre propre programme et nous utilisons les lois d'échelle pour générer tous les valeurs de Q indispensables pour le calcul du coefficient de taux de RD. Les programmes de calcul de ce coefficient utilisent les premiers valeurs de Q calculées et le reste de valeurs de Q par les lois d'échelle (jusqu'à $n=1000$). Nous utilisons pour tous les calculs des énergies de capture E_s dans l'équation (V.2) les valeurs obtenues par FAC pour les premières valeurs de n jusqu'à $n=10$, alors que le reste des valeurs sont obtenues par une équation approximative des hydrogénoïdes :

$$E_s = \left(\frac{3}{4} - \frac{1}{n^2} \right) Z^2 R_y \quad (\text{V.8})$$

- **Calcul Atom**

Le calcul Atom se réfère a l'équation donnée pour le calcul du coefficient de taux de RD [35] :

$$\alpha_d = 10^{-8} A \beta^{3/2} e^{-\beta\chi} \quad (\text{V.9})$$

pour l'He I, $\beta = Z^2 \text{Ry}/T_e$ ($Z=2$), $A = 3.1 \cdot 10^{-4}$ et $\chi = 0.744$ (les valeurs de A et χ sont données pour les états $2lnl'$). Pour l'Ar XVII, $\beta = Z^2 \text{Ry}/T_e$ ($Z=18$), $A = 9.51 \cdot 10^{-5}$ et $\chi = 0.620$ (pour les états $2lnl'$).

- **Calcul MZ**

Ce calcul se réfère aux résultats effectués par un calcul MZ [35] exposés auparavant pour l'He I et l'Ar XVII. Le calcul du coefficient de taux de RD suivant l'équation:

$$\alpha = \sum_n 1.656 \cdot 10^{-22} \frac{1}{g_s} Q(n) \frac{e^{-E_s(n)/kT}}{(kT)^{3/2}} \quad (\text{V.10})$$

utilise les valeurs des Q obtenues par la loi d'échelle (V.6) pour l'Ar XVII. Pour l'He I, nous utilisons l'algorithme génétique pour développer une loi d'échelle qui génère toutes les valeurs de Q pour toutes les valeurs de n. Cette loi prend la forme suivante :

$$Q(n) = \frac{65 \cdot 10^9 \frac{282 \cdot 10^{13}}{n^3}}{282 \cdot 10^9 + \frac{717 \cdot 10^{13}}{n^3}} \quad (\text{V.11})$$

- **Calcul de Burgess**

Burgess [13,38] donne une formule générale pour le calcul du coefficient de taux de RD :

$$\alpha_{\text{Burgess}} = 10^{-13} B_d \beta^{3/2} \exp(-\beta \chi_d)$$

$$B_d = 480 f_{\alpha\alpha_0} \left(\frac{z\chi}{z^2 + 13.4} \right)^{1/2} \left[1 + 0.105(z+1)\chi + 0.015(z+1)^2 \chi^2 \right]^1 \quad (\text{V.12})$$

$$\beta = \frac{(z+1)^2 \text{Ry}}{T_c}, \chi_d = \chi \left[1 + 0.015 \frac{z^3}{(z+1)^2} \right]^{-1}, \chi = \frac{E_{\alpha\alpha_0}}{(z+1)^2 \text{Ry}}$$

où $E_{\alpha\alpha_0}$ et $f_{\alpha\alpha_0}$ représentent, respectivement, la différence d'énergie et la force d'oscillateur entre les niveaux 2p et 1s. Ces données ont été calculées par FAC et ils sont reportées sur le tableau V.8. Notons que $z=1$ pour l'He I et $z=17$ pour l'Ar XVII dans l'équation (V.12).

Element	$E_{\alpha\alpha_0}$ (eV)	$f_{\alpha\alpha_0}$
He I	40.81	0.41
Ar XVII	3320	0.412

Tableau V.8 Valeurs de $E_{\alpha\alpha_0}$ et de $f_{\alpha\alpha_0}$ pour l'He I et l'Ar XVII.

Burgess et al. [14] ont corrigé la formule précédente par un facteur dépendant de z qui prend la forme générale suivante :

$$f_{\text{corr}} = 0.84 + 0.5(z+1)^{-2} + 0.03(z-11) \left[1 + 4.5 \cdot 10^{-5} (z-11)^3 \right]^1 \quad (\text{V.13})$$

Ce facteur doit multiplier le coefficient de taux de RD de Burgess de telle sorte que

$$\alpha_{\text{Burgess}_C} = f_{\text{corr}} \alpha_{\text{Burgess}} \quad (\text{V.14})$$

Le facteur f_{corr} prend les valeurs de 0.65 et 1.0198 pour l'He I et l'Ar XVII respectivement.

- **Calcul Hartree Fock Relativiste (HFR)**

Les résultats de calcul HFR présentés au tableau V.4 pour les valeurs des facteurs d'intensité Q jusqu'à $n=7$ ont été utilisés pour générer le reste des valeurs de Q par la loi d'échelle présentée auparavant pour l'Ar XVII. Une fois ces valeurs sont disponibles, le coefficient de taux de RD peut être calculé par l'équation (V.10).

V.3.1.f Comparaisons et discussions

Nous reportons les résultats de calcul sur les figures ci-dessous. La figure V.6 [36] représente une comparaison de nos résultats pour le coefficient de taux de RD pour l'He I avec les autres méthodes de calcul citées auparavant. Les résultats de Burgess et al. [14] et ceux de Wang et al. [25] sont en très bon accord avec notre calcul, la différence est de l'ordre de 20% comparée à [14,25]. Notons que Wang et al. [25] utilisent une méthode relativiste simplifiée d'interaction des configurations pour calculer le coefficient de taux de RD. Les sections efficaces de RD pour l'He I [24] pour les transitions $\Delta N=1$ sont en bon accord (10%) avec les mesures absolues. Il est difficile d'analyser les différences entre les différentes méthodes. Les plus grandes valeurs observées pour la méthode MZ peuvent être dues aux grandes valeurs de taux d'autoionisation comparées aux autres méthodes. D'une autre part notre calcul inclus aussi tous les chaînes de transition radiative entre les états d'auto ionisation qui diminuent les valeurs de Q . La figure V.7 montre les mêmes résultats pour l'He I sur un échelle linéaire pour les coefficient de taux de RD.

Nous exposons sur les fig.V.8 et V.9 les résultats de calcul des coefficients de taux de RD pour l'Ar XVII. Une bonne concordance est observée. La différence est moins de 2% entre nos résultats et ceux de Burgess et al. [14]. En effet les taux de RD convergent rapidement pour les ions multichargés.

L'argon héliumoïde comme étant un ion multichargé donne des résultats très satisfaisants comparés à la littérature. Cependant l'hélium neutre présente toujours des difficultés et un désaccord relativement faible entre les résultats de la littérature, ceci est lié à son structure atomique.

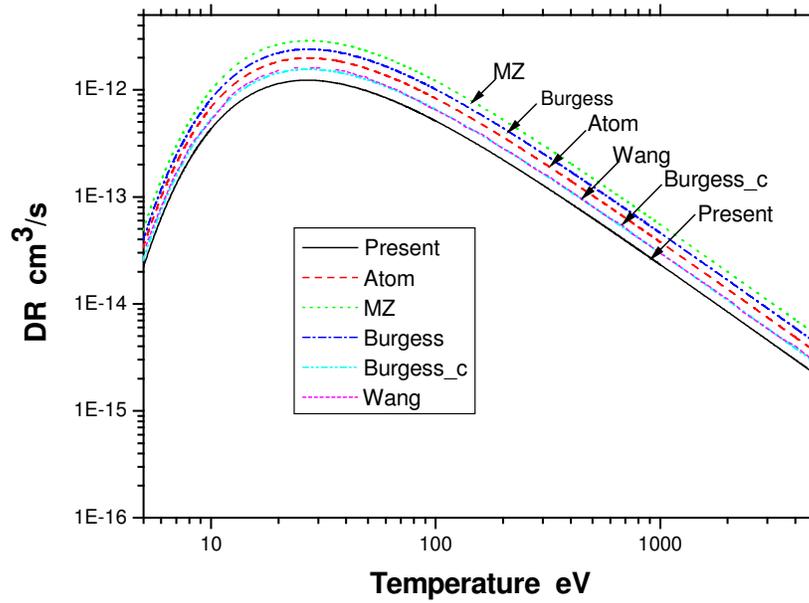


Fig.V.6 Coefficients de taux de RD par différentes méthodes pour l'He I (échelle log.).

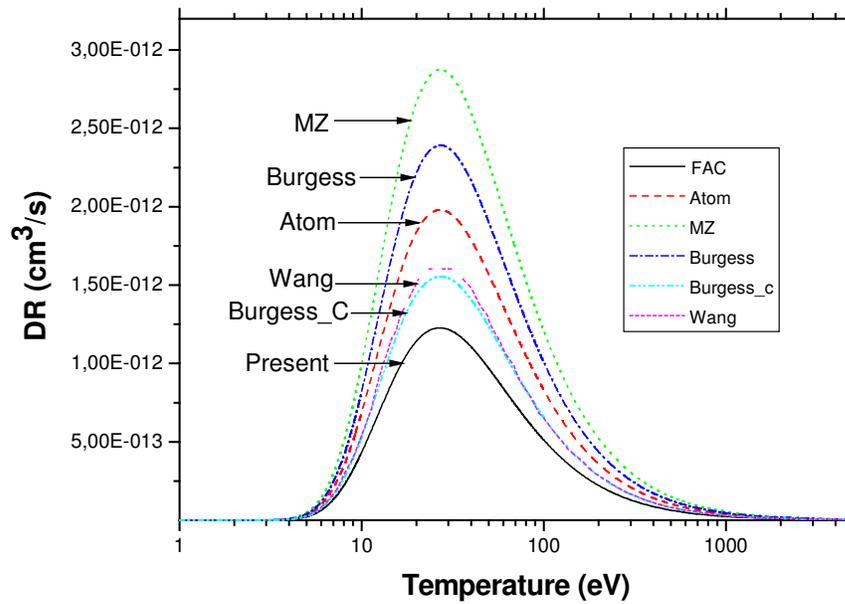


Fig. V.7 Coefficients de taux de RD par différentes méthodes pour l'He I (échelle linéaire).

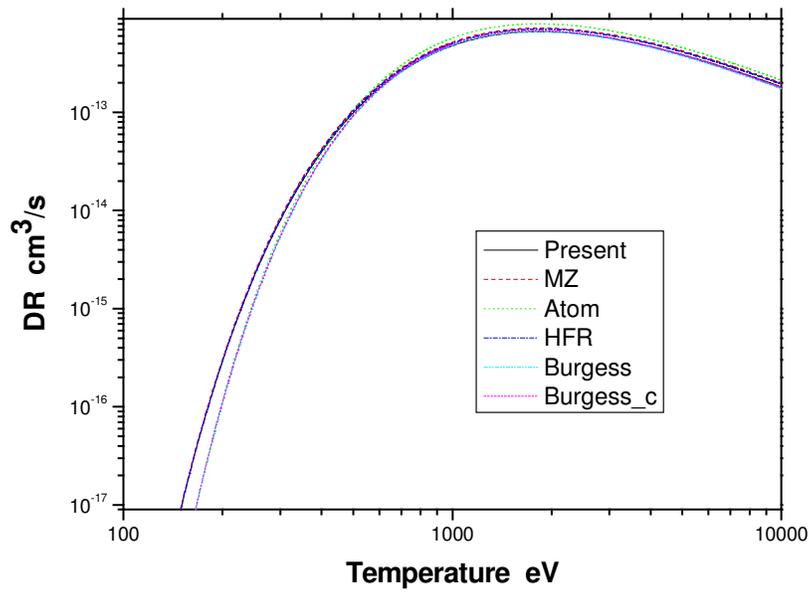


Fig. V.8 Coefficients de taux de RD par différentes méthodes pour l'Ar XVII (échelle logarithmique).

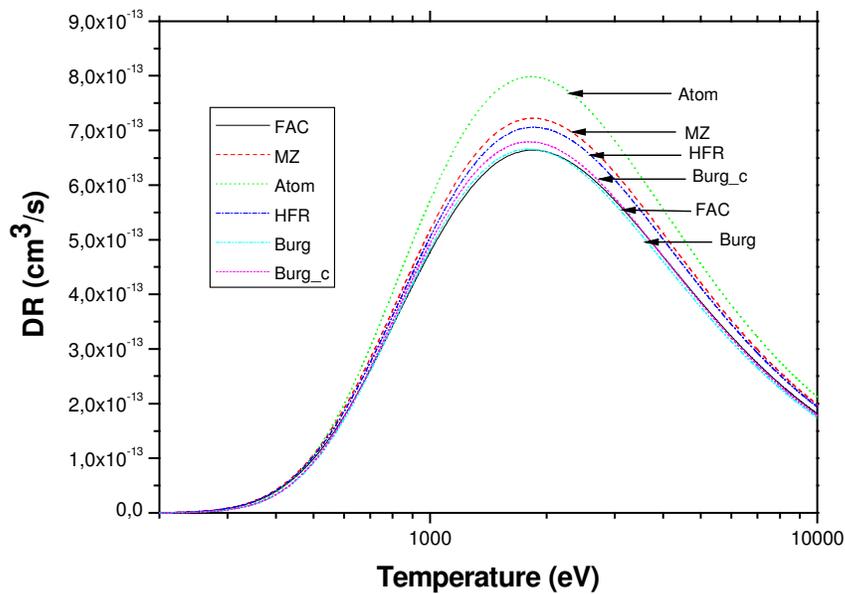


Fig. V.9 Coefficients de taux de RD par différentes méthodes pour l'Ar XVII (échelle linéaire).

V.3.2 Cas des hautes densités

V.3.2.a Facteur d'intensité Q à la limite de Boltzmann

Les effets des hautes densités sont importants pour les grands nombres quantiques n . En effet les taux de collision C sont plus forts que les taux de transition radiative A et l'autoionisation Γ . Dans la limite de Boltzmann où $C \gg A, \Gamma$, le facteur Q prend la forme :

$$Q_{\text{Boltz}} = \frac{\bar{g} \bar{\Gamma} (\bar{A}_{21} + \bar{A}_{n1})}{\bar{A}_{21} + \bar{A}_{n1} + \bar{\Gamma}} \quad (\text{V.15})$$

où :

$$\bar{g} = \sum_j g_j \quad (\text{V.16})$$

est le poids statistique moyenné.

$$\bar{\Gamma} = \frac{\sum_j g_j \Gamma_j}{\sum_j g_j} \quad (\text{V.17})$$

est la moyenne des taux d'autoionisation.

$$A_{21,n1} = \frac{\sum_{ij} g_j A_{ij}}{\sum_j g_j} \quad (\text{V.18})$$

est la moyenne des taux de transition radiative.

Tel que $\{j \in (2l n l')\}$, $i \in (1s n l)\}$ pour A_{21} et $\{j \in (2l n l')\}$, $i \in (1s 2l)\}$ pour A_{n1}

V.3.2.b Lois d'échelle

Dans le but de calculer le coefficient de taux de RD dans la limite de Boltzmann, il est indispensable de disposer des valeurs de Q_{Boltz} pour tous les valeurs de n . Nous développons un programme pour le calcul de Q_{Boltz} en utilisant les données du FAC pour les taux d'autoionisation et les taux de transition radiative. Nous se contentons de calculer Q_{Boltz}

jusqu'à $n=10$. Ces valeurs sont données sur le tableau V.9 pour l'He I. Le reste des valeurs seront obtenues par des lois d'échelle [36]. Ces lois prennent les formes suivantes :

$$\bar{\Gamma}(n) = \frac{C_1}{n^5} \quad (\text{V.19})$$

$$\bar{A}_{n1} = \frac{C_2}{n^5}; n \geq 3 \text{ et } \bar{A}_{21} = C_3 \quad (\text{V.20})$$

$$\begin{cases} \bar{g}(n) = 16n^2 & n \geq 3 \\ \bar{g}(2) = 28 & n = 2 \end{cases} \quad (\text{V.21})$$

L'algorithme génétique [37] donne les paramètres d'ajustement C_1 , C_2 et C_3 . Ces valeurs sont reportés sur le tableau V.10. Les valeurs de Q_{Boltz} calculées jusqu'à $n=10$ et obtenues par les lois d'échelle seront représentées sur le tableau V.11.

Config.	AI_moy	A ₂₁ _moy	A _{n1} _moy	Q _{Boltz}
2x2y	0.51926826E+14	0.10285268E+11		0.28793048E+12
2x3y	0.31719576E+13	0.60465336E+10	0.36099434E+09	0.92082392E+12
2x4y	0.66708098E+12	0.60128113E+10	0.74751400E+08	0.15443231E+13
2x5y	0.20550846E+12	0.60361564E+10	0.22853524E+08	0.23541952E+13
2x6y	0.79685747E+11	0.60268508E+10	0.88243140E+07	0.32317639E+13
2x7y	0.35928551E+11	0.60234260E+10	0.39753695E+07	0.40466189E+13
2x8y	0.18066074E+11	0.60236713E+10	0.19993691E+07	0.46270146E+13
2x9y	0.98959442E+10	0.60240829E+10	0.10931015E+07	0.48535369E+13
2x10y	0.57788897E+10	0.60243656E+10	0.63789038E+06	0.47195048E+13

Tableau V.9 Valeurs de Q_{Boltz} et les taux correspondants pour l'He I

Paramètre	C_1	C_2	C_3
Valeur	5.755E+14	6.931E+10	6.000E+09

Tableau V.10 Les paramètres d'ajustement des lois d'échelle pour Q_{Boltz}

(2lnl') n :	Q _{Boltz}	Q _{Boltz_scale}
2	0.29 E+12	
3	0.92 E+12	0.90 E+12
4	0.15 E+13	0.15 E+13
5	0.24 E+13	0.23 E+13
6	0.32 E+13	0.32 E+13
7	0.41 E+13	0.40 E+13
8	0.46 E+13	0.46 E+13
9	0.48 E+13	0.48 E+13
10	0.47 E+13	0.47 E+13
15		0.24 E+13
20		0.11 E+13
25		0.58 E+12
30		0.34 E+12
40		0.14 E+12
50		0.74 E+11

Tableau V.11 Valeurs de Q_{Boltz} obtenues par notre calcul et les lois d'échelle pour l'He I.

V.3.2.c Résultats et discussions

Dans le but d'examiner les effets de collision sur le coefficient de taux de RD, nous avons reproduit par les lois d'échelle toutes les valeurs de Q_{Boltz} jusqu'à n=1000. Nous calculons, suivant l'équation (V.22), le coefficient de taux de RD à la limite de Boltzmann pour les hautes densités.

$$\alpha_{\text{Boltz}} = \sum_n 1.656 \cdot 10^{-22} \frac{1}{g_s} Q_{\text{Boltz}}(n) \frac{e^{-E_s(n)/kT}}{(kT)^{3/2}} \quad (\text{V.22})$$

Les résultats sont reportés sur la figure V.10 [39]. Nous constatons que les collisions ont un effet d'augmenter le coefficient de taux de RD. Il est bien clair que la valeur de taux de RD à la limite de Boltzmann est 6.6 plus grande que celui de Q_d au maximum.

V.3.3 Cas des densités intermédiaires

V.3.3.a Facteur d'intensité

Dans le cas des densités intermédiaires, le coefficient de taux de RD peut être calculé à partir de facteur d'intensité Q tel que :

$$Q_{\text{int}} = \sum_{n=2}^{n_{\text{crit}}} Q_d + \sum_{n>n_{\text{crit}}}^{n_{\text{max}}} Q_{\text{Boltz}} \quad (\text{V.23})$$

Le nombre n critique peut être estimé à partir de cette condition :

$$S(2 \ln_{\text{crit}} I' \rightarrow 2l + e) \gg \bar{A}_{2l} + \bar{\Gamma}(n_{\text{crit}}) \quad (\text{V.24})$$

où S est le taux d'ionisation.

V.3.3.b Résultats de calcul et discussions

Nous utilisons les résultats trouvés pour les facteurs Q_d et Q_{Boltz} pour calculer les coefficients de taux de RD. Nous présentons sur la figure V.10 nos résultats de calcul pour différents nombres critiques n . La figure V.10 montre que les effets de collision tendent à augmenter les valeurs des taux de RD. La figure V.11 [39] donne l'allure du maximum de Q en fonction de n critique. Les effets de hautes densités qui sont préférentiellement importants pour les nombres quantiques les plus grands sont très visibles. Ces effets peuvent augmenter les valeurs des taux de RD d'un facteur de deux si on inclut le Q_{Boltz} pour $n_{\text{crit}}=20$ ou $n_{\text{crit}}=10$ (voir fig. V.11). On note que les figures V.10 et V.11 montrent des effets particuliers et pour un taux de RD effectif il faut, aussi, considerer l'ionisation des électrons nl.

V.4 Influence du coefficient de taux de RD sur l'équilibre atomique/ionique

Les méthodes spectroscopiques traditionnelles appliquées à la fusion magnétique sont essentiellement basées sur l'approximation du model coronal où les taux de transition radiative sont plus grands que les taux d'excitation collisionnelle. La population des états d'ionisation est donnée par :

$$n_e n^{Z+1} (\alpha_{\text{RD}} + \alpha_{\text{RR}}) = n_e n^Z I \quad (\text{V.25})$$

où α_{RD} , α_{RR} et I sont les coefficients de taux de RD, de recombinaison radiative et d'ionisation respectivement.

A partir de l'équation (V.25), il est bien clair que les erreurs commises sur le calcul de coefficients de taux de RD influent directement sur l'équation d'équilibre et donc sur les diagnostics qui emploient les rapports ioniques et atomiques. Ceci est, i.g., important pour la détermination de coefficients de diffusion pour caractériser les propriétés de transport indépendamment des modèles de plasmas [40].

V.4.1 Cinétique atomique

Nous avons utilisé deux modèles pour étudier l'influence des coefficients de taux de RD sur l'équilibre atomique/ionique [36,39,40], fig.V.12.

1. Model de l'état fondamental, où tous les RD sont couplées à l'état fondamental de l'hélium neutre (model standard [1,41]).
2. Model de chaîne (channel), où tous les RD sont couplées aux états simplement excités singulets et triplets respectivement après la première décroissance radiative. Ce model va être utilisé dans notre étude.

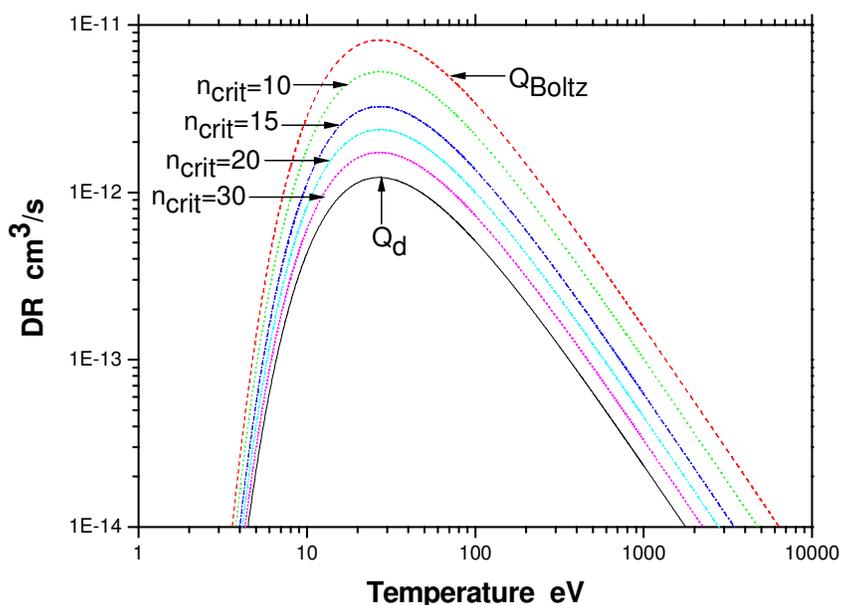


Fig. V.10 Coefficients de taux de RD pour les différents cas des densités pour l'He I.

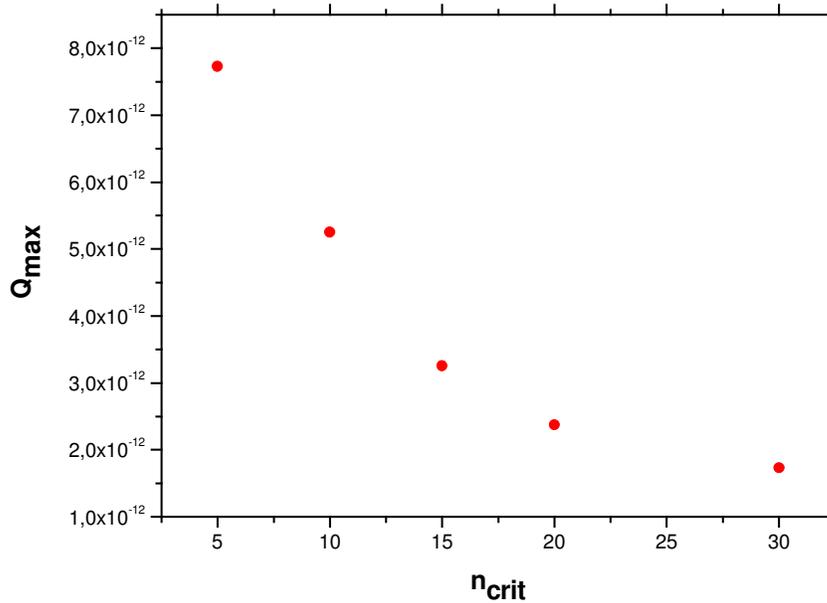


Fig. V.11 Q_{max} en fonction de n critique

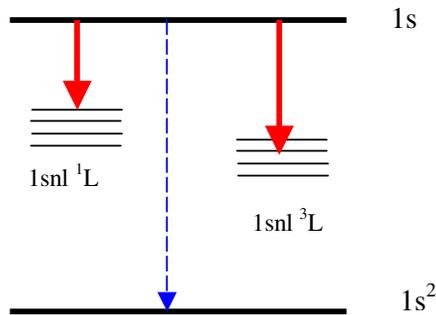


Fig.V.12 Description des models, Pointillée : Model standard 1, Pleine : Model de chaîne 2.

V.4.2 Cinétique de la population atomique

Comme il a été déjà mentionné les effets d'évaluation incorrecte des coefficients de taux de RD sur l'équation d'équilibre (V.25) est très important. Pour montrer ces effets, nous avons utilisé le code SOPHIA [29] pour une densité électronique de $n_e=10^{13} \text{ cm}^{-3}$ pour calculer le rapport doublé R (normalisé au coefficient de taux inchangé, $f=1.0$) :

$$R = \left\{ n(1s^2)/n(1s) \right\}_{f=1} / \left\{ n(1s^2)/n(1s) \right\}_f \quad (\text{V.26})$$

Le code SOPHIA [29] est un model collisionnel radiatif qui prend en compte simultanément le calcul des états d'ionisation et les populations des états excités (Les états métastables sont aussi inclus).

Les coefficients de taux de RD sont réduits d'un facteur de deux ($f = 0.5$) et augmentés d'un facteur de deux ($f = 2.0$), i.e., $\alpha \rightarrow f \cdot \alpha$

Le tableau V.12 montre les valeurs du rapport R pour différentes températures. On peut voir, que les températures plus grandes que 10 eV induisent une variation sur les coefficients de taux de RD qui influent directement sur les densités de population de l'He⁰⁺ et l'He¹⁺ [40].

kT _e	100 eV	10 eV	5 eV	2 eV
f = 0.5	1.97	1.84	1.13	1.00
f = 2.0	0.50	0.52	0.81	1.00

Tableau V.12 Variation des rapports R (eq.V.26) de l'He I et l'He II .

V.4.3 Effets de hautes densités

Nous examinons dans ce qui suit les effets de hautes densités sur les coefficients de taux de RD. Pour les éléments légers tel que l'He I, les facteurs Q sont lentement convergents (voir tableau V.6), ainsi les niveaux plus grands que $n=10$ peuvent contribuer largement aux coefficients de taux de RD. Le nombre quantique principal peut être estimé à partir de [42] :

$$n_{\max} \approx 1.2 \cdot 10^3 \frac{Z^{3/5}}{n_e^{2/15}}; \quad n_e \text{ en } [\text{cm}^{-3}] \quad (\text{V.27})$$

pour l'hélium neutre, on aura $n_{\max}=16$ et $n_{\max}= 22$ pour les densités électronique $n_e=10^{14} \text{ cm}^{-3}$ et $n_e=10^{13} \text{ cm}^{-3}$, respectivement. Le tableau V.6 montre que les facteurs Q sont loins de la convergence à n_{\max} . En conséquence, les effets de hautes densités (ionisation collisionnelle,

dépression des niveaux du au champ électrique, etc.), qui sont préférentiellement considérables pour les grands nombres quantiques sont très importants.

Cependant le cas est très différent pour les ions multichargés tel que l'Ar XVII. En effet les coefficients de taux de RD convergent très rapidement comme les montre le tableau V.4 pour les facteurs Q. Ceci est du aux valeurs de taux de recombinaison radiative qui sont relativement grandes. Ce qui implique que les corrections de hautes densités sur les coefficients de taux de RD sont faibles [40].

D'une autre part, nous avons utilisé le code SOPHIA [29] pour étudier l'influence de hautes densités sur les coefficients de taux de RD de l'He I suivant les models décrits au paragraphe V.4.1. Le rapport R est défini de la façon suivante :

$$R = \left\{ n(1s^2)/n(1s) \right\}_{\text{model 1, libre}} / \left\{ n(1s^2)/n(1s) \right\} \quad (\text{V.28})$$

Les résultats de calcul [40] pour $n_e = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ et $kT_e = 10 \text{ eV}$ sont reportés sur le tableau V.13.

	model 1, free	model 1, coll.	model 2, free	model 2, coll.
R (eq. V.28)	1.00	0.32	0.13	0.10

Tableau V.13 Variation des rapports R (eq. V.28) de l'He I et l'He II

Le tableau V.13 montre que les processus collisionnels influencent par un facteur de 3 (model 1, coll.). Le plus intéressant est l'influence du model 2, par un facteur de 8 (model 2, libre) et un facteur de 10 dans le cas collisionnel (model 2, coll.).

Nous concluons que les effets de hautes densités (model 2), les collisions et la dépression des niveaux influencent fortement sur le rapport ionique/atomique. Ceci, en conséquence, est très important pour toutes les interprétations employant les densités de population comme la perte de puissance et le refroidissement de radiation, l'analyse de diffusion et le transport de particule dans les plasmas de bord.

V.5 Conclusion

Nous avons exposé dans ce chapitre la recombinaison diélectronique. L'effet de l'interaction et choix des configurations sur les différents taux liés au processus de RD a été étudié. Par ailleurs, des lois d'échelle ont été développées pour calculer les coefficients de taux de RD dépendant de spin. Ces lois sont convergentes pour tous les nombres quantiques (S,L et n). Nos résultats de calcul des coefficients de taux de RD pour les atomes isolés à faible densité sont en bonne concordance avec ceux publiés. Par ailleurs, nous avons examiné les différents cas des densités pour montrer les effets de haute densité sur ces coefficients. Les effets de hautes densités, les collisions et la dépression des niveaux influencent fortement sur le rapport ionique /atomique de l'He I qui est, fréquemment, utilisé dans les diagnostics de plasmas.

Références

- [1] A. Burgess *Astrophys. J.* **139** (1964) 776.
- [2] A. Burgess *Astrophys. J.* 141 (1965) 1588.
- [3] N. Ohno, D. Nishijima, S. Takamura, et al., *Nucl. Fus.* **41** (2001) 1055.
- [4] A. Escarguel, B. Pegourié, J. Hogan, et al., *Plasma Phys. Control. Fus.* **43** (2001) 1743.
- [5] R. Guirlet, M. Koubiti, A. Escarguel, et al., *Plasma Phys. Control. Fus.* **43** (2001) 177.
- [6] N. Ohno, D. Nishijima, S. Takamura et al., *Nuclear Fusion*, **41** (2001) 8.
- [7] F. B. Rosmej, R. Stamm, S. Fritzsche, H. Capes, et al., *J. Nucl. Mat.* **337-339** (2005) 1101.
- [8] F. B. Rosmej and V. S. Lisitsa, *Phys. Lett. A* 244 (1998) 401-406.
- [9] F. P. Keenan and S. M. McCann, *J. Phys. B. At. Mol. Opt. Phys.*, **23** (1990) L423.
- [10] K. J. H. Philips et al., *J. Phys. B. At. Mol. Opt. Phys.*, **27**(1994) 1939.
- [11] J. E. Rice et al., *New Journal of Physics* **1** (1999) 19.1-19.27.
- [12] G. M. R. Ansari, G. Elwert and P. Mucklich, *Z. Naturforsch.* **259** (1970) 1781.
- [13] A. Burgess, *Astrophys. J.* **141**, 1588 (1965).
- [14] A. Burgess and A.S. Tworokowi., *Astrophys. J.* **205** (1976) L105-L107.
- [15] S. M. V. Aldrovandi and D. Péquignot, *Astron. & Astrophys.* **25** (1970) 137-140.
- [16] M. Arnaud and R. Rothenflug, *Astrn. Astrophys. Suppl. Ser.* **60** (1985) 425-457.
- [17] T. Kato and E. Asano, *NIFS-DATA Series*, **54** (1999).
- [18] W. Eissner and M. J. Seaton, *J. Phys. B* **6** (1972) 2187.
- [19] H. E. Saraph and M. J. Seaton, *Philos. Trans. R. Soc. London, Ser. A* **271** (1971) 1.
- [20] Y. Hahn, *Phys. Rev. A* **22** (1980) 2896.
- [21] M. H. Chen, *Phys. Rev. A* **31** (1985) 1449.
- [22] R. H. Bell and M. J. Seaton, *JB*, 18(1985) 1589-1629.
- [23] E. Lindroth, *Phys. Rev. A* **49** (1994) 4473-4480.
- [24] J. G. Wang, Y. Z. Qu and Li J.M., *Phys. Rev. A* **52** (1995) 4276.
- [25] J.G. Wang, T. Kato and Murakami I., *Phys. Rev. A* **60** (1999) 3753.
- [26] R. R. Haar, J. A. Tanis, V. L. Plano et al. *Phys. Rev. A* **47**(1993) R3472-R3475.
- [27] D. R. Dewitt, R. Schuch, T. Quinteros et al. *Phys. Rev A* **50** (1994) 1257-1264.
- [28] D. R. Dewitt, E. Lindroth, R. Schuch et al. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **28** (1995) L147-L153.
- [29] F. B. Rosmej, SOPHIA-code, in preparation.
- [30] D. Nishijima, U. Wenzel, M. Motoyama et al. *J. Nucl. Mater.*, **290-293** (2001) 688.
- [31] M. F. Gu, FAC1.0.7, <http://kipac-tree.stanford.edu/fac/>
- [32] F.B. Rosmej, Méthodes Spectroscopiques pour l'Analyse de Plasmas Hors-Equilibre, Habilitation à diriger des recherches, Université Bochum 1998.
- [33] E. Lindroth, *Phys. Rev. A* **49** (1994) 4473.
- [34] P. Glans, E. Lindroth, R. Badnell et al., *Phys. Rev. A* **64** (2001) 043609.
- [35] V. P. Shevelko and L. A. Vainshtein, *Atomic Physics for Hot Plasmas*, IOP Publishing, London, 1993.
- [36] E. H. Guedda, F. B. Rosmej, P. Genesio, R. Stamm, L. A. Vainshtein, M. F. Gu, E. Lindroth and F. Khelifaoui, *Contrib. Plasma Phys.* **46** (2006) 655-660.

- [37] P. Charbonneau, *Astrophys. J. Suppl.* **101**, 309-334 (1995).
- [38] I. I. Sobelman, L.A. Vanshtein and E.A. Yukov, *Excitation of Atoms and Broadening of Spectral lines*, Springer and Verlag, NY, 1981.
- [39] E. H. Guedda, F. B. Rosmej, M. Koubiti, R. Stamm , V. S. Lisitsa, 33rd Europ. Phys. Soc. Conference on Plasma Physics, Rome, Italy, 2006.
- [40] F. B. Rosmej, E. H. Guedda, V. S. Lisitsa and R. Stamm, *AIP Conf. Proc.*, **812-1** (2006) 104-111.
- [41] R. A. Hulse, *Nuclear technology Fusion*, **3**(1983) 259.
- [42] D. G. Hummer and D. Mihalas, *Astrophys. J.* **331** (1988) 807.

Conclusion générale

Nous avons présenté dans cette thèse notre contribution à l'étude des structures atomiques et des quelques processus atomiques élémentaires dans les plasmas, en particulier les transitions radiatives, la recombinaison diélectronique et l'autoionisation. En effet ces processus atomiques sont indispensables pour la compréhension, la modélisation et les diagnostics de plasmas.

Nous avons, tout d'abord, donné des généralités sur les plasmas pour justifier l'importance du sujet et développé les paramètres importants et les méthodes utilisées pour l'étude des plasmas. D'autre part, nous avons exposé les différentes équations, les méthodes et les codes de calcul des structures atomiques pour les systèmes à un et à deux électrons. Les résultats de calcul des structures atomiques des hydrogénoïdes par notre propre programme sont comparés aux résultats publiés. La comparaison montre une bonne concordance entre les différentes méthodes. Les erreurs relatives sont trop faibles.

Les calculs de structures atomiques pour l'hélium neutre et l'argon héliumoïde ont été effectués par le code FAC. Pour l'He I, la comparaison avec un calcul Hartree Fock Relativiste (HFR modifié) nous montre une bonne concordance. Les coefficients de mélange entre les fonctions d'onde ont été étudiés; les résultats montrent une concordance entre les coefficients de mélange des états singulets et triplets calculés par le programme FAC dans la base jj et ceux trouvés par transformation LS-jj des coefficients de Drake dans la base LS. Les résultats de notre calcul de l'Ar XVII pour les énergies se coïncident bien avec ceux publiés par NIST. Les erreurs relatives sont très faibles. D'autre part nous avons étudié les taux de transition radiative de l'He I. Une comparaison entre nos résultats trouvés pour les taux de transition radiative de résonance comparés au calcul de Drake et au calcul Hartree-Fock Relativiste (HFR modifié) montre les mêmes ordres de grandeur. La loi d'échelle est vérifiée

pour ces transitions pratiquement à partir de $n=4$ pour nos calculs. D'autre part, les taux moyens de transition radiative de l'He I ont été aussi calculés et étudiés. Les résultats de taux de transition singulet-singulet (Ass) se comparent bien en général avec ceux calculés par HFR modifié et Drake. Les transitions triplets-singulets montrent que les résultats de FAC pour les taux de transition radiative sont convergents. Cependant la correspondance entre les différents résultats des différentes méthodes est mieux pour les transitions entre les grands nombres quantiques n . Le calcul HFR modifié donne des résultats de même ordre que ceux calculés par Drake. Les mêmes remarques se généralisent pour les transitions singulets-triplets. Les taux de transition entre les états triplets-triplets sont en très bon accord. Par ailleurs, nous avons développé des lois d'échelle pour les taux moyens de transition radiative. Ces lois sont inspirées à partir de ceux des hydrogénoïdes et en tenant compte des coefficients de mélange entre les fonctions d'onde singulets et triplets. Les taux moyens générés par ces lois sont convergents et comparables aux résultats de calcul. Cependant, ces lois donnent pour FAC, des résultats qui diffèrent largement de ceux du Drake et HFR modifié alors que ces deux derniers sont en bon accord. Ces lois convergentes pour les probabilités de transition sont très importantes, en particulier pour les raies d'intercombinaison, pour un modèle collisionnel radiatif utilisant la cinétique de population.

Les processus atomiques élémentaires dans les plasmas ont été exposés. Cependant les processus liés à la recombinaison diélectronique (RD) ont été développés et étudiés en détail pour l'He I et l'Ar XVII. Nous avons étudié l'effet de l'interaction et choix des configurations sur les différents taux liés au processus de RD. Par ailleurs, des lois d'échelle ont été développées pour calculer les coefficients de taux de RD dépendant de spin. Ces lois sont convergentes pour tous les nombres quantiques (S , L et n). Nos résultats de calcul des coefficients de taux de RD pour les atomes isolés à faible densité sont en bonne concordance avec ceux publiés. Par ailleurs, nous avons examiné les différents cas de densités pour montrer les effets de haute densité sur les coefficients de taux de RD. Les effets de hautes densités, les collisions et la dépression des niveaux influencent fortement sur le rapport ionique /atomique de l'He I qui est, fréquemment, utilisé dans les diagnostics de plasmas.

Dans les perspectives nous comptons continuer à étudier les autres processus atomiques élémentaires pour l'He I. Ceci nous permet d'avoir un schéma complet des processus importants et une meilleure utilisation du modèle collisionnel radiatif.

Annexe A

Programme FAC

A.1 Introduction

Le code FAC (Flexible Atomic Code) [1] est un programme conçu pour le calcul des différents processus atomiques radiatifs et collisionnels. Le calcul de structure atomique est basé sur l'interaction de configuration relativiste avec des fonctions d'onde de bases indépendantes. Ces fonctions d'onde sont obtenues à partir d'un potentiel central local qui peut être déterminé d'une façon auto régulière pour représenter l'écran électronique du potentiel nucléaire. Les effets relativistes sont pris en compte ainsi que les effets QED de grand ordre par l'interaction de Breit. Les processus du continuum sont traités dans l'approximation des ondes déformées.

A.2 Installation

Le code FAC peut être obtenu à partir <http://kipac-tree.stanford.edu/fac>. Le programme FAC est écrit en ANSI C et en Fortran 77. La flexibilité du FAC est assurée quand l'interface Python (PFAC) est utilisée. Les subroutines numériques implémentées dans FAC sont exportées à travers les différents modules Python. La tâche de calcul peut être complétée par la programmation dans un langage Python. Pour exécuter le FAC sur Windows il est recommandé d'utiliser l'émulation API Unix par Cygwin qui est disponible au www.cygwin.com. Python est, aussi, recommandé pour une meilleure utilisation du FAC, il est disponible sur www.python.org.

Les procédures d'installation sont les suivantes :

- Installation de cygwin à partir de, www.cygwin.com
- Copier FAC à partir de, <http://kipac-tree.stanford.edu/fac> dans cygwin/usr/local
- Dans cygwin/usr/local, utiliser les commandes suivantes pour extraire fac-x y z à partir de la version fac-x y z.tar.gz (x y z est la version FAC, i.e. 1 0 6 pour Nov. 2004)

```
$ gunzip fac x y z.tar.gz
```

```
$ tar -xvf fac x y z.tar
```

```
$ cd fac x y z
```

```
$ ./configure
```

```
$ make pfac
```

```
$ make-pfac
```

A.3 Exemples des fichiers d'entrée et de sortie

A.3.1 Fichier Python de calcul de structure atomique pour l'He I

Le fichier suivant calcule les niveaux d'énergie, et les transitions entre les différents sous niveaux jusqu'à $n=3$ pour l'He I.

Début du prog.py

```
""" calculation of the energy levels. and radiative transition rates
```

```
"""
```

```
from pfac import fac
```

```
fac.SetAtom('He')
```

```
fac.Config('1*2', group = 'n1')
```

```
fac.Config('1*1 2*1', group = 'n2')
```

```
fac.Config('1*1 3*1', group = 'n3')
```

```
fac.SetRadialGrid(3000)
```

```

fac.SetBreit(20)
fac.SetAngZCut(0.0)
fac.SetMixCut(0.0)
fac.SetTransitionCut(0.0)

fac.ConfigEnergy(0)
fac.OptimizeRadial(['n1'])
fac.ConfigEnergy(1)

fac.Structure('nehe.lev.b', ['n1'])
fac.Structure('nehe.lev.b', ['n2'])
fac.Structure('nehe.lev.b', ['n3'])

fac.MemENTable('nehe.lev.b')
fac.PrintTable('nehe.lev.b', 'nehe.lev', 1)

fac.TransitionTable('nehe.tr.b', ['n1'], ['n2'])
fac.TransitionTable('nehe.tr.b', ['n2'], ['n2'])
fac.TransitionTable('nehe.tr.b', ['n1'], ['n3'])
fac.TransitionTable('nehe.tr.b', ['n2'], ['n3'])
fac.TransitionTable('nehe.tr.b', ['n3'], ['n3'])

fac.PrintTable('nehe.tr.b', 'nehe.tr', 1)

```

A.3.2 Fichier de sortie pour les niveaux d'énergie de l'He I

Le fichier suivant est un fichier de sortie (out put) du programme prog.py. Il indique la nature de l'élément utilisé (He), l'indexation des sous niveaux (ILEV), l'énergie de chaque sous niveaux (ENERGY), la parité (P), le niveau n et le nombre orbital l dans VNL, le nombre quantique 2J et les configurations.

```

FAC 1.0.7
Endian = 0
TSess = 1142329694
Type = 1
Verbose = 1
He Z = 2.0
NBlocks = 3
E0 = 0, -7.78604223E+01

```

NELE = 2

NLEV = 1

ILEV	IBASE	ENERGY	P	VNL	2J		
0	-1	0.00000000E+00	0	100	0 1*2	1s2	1s+2(0)0

NELE = 2

NLEV = 6

ILEV	IBASE	ENERGY	P	VNL	2J		
1	-1	1.87774591E+01	0	200	2 1*1 2*1	1s1 2s1	1s+1(1)1 2s+1(1)2
2	-1	2.00077110E+01	0	200	0 1*1 2*1	1s1 2s1	1s+1(1)1 2s+1(1)0
3	-1	2.03369338E+01	1	201	4 1*1 2*1	1s1 2p1	1s+1(1)1 2p+1(3)4
4	-1	2.03371485E+01	1	201	2 1*1 2*1	1s1 2p1	1s+1(1)1 2p-1(1)2
5	-1	2.03373504E+01	1	201	0 1*1 2*1	1s1 2p1	1s+1(1)1 2p-1(1)0
6	-1	2.07788865E+01	1	201	2 1*1 2*1	1s1 2p1	1s+1(1)1 2p+1(3)2

NELE = 2

NLEV = 10

ILEV	IBASE	ENERGY	P	VNL	2J		
7	-1	2.16901990E+01	0	300	2 1*1 3*1	1s1 3s1	1s+1(1)1 3s+1(1)2
8	-1	2.18662487E+01	1	301	2 1*1 3*1	1s1 3p1	1s+1(1)1 3p-1(1)2
9	-1	2.18662617E+01	1	301	0 1*1 3*1	1s1 3p1	1s+1(1)1 3p-1(1)0
10	-1	2.18662759E+01	1	301	4 1*1 3*1	1s1 3p1	1s+1(1)1 3p+1(3)4
11	-1	2.19463012E+01	0	302	2 1*1 3*1	1s1 3d1	1s+1(1)1 3d-1(3)2
12	-1	2.19463026E+01	0	302	4 1*1 3*1	1s1 3d1	1s+1(1)1 3d-1(3)4
13	-1	2.19463125E+01	0	302	6 1*1 3*1	1s1 3d1	1s+1(1)1 3d+1(5)6
14	-1	2.19486272E+01	0	302	4 1*1 3*1	1s1 3d1	1s+1(1)1 3d+1(5)4
15	-1	2.19888235E+01	0	300	0 1*1 3*1	1s1 3s1	1s+1(1)1 3s+1(1)0
16	-1	2.19998874E+01	1	301	2 1*1 3*1	1s1 3p1	1s+1(1)1 3p+1(3)2

A.3.3 Fichier de sortie pour les transitions dans l'He I

Le fichier suivant est aussi fichier de sortie du programme prog.py. Il donne les énergies de transition, les forces d'oscillateur (gf) et les taux de transition radiative entre les différents sous niveaux. Un bloc contient en colonne : index d'un sous niveau, le 2j, l'indexe de l'autre sous niveau, 2j, l'énergie de transition en eV, la force d'oscillateur gf et le taux de transition radiative A en s⁻¹.

```

FAC 1.0.7
Endian = 0
TSess = 1142329694
Type = 2
Verbose = 1
He Z = 2.0
NBlocks= 5

NELE = 2
NTRANS = 2
MULTIP = -1
GAUGE= 2
MODE = 1
  4 2  0 0 2.0337E+01 1.09521530E-08 6.55190659E+01
  6 2  0 0 2.0779E+01 3.20230454E-01 1.99983987E+09

NELE = 2
NTRANS = 24
MULTIP = -1
GAUGE= 2
MODE = 1
  3 4  1 2 1.5595E+00 1.44180560E+00 3.04300520E+07
  3 4  2 0 3.2922E-01 0.00000000E+00 0.00000000E+00
  3 4  3 4 0.0000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00
  3 4  4 2 -2.1472E-04 0.00000000E+00 0.00000000E+00
  3 4  5 0 -4.1659E-04 0.00000000E+00 0.00000000E+00
  3 4  6 2 -4.4195E-01 0.00000000E+00 0.00000000E+00
  4 2  1 2 1.5597E+00 8.65185916E-01 3.04420440E+07
  4 2  2 0 3.2944E-01 7.31815097E-09 1.14877671E-02

```

Références

[1] M. F. Gu, FAC1.0.7, <http://kipac-tree.stanford.edu/fac/>

Annexe B

Symboles 3-6-j et transformations entre différents couplages

B.1 Symbol 3-j

Les symboles 3n-j de Wigner [1-2] ou bien leurs (their close relative) coefficients de Clebsch-Gorden et les coefficients de Racah (pour n=1 et 2 respectivement) sont pratiquement indispensables pour le calcul quantitatif de structure atomique et spectrale.

Le symbole 3-j est une fonction algébrique de six arguments qui peut être définie comme suit :

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} &\equiv \delta_{m_1+m_2+m_3,0} (-1)^{j_1-j_2-m_3} \\ &\times \left[\frac{(j_1+j_2-j_3)!(-j_1+j_2+j_3)!(j_1-m_1)!(j_1+m_1)!(j_2-m_2)!(j_2+m_2)!(j_3-m_3)!(j_3+m_3)!}{(j_1+j_2+j_3+1)!} \right]^{1/2} \quad (\text{B.1}) \\ &\times \sum_k \frac{(-1)^k}{k!(j_1+j_2-j_3-k)!(j_1-m_1-k)!(j_2+m_2-k)!(j_3-j_2+m_1+k)!(j_3-j_1-m_2+k)!} \end{aligned}$$

Cette fonction est définie sauf pour des valeurs de j_i et m_i tel que les arguments de tous les factoriels sont des entiers non négatifs. j_i et m_i sont obligatoirement entiers ou demi-entiers. $j_1+j_2+j_3$ et $m_1+m_2+m_3$ doivent être entiers et $j_1-j_2-m_3$ est entier, ainsi le symbole 3-j est réel. Il faut, aussi, satisfaire les inégalités pour les j_i :

$$\begin{aligned} j_1 + j_2 &\geq j_3, \\ j_2 + j_3 &\geq j_1, \\ j_3 + j_1 &\geq j_2; \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Les inégalités et les relations de sommes se réfèrent aux relations de triangle.
La sommation dans la relation (B.1) est finie pour des valeurs de k satisfaisant:

$$\max(0, j_2 - j_3 - m_1, j_1 - j_3 + m_2) \leq k \leq (j_1 + j_2 - j_3, j_1 - m_1, j_2 + m_2) \quad (\text{B.3})$$

B.2 Symbole 6-j

Le symbole 6-j est une fonction de six arguments qui peut être définie par l'expression [2-3] :

$$\left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{matrix} \right\} \equiv \Delta(j_1 j_2 j_3) \Delta(j_1 l_2 l_3) \Delta(l_1 j_2 l_3) \Delta(l_1 l_2 j_3) \\ \times \sum_k \frac{(-1)^k (k+1)!}{(k - j_1 - j_2 - j_3)! (k - j_1 - l_2 - l_3)! (k - l_1 - j_2 - l_3)! (k - l_1 - l_2 - j_3)!} \\ \times \frac{1}{(j_1 + j_2 + l_1 + l_2 - k)! (j_2 + j_3 + l_2 + l_3 - k)! (j_3 + j_1 + l_3 + l_1 - k)!} \quad (\text{B.4})$$

où

$$\Delta(abc) = \left[\frac{(a+b-c)! (a-b+c)! (-a+b+c)!}{(a+b+c+1)!} \right]^{1/2} \quad (\text{B.5})$$

Dans la théorie de structure atomique le symbole 6-j résulte d'un quintuple de sommation sur un produit de quatre symboles 3-j [4] :

$$\left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{matrix} \right\} = [j_3] \sum_{\substack{m_1 m_2 \\ n_1 n_2 n_3}} (-1)^s \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & n_2 & -n_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & j_2 & l_3 \\ -n_1 & m_2 & n_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & j_3 \\ n_1 & -n_2 & m_3 \end{pmatrix} \quad (\text{B.6})$$

où

$$s = l_1 + l_2 + l_3 + n_1 + n_2 + n_3 \quad (\text{B.7})$$

Le symbole 6-j est considéré égal à zéro sauf si les arguments dans les factoriels des relations (B.4) et (B.5) sont des entiers non négatifs (ie., tous les arguments dans le symbole 6-j sont des entiers ou demi entiers non négatifs). Les relations de triangle doivent être aussi satisfaites :

$$\delta(j_1 j_2 j_3), \delta(j_1 l_2 l_3), \delta(l_1 j_2 l_3), \delta(l_1 l_2 j_3) \quad (\text{B.8})$$

La sommation dans (B.4) est finie et elle couvre les valeurs entiers dans le rang :

$$\begin{aligned} \max(j_1 + j_2 + j_3, j_1 + l_2 + l_3, l_1 + j_2 + l_3, l_1 + l_2 + j_3) \\ \leq k \leq \min(j_1 + j_2 + l_1 + l_2, j_2 + j_3 + l_2 + l_3, j_3 + j_1 + l_3 + l_1) \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

B.3 Transformation entre différents couplages

Les symboles décrits auparavant peuvent être appliqués au calcul des matrices de passage entre différents couplages. Nous exposons par la suite la procédure de passage entre deux couplages.

Les éléments de matrice de transformation entre LS et LK sont donnés par :

$$\begin{aligned} T_{LS, L'K'} &\equiv \langle [(1, l_2) L, (s_1, s_2) S] J | [(1, l_2) L', s_1] K', s_2, J \rangle \\ &= \delta_{LL'} (-1)^{L+s+s+J} [K', S]^{l/2} \begin{Bmatrix} L & s_1 & K' \\ s_2 & J & S \end{Bmatrix} \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

De la même façon les éléments de matrices de transformation entre couplages LK-jK et jK-jj seront donnés comme suit :

$$\begin{aligned} T_{L'K', jK} &\equiv \langle [(1, l_2) L', s_1] K', s_2, J | [(1, s_1) j_1, l_2] K, s_2, J \rangle \\ &= \delta_{KK'} (-1)^{l_2+s_1+L'+j_1} [L', j_1]^{l/2} \begin{Bmatrix} l_2 & l_1 & L' \\ s_1 & K & j_1 \end{Bmatrix} \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

$$\begin{aligned}
T_{j_1 K, j_1' j_2} &\equiv \langle [(1_1 s_1) j_1, 1_2] K, s_2, J | [(1_1 s_1) j_1', (1_2 s_2) j_2] J \rangle \\
&= \delta_{j_1 j_1'} (-1)^{j_1 + 1_2 + s_2 + J} [K, j_2]^{1/2} \left\{ \begin{matrix} j_1 & 1_2 & K \\ s_2 & J & j_2 \end{matrix} \right\}
\end{aligned} \tag{B.12}$$

La matrice de transformation entre LS-jj est donnée par (B.10), (B.11) et (B.12) :

$$\begin{aligned}
T_{LS, jj} &= \sum_K T_{LS, LK} T_{LK, jK} T_{jK, jj} \\
&= [L, S, j_1, j_2]^{1/2} \sum_K (-1)^{2(L+s_1)} [K] \left\{ \begin{matrix} L & s_1 & K \\ s_2 & J & S \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} 1_2 & 1_1 & L \\ s_1 & K & j_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} j_1 & 1_2 & K \\ s_2 & J & j_2 \end{matrix} \right\}
\end{aligned} \tag{B.13}$$

Notons que $2(L+s+K)$ doit être un entier pair, alors on peut écrire $T_{LS, jj}$ comme :

$$\begin{aligned}
T_{LS, jj} &= [L, S, j_1, j_2]^{1/2} \sum_K (-1)^{2K} [K] \left\{ \begin{matrix} 1_2 s_2 j_2 \\ j_1 K \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} LSJ \\ s_2 K s_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} 1_1 s_1 j_1 \\ K 1_2 L \end{matrix} \right\} \\
&= [L, S, j_1, j_2]^{1/2} \left\{ \begin{matrix} 1_2 & L & 1_1 \\ s_2 & S & s_1 \\ j_2 & J & j_1 \end{matrix} \right\} \\
&= [L, S, j_1, j_2]^{1/2} \left\{ \begin{matrix} 1_1 & 1_2 & L \\ s_1 & s_2 & S \\ j_1 & j_2 & J \end{matrix} \right\}
\end{aligned} \tag{B.14}$$

Les éléments de matrice de transformation LS-jj sont proportionnels aux symboles 9-j. Ces derniers peuvent être évalués par une somme sur un produit des symboles 6-j.

Références

- [1] E. P. Wigner, Quantum Theory of Angular Momentum , L.C. Biedenharn and H. van Dam, eds., Academic Press, New York, 1965.
- [2] A. R. Edmonds, Angular Momentum in Quantum Mechanics, Princeton University Press, Princeton, N. J., 1960 2nd ed.
- [3] M. Rotenberg, R. Bivins, N. Metropolis, and J. K. Wooten., The 3-j and 6-j symbols, The Technology Press, Massachusetts Institute of technology, Cambridge, 1959.
- [4] G. Racah, Phys. Rev. 62, 438 (1942).

Annexe C

Taux de transition radiative

Nous présentons dans cet annexe les résultats de calcul des taux de transition radiative obtenus par les trois méthodes, i.e., FAC [1], HFR modifié [2-4] et Drake [5]. Les précisions sur l'application des lois d'échelle des équations IV.B.16 et IV.B.17.

Tableau C.1 : Taux moyens de transition radiative entre les états singulets par les trois méthodes.

Tableau C.2 : Taux moyens de transition radiative entre les états triplets et singulets par les trois méthodes.

Tableau C.3 : Taux moyens de transition radiative entre les états singulets et triplets par les trois méthodes.

Tableau C.4 : Taux moyens de transition radiative entre les états triplets par les trois méthodes.

Tableau C.5 : Taux moyens de transition radiative pour tout type de transition par le programme FAC.

Tableau C.6 : Taux moyens de transition radiative pour tout type de transition par le programme HFR modifié.

Tableau C.7 : Précisions sur l'application des lois d'échelle par FAC [1].

Tableau C.8 : Précisions sur l'application des lois d'échelle par HFR modifié [2-4].

Tableau C.9 : Précisions sur l'application des lois d'échelle par Drake [5].

C.1 Taux moyens (singulets-singulets) de transition radiative

n_2	n_1	$A_{ss}[HFR]$	$A_{ss}[FAC]$	$A_{ss}[Drake]$
2	1	0.16827500E+10	0.10452555E+10	0.13E+10
3	1	0.24577778E+09	0.16047510E+09	0.19E+09
4	1	0.62037500E+08	0.37930736E+08	0.45E+08
5	1	0.21536000E+08	0.12380808E+08	0.15E+08
6	1	0.91694440E+07	0.49517085E+07	0.61E+07
7	1	0.45020410E+07	0.22814475E+07	0.28E+07
8	1	0.24546875E+07	0.11661050E+07	0.14E+07
9	1	0.14506172E+07	0.64523562E+06	0.81E+06
10	1	0.91530000E+06	0.38010228E+06	0.48E+06
3	2	0.54468888E+08	0.85017190E+07	0.42E+08
4	2	0.10287500E+08	0.29167965E+07	0.79E+07
5	2	0.31558400E+07	0.10589331E+07	0.24E+07
6	2	0.12489722E+07	0.44114388E+06	0.92E+06
7	2	0.58200000E+06	0.20656978E+06	0.41E+06
8	2	0.30442188E+06	0.10604376E+06	0.21E+06
9	2	0.17398766E+06	0.58671598E+05	0.11E+06
10	2	0.10645800E+06	0.34589930E+05	0.67E+05
4	3	0.76446875E+07	0.54918065E+07	0.67E+07
5	3	0.20043400E+07	0.16574772E+07	0.18E+07
6	3	0.73511112E+06	0.59438556E+06	0.65E+06
7	3	0.32537144E+06	0.25767367E+06	0.29E+06
8	3	0.16325938E+06	0.12640859E+06	0.14E+06
9	3	0.89816547E+05	0.67954539E+05	0.77E+05
10	3	0.52959699E+05	0.39310141E+05	0.45E+05
5	4	0.25092800E+07	0.23610260E+07	0.24E+07
6	4	0.71626581E+06	0.65841706E+06	0.68E+06
7	4	0.28453838E+06	0.25791180E+06	0.27E+06
8	4	0.13432922E+06	0.11986854E+06	0.13E+06
9	4	0.70932961E+05	0.62338465E+05	0.67E+05
10	4	0.40595898E+05	0.35273461E+05	0.38E+05
6	5	0.97752356E+06	0.85519588E+06	0.96E+06
7	5	0.30682938E+06	0.26228738E+06	0.30E+06
8	5	0.13068500E+06	0.10996584E+06	0.13E+06
9	5	0.65152691E+05	0.54142012E+05	0.63E+05
10	5	0.35932379E+05	0.29629320E+05	0.35E+05
7	6	0.44075694E+06	0.39709691E+06	0.43E+06
8	6	0.14910984E+06	0.12931970E+06	0.15E+06
9	6	0.67200531E+05	0.57111285E+05	0.66E+05
10	6	0.35032141E+05	0.29453512E+05	0.34E+05
8	7	0.22143516E+06	0.20428183E+06	x
9	7	0.79428000E+05	0.70470859E+05	x
10	7	0.37477090E+05	0.32716500E+05	x
9	8	0.12076017E+06	0.11318526E+06	x
10	8	0.45410430E+05	0.41313965E+05	x
10	9	0.70384812E+05	0.66890203E+05	x

C.2 Taux moyens (Triplets-singulets) de transition radiative

n_2	n_1	$A_{ts}[\text{HFR}]$	$A_{ts}[\text{FAC}]$	$A_{ts}[\text{Drake}]$
2	1	0.68333336E+02	0.32714851E+01	x
3	1	0.86111107E+01	0.30018942E+01	x
4	1	0.21000001E+01	0.26299635E+00	x
5	1	0.70853335E+00	0.23612512E-01	x
6	1	0.29675925E+00	0.10808761E-02	x
7	1	0.14394557E+00	0.38590861E-03	x
8	1	0.77708334E-01	0.47643841E-02	x
9	1	0.45473251E-01	0.53521283E-02	x
10	1	0.28366668E-01	0.64747380E-02	x
3	2	0.33936890E+04	0.50216199E+03	0.28E+04
4	2	0.34098660E+03	0.48996471E+02	0.26E+03
5	2	0.75915489E+02	0.14227866E+03	0.58E+02
6	2	0.25232634E+02	0.10962668E+03	0.19E+02
7	2	0.10471844E+02	0.30112524E+02	x
8	2	0.50939355E+01	0.60660529E+00	x
9	2	0.27443600E+01	0.13861433E+01	x
10	2	0.15900466E+01	0.17669606E+01	x
4	3	0.61953969E+06	0.72584531E+06	0.71E+06
5	3	0.10270394E+06	0.30543174E+05	0.12E+06
6	3	0.29105051E+05	0.66722471E+04	0.38E+05
7	3	0.10971165E+05	0.21290684E+04	0.14E+05
8	3	0.49212534E+04	0.83563989E+03	0.62E+04
9	3	0.24869358E+04	0.37161020E+03	0.32E+04
10	3	0.13731019E+04	0.17651128E+03	0.17E+04
5	4	0.82775117E+05	0.33732109E+05	0.92E+05
6	4	0.22915102E+05	0.88260557E+04	0.26E+05
7	4	0.85620557E+04	0.29952146E+04	0.10E+05
8	4	0.38291858E+04	0.12486973E+04	0.46E+04
9	4	0.19337803E+04	0.59387549E+03	0.23E+04
10	4	0.10670399E+04	0.30822198E+03	0.13E+04
6	5	0.19535689E+05	0.24766098E+05	0.21E+05
7	5	0.70152241E+04	0.84960029E+04	0.78E+04
8	5	0.30800974E+04	0.36077410E+04	0.35E+04
9	5	0.15400277E+04	0.17652030E+04	0.17E+04
10	5	0.84555725E+03	0.95213031E+03	0.96E+03
7	6	0.60493867E+04	0.78322065E+04	0.65E+04
8	6	0.25356553E+04	0.32847012E+04	0.28E+04
9	6	0.12415505E+04	0.15983646E+04	0.14E+04
10	6	0.67354541E+03	0.86147864E+03	0.74E+03
8	7	0.22356055E+04	0.28935886E+04	x
9	7	0.10367195E+04	0.13612338E+04	x
10	7	0.54864154E+03	0.72391864E+03	x
9	8	0.94136401E+03	0.12164132E+04	x
10	8	0.46921014E+03	0.61925269E+03	x
10	9	0.43874771E+03	0.56752850E+03	x

C.3 Taux moyens (singulets-triplets) de transition radiative

n_2	n_1	$A_{st}[HFR]$	$A_{st}[FAC]$	$A_{st}[Drake]$
2	1	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0
3	1	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0
4	1	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0
5	1	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0
6	1	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0
7	1	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0
8	1	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0
9	1	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0
10	1	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0
3	2	0.10353021E+05	0.54204683E+04	0.92E+04
4	2	0.10581318E+04	0.33547485E+03	0.96E+03
5	2	0.23506375E+03	0.87646704E+03	0.17E+03
6	2	0.77314384E+02	0.64488782E+03	x
7	2	0.31601486E+02	0.17305203E+03	x
8	2	0.15073126E+02	0.34361730E+01	x
9	2	0.79328837E+01	0.78232903E+01	x
10	2	0.44728999E+01	0.99139776E+01	x
4	3	0.18589520E+07	0.21864927E+07	0.21E+07
5	3	0.30823412E+06	0.92074141E+05	0.37E+06
6	3	0.87359711E+05	0.20191229E+05	0.11E+06
7	3	0.32925234E+05	0.64331558E+04	0.41E+05
8	3	0.14770900E+05	0.25126482E+04	0.18E+05
9	3	0.74692158E+04	0.11182921E+04	0.95E+04
10	3	0.41244902E+04	0.53215228E+03	0.53E+04
5	4	0.24830427E+06	0.10160282E+06	0.28E+06
6	4	0.68769211E+05	0.26585246E+05	0.80E+05
7	4	0.25695943E+05	0.90121807E+04	0.30E+05
8	4	0.11489259E+05	0.37509768E+04	0.14E+05
9	4	0.58007012E+04	0.17841104E+04	0.70E+04
10	4	0.32021130E+04	0.92620398E+03	0.39E+04
6	5	0.58581855E+05	0.74378148E+05	0.64E+05
7	5	0.21046564E+05	0.25505193E+05	0.23E+05
8	5	0.92420635E+04	0.10826699E+05	0.10E+05
9	5	0.46218472E+04	0.52972388E+04	0.52E+04
10	5	0.25350320E+04	0.28573079E+04	0.29E+04
7	6	0.18142631E+05	0.23509766E+05	0.19E+05
8	6	0.76061313E+04	0.98565859E+04	0.83E+04
9	6	0.37248762E+04	0.47962090E+04	0.41E+04
10	6	0.20202432E+04	0.25850273E+04	0.22E+04
8	7	0.67058657E+04	0.86822002E+04	x
9	7	0.31089390E+04	0.40844270E+04	x
10	7	0.16460490E+04	0.21721370E+04	x
9	8	0.28234949E+04	0.36497812E+04	x
10	8	0.14072035E+04	0.18580426E+04	x
10	9	0.13156707E+04	0.17029006E+04	x

C.4 Taux moyens (triplets-triplets) de transition radiative

n_2	n_1	A_{if} [HFR]	A_{if} [FAC]	A_{if} [Drake]
2	1	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0
3	1	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0
4	1	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0
5	1	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0
6	1	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0
7	1	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0
8	1	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0
9	1	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0
10	1	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0
3	2	0.54785632E+08	0.26624816E+08	0.45E+08
4	2	0.10235625E+08	0.67204095E+07	0.93E+07
5	2	0.30507600E+07	0.22294512E+07	0.29E+07
6	2	0.11627000E+07	0.89320250E+06	0.11E+07
7	2	0.51889931E+06	0.40980722E+06	0.51E+06
8	2	0.25877656E+06	0.20798564E+06	0.26E+06
9	2	0.14018725E+06	0.11429732E+06	0.14E+06
10	2	0.80973000E+05	0.67054117E+05	0.84E+05
4	3	0.88270840E+07	0.83311305E+07	0.81E+07
5	3	0.21890635E+07	0.21323437E+07	0.20E+07
6	3	0.77947681E+06	0.76103681E+06	0.74E+06
7	3	0.33717166E+06	0.32874162E+06	0.32E+06
8	3	0.16567570E+06	0.16078261E+06	0.16E+06
9	3	0.89230484E+05	0.86210687E+05	0.87E+05
10	3	0.51535602E+05	0.49755504E+05	0.51E+05
5	4	0.26637277E+07	0.26459732E+07	0.26E+07
6	4	0.75725212E+06	0.74712750E+06	0.73E+06
7	4	0.29853631E+06	0.29269922E+06	0.29E+06
8	4	0.13974531E+06	0.13580630E+06	0.13E+06
9	4	0.73142648E+05	0.70493773E+05	0.71E+05
10	4	0.41484578E+05	0.39821453E+05	0.40E+05
6	5	0.10141631E+07	0.94929175E+06	0.99E+06
7	5	0.31949119E+06	0.29434406E+06	0.31E+06
8	5	0.13595206E+06	0.12364905E+06	0.13E+06
9	5	0.67577469E+05	0.60867867E+05	0.66E+05
10	5	0.37130824E+05	0.33287488E+05	0.36E+05
7	6	0.45217297E+06	0.42511231E+06	0.45E+06
8	6	0.15373595E+06	0.13991180E+06	0.15E+06
9	6	0.69367734E+05	0.62104875E+05	0.68E+05
10	6	0.36145387E+05	0.32118664E+05	0.36E+05
8	7	0.22565630E+06	0.21383392E+06	x
9	7	0.81331531E+05	0.74410930E+05	x
10	7	0.38448539E+05	0.34745488E+05	x
9	8	0.12255021E+06	0.11671847E+06	x
10	8	0.46281984E+05	0.42946129E+05	x
10	9	0.71223023E+05	0.68280977E+05	x

C.5 Taux moyens par notre calcul (FAC)

n_2	n_1	A_{ss}	A_{ts}	A_{st}	A_{tt}
2	1	0.10452555E+10	0.32714851E+01	0.00000000E+00	0.00000000E+00
3	1	0.16047510E+09	0.30018942E+01	0.00000000E+00	0.00000000E+00
4	1	0.37930736E+08	0.26299635E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00
5	1	0.12380808E+08	0.23612512E-01	0.00000000E+00	0.00000000E+00
6	1	0.49517085E+07	0.10808761E-02	0.00000000E+00	0.00000000E+00
7	1	0.22814475E+07	0.38590861E-03	0.00000000E+00	0.00000000E+00
8	1	0.11661050E+07	0.47643841E-02	0.00000000E+00	0.00000000E+00
9	1	0.64523562E+06	0.53521283E-02	0.00000000E+00	0.00000000E+00
10	1	0.38010228E+06	0.64747380E-02	0.00000000E+00	0.00000000E+00
3	2	0.85017190E+07	0.50216199E+03	0.54204683E+04	0.26624816E+08
4	2	0.29167965E+07	0.48996471E+02	0.33547485E+03	0.67204095E+07
5	2	0.10589331E+07	0.14227866E+03	0.87646704E+03	0.22294512E+07
6	2	0.44114388E+06	0.10962668E+03	0.64488782E+03	0.89320250E+06
7	2	0.20656978E+06	0.30112524E+02	0.17305203E+03	0.40980722E+06
8	2	0.10604376E+06	0.60660529E+00	0.34361730E+01	0.20798564E+06
9	2	0.58671598E+05	0.13861433E+01	0.78232903E+01	0.11429732E+06
10	2	0.34589930E+05	0.17669606E+01	0.99139776E+01	0.67054117E+05
4	3	0.54918065E+07	0.72584531E+06	0.21864927E+07	0.83311305E+07
5	3	0.16574772E+07	0.30543174E+05	0.92074141E+05	0.21323437E+07
6	3	0.59438556E+06	0.66722471E+04	0.20191229E+05	0.76103681E+06
7	3	0.25767367E+06	0.21290684E+04	0.64331558E+04	0.32874162E+06
8	3	0.12640859E+06	0.83563989E+03	0.25126482E+04	0.16078261E+06
9	3	0.67954539E+05	0.37161020E+03	0.11182921E+04	0.86210687E+05
10	3	0.39310141E+05	0.17651128E+03	0.53215228E+03	0.49755504E+05
5	4	0.23610260E+07	0.33732109E+05	0.10160282E+06	0.26459732E+07
6	4	0.65841706E+06	0.88260557E+04	0.26585246E+05	0.74712750E+06
7	4	0.25791180E+06	0.29952146E+04	0.90121807E+04	0.29269922E+06
8	4	0.11986854E+06	0.12486973E+04	0.37509768E+04	0.13580630E+06
9	4	0.62338465E+05	0.59387549E+03	0.17841104E+04	0.70493773E+05
10	4	0.35273461E+05	0.30822198E+03	0.92620398E+03	0.39821453E+05
6	5	0.85519588E+06	0.24766098E+05	0.74378148E+05	0.94929175E+06
7	5	0.26228738E+06	0.84960029E+04	0.25505193E+05	0.29434406E+06
8	5	0.10996584E+06	0.36077410E+04	0.10826699E+05	0.12364905E+06
9	5	0.54142012E+05	0.17652030E+04	0.52972388E+04	0.60867867E+05
10	5	0.29629320E+05	0.95213031E+03	0.28573079E+04	0.33287488E+05
7	6	0.39709691E+06	0.78322065E+04	0.23509766E+05	0.42511231E+06
8	6	0.12931970E+06	0.32847012E+04	0.98565859E+04	0.13991180E+06
9	6	0.57111285E+05	0.15983646E+04	0.47962090E+04	0.62104875E+05
10	6	0.29453512E+05	0.86147864E+03	0.25850273E+04	0.32118664E+05
8	7	0.20428183E+06	0.28935886E+04	0.86822002E+04	0.21383392E+06
9	7	0.70470859E+05	0.13612338E+04	0.40844270E+04	0.74410930E+05
10	7	0.32716500E+05	0.72391864E+03	0.21721370E+04	0.34745488E+05
9	8	0.11318526E+06	0.12164132E+04	0.36497812E+04	0.11671847E+06
10	8	0.41313965E+05	0.61925269E+03	0.18580426E+04	0.42946129E+05
10	9	0.66890203E+05	0.56752850E+03	0.17029006E+04	0.68280977E+05

C.6 Taux moyens par HFR

n_2	n_1	A_{ss}	A_{ts}	A_{st}	A_{tt}
2	1	0.1683E+10	0.6833E+02	0.0000E+00	0.0000E+00
3	1	0.2458E+09	0.8611E+01	0.0000E+00	0.0000E+00
4	1	0.6204E+08	0.2100E+01	0.0000E+00	0.0000E+00
5	1	0.2154E+08	0.7085E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
6	1	0.9169E+07	0.2968E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
7	1	0.4502E+07	0.1439E+00	0.0000E+00	0.0000E+00
8	1	0.2455E+07	0.7771E-01	0.0000E+00	0.0000E+00
9	1	0.1451E+07	0.4547E-01	0.0000E+00	0.0000E+00
10	1	0.9153E+06	0.2837E-01	0.0000E+00	0.0000E+00
3	2	0.5447E+08	0.3394E+04	0.1035E+05	0.5479E+08
4	2	0.1029E+08	0.3410E+03	0.1058E+04	0.1024E+08
5	2	0.3156E+07	0.7592E+02	0.2351E+03	0.3051E+07
6	2	0.1249E+07	0.2523E+02	0.7731E+02	0.1163E+07
7	2	0.5820E+06	0.1047E+02	0.3160E+02	0.5189E+06
8	2	0.3044E+06	0.5094E+01	0.1507E+02	0.2588E+06
9	2	0.1740E+06	0.2744E+01	0.7933E+01	0.1402E+06
10	2	0.1065E+06	0.1590E+01	0.4473E+01	0.8097E+05
4	3	0.7645E+07	0.6195E+06	0.1859E+07	0.8827E+07
5	3	0.2004E+07	0.1027E+06	0.3082E+06	0.2189E+07
6	3	0.7351E+06	0.2911E+05	0.8736E+05	0.7795E+06
7	3	0.3254E+06	0.1097E+05	0.3293E+05	0.3372E+06
8	3	0.1633E+06	0.4921E+04	0.1477E+05	0.1657E+06
9	3	0.8982E+05	0.2487E+04	0.7469E+04	0.8923E+05
10	3	0.5296E+05	0.1373E+04	0.4124E+04	0.5154E+05
5	4	0.2509E+07	0.8278E+05	0.2483E+06	0.2664E+07
6	4	0.7163E+06	0.2292E+05	0.6877E+05	0.7573E+06
7	4	0.2845E+06	0.8562E+04	0.2570E+05	0.2985E+06
8	4	0.1343E+06	0.3829E+04	0.1149E+05	0.1397E+06
9	4	0.7093E+05	0.1934E+04	0.5801E+04	0.7314E+05
10	4	0.4060E+05	0.1067E+04	0.3202E+04	0.4148E+05
6	5	0.9775E+06	0.1954E+05	0.5858E+05	0.1014E+07
7	5	0.3068E+06	0.7015E+04	0.2105E+05	0.3195E+06
8	5	0.1307E+06	0.3080E+04	0.9242E+04	0.1360E+06
9	5	0.6515E+05	0.1540E+04	0.4622E+04	0.6758E+05
10	5	0.3593E+05	0.8456E+03	0.2535E+04	0.3713E+05
7	6	0.4408E+06	0.6049E+04	0.1814E+05	0.4522E+06
8	6	0.1491E+06	0.2536E+04	0.7606E+04	0.1537E+06
9	6	0.6720E+05	0.1242E+04	0.3725E+04	0.6937E+05
10	6	0.3503E+05	0.6735E+03	0.2020E+04	0.3615E+05
8	7	0.2214E+06	0.2236E+04	0.6706E+04	0.2257E+06
9	7	0.7943E+05	0.1037E+04	0.3109E+04	0.8133E+05
10	7	0.3748E+05	0.5486E+03	0.1646E+04	0.3845E+05
9	8	0.1208E+06	0.9414E+03	0.2823E+04	0.1226E+06
10	8	0.4541E+05	0.4692E+03	0.1407E+04	0.4628E+05
10	9	0.7038E+05	0.4387E+03	0.1316E+04	0.7122E+05

C.7 Précisions de la loi d'échelle (FAC)

n2	n1	Ass_FAC	Ass_ScaleLaw	PRECISION
4	3	0.54918065E+07	0.79317710E+07	0.44429177E+00
5	3	0.16574772E+07	0.17767167E+07	0.71940355E-01
6	3	0.59438556E+06	0.60929931E+06	0.25091037E-01
7	3	0.25767367E+06	0.25899661E+06	0.51341588E-02
8	3	0.12640859E+06	0.12618727E+06	0.17508946E-02
9	3	0.67954539E+05	0.67699922E+05	0.37468753E-02
10	3	0.39310141E+05	0.39048719E+05	0.66502402E-02
5	4	0.23610260E+07	0.23689557E+07	0.33586035E-02
6	4	0.65841706E+06	0.61691550E+06	0.63032329E-01
7	4	0.25791180E+06	0.23545145E+06	0.87085366E-01
8	4	0.11986854E+06	0.10844218E+06	0.95324092E-01
9	4	0.62338465E+05	0.56243012E+05	0.97779967E-01
10	4	0.35273461E+05	0.31727084E+05	0.10053952E+00
6	5	0.85519588E+06	0.89733169E+06	0.49270365E-01
7	5	0.26228738E+06	0.25899661E+06	0.12546413E-01
8	5	0.10996584E+06	0.10677384E+06	0.29027196E-01
9	5	0.54142012E+05	0.52225652E+05	0.35395052E-01
10	5	0.29629320E+05	0.28427467E+05	0.40562980E-01
7	6	0.39709691E+06	0.39845631E+06	0.34233616E-02
8	6	0.12931970E+06	0.12393392E+06	0.41647028E-01
9	6	0.57111285E+05	0.54159937E+05	0.51677138E-01
10	6	0.29453512E+05	0.27761199E+05	0.57457071E-01
8	7	0.20428183E+06	0.19829428E+06	0.29310228E-01
9	7	0.70470859E+05	0.65282066E+05	0.73630333E-01
10	7	0.32716500E+05	0.29860785E+05	0.87286688E-01
9	8	0.11318526E+06	0.10752341E+06	0.50022870E-01
10	8	0.41313965E+05	0.37014934E+05	0.10405758E+00
10	9	0.66890203E+05	0.62340937E+05	0.68010941E-01
n2	n1	Att_FAC	Att_ScaleLaw	PRECISION
4	3	0.83311305E+07	0.92307590E+07	0.10798396E+00
5	3	0.21323437E+07	0.20676900E+07	0.30320510E-01
6	3	0.76103681E+06	0.70908438E+06	0.68265341E-01
7	3	0.32874162E+06	0.30141253E+06	0.83132438E-01
8	3	0.16078261E+06	0.14685298E+06	0.86636394E-01
9	3	0.86210687E+05	0.78787148E+05	0.86109266E-01
10	3	0.49755504E+05	0.45443734E+05	0.86659148E-01
5	4	0.26459732E+07	0.27569200E+07	0.41930411E-01
6	4	0.74712750E+06	0.71794794E+06	0.39055668E-01
7	4	0.29269922E+06	0.27401141E+06	0.63846469E-01
8	4	0.13580630E+06	0.12620178E+06	0.70722170E-01
9	4	0.70493773E+05	0.65453941E+05	0.71493290E-01
10	4	0.39821453E+05	0.36923035E+05	0.72785340E-01
6	5	0.94929175E+06	0.10442879E+07	0.10007053E+00
7	5	0.29434406E+06	0.30141253E+06	0.24014307E-01
8	5	0.12364905E+06	0.12426022E+06	0.49427948E-02
9	5	0.60867867E+05	0.60778660E+05	0.14655850E-02
10	5	0.33287488E+05	0.33083039E+05	0.61419238E-02
7	6	0.42511231E+06	0.46371159E+06	0.90797842E-01
8	6	0.13991180E+06	0.14423061E+06	0.30868107E-01
9	6	0.62104875E+05	0.63029719E+05	0.14891645E-01
10	6	0.32118664E+05	0.32307656E+05	0.58841859E-02
8	7	0.21383392E+06	0.23076897E+06	0.79197198E-01
9	7	0.74410930E+05	0.75973320E+05	0.20996790E-01
10	7	0.34745488E+05	0.34751094E+05	0.16132940E-03
9	8	0.11671847E+06	0.12513253E+06	0.72088525E-01
10	8	0.42946129E+05	0.43076875E+05	0.30444209E-02
10	9	0.68280977E+05	0.72550523E+05	0.62529087E-01

n2	n1	Ast_FAC	Ast_ScaleLaw	PRECISION
4	3	0.21864927E+07	0.40659088E+06	0.81404424E+00
5	3	0.92074141E+05	0.87680523E+05	0.47718253E-01
6	3	0.20191229E+05	0.25836336E+05	0.27958217E+00
7	3	0.64331558E+04	0.92689688E+04	0.44081211E+00
8	3	0.25126482E+04	0.38234509E+04	0.52168179E+00
9	3	0.11182921E+04	0.17519946E+04	0.56666994E+00
10	3	0.53215228E+03	0.87170148E+03	0.63806772E+00
5	4	0.10160282E+06	0.69513531E+05	0.31583068E+00
6	4	0.26585246E+05	0.19300010E+05	0.27403307E+00
7	4	0.90121807E+04	0.67910146E+04	0.24646266E+00
8	4	0.37509768E+04	0.27794299E+04	0.25901169E+00
9	4	0.17841104E+04	0.12694840E+04	0.28844982E+00
10	4	0.92620398E+03	0.63092981E+03	0.31880036E+00
6	5	0.74378148E+05	0.16692152E+05	0.77557719E+00
7	5	0.25505193E+05	0.55113618E+04	0.78391218E+00
8	5	0.10826699E+05	0.22055569E+04	0.79628539E+00
9	5	0.52972388E+04	0.99714899E+03	0.81176060E+00
10	5	0.28573079E+04	0.49306381E+03	0.82743764E+00
7	6	0.23509766E+05	0.50416543E+04	0.78555065E+00
8	6	0.98565859E+04	0.18887531E+04	0.80837655E+00
9	6	0.47962090E+04	0.83339380E+03	0.82623905E+00
10	6	0.25850273E+04	0.40730585E+03	0.84243655E+00
8	7	0.86822002E+04	0.17968948E+04	0.79303694E+00
9	7	0.40844270E+04	0.74113544E+03	0.81854606E+00
10	7	0.21721370E+04	0.35308527E+03	0.83744800E+00
9	8	0.36497812E+04	0.72582874E+03	0.80113089E+00
10	8	0.18580426E+04	0.32291400E+03	0.82620740E+00
10	9	0.17029006E+04	0.32337823E+03	0.81010151E+00
n2	n1	Ats_FAC	Ats_ScaleLaw	PRECISION
4	3	0.72584531E+06	0.13484886E+06	0.81421816E+00
5	3	0.30543174E+05	0.29079891E+05	0.47908682E-01
6	3	0.66722471E+04	0.85688115E+04	0.28424674E+00
7	3	0.21290684E+04	0.30741218E+04	0.44388121E+00
8	3	0.83563989E+03	0.12680757E+04	0.51749063E+00
9	3	0.37161020E+03	0.58106195E+03	0.56363297E+00
10	3	0.17651128E+03	0.28910620E+03	0.63789082E+00
5	4	0.33732109E+05	0.23054676E+05	0.31653619E+00
6	4	0.88260557E+04	0.64009902E+04	0.27476209E+00
7	4	0.29952146E+04	0.22522900E+04	0.24803717E+00
8	4	0.12486973E+04	0.92181842E+03	0.26177588E+00
9	4	0.59387549E+03	0.42103372E+03	0.29104042E+00
10	4	0.30822198E+03	0.20925252E+03	0.32109800E+00
6	5	0.24766098E+05	0.55360752E+04	0.77646559E+00
7	5	0.84960029E+04	0.18278838E+04	0.78485370E+00
8	5	0.36077410E+04	0.73148926E+03	0.79724449E+00
9	5	0.17652030E+04	0.33071179E+03	0.81264943E+00
10	5	0.95213031E+03	0.16352824E+03	0.82825017E+00
7	6	0.78322065E+04	0.16721018E+04	0.78650951E+00
8	6	0.32847012E+04	0.62641888E+03	0.80929196E+00
9	6	0.15983646E+04	0.27640118E+03	0.82707250E+00
10	6	0.86147864E+03	0.13508598E+03	0.84319288E+00
8	7	0.28935886E+04	0.59595343E+03	0.79404348E+00
9	7	0.13612338E+04	0.24580302E+03	0.81942630E+00
10	7	0.72391864E+03	0.11710333E+03	0.83823687E+00
9	8	0.12164132E+04	0.24072646E+03	0.80210143E+00
10	8	0.61925269E+03	0.10709681E+03	0.82705474E+00
10	9	0.56752850E+03	0.10725077E+03	0.81102133E+00

C.8 Précisions de la loi d'échelle (HFR)

n2	n1	Ass_HFR	Ass_ScaleLaw	PRECISION
4	3	0.76446875E+07	0.94223360E+07	0.23253383E+00
5	3	0.20043400E+07	0.21106032E+07	0.53016581E-01
6	3	0.73511112E+06	0.72380088E+06	0.15385769E-01
7	3	0.32537144E+06	0.30766812E+06	0.54409549E-01
8	3	0.16325938E+06	0.14990080E+06	0.81824265E-01
9	3	0.89816547E+05	0.80422312E+05	0.10459358E+00
10	3	0.52959699E+05	0.46386887E+05	0.12410970E+00
5	4	0.25092800E+07	0.28141377E+07	0.12149212E+00
6	4	0.71626581E+06	0.73284838E+06	0.23151409E-01
7	4	0.28453838E+06	0.27969828E+06	0.17010337E-01
8	4	0.13432922E+06	0.12882100E+06	0.41005366E-01
9	4	0.70932961E+05	0.66812383E+05	0.58091164E-01
10	4	0.40595898E+05	0.37689344E+05	0.71597248E-01
6	5	0.97752356E+06	0.10659612E+07	0.90471156E-01
7	5	0.30682938E+06	0.30766812E+06	0.27336041E-02
8	5	0.13068500E+06	0.12683914E+06	0.29428469E-01
9	5	0.65152691E+05	0.62040074E+05	0.47774192E-01
10	5	0.35932379E+05	0.33769652E+05	0.60188793E-01
7	6	0.44075694E+06	0.47333556E+06	0.73915169E-01
8	6	0.14910984E+06	0.14722400E+06	0.12647346E-01
9	6	0.67200531E+05	0.64337852E+05	0.42599063E-01
10	6	0.35032141E+05	0.32978176E+05	0.58630869E-01
8	7	0.22143516E+06	0.23555841E+06	0.63780524E-01
9	7	0.79428000E+05	0.77550094E+05	0.23642875E-01
10	7	0.37477090E+05	0.35472324E+05	0.53493097E-01
9	8	0.12076017E+06	0.12772956E+06	0.57712659E-01
10	8	0.45410430E+05	0.43970902E+05	0.31700369E-01
10	9	0.70384812E+05	0.74056258E+05	0.52162465E-01
n2	n1	Att_HFR	Att_ScaleLaw	PRECISION
4	3	0.88270840E+07	0.97914730E+07	0.10925341E+00
5	3	0.21890635E+07	0.21932900E+07	0.19307343E-02
6	3	0.77947681E+06	0.75215706E+06	0.35048831E-01
7	3	0.33717166E+06	0.31972156E+06	0.51754333E-01
8	3	0.16567570E+06	0.15577344E+06	0.59768967E-01
9	3	0.89230484E+05	0.83573008E+05	0.63402958E-01
10	3	0.51535602E+05	0.48204176E+05	0.64643189E-01
5	4	0.26637277E+07	0.29243865E+07	0.97854875E-01
6	4	0.75725212E+06	0.76155900E+06	0.56875045E-02
7	4	0.29853631E+06	0.29065597E+06	0.26396601E-01
8	4	0.13974531E+06	0.13386780E+06	0.42058766E-01
9	4	0.73142648E+05	0.69429883E+05	0.50760612E-01
10	4	0.41484578E+05	0.39165891E+05	0.55892758E-01
6	5	0.10141631E+07	0.11077221E+07	0.92252418E-01
7	5	0.31949119E+06	0.31972156E+06	0.72106841E-03
8	5	0.13595206E+06	0.13180828E+06	0.30479724E-01
9	5	0.67577469E+05	0.64470602E+05	0.45974899E-01
10	5	0.37130824E+05	0.35092641E+05	0.54891955E-01
7	6	0.45217297E+06	0.49187934E+06	0.87812357E-01
8	6	0.15373595E+06	0.15299177E+06	0.48406860E-02
9	6	0.69367734E+05	0.66858406E+05	0.36174282E-01
10	6	0.36145387E+05	0.34270156E+05	0.51880214E-01
8	7	0.22565630E+06	0.24478683E+06	0.84777296E-01
9	7	0.81331531E+05	0.80588258E+05	0.91388104E-02
10	7	0.38448539E+05	0.36862016E+05	0.41263554E-01
9	8	0.12255021E+06	0.13273359E+06	0.83095595E-01
10	8	0.46281984E+05	0.45693539E+05	0.12714350E-01
10	9	0.71223023E+05	0.76957539E+05	0.80514915E-01

n2	n1	Ast_HFR	Ast_ScaleLaw	PRECISION
4	3	0.18589520E+07	0.16341756E+07	0.12091564E+00
5	3	0.30823412E+06	0.35240672E+06	0.14330858E+00
6	3	0.87359711E+05	0.10384175E+06	0.18866865E+00
7	3	0.32925234E+05	0.37253965E+05	0.13147151E+00
8	3	0.14770900E+05	0.15367266E+05	0.40374331E-01
9	3	0.74692158E+04	0.70416406E+04	0.57244990E-01
10	3	0.41244902E+04	0.35035542E+04	0.15054855E+00
5	4	0.24830427E+06	0.27938972E+06	0.12519097E+00
6	4	0.68769211E+05	0.77570859E+05	0.12798822E+00
7	4	0.25695943E+05	0.27294539E+05	0.62211987E-01
8	4	0.11489259E+05	0.11171122E+05	0.27689926E-01
9	4	0.58007012E+04	0.51023271E+04	0.12039476E+00
10	4	0.32021130E+04	0.25358416E+04	0.20807244E+00
6	5	0.58581855E+05	0.67089320E+05	0.14522354E+00
7	5	0.21046564E+05	0.22151340E+05	0.52491959E-01
8	5	0.92420635E+04	0.88646045E+04	0.40841419E-01
9	5	0.46218472E+04	0.40077546E+04	0.13286734E+00
10	5	0.25350320E+04	0.19817286E+04	0.21826287E+00
7	6	0.18142631E+05	0.20263484E+05	0.11689889E+00
8	6	0.76061313E+04	0.75913018E+04	0.19496889E-02
9	6	0.37248762E+04	0.33495876E+04	0.10075196E+00
10	6	0.20202432E+04	0.16370492E+04	0.18967715E+00
8	7	0.67058657E+04	0.72221040E+04	0.76983094E-01
9	7	0.31089390E+04	0.29787815E+04	0.41865561E-01
10	7	0.16460490E+04	0.14191251E+04	0.13785970E+00
9	8	0.28234949E+04	0.29172607E+04	0.33209153E-01
10	8	0.14072035E+04	0.12978604E+04	0.77702433E-01
10	9	0.13156707E+04	0.12997261E+04	0.12118976E-01
n2	n1	Ats_HFR	Ats_ScaleLaw	PRECISION
4	3	0.61953969E+06	0.54465212E+06	0.12087613E+00
5	3	0.10270394E+06	0.11745316E+06	0.14360917E+00
6	3	0.29105051E+05	0.34609277E+05	0.18911585E+00
7	3	0.10971165E+05	0.12416323E+05	0.13172331E+00
8	3	0.49212534E+04	0.51217349E+04	0.40737882E-01
9	3	0.24869358E+04	0.23468987E+04	0.56309097E-01
10	3	0.13731019E+04	0.11676948E+04	0.14959349E+00
5	4	0.82775117E+05	0.93117422E+05	0.12494461E+00
6	4	0.22915102E+05	0.25853486E+05	0.12822919E+00
7	4	0.85620557E+04	0.90969600E+04	0.62473815E-01
8	4	0.38291858E+04	0.37232080E+04	0.27676323E-01
9	4	0.19337803E+04	0.17005477E+04	0.12060964E+00
10	4	0.10670399E+04	0.84516718E+03	0.20793293E+00
6	5	0.19535689E+05	0.22360107E+05	0.14457734E+00
7	5	0.70152241E+04	0.73827896E+04	0.52395392E-01
8	5	0.30800974E+04	0.29544719E+04	0.40786207E-01
9	5	0.15400277E+04	0.13357391E+04	0.13265254E+00
10	5	0.84555725E+03	0.66048767E+03	0.21887292E+00
7	6	0.60493867E+04	0.67535894E+04	0.11640893E+00
8	6	0.25356553E+04	0.25300945E+04	0.21930391E-02
9	6	0.12415505E+04	0.11163795E+04	0.10081831E+00
10	6	0.67354541E+03	0.54560992E+03	0.18994337E+00
8	7	0.22356055E+04	0.24070452E+04	0.76686025E-01
9	7	0.10367195E+04	0.99279401E+03	0.42369682E-01
10	7	0.54864154E+03	0.47297827E+03	0.13791020E+00
9	8	0.94136401E+03	0.97228986E+03	0.32852162E-01
10	8	0.46921014E+03	0.43256210E+03	0.78105815E-01
10	9	0.43874771E+03	0.43318396E+03	0.12680980E-01

C.9 Précisions de la loi d'échelle (Drake)

n2	n1	Ass_Drake	Ass_ScaleLaw	PRECISION
4	3	0.67000000E+07	0.88382590E+07	0.31914315E+00
5	3	0.18000000E+07	0.19797700E+07	0.99872224E-01
6	3	0.65000000E+06	0.67893350E+06	0.44513077E-01
7	3	0.29000000E+06	0.28859622E+06	0.48406250E-02
8	3	0.14000000E+06	0.14060867E+06	0.43476564E-02
9	3	0.77000000E+05	0.75437055E+05	0.20297991E-01
10	3	0.45000000E+05	0.43511430E+05	0.33079341E-01
5	4	0.24000000E+07	0.26396935E+07	0.99872291E-01
6	4	0.68000000E+06	0.68742019E+06	0.10912040E-01
7	4	0.27000000E+06	0.26236019E+06	0.28295603E-01
8	4	0.13000000E+06	0.12083558E+06	0.70495553E-01
9	4	0.67000000E+05	0.62670785E+05	0.64615145E-01
10	4	0.38000000E+05	0.35353035E+05	0.69656968E-01
6	5	0.96000000E+06	0.99988388E+06	0.41545704E-01
7	5	0.30000000E+06	0.28859622E+06	0.38012605E-01
8	5	0.13000000E+06	0.11897656E+06	0.84795676E-01
9	5	0.63000000E+05	0.58194301E+05	0.76280937E-01
10	5	0.35000000E+05	0.31676320E+05	0.94962277E-01
7	6	0.43000000E+06	0.44399419E+06	0.32544620E-01
8	6	0.15000000E+06	0.13809780E+06	0.79348020E-01
9	6	0.66000000E+05	0.60349645E+05	0.85611448E-01
10	6	0.34000000E+05	0.30933906E+05	0.90179227E-01
n2	n1	Att_Drake	Att_ScaleLaw	PRECISION
4	3	0.81000000E+07	0.95251340E+07	0.17594247E+00
5	3	0.20000000E+07	0.21336300E+07	0.66814996E-01
6	3	0.74000000E+06	0.73169756E+06	0.11219510E-01
7	3	0.32000000E+06	0.31102478E+06	0.28047558E-01
8	3	0.16000000E+06	0.15153622E+06	0.52898634E-01
9	3	0.87000000E+05	0.81299727E+05	0.65520383E-01
10	3	0.51000000E+05	0.46892969E+05	0.80530025E-01
5	4	0.26000000E+07	0.28448400E+07	0.94169229E-01
6	4	0.73000000E+06	0.74084375E+06	0.14854452E-01
7	4	0.29000000E+06	0.28274981E+06	0.25000647E-01
8	4	0.13000000E+06	0.13022644E+06	0.17418269E-02
9	4	0.71000000E+05	0.67541312E+05	0.48713908E-01
10	4	0.40000000E+05	0.38100535E+05	0.47486622E-01
6	5	0.99000000E+06	0.10775909E+07	0.88475630E-01
7	5	0.31000000E+06	0.31102478E+06	0.33057460E-02
8	5	0.13000000E+06	0.12822296E+06	0.13669531E-01
9	5	0.66000000E+05	0.62716930E+05	0.49743488E-01
10	5	0.36000000E+05	0.34138082E+05	0.51719945E-01
7	6	0.45000000E+06	0.47849966E+06	0.63332573E-01
8	6	0.15000000E+06	0.14883022E+06	0.77985418E-02
9	6	0.68000000E+05	0.65039781E+05	0.43532629E-01
10	6	0.36000000E+05	0.33337969E+05	0.73945314E-01

n2	n1	Ast_Drake	Ast_ScaleLaw	PRECISION
4	3	0.21000000E+07	0.18758375E+07	0.10674405E+00
5	3	0.37000000E+06	0.40452066E+06	0.93299069E-01
6	3	0.11000000E+06	0.11919788E+06	0.83617046E-01
7	3	0.41000000E+05	0.42763082E+05	0.43002002E-01
8	3	0.18000000E+05	0.17639777E+05	0.20012369E-01
9	3	0.95000000E+04	0.80829585E+04	0.14916226E+00
10	3	0.53000000E+04	0.40216599E+04	0.24119624E+00
5	4	0.28000000E+06	0.32070588E+06	0.14537813E+00
6	4	0.80000000E+05	0.89042039E+05	0.11302549E+00
7	4	0.30000000E+05	0.31330855E+05	0.44361848E-01
8	4	0.14000000E+05	0.12823107E+05	0.84063753E-01
9	4	0.70000000E+04	0.58568594E+04	0.16330580E+00
10	4	0.39000000E+04	0.29108418E+04	0.25363031E+00
6	5	0.64000000E+05	0.77010492E+05	0.20328894E+00
7	5	0.23000000E+05	0.25427080E+05	0.10552522E+00
8	5	0.10000000E+05	0.10175502E+05	0.17550195E-01
9	5	0.52000000E+04	0.46004214E+04	0.11530358E+00
10	5	0.29000000E+04	0.22747869E+04	0.21559073E+00
7	6	0.19000000E+05	0.23260049E+05	0.22421309E+00
8	6	0.83000000E+04	0.87139033E+04	0.49867868E-01
9	6	0.41000000E+04	0.38449246E+04	0.62213521E-01
10	6	0.22000000E+04	0.18791360E+04	0.14584728E+00
n2	n1	Ats_Drake	Ats_ScaleLaw	PRECISION
4	3	0.71000000E+06	0.62802919E+06	0.11545185E+00
5	3	0.12000000E+06	0.13543325E+06	0.12861042E+00
6	3	0.38000000E+05	0.39907371E+05	0.50193977E-01
7	3	0.14000000E+05	0.14317052E+05	0.22646554E-01
8	3	0.62000000E+04	0.59057861E+04	0.47453851E-01
9	3	0.32000000E+04	0.27061694E+04	0.15432206E+00
10	3	0.17000000E+04	0.13464492E+04	0.20797105E+00
5	4	0.92000000E+05	0.10737212E+06	0.16708831E+00
6	4	0.26000000E+05	0.29811217E+05	0.14658526E+00
7	4	0.10000000E+05	0.10489551E+05	0.48955079E-01
8	4	0.46000000E+04	0.42931685E+04	0.66702507E-01
9	4	0.23000000E+04	0.19608728E+04	0.14744660E+00
10	4	0.13000000E+04	0.97454803E+03	0.25034767E+00
6	5	0.21000000E+05	0.25783062E+05	0.22776487E+00
7	5	0.78000000E+04	0.85129697E+04	0.91406375E-01
8	5	0.35000000E+04	0.34067517E+04	0.26642369E-01
9	5	0.17000000E+04	0.15402181E+04	0.93989328E-01
10	5	0.96000000E+03	0.76159717E+03	0.20666961E+00
7	6	0.65000000E+04	0.77874497E+04	0.19806919E+00
8	6	0.28000000E+04	0.29174094E+04	0.41931938E-01
9	6	0.14000000E+04	0.12872783E+04	0.80515489E-01
10	6	0.74000000E+03	0.62913354E+03	0.14981954E+00

Références

- [1] M. F. Gu, FAC 1.0.7, <http://kipac-tree.stanford.edu/fac/>
- [2] R. D. Cowan, Theory of Atomic Structure and Spectra, University of California Press, Berkeley, 1981.

- [3] F. B. Rosmej, R. Stamm, S. Fritzsche, T. Yamamoto, T. Kato et al. , Proceedings of the 4th International Conference on Atomic and Molecular Data and Their Applications, Ceratopia Toki, Toki, Gifu, Japan, AIP **771** (2004) 42, invited talk.
- [4] F. B. Rosmej, E.H. Guedda et R. Stamm, soumis pour J. Phys. B Letters.
- [5] G.W.F. Drake, “High Precision Calculations for Helium”, p. 154-171, in “Atomic Molecular Optical Physics Handbook”, edited by G.W.F. Drake, AIP Press, New York 1996 .

Annexe D

Algorithme Génétique

D.1 Introduction

Plusieurs problèmes mathématiques et physiques nécessitent une technique d'optimisation pour leurs solutions. La minimisation ou la maximisation d'une fonction, l'ajustement (fitting) des données et la recherche des racines des équations couplées sont des exemples des problèmes rencontrés. Plusieurs méthodes sont utilisées pour traiter ces genres des problèmes, mais les résultats ne sont pas toujours assurés. Les algorithmes génétiques (AG) prouvent leurs applications et donnent des résultats fiables aux plusieurs applications[1].

D.2 Problème d'optimisation modèle

Il est intéressant de commencer par un problème d'optimisation d'une fonction qui montre des difficultés pour les autres méthodes d'optimisation classiques.

Soit à maximiser la fonction à deux variables définie par :

$$f(x, y) = [16x(1-x)y(1-y) \sin(n\pi x) \sin(n\pi y)]^2, \quad (D.1)$$
$$x, y \in [0,1], \quad n = 1,2,\dots$$

Le problème est de chercher le couple $[x_{\max}, y_{\max}]$ qui rend la fonction $f(x,y)$ maximale. Cette fonction possède par exemple 81 maxima locaux (voir figure D.1) pour $n=9$ dans l'intervalle donné. Le problème est bien évidemment difficile à résoudre par une méthode d'optimisation classique.

D.3 Bases des algorithmes génétiques

Les algorithmes génétiques sont des séquences d'instructions qui permettent de résoudre une vaste classe de problèmes d'optimisation, avec la particularité de se baser sur les processus de l'évolution biologiques. La théorie de l'évolution prédit en effet que dans toutes les espèces vivantes, l'allure extérieure d'un individu (ou phénotype) a tendance à s'adapter de façon naturelle au système extérieur au fil des générations, ce qui revient donc à dire qu'elle tend à être optimale. Cette adaptation naturelle est alors basée sur l'ensemble des processus d'évolution biologique, à savoir :

- Sélection naturelle, qui favorise les meilleurs individus (phénotypes)
- Croisement, qui amène les individus à transmettre la particularité génétique
- Mutation aléatoire, qui préserve la diversité des individus dans l'espèce.

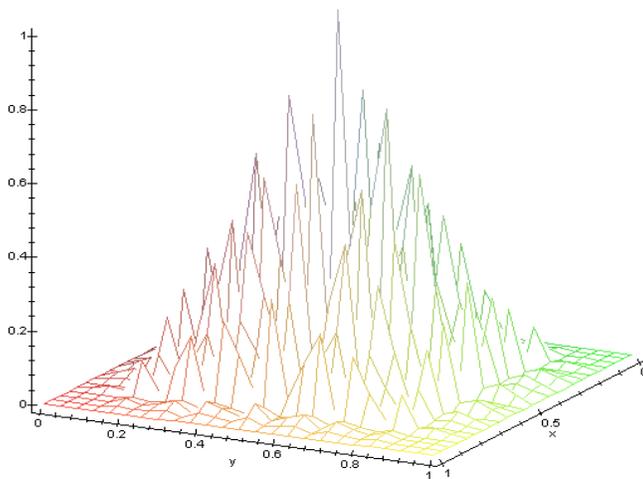


Fig. D.1 Illustration de la fonction $f(x,y)$

D.4 Application à l'optimisation d'une fonction

Nous appliquons l'AG au problème de la recherche du couple (x,y) qui maximise la fonction (D.1). Pour se faire on applique le programme PIKAIA [1] basé sur les idées des algorithmes génétiques.

La fonction à maximiser $f(x,y)$ est appelée fonction d'adaptation f , ou fitness. Un individu est dans ce cas caractérisé par un couple (x,y) , qui constitue son phénotype. La recherche du couple (x_{\max},y_{\max}) par l'AG se résume par les étapes suivantes :

1. Construire une population aléatoire et évaluer la fonction d'adaptation f pour chaque individu.
2. Construire une nouvelle population par croisement des individus choisis à partir de l'ancienne population.
3. Évaluation du fitness de la nouvelle population (chaque nouvel individu).
4. Remplacement de l'ancienne population par la nouvelle population.
5. Test de la convergence, sinon retour en 2 jusqu'à que f soit optimale.

Le tableau D.1 résume les processus établis par l'AG au cours de la recherche de la fitness f . En premier lieu l'AG fait une sélection d'un ensemble de couples d'individus $\{(x_j, y_j), (x_k, y_k)\}$ en fonction de leur fitness. L'AG procède ensuite au croisement des individus après avoir codé leur phénotype en génotype. En fin, une mutation s'applique sur chaque chiffre du génotype, puis le génotype est décodé en phénotype.

Dans le cas de l'optimisation de la fonction de l'équation D.1 l'AG cherche l'individu idéal (x,y) qui rend la fonction fitness optimal soit f tend vers 1. Nous présentons sur la figure D.2 l'ensemble des individus pour des générations différentes. La 20^{ème} génération tend à choisir un seul couple qui est $(0.5,0.5)$ et la fonction fitness illustrée sur la figure D.3 tend aussi vers 1.

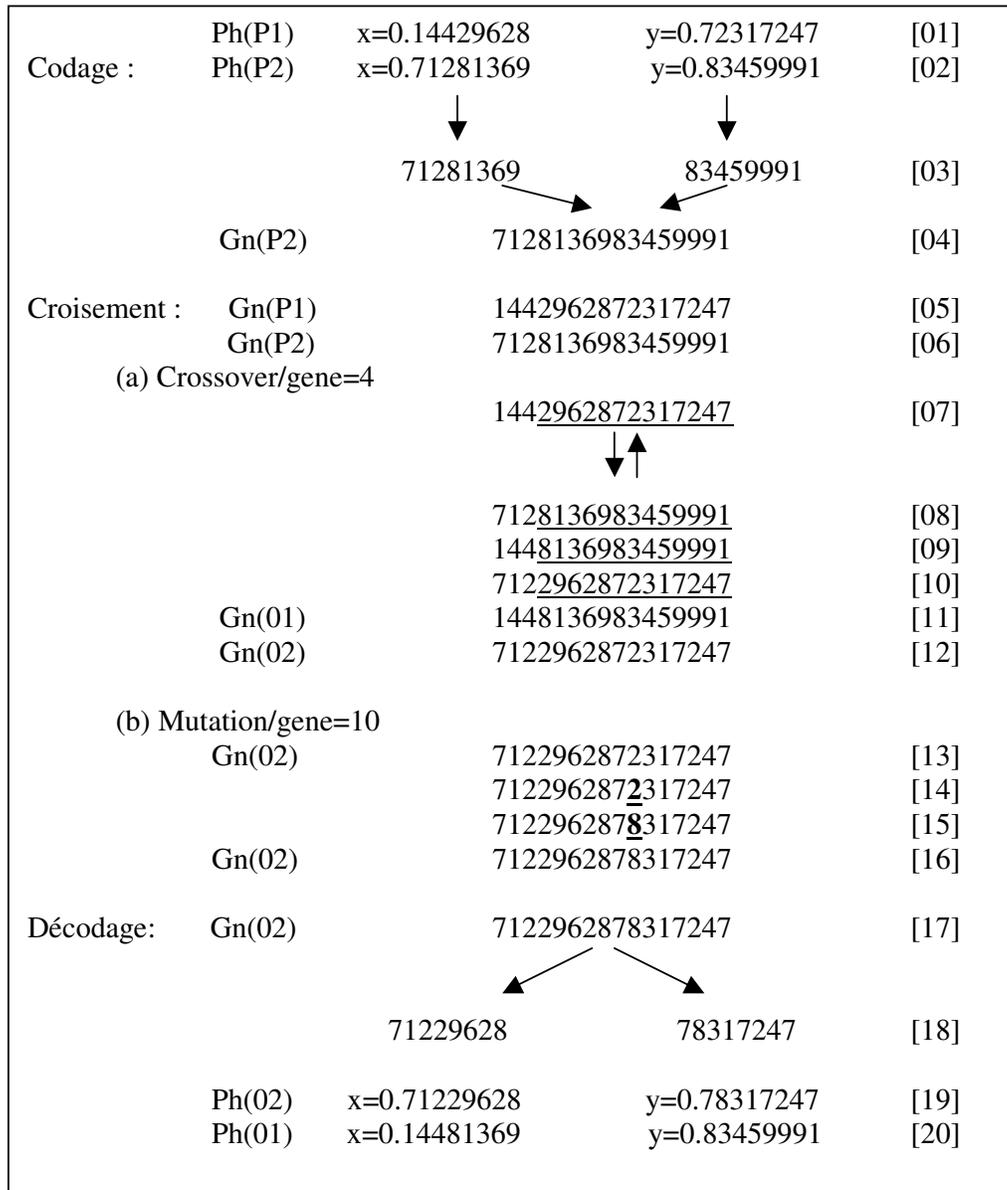


Tableau D.1 Les processus de codage, croisement et décodage dans un AG.

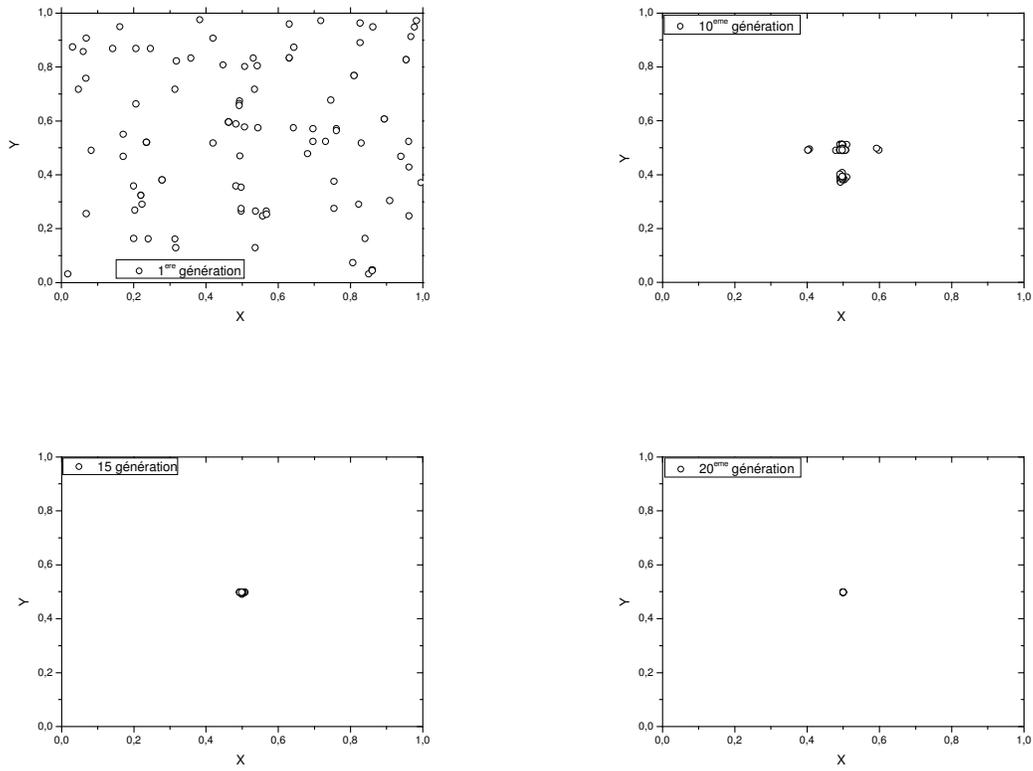


Fig. D.2 Evolutions des générations

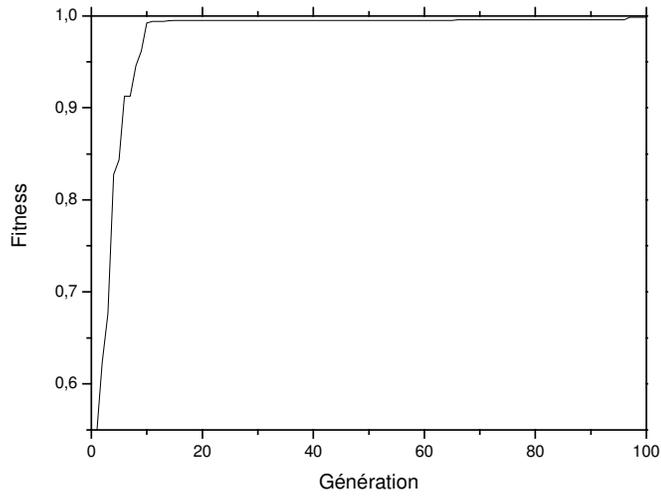


Fig. D.3 Evolution de la fonction fitness au cours des générations.

D.5 Application à l'ajustement « fitting » des données

Nous avons utilisé l'AG pour le fitting des données et la recherche des lois d'échelle pour les taux moyens de transition radiative et les facteurs d'intensité Q_d .

Pour la recherche de la loi d'échelle pour le facteur d'intensité $Q_d(n)$:

$$Q_d(n) = \frac{\frac{C_1 10^{10}}{n^\alpha} \frac{C_2 10^{13}}{n^3}}{C_3 10^9 + \frac{C_2 10^{13}}{n^3}} \quad \begin{cases} \alpha = 3 \text{ for } 1s2l(^1S, ^3S, ^1P \text{ and } ^3P) \text{ states} \\ \alpha = 0 \text{ for } 1s2l(^1L \text{ and } ^3L) \text{ states} \end{cases} \quad (\text{D.2})$$

nous avons appliqué le programme PIKAIA [1] à une fonction de fitness f tel que :

$f = 1/\chi^2$ et tel que :

$$\chi^2(C_1, C_2, C_3) = \sum_{i=1}^N \left[\frac{y(n(i), C_1, C_2, C_3) - y(n(i))}{\sigma_i} \right]^2 \quad (\text{D.3})$$

où on a choisi $y(n, C_1, C_2, C_3) = \ln Q_d(n)$

Références

[1] P. Charbonneau, *Astrophys. J. Supp. Ser.*, 101(1995) 309-334.

Annexe E

Résultats de calcul de la recombinaison diélectronique

Nous présentons dans cet annexe les résultats obtenus pour les taux d'auto ionisation, les facteurs d'intensité ainsi que les erreurs relatives sur l'application des lois d'échelle.

Tableau E.1 : Longueurs d'onde et taux de transition radiative pour l'Ar XVII par les deux programmes HFR [1] et FAC [2].

Tableau E.2 : taux d'auto ionisation et taux de transition radiative pour l'He I par FAC [1], Lindroth et al. [3,4] et MZ [5]

Tableau E.3 : Taux d'auto ionisation pour l'Ar XVII par plusieurs configurations FAC [2] et HFR [1].

Tableau E.4 : Facteurs d'intensité Q (eq. V.3) pour l'He I par notre programme FactSumQ.

Tableaux E.5 : Les erreurs relatives sur l'application des lois d'échelle (eq. V.5) par FAC [6].

Références

[1] F.B. Rosmej, Méthodes Spectroscopiques pour l'Analyse de Plasmas Hors-Equilibre, Habilitation à diriger des recherches, Université Bochum 1998.

[2] M. F. Gu, FAC 1.0.7, <http://kipac-tree.stanford.edu/fac/>

[3] E. Lindroth, Phys. Rev. A **49** (1994) 4473.

[4] P. Glans, E. Lindroth, R. Badnell et al., Phys. Rev. A **64** (2001) 043609.

[5] V. P. Shevelko and L. A. Vainshtein, Atomic Physics for Hot Plasmas, IOP Publishing, London, 1993.

[6] E. H. Guedda, F. B. Rosmej, P. Genesisio, R. Stamm, L. A. Vainshtein, M. F. Gu, E. Lindroth and F. Khelfaoui, Contrib. Plasma Phys. **46** (2006) 655-660.

level low	level up	lam_A(HFR)	lam_A(FAC)	A (HFR)	A(FAC)
1s2p 1p1	2p2 1s0	3,7394	3,741	1,03E+14	1,07E+14
1s2p 3p2	2p2 1d2	3,7551	3,757	5,66E+12	5,92E+12
1s2p 3p1	2p2 3p2	3,7623	3,764	3,31E+13	3,43E+13
1s2p 3p0	2p2 3p1	3,764	3,766	4,25E+13	4,37E+13
1s2p 3p1	2p2 3p1	3,7652	3,767	3,14E+13	3,23E+13
1s2p 3p2	2p2 3p2	3,7656	3,768	8,99E+13	9,25E+13
1s2p 3p1	2p2 3p0	3,7672	3,769	1,25E+14	1,28E+14
1s2p 3p2	2p2 3p1	3,7685	3,77	5,30E+13	5,45E+13
1s2p 1p1	2p2 1d2	3,7707	3,773	1,19E+14	1,24E+14
1s2p 1p1	2p2 3p2	3,7813	3,783	4,25E+12	4,36E+12
1s2p 1p1	2p2 3p1	3,7842	3,786	4,02E+11	4,79E+11
1s2p 1p1	2p2 3p0	3,7862	3,788	5,97E+11	7,09E+11
1s2p 3p1	2s2 1s0	3,7923	3,794	2,43E+12	2,49E+12
1s2p 1p1	2s2 1s0	3,8116	3,813	2,51E+13	2,36E+13
1s2p 3p1	2p3p 3p2	3,1981	3,198	1,80E+12	1,54E+12
1s2p 1p1	2p3p 3p2	3,2118	3,212	9,85E+11	6,76E+11
1s2p 3p2	2p3p 3p2	3,2	3,2	1,13E+13	1,03E+13
1s2s 3s1	2s2p 1p1	3,7306	3,732	3,53E+11	3,71E+11
1s2s 1s0	2s2p 1p1	3,7535	3,755	6,35E+13	6,59E+13
1s2s 3s1	2s2p 3p2	3,7605	3,761	6,33E+13	6,60E+13
1s2s 3s1	2s2p 3p1	3,7642	3,766	6,27E+13	5,54E+13
1s2s 3s1	2s2p 3p0	3,7658	3,767	6,30E+13	6,57E+13
1s2s 3s1	2p3d 1p1	3,1717	3,171	2,80E+10	1,85E+10
1s2s 3s1	2p3d 3p0	3,1765	3,178	1,48E+12	1,36E+12
1s2s 3s1	2p3d 3p1	3,1767	3,177	1,44E+12	1,34E+12
1s2s 3s1	2p3d 3p2	3,177	3,178	1,61E+12	1,49E+12
1s3d 3d3	2p3d 3f3	3,7425	3,742	1,89E+13	1,86E+13
1s3d 1d2	2p3d 3f3	3,7427	3,742	1,70E+13	1,68E+13
1s3d 3d1	2p3d 3f2	3,7445	3,744	3,97E+13	3,93E+13
1s3d 3d2	2p3d 3f2	3,7445	3,744	2,31E+13	2,31E+13
1s3d 3d3	2p3d 3f2	3,7449	3,745	6,07E+11	5,86E+11

Tableau E.1 Longueurs d'onde et taux de transition radiative pour l'Ar XVII

		AI (LIND)	AI (FAC)	AI (MZ)	A(LIND)	A(FAC)	A(MZ)	Q(LIND)	Q(FAC)	Q(MZ)	Channel
2s2 1S0	1s2p 3P1	1,88E+14	1,79E+14	3,55E+14	3,42E+02	1,23E+02	5,91E+02	3,42E+02	1,23E+02	5,91E+02	Q4
	1s2p 1P1	1,88E+14	1,79E+14	3,55E+14	2,38E+09	2,66E+09	3,01E+09	2,38E+09	2,66E+09	3,01E+09	Q3
2p2 1S0	1s2p 3P1	8,92E+12	3,29E+12	6,10E+12	1,60E+01	1,30E+02	1,61E-01	1,60E+01	1,29E+02	1,61E-01	Q4
	1s2p 1P1	8,92E+12	3,29E+12	6,10E+12	8,08E+09	1,22E+10	9,45E+09	8,07E+09	1,21E+10	9,43E+09	Q3
2p2 3P0	1s2p 3P1	1,09E+06	1,24E+04	2,29E+06	1,17E+10	1,36E+10	1,45E+10	1,09E+06	1,23E+04	2,29E+06	Q4
	1s2p 1P1	1,09E+06	1,24E+04	2,29E+06	5,40E+01	3,60E+01	3,32E+02	5,03E-03	3,26E-05	5,24E-02	Q3
2p2 3P1	1s2p 3P0	2,62E+06	3,63E+05	0,00E+00	3,91E+09	4,55E+09	4,82E+09	2,62E+06	3,63E+05	0,00E+00	Q4
	1s2p 3P1	2,62E+06	3,63E+05	0,00E+00	2,93E+09	3,41E+09	3,62E+09	1,97E+06	2,72E+05	0,00E+00	Q4
	1s2p 3P2	2,62E+06	3,63E+05	0,00E+00	4,89E+09	5,69E+09	6,03E+09	3,28E+06	4,54E+05	0,00E+00	Q4
	1s2p 1P1	2,62E+06	3,63E+05	0,00E+00	8,18E+01	1,17E+00	1,88E+02	5,49E-02	9,37E-05	0,00E+00	Q3
2p2 3P2	1s2p 3P1	9,87E+07	1,80E+07	4,37E+09	2,95E+09	3,41E+09	3,62E+09	1,22E+08	2,24E+07	4,20E+09	Q4
	1s2p 3P2	9,87E+07	1,80E+07	4,37E+09	8,86E+09	1,02E+10	1,08E+10	3,67E+08	6,74E+07	1,26E+10	Q4
	1s2p 1P1	9,87E+07	1,80E+07	4,37E+09	3,51E+06	8,19E+02	1,87E+05	1,45E+05	5,39E+00	2,17E+05	Q3
2p2 1D2	1s2p 3P1	9,77E+13	1,80E+14	3,74E+14	2,39E+02	2,48E+02	5,47E+04	1,19E+03	1,24E+03	2,73E+05	Q4
	1s2p 1P1	9,77E+13	1,80E+14	3,74E+14	1,02E+10	1,32E+10	1,49E+10	5,10E+10	6,62E+10	7,44E+10	Q3
	1S2P 3P2	9,77E+13	1,80E+14	3,74E+14	1,65E+03	6,10E+02	1,26E+05	8,25E+03	3,05E+03	6,31E+05	Q4
2s2p 3P0	1s2s 3S1	1,24E+13	7,03E+12	1,36E+13	6,22E+09	6,86E+09	6,84E+09	6,22E+09	6,85E+09	6,83E+09	Q1
2s2p 3P1	1s2s 3S1	1,24E+13	7,03E+12	1,36E+13	6,22E+09	6,86E+09	6,84E+09	1,86E+10	2,05E+10	2,05E+10	Q1
	1s2s 1S0	1,24E+13	7,03E+12	1,36E+13	1,09E+02	7,27E+01	2,87E+02	3,27E+02	2,18E+02	8,61E+02	Q2
2s2p 3P2	1s2s 3S1	1,24E+13	7,03E+12	1,36E+13	6,22E+09	6,86E+09	6,84E+09	3,11E+10	3,42E+10	3,42E+10	Q1
2s2p 1P1	1s2s 3S1	5,68E+13	1,03E+14	2,03E+14	7,96E+01	5,18E+01	2,95E+02	2,39E+02	1,55E+02	8,85E+02	Q1
	1s2s 1S0	5,68E+13	1,03E+14	2,03E+14	6,44E+09	7,46E+09	8,17E+09	1,93E+10	2,23E+10	2,45E+10	Q2

Tableau E.2 Taux d'autoionisation et de transition radiative pour l'He I.

Symbol	AI (FAC_5)	AI (FAC_2)	AI (FAC_1)	AI (HFR)
2s2 1S0	3.24e+14	3.31e+14	3.26e+14	3.29e+14
2p2 1S0	1.97e+13	1.93e+13	1.85e+13	2.36e+13
2p2 3P0	1.1e+12	1.1e+12	1.21e+12	1.29e+12
2p2 3P2	2.05e+13	2.06e+13	2.0e+13	2.01e+13
2p2 1D2	3.25e+14	3.27e+14	3.22e+14	3.22e+14
2s2p 3P0	1.41e+13	1.45e+13	1.36e+13	1.48e+13
2s2p 3P1	1.49e+13	1.53e+13	1.23e+13	1.58e+13
2s2p 3P2	1.29e+13	1.31e+13	1.44e+13	1.48e+13
2s2p 1P1	1.9e+14	1.93e+14	1.93e+14	1.84e+14
2s3s 3S1	6.62e+11	7.1e+11	x	6.87e+11
2s3s 1S0	1.56e+14	1.67e+14	1.83e+14	1.61e+14
2s3p 3P0	9.95e+11	11.8e+11	16.0e+11	8.95e+11
2s3p 3P1	7.54e+12	8.08e+12	8.55e+12	7.84e+12
2s3p 3P2	5.58e+12	5.98e+12	6.17e+12	6.1e+12
2s3d 3D1	1.44e+12	1.31e+12	1.7e+12	1.38e+12
2s3d 3D2	4.3e+13	3.65e+13	2.45e+13	3.4e+13
2s3d 3D3	2.0e+12	2.19e+12	2.42e+12	2.07e+12
2p3s 3P0	5.89e+12	6.2e+12	6.3e+12	6.31e+12
2p3s 3P1	1.13e+12	1.17e+12	1.18e+12	1.2e+12
2p3s 3P2	6.48e+11	7.1e+11	9.6e+11	11.2e+11
2p3s 1P1	8.5e+13	9.4e+13	10.6e+13	8.16e+13
2p3p 1S0	1.05e+13	1.14e+13	1.24e+13	1.2e+13
2p3p 3P0	1.19e+12	1.23e+12	1.3e+12	1.37e+12
2p3p 3P1	6.9e+11	x	8.7e+11	8.11e+11
2p3p 1D2	8.25e+12	1.09e+13	4.69e+13	8.25e+13
2p3p 3D1	8.22e+9	6.8e+9	9.79e+9	3.96e+9
2p3p 3D2	2.27e+12	2.26e+12	2.1e+12	2.11e+12
2p3p 3D3	1.0e+11	1.24e+11	1.21e+11	1.47e+11
2p3d 3P0	2.97e+10	3.77e+10	4.27e+10	4.16e+10
2p3d 3P1	7.28e+11	8.56e+11	5.22e+11	7,77E+11
2p3d 3P2	2.77e+10	3.49e+10	3.97e+10	3.37e+10
2p3d 1P1	1.48e+12	0.88e+12	1.33e+12	1.32e+12
2p3d 3D1	5.33e+12	3.2e+12	1.62e+12	4.43e+12
2p3d 3D2	2.08e+11	2.17e+11	2.1e+11	2.16e+11
2p3d 3D3	5.62e+11	6.09e+11	6.31e+11	6.06e+11
2p3d 1D2	6.94e+11	7.6e+11	8.24e+11	7.23e+11
2p3d 3F2	3.42e+12	3.8e+12	4.13e+12	3.75e+12
2p3d 3F3	4.32e+12	4.79e+12	5.15e+12	4.74e+12
2p3d 3F4	4.24e+12	4.68e+12	5.05e+12	4.7e+12
2p3d 1F3	2.04e+13	2.2e+13	2.46e+13	1.99e+13

Tableau E.3 Taux d'autoionisation pour l'Ar XVII.

config	Qn_2sT	Qn_2sS	Qn_2pS	Qn_2pT				
2x2y	0.61667840E+11	0.22366644E+11	0.80986751E+11	0.90947456E+08				
2x3y	0.98201580E+10	0.17580058E+10	0.61928279E+10	0.13482331E+11				
2x4y	0.36685629E+10	0.11429914E+10	0.21948902E+10	0.36583191E+10				
2x5y	0.15796315E+10	0.53633520E+09	0.10356067E+10	0.11883263E+10				
2x6y	0.63469862E+09	0.25942830E+09	0.57332902E+09	0.91726899E+09				
2x7y	0.42442582E+09	0.11454987E+09	0.34975066E+09	0.54190592E+09				
2x8y	0.25896445E+09	0.69923776E+08	0.22779778E+09	0.31513027E+09				
2x9y	0.15118872E+09	0.50731312E+08	0.15738051E+09	0.15365846E+09				
2x10y	0.10862878E+09	0.41695840E+08	0.11268802E+09	0.11879064E+09				
sumQ_v	0.78314103E+11	0.26340305E+11	0.91831026E+11	0.20466678E+11				
config	Qn_3S	Qn_3T	Qn_4S	Qn_4T	Qn_5S	Qn_5T	Qn_6S	Qn_6T
2x2y	0.00000000E+00							
2x3y	0.18181046E+12	0.44725472E+12	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00
2x4y	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.18034627E+12	0.45552488E+12	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00
2x5y	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.19735237E+12	0.35432038E+12	0.00000000E+00	0.00000000E+00
2x6y	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.22395593E+12	0.35391770E+12
2x7y	0.00000000E+00							
2x8y	0.00000000E+00							
2x9y	0.00000000E+00							
2x10y	0.00000000E+00							
sumQ_v	0.22395593E+12	0.35391770E+12	0.18181046E+12	0.44725472E+12	0.18034627E+12	0.45552488E+12	0.19735237E+12	0.35432038E+12
config	Qn_7S	Qn_7T	Qn_8S	Qn_8T	Qn_9S	Qn_9T	Qn_10S	Qn_10T
2x2y	0.00000000E+00							
2x3y	0.00000000E+00							
2x4y	0.00000000E+00							
2x5y	0.00000000E+00							
2x6y	0.00000000E+00							
2x7y	0.20518040E+12	0.32411383E+12	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00
2x8y	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.20244233E+12	0.31169249E+12	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00
2x9y	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.19385008E+12	0.27793631E+12	0.00000000E+00	0.00000000E+00
2x10y	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.18703727E+12	0.22535738E+12
sumQ_v	0.20518040E+12	0.32411383E+12	0.20244233E+12	0.31169249E+12	0.19385008E+12	0.27793631E+12	0.18703727E+12	0.22535738E+12

Tableau E.4 Facteurs d'intensité Q pour l'He I.

Q_{2sT}

n	Q(scale)	Q(FAC)	Err
5	0.14038591E+10	0.15800000E+10	0.111
6	0.75864851E+09	0.63500000E+09	0.195
7	0.43735210E+09	0.42400000E+09	0.031
8	0.26335824E+09	0.25900000E+09	0.017
9	0.16370494E+09	0.15100000E+09	0.084
10	0.10436064E+09	0.10900000E+09	0.043

Tableau E.5.a Facteurs d'intensité Q_{2sT} pour l'He I Q_{2sS}

n	Q(scale)	Q(FAC)	Err
5	0.44400221E+09	0.53600000E+09	0.172
6	0.23789656E+09	0.25900000E+09	0.081
7	0.13576534E+09	0.11400000E+09	0.191
8	0.80862688E+08	0.67000000E+08	0.207
9	0.49711580E+08	0.50700000E+08	0.019
10	0.31357230E+08	0.41700000E+08	0.248

Tableau E.5.b Facteurs d'intensité Q_{2sS} pour l'He I Q_{2pS}

n	Q(scale)	Q(FAC)	Err
5	0.10194730E+10	0.10300000E+10	0.010
6	0.58254112E+09	0.57300000E+09	0.017
7	0.36051027E+09	0.35000000E+09	0.030
8	0.23608621E+09	0.22800000E+09	0.035
9	0.16116046E+09	0.15700000E+09	0.026
10	0.11351020E+09	0.11300000E+09	0.005

Tableau E.5.c Facteurs d'intensité Q_{2pS} pour l'He I

Q_{2pT}

n	Q(scale)	Q(FAC)	Err
5	0.14690031E+10	0.11900000E+10	0.234
6	0.80356826E+09	0.91700000E+09	0.124
7	0.47011194E+09	0.54200000E+09	0.133
8	0.28775382E+09	0.31500000E+09	0.086
9	0.18193442E+09	0.15400000E+09	0.181
10	0.11793510E+09	0.11900000E+09	0.009

Tableau E.5.d Facteurs d'intensité Q_{2pT} pour l'He I Q_{nS}

n	Q(scale)	Q(FAC)	Err
5	0.21029084E+12	0.19700000E+12	0.067
6	0.20767041E+12	0.22400000E+12	0.073
7	0.20412065E+12	0.20500000E+12	0.004
8	0.19958096E+12	0.20200001E+12	0.012
9	0.19403976E+12	0.19399999E+12	0.000
10	0.18753724E+12	0.18700000E+12	0.003

Tableau E.5.e Facteurs d'intensité Q_{nS} pour l'He I Q_{nT}

n	Q(scale)	Q(FAC)	Err
5	0.36831950E+12	0.35400001E+12	0.040
6	0.34879452E+12	0.35400001E+12	0.015
7	0.32476745E+12	0.32399999E+12	0.002
8	0.29749674E+12	0.31199999E+12	0.046
9	0.26854264E+12	0.27800001E+12	0.034
10	0.23943989E+12	0.22500000E+12	0.064

Tableau E.5.f Facteurs d'intensité Q_{nT} pour l'He I

Liste des publications

1-Calcul des données atomiques pour les hydrogéoïdes

Guedda E. H., Khelfaoui F. et Stamm R., soumis au Revue Algérien de Physique.

2-Double excited high-n dependent atomic scaling laws for He I: Application to radiative properties for edge plasma conditions.

E. H. Guedda, F. B. Rosmej, P. Genesisio, R. Stamm, L. A. Vainshtein , M. F. Gu, E. Lindroth and F. Khelfaoui, Contrib. Plasma Phys., **46** (2006) 655-660.

3-About the problems to interpret spectroscopic data from plasmas.

F. B. Rosmej, **E. H. Guedda**, V. S. Lisitsa and R. Stamm, AIP Conf. Proc., **812-1** (2006) 104-111.

4-Investigation of Collisional and electric field effects on the He I dielectronic recombination rates for magnetic fusion plasmas.

E. H. Guedda, F. B. Rosmej, M. Koubiti et al., 33rd EPS Conference on Plasma Phys. Rome, 19 - 23 June 2006 ECA Vol.**30I**, P-4.190 (2006)

5-Optical transitions of highly charged ions in high density laser produced plasmas .

F. B. Rosmej, A. Delsérieys, **E. H. Guedda**, L. Godberg-Mouret, et al., 33rd EPS Conference on Plasma Phys. Rome, 19 - 23 June 2006 ECA Vol.**30I**, P-5.034 (2006)

6-Dense plasma effects on atomic data and line emission of He I for divertor plasma conditions.

E. H. Guedda, M. Koubiti, F. B. Rosmej, et al.

Int. Conf. On Plasma Surface Interactions in Controlled Fusion Devices, China, May 22-26, 2006.

7- Universal convergent scaling laws of high-n intercombination transitions in helium

F. B. Rosmej, **E. H. Guedda**, R. Stamm, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **40** (2007).