

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



Université Badji Mokhtar Annaba



Faculté des Sciences
Département de Physique

THÈSE

Pour obtenir le diplôme de
DOCTEUR EN PHYSIQUE
Option : *Physique Théorique*

Par
Samia DILMI

Sur le Thème

**Etude de quelques processus atomiques affectant la
cinétique atomique : Application à l'ionisation de
l'hélium neutre et quelques ions héliumoides**

Soutenue en : 10 / 04 /2014

devant le Jury composé de :

Président : Pr. Abdelssetar Elakremi (Université B.M. Annaba)

Directeur de Thèse : Pr. El Habib Guedda (Université d'El-Oued)

Co-directeur de Thèse : Pr. Mokhtar Ghers (Université B.M. Annaba)

Examineurs :

Pr. M.Tayeb Meftah (Université K.M. Ouargla)

Pr. Fethi Khelfaoui (Université K.M. Ouargla)

Pr. Réda Attallah (Université B.M. Annaba)

Au Nom de Dieu Clément et Miséricordieux

Il apprit à l'homme ce que l'homme ne savait pas

(Sourate XCVI, Le Sang Coagulé, verset 5)

Dédicace

A mon mari Zakaria

A mes enfants Youcef, Mouaid et Estabrakh

Remerciements

Cette thèse s'inscrit dans le cadre d'un doctorat en physique, option physique théorique.

Je tiens à exprimer tout spécialement ma profonde reconnaissance à Monsieur El Habib GUEDDA, Professeur à l'Université d'El-Oued. Ce travail n'aurait certainement pas pu être réalisé sans son aide constante et sa gentillesse inégalée. Travailler avec lui fut un vrai plaisir.

J'adresse également mes plus vifs remerciements à Monsieur GHERS Mokhtar, Professeur à l'Université Badji Mokhtar (UBM, Annaba), pour ses conseils précieux, Qu'il trouve ici l'expression de ma profonde gratitude.

Monsieur MEFTAH M. Tayeb, Professeur à l'Université Kasdi Merbah (UKM, Ouargla) et Monsieur BOUMALI A. El Malek, Maître de conférences à l'Université de Tébessa, m'ont énormément aidé à bien mener certaines parties de cette recherche. Je ne peux oublier les discussions enrichissantes que j'ai eu avec eux. Je les remercie chaleureusement et je leurs en serais sans cesse reconnaissante.

Je suis très reconnaissante à Monsieur EL AKREMI Abd el-Sattar, Professeur à l'Université Badji Mokhtar (UBM, Annaba), pour m'avoir fait l'honneur de présider le jury de ma thèse. Qu'il accepte mes vifs remerciements.

Monsieur KHELFAOUI Fethi, Professeur à l'Université Kasdi Merbah (UKM, Ouargla), a accepté d'examiner cette thèse. Je me réjouis de sa participation au jury et l'en remercie vivement.

Je sais gré à Monsieur ATALLAH Réda, Professeur à l'Université Badji Mokhtar (UBM, Annaba), d'avoir eu l'obligeance de faire partie du jury de ma thèse. Qu'il sache que je suis très sensible à l'honneur qu'il me fait.

Je suis extrêmement reconnaissante à Monsieur MEFTAH M. Tayeb, Professeur à l'Université Kasdi Merbah (UKM, Ouargla), d'avoir accepté d'examiner cette thèse et de me faire l'honneur de participer au jury.

Qu'il me soit aussi permis d'adresser mes plus vifs remerciements à mes très chères amies, Ismahen et Moniara, dont le soutien n'ajamais fait défaut.

Je remercie du fond du cœur ma famille et ma belle-famille pour leurs appuis durant toutes ces années et, particulièrement, à mon mari Monsieur Zakaria Demdoun, Maître-assistant à l'Université d'El-Oued, pour son soutien moral et son aide précieuse, et à ma belle-mère à qui j'adresse mon profond respect et reconnaissance.

Enfin, un grand merci à tous ceux qui m'ont aidé à accomplir ce travail: Moncef Bouledroua, Nabil Zemmar, Souhaila Asekri, et à tous mes amis.

Dilmi Samia

Abstract

Structures and atomic data describing the elementary processes in plasmas have a vital interest in the modeling of radiative properties of ions and atoms in the analysis and interpretation of spectra. Understanding the role of hot electrons in the plasma is particularly important because of their influence on the dynamics of plasma, production of radiation and energy balances. Our goal through this work focuses on the study of the effects of hot electrons on the ionization rates of neutral helium plasma and heliumoid ions studied.

Generally and for a collisional radiative model population densities of atomic levels are determined by a system of equations containing the rates of different atomic processes. Among them is the electronic impact ionization rate, as required for the study of ionization balance. Several problems related to the study of laboratory plasmas, astrophysics and controlled thermonuclear fusion require prior knowledge of the atomic structure as the energies of different levels, wavelengths of different transitions, cross sections and rate coefficients of the elementary processes in plasmas. However, the direct calculation of the data becomes impossible for many-electron atoms and also for large quantum numbers. In this case, we used the programs and computer codes. Despite the large number of existing codes for the treatment of atomic data, they are all competing to give results close to the experience.

In our work, we choose the FAC code (Flexible Atomic Code) to calculate the cross sections of ionization of neutral He and other heliumoid ions. The ionization rate is generated by a numerical calculation. The electron impact ionization is an essential process in atomic simulation of radiative emission lines and also in the study of ionic balance. We have studied the effects of the fraction of hot electrons on the rate of ionization of neutral helium and heliumoid ions (Li^+ , Ar^{+16} and Fe^{+24}). The fraction of the hot electrons is represented by a Non-Maxwellian distribution. The ionization rates are generated from the cross sections and weighted by this distribution. Using a Non-Maxwellian distribution of hot electrons for different fractions allowed us to show the sensitivity of these rates relative to fractions of hot electrons. The results are compared to those found in the literature.

Résumé

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. La compréhension du rôle d'électrons chauds dans les plasmas est particulièrement importante à cause de leur influence sur la dynamique de plasma, la production de rayonnement et les bilans énergétiques. Notre objectif à travers ce travail s'attache à l'étude des effets des électrons chauds sur les taux d'ionisation d'un plasma d'hélium neutre et les ions héliumoïdes étudiés.

Généralement, et pour un modèle collisionnel radiatif, les densités des populations des niveaux atomiques sont déterminées par un système d'équations contenant les taux des différents processus atomiques. Parmi eux les taux d'ionisation par impact électronique, nécessaire aussi pour l'étude du bilan d'ionisation. 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 des différents niveaux, les longueurs d'onde des différentes transitions, les sections efficaces et les coefficients des taux des processus élémentaires dans les plasmas. Cependant, le calcul direct de ces données devient impossible pour les atomes à plusieurs électrons et aussi pour les grands nombres quantiques. Dans ce cas on fait appel aux programmes et codes de calcul. 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'expérience.

Dans notre travail, nous avons choisi le code FAC (Flexible Atomic Code) pour calculer les sections efficaces d'ionisation de l'hélium neutre et d'autres ions héliumoïdes. Les taux d'ionisation seront générés par un calcul numérique. L'ionisation par impact électronique est un processus atomique indispensable dans la simulation des émissions radiatives des raies et aussi pour l'étude du bilan ionique. Nous avons étudié les effets de la fraction des électrons chauds sur le taux d'ionisation d'un plasma d'He neutre et les ions héliumoïdes (Li^+ , Ar^{+16} et Fe^{+24}). La fraction des électrons chauds est représentée par une distribution non-Maxwellienne. Les taux d'ionisation sont générés à partir des sections efficaces et pondérées par cette distribution. L'utilisation d'une distribution Non-Maxwellienne des électrons chauds, pour différentes fractions nous a permis de montrer la sensibilité de ces taux par rapport aux fractions des électrons chauds. Les résultats sont comparés à ceux trouvés dans la littérature.

Sommaire

Sommaire	i
Table des figures	v
Liste des tableaux	vii
INTRODUCTION GENERALE	1

Chapitre 01 : Généralités sur les plasmas et les structures atomiques

1 -1 Introduction	6
1-2 Définitions	6
1-3 Classification des plasmas	7
1-4 Processus réactionnels	7
1-4-1 Les processus radiatifs	8
1-4-2 Les processus électroniques	8
1-4-3 Les processus moléculaires et atomiques	9
1-5 Modèle d'équilibre dans les plasmas	9
1-5-1 Modèle d'équilibre thermodynamique complet (ETC)	9
1-5-2 Lois vérifiées par un plasma à l'ETC	10
1-5-3 Modèle d'équilibre thermodynamique local (ETL)	12
1-5-4 Modèle coronal (MC)	12
1-5-5 Modèle collisionnel radiatif (MCR)	13
1-6 Spectroscopie du plasma	15
1-6-1 Introduction	15
1-6-2 Mécanismes d'élargissement des profils de raies	16
1-6-3 Quelques méthodes de traitement des spectres d'émission	19

1-7 Conclusion	21
Références	22

Chapitre 02 : Processus atomiques élémentaire dans les plasmas

2-1 Introduction	23
2-2 Transitions radiatives	23
2-2-1 Emission spontanée et photoexcitation	24
2-2-2 Emission stimulée	25
2-2-3 Le coefficient de taux de transition radiative	27
2-3 Excitation et désexcitation collisionnelle	28
2-3-1 Le coefficient de taux d'excitation	28
2-4 L'ionisation par électron d'impact	29
2-4-1 L'ionisation collisionnelle et la recombinaison à trois-corps	29
2-5 La photoionisation et la recombinaison radiative	30
2-5-1 La photoionisation	31
2-5-2 La recombinaison radiative	31
2-6 La recombinaison diélectronique et autoionisation	31
2-6-1 Capture diélectronique	32
2-6-2 Stabilisation radiative	33
2-7 Simulation numérique et codes de calcul	34
2-7-1 Introduction	34
2-7-2 Code HULLAC	34
2-7-3 Code SCO	35
2-7-4 Code ATOM	36
2-7-5 Code TRANSPEC	36

2-7-6 Code COWAN	37
2-7-7 Code FAC	38
2-8 Conclusion	39
Références	40

Chapitre 03: Fondement théorique du calcul des sections efficaces

3-1 Introduction	42
3-2 Principes généraux sur la diffusion	43
3-3 L'excitations et l'ionisation collisionnelles par la théorie des perturbations	43
3-3-1 Les méthodes perturbatives	43
3-3-2 La formule de Born	45
3-3-3 La formule de Bethe	47
3-3-4 Quelques remarques sur les sections efficaces de Born	48
3-3-5 Quelques raffinements possibles	49
3-4 L'approximation des ondes déformées "Distorted Waves" (DW)	50
3-4-1 Développement en ondes partielles distordues	50
3-5 Les différentes méthodes d'évaluation des sections efficaces d'ionisation	52
3-5-1 Les méthodes classiques	52
3.5.2 Approximation de Coulomb-Born	53
3-5-3 Les équations semi empiriques	53
3-6 Calcul des sections efficaces d'ionisation pour les ions héliumoides	54
3-6-1 Introduction	54
3-6-2 Bases théoriques de calcul du code FAC	55
3-6-3 Résultats de calcul et discussion	58
3-7 Conclusion	63

Références	64
Chapitre 04 : Etude des taux d'ionisation : Application aux ions héliumoïdes	
4-1 Introduction	66
4-2 Eléments de théorie	67
4-2-1 Fonctions de distributions	67
4-2-2 Fonction de distribution Maxwellienne	68
4-2-3 Fonction de distribution Non-Maxwellienne	68
4-3 Calcul des données atomiques	70
4-3-1 Taux de transition radiative	70
4-3-2 Taux d'auto-ionisation pour un plasma d'hélium neutre	72
4-4 Calcul des coefficients de taux d'ionisation pour les ions héliumoïdes	74
4-4-1 Méthode de calcul en utilisant une distribution maxwellienne	76
4-4-2 Résultat et discussion	76
4-4-3 Méthode de calcul en utilisant une distribution non-maxwellienne	81
4-4-4 Résultat et discussion	81
4-5 Conclusion	90
Références	91
Conclusion générale et perspectives	93
Annexe A	95
Liste des publications et communications	104

Table des figures

Figure 1-1 : Représentation schématique des processus intervenant dans les modèles collisionnels radiatifs (cas optiquement mince).

Figure 1-2 : Raie spectrale «posée» sur le fond continu de rayonnement

Figure 3-1: sections efficaces de l'He neutre

Figure 3-2: sections efficaces de Li^+ .

Figure 3-3: sections efficaces d' Ar^{16+} .

Figure 3-4: sections efficaces de Fe^{24+} .

Figure 4-1 : Distribution Maxwellienne normalisée

Figure 4-2 : Coefficients du taux d'ionisation pour He (cas de la distribution Maxwellienne)

Figure 4-3 : Coefficients du taux d'ionisation pour Li^+ (cas de la distribution Maxwellienne)

Figure 4-4 : Coefficients du taux d'ionisation pour Ar^{16+} (cas de la distribution Maxwellienne)

Figure 4-5 : Coefficients du taux d'ionisation pour Fe^{24+} (cas de la distribution Maxwellienne)

Figure 4-6: Coefficients du taux d'ionisation pour l'hélium neutre (cas de la distribution

Non- Maxwellienne) pour $f_{hot} = 0,8, 0,9, 1,0$

Figure 4-7 : Coefficients du taux d'ionisation pour l'hélium neutre (cas de la distribution

Non- Maxwellienne) pour $f_{hot} = 0,01, 0,02, 0,04$

Figure 4-8 : Coefficients du taux d'ionisation pour Li^+ (cas de la distribution

Non- Maxwellienne) pour $f_{hot} = 0,01, 0,02, 0,04$

Figure 4-9 : Coefficients du taux d'ionisation pour Li^+ (cas de la distribution

Non- Maxwellienne) pour $f_{hot} = 0,7, 0,8, 0,9$

Figure 4-10 : Coefficients du taux d'ionisation pour Ar^{16+} (cas de la distribution

Non- Maxwellienne) pour $f_{hot} = 0,01, 0,02, 0,04$

Figure 4-11 : Coefficients du taux d'ionisation pour Ar^{16+} (cas de la distribution

Non- Maxwellienne) pour $f_{hot} = 0,6, 0,7, 0,8$

Figure 4-12 : Coefficients du taux d'ionisation pour le Fe^{24+} (cas de la distribution

Non- Maxwellienne) pour $f_{hot} = 0,01, 0,02, 0,04$

Liste des tableaux

Tableau 2.1: Règle de sélection des probabilités de transition radiatives pour les différents types [5].

Tableau 3-1: Sections efficaces d'ionisation de l'He.

Tableau 3-2: Sections efficaces d'ionisation de Li^+ .

Tableau 3-3: Sections efficaces d'ionisation d' Ar^{+16} .

Tableau 3-4: Sections efficaces d'ionisation de Fe^{+24} .

Tableau 4-1 : les taux de transition radiative pour quelques niveaux de transition pour l'He neutre.

Tableau 4-2 : les taux d'auto ionisation pour quelques niveaux de transition pour l'He neutre.

Tableau 4-3: Potentiel d'ionisation de quelques éléments. [3]

Tableau 4-4: Les écarts relatifs des taux d'ionisation pour He dans le cas de la distribution Maxwellienne

Tableau 4-5: Les écarts relatifs des taux d'ionisation pour Li^+ dans le cas de la distribution Maxwellienne

Tableau 4-6: Les écarts relatifs des taux d'ionisation pour Ar^{+16} dans le cas de la distribution Maxwellienne

Tableau 4-7: Les écarts relatifs des taux d'ionisation pour Fe^{24+} dans le cas de la distribution Maxwellienne

Tableau 4-8 : Les écarts relatifs des taux d'ionisation de l'He neutre dans le cas de la distribution non- Maxwellienne pour $f_{hot} = 0.8, 0.9, 1.0$

Tableau 4-9 : Les écarts relatifs des taux d'ionisation de l'He neutre dans le cas de la distribution non- Maxwellienne pour $f_{hot} = 0.01, 0.02, 0.04$

Tableau 4-10 : Les écarts relatifs des taux d'ionisation de Li^{+1} dans le cas de la distribution Non-Maxwellienne pour $f_{hot} = 0.01, 0.02, 0.04$

Tableau 4-11 : Les écarts relatifs des taux d'ionisation de Li^{+1} dans le cas de la distribution Non-Maxwellienne pour $f_{hot} = 0.7, 0.8, 0.9$

Tableau 4-12: Les écarts relatifs des taux d'ionisation de Ar^{+16} dans le cas de la distribution Non-Maxwellienne pour $f_{hot} = 0.01, 0.02, 0.04$

Tableau 4-13 : Les écarts relatifs des taux d'ionisation de Ar^{+16} dans le cas de la distribution Non-Maxwellienne pour $f_{hot} = 0.6, 0.7, 0.8$

Tableau 4-14: Les écarts relatifs des taux d'ionisation de Fe^{+24} dans le cas de la distribution Non-Maxwellienne pour $f_{hot} = 0.01, 0.02, 0.04$

Introduction générale

Lorsqu'un gaz est soumis à un champ électrique de forte intensité ou chauffé très fortement, les électrons sont séparés des atomes du gaz. Le milieu obtenu est globalement neutre mais constitué de particules chargées, ions et électrons. Ce fluide est un plasma, considéré comme le quatrième état de la matière. Par ailleurs, on peut extraire des électrons ou des ions de certains métaux en les soumettant à une très grande différence de potentiel électrique. On obtient dans ce cas un plasma non neutre ou faisceau de particules chargées.

Le plasma se manifeste à l'état naturel dans les étoiles ou les aurores boréales, mais il a également de nombreuses et diverses applications industrielles : les tubes à néon, les écrans plasma, les satellites de communication, la production de rayons X ou d'énergie, etc...

Les températures requises pour obtenir certains plasmas rendent leur étude expérimentale coûteuse et peu accessible. Leurs applications sont pourtant d'un très grand intérêt, c'est pourquoi leur étude théorique et leur simulation numérique ont été largement développées. D'importants moyens sont notamment mis en œuvre pour la production d'énergie par réaction de fusion dans le réacteur ITER [1,2].

Depuis le procédé «plasma» au début du siècle, les techniques plasmas ont connu une évolution contrastée. Pour un temps, elles furent partiellement abandonnées pour des raisons économiques. Ce n'est que dans les années soixante, que la mise au point de nouveaux générateurs autorisa une reprise de leurs utilisations (découpage par plasma, soudure, projection, synthèse chimique et traitement de surface, etc...). Aujourd'hui, le nombre d'applications est important et va croissant, comme en témoigne l'augmentation spectaculaire des équipements de production utilisant les plasmas. Comme les flammes, les plasmas possèdent une enthalpie très élevée pouvant être utilisée pour le chauffage ou pour des réactions chimiques. En revanche, ils peuvent fonctionner sans oxygène puisque leur énergie n'est pas chimique mais électrique.

Si l'électricité utilisée est produite de manière écologique, les procédés peuvent être parfaitement propres [3]. Les plasmas peuvent donc remplir certains des rôles attribués aux flammes, sans les conséquences négatives sur l'environnement. Ils présentent par ailleurs d'autres avantages spécifiques par rapport aux flammes : pas de limites en température, des densités d'énergie très élevées, des réactions spécifiques et des cinétiques plus rapides.

Pour la première fois, grâce à leurs caractéristiques instrumentales (sensibilité, résolutions angulaire et spectrale) des images et des spectres de qualité sans précédent sont obtenus dans le domaine des rayons X pour les objets extragalactiques comme les Noyaux Actifs de Galaxies (NAG) [4]. Notamment une étude spectroscopique fine est dorénavant possible ce qui permet d'appliquer de puissants diagnostics de plasmas comme notamment ceux basés sur les raies des ions héliumoïdes qui donnent une estimation précise de la densité électronique, de la température électronique, ainsi que la mise en évidence des processus d'ionisation (photoionisation et/ou ionisation collisionnelle) qui dominant dans les plasmas chauds.

Les intensités relatives des raies X émises par les ions très chargées comme les ions héliumoïdes (He-like) de numéro atomique Z assez élevé sont fréquemment utilisées dans le diagnostic des plasmas à la fois collisionnellement ionisés et photoionisés, soit en astrophysique ou produits dans le laboratoire [5, 6, 7].

La physique des plasmas s'est alors développée en intégrant toutes les avancées de la physique moderne. C'est une science complexe, prenant ses racines dans de nombreux concepts utilisés pour décrire les solides, les liquides ou les gaz, mais faisant appel à pratiquement tous les domaines de la physique (magnétodynamique, théorie des collisions, physique atomique et moléculaire, physique nucléaire, théorie cinétique, thermodynamique, propagation des ondes, rayonnement, spectroscopie..), le tout aboutissant en général à des équations non linéaires couplées, ardues à résoudre même avec les techniques numériques d'aujourd'hui. Ces dernières années plusieurs modèles numériques ont été proposés afin de mieux décrire les décharges [8, 9].

La physique atomique montre 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.

Les effets thermiques sont d'importance dans un nombre de systèmes, et il n'est pas toujours facile de prévoir la distribution de température par des mesures expérimentales. Lacune que la simulation numérique comble bien souvent. Et si les effets multi- physiques sont pris en compte, la simulation devient un outil efficace de prédiction et d'optimisation.

La compréhension du rôle d'électrons chauds dans les plasmas est particulièrement importante à cause de leur influence sur la dynamique de plasma, la production de rayonnement et les bilans énergétiques. Un majeur conducteur historique dans l'étude des plasmas avec les électrons chauds est la question de réchauffements dans le laser motorisé aux schémas de fusion par confinement inertiels. Des lasers intenses interagissant avec des cibles denses peuvent déposer l'énergie significative dans des électrons chauds à travers l'absorption résonante [10,11], de tels électrons peuvent mener aux pertes d'énergie significatives et avoir des effets délétères sur la stabilité et le contrôle de plasma [12]. Dans d'autre cas, les effets d'électrons chauds sont désirables, par exemple quand ils augmentent la production de rayonnement de haute énergie des sources plasma relativement à basses énergies [13, 14, 15, 16]. Si les électrons chauds sont avantageux ou nuisibles, les détectant et les caractérisant dans des plasmas de laboratoire est une étape importante vers le contrôle de leurs effets.

Dans ce travail on s'intéresse au calcul des taux d'ionisation de l'hélium neutre et d'autres ions héliumoïdes dans un plasma. Plusieurs auteurs et dans plusieurs types de plasmas [15, 17-23] ont utilisé des distributions non-maxwelliennes en énergie des électrons chauds pour simuler les spectres de raies. Notre objectif à travers ce travail s'attache à l'étude des effets des électrons chauds sur les taux d'ionisation d'un plasma d'hélium neutre et les ions héliumoïdes étudiés.

Le travail développé dans cette thèse a été réparti selon le plan suivant :

Le Chapitre 1 traite des généralités sur les plasmas où nous abordons les différents types de plasmas ainsi que les méthodes approximatives pour interpréter correctement le rayonnement émergent d'un plasma et en déduire ses propriétés physiques. Les modèles d'équilibre fréquemment utilisés pour la modélisation des plasmas sont abordés. Nous exposons également les mécanismes d'élargissement des profils de raies ainsi que les différentes méthodes de traitement des spectres.

Dans le Chapitre 2, nous rappelons les différents processus atomiques intervenant dans les plasmas chauds. Dans la première partie de ce chapitre, nous exposons les processus atomiques se produisant dans les plasmas, parmi lesquels on peut citer l'excitation et la désexcitation collisionnelle, la transition radiative spontanée, l'ionisation par impact électronique, la photoionisation, l'autoionisation et la recombinaison diélectronique. Nous abordons aussi l'importance des codes de calcul pour le traitement des données atomiques. Plusieurs codes de calcul sont décrits.

Le Chapitre 3 est consacré au fondement théorique du calcul des sections efficaces. Nous présentons les différentes méthodes théoriques pour le calcul des sections efficaces ainsi que les approximations effectuées pour rendre les résultats plus précis. Une attention particulière a été donnée au calcul des sections efficaces d'ionisation de quelques ions héliumoïde basé sur le code de calcul FAC dont nous exposons ces bases théoriques ainsi que ces méthodes de calcul.

Nous reportons dans le Chapitre 4 nos résultats numériques. Nous présentons tout d'abord, les éléments de théorie incluant dans le calcul des coefficients de taux d'ionisation pour l'Hélium neutre et les ions héliumoïdes étudiés (Li^+ , Ar^{+16} , Fe^{+24}). Les fonctions de distributions Maxwellienne et Non-Maxwellienne sont exposés. Nous établissons notamment les expressions des coefficients de taux de transitions radiatives et d'autoionisation pour un plasma d'hélium neutre. La seconde partie est consacrée au calcul des taux d'ionisation de l'hélium neutre et les ions héliumoïdes (Li^+ , Ar^{+16} , Fe^{+24}) à partir des sections efficaces calculés par le code FAC pour des distributions d'électrons aussi bien Maxwellienne que Non-Maxwellienne. Les résultats obtenus sont comparés avec la littérature.

Enfin, une conclusion générale et les perspectives d'avenir sont présentées aussi.

Références

- [1] C.K. Birdsall and A.B. Langdon. *Plasma Physics via Computer Simulation*. Institute of Physics (IOP), Series in Plasma Physics, (1991).
- [2] Francis Filbet. *Contribution à l'analyse et la simulation numérique de l'équation de Vlasov*. PhD thesis, Université Henri Poincaré - Nancy I, (2001).
- [3] J. Rentsch, J. Jaus, K. Roth and R. Preu, "Economical and ecological aspects of plasma processing for industrial solar cell fabrication", 31th IEEE Photovoltaic Specialists Conference pp, 931- 934, (2005).
- [4] D. Porquet, J. Dubau and N. Grosso, *He-like ions as practical astrophysical plasma diagnostics: from stellar coronae to active galactic nuclei*, Space. Sci. Rev., **157**, 103 (2010).
- [5] C. Jordan, *The ionization equilibrium of element between C and Ni*, Mon. Not. R. Astron. Soc., **142**, 501 (1969).
- [6] A.H. Gabriel and C. Jordan, *Interpretation of solare Helium-like ion line intensities*, Mon. Not.R. Astron. Soc., **145**, 241 (1969).
- [7] A.H. Gabriel and C. Jordan, *Interpretation of spectral intensities from laboratory and astrophysical plasmas*, "Case studies in atomic collision physics", McDaniel, McDowell (eds.), vol.2, (1972).
- [8] J. P. Boeuf and L. C. Pitchford, "Two-dimensional model of a capacitively coupled rf discharge and comparisons with experiments in the Gaseous Electronics Conference reference reactor", Phys. Rev. E51, 1376,(1995).
- [9] M. Davoudabadi , J. S. Shrimpton , F. Mashayek, " On accuracy and performance of highorder finite volume methods in local mean energy model of non-thermal plasmas", Journal of Computational Physics, v.228 n.7, p.2468-2479, April, (2009)
- [10] W. L. Kruer, *The Physics of Laser Plasma Interactions* (Addison Wesley, 1988).
- [11] A. B. Langdon, Phys. Rev. Lett. **44**, 575 (1980).
- [12] R. W. Harvey, V. S. Chan, S. C. Chiu, T. E. Evans, M. N. Rosenbluth, and D. G. Whyte, Phys. of Plasmas **7**, 4590 (2000).
- [13] P. Choi, C. Deeney, and C.S. Wong, Physics Letters A **128**, 80 (1988).
- [14] J. Abdallah, Jr., A.Ya. Faenov, D. Hammer, S.A. Pikuz, G. Csanak, and R.E.H. Clark, Phys. Scr. **53**, 705 (1996).
- [15] S. B. Hansen and A. S. Shlyaptseva, Physical Review E **70**, 36402 (2004)
- [16] A.S. Shlyaptseva, S.B. Hansen, V.L. Kantsyrev, D.A. Fedin, N. Quart, K.B. Fournier, and U.I. Safronova, Phys. Rev. E **67**, 026409 (2003).
- [17] A. Escarguel, F. B. Rosmej, C. Brault, Th. Pierre, R. Stamm and K. Quotb, Plasma Phys. Control. Fusion **49** (2007) 85–93
- [18] R. Bartiromo, F. Bombarda, and R. Giannella, Phys. Rev. A **32** (1985) 531.
- [19] M. Bitter, M. F. Gu, L. A. Vainshtein, P. Beiersdorfer, G. Bertschinger, O. Marchuk, R. Bell, B. LeBlanc, K. W. Hill, D. Johnson and L. Roquemore , Phys. Rev. Lett. **91** (2003) 265001.
- [20] Y. Sentoku, K. Mima, P. Kaw, and K. Nishikawa, Phys. Rev. Lett. **90** (2003) 155001.
- [21] A. G. Zhidkov, A. Sasaki, T. Tajima, T. Augustine, P. D'Olivera, S. Hulin, P. Monot, A. Ya. Faenov, T. A. Pikuz, and I. Yu. Skobelev, Phys. Rev. E **60** (1999) 3273.
- [22] A.S. Shlyaptseva, V.L. Kantsyrev, N. D. Quart, D. A. Fedin, P. Neill, C. Harris, S. M. Hamasha, S.B. Hansen, U. I. Safronova, P. Beiersdorfer and A.G. Petrashen, Proceedings of the 4th US-Japan workshop on polarization spectroscopy, Kyoto, Japan,, February 4-6, (2006).
- [23] T. Kato, T. Fujiwara, and Y. Hanaoka, Astrophys. J. **492** (1998) 822.

Chapitre 01 :

Généralités sur les plasmas et les structures atomiques

1 -1 Introduction

Souvent considérés comme le "quatrième état de la matière", les plasmas composent plus de 99% de la matière connue. Dans la terminologie actuelle, ce terme désigne de manière générale tout gaz électriquement neutre partiellement ou totalement ionisé et recouvre un grand nombre de sous types aux caractéristiques très différentes.

1-2 Définitions

Un gaz ionisé est un gaz ayant été soumis à une énergie suffisante pour dissocier les électrons des atomes. On parle alors de phénomène d'ionisation et on définit le degré d'ionisation α du gaz par :

$$\alpha = \frac{n_e}{n_{tot}} \quad (1-1)$$

où n_e est le nombre d'électrons et n_{tot} est le nombre total de molécules – chargées ou non – constituant le gaz. Lorsque $\alpha = 1$, le gaz est totalement ionisé et lorsque $\alpha \ll 1$, on dit que le gaz est faiblement ionisé. Un gaz ionisé est donc un mélange composé de molécules neutres, d'ions positifs et négatifs ainsi que d'électrons et présente un comportement collectif différent d'un gaz neutre. En effet, ce mélange est sensible aux forces électromagnétiques et les particules chargées peuvent être influencées par une source externe ou interagir les unes avec les autres. Dans un gaz suffisamment ionisé, ces interactions entre particules deviennent suffisamment importantes pour influencer sur le comportement de l'ensemble et on parle alors de plasma.

1-3 Classification des plasmas

Les plasmas peuvent se présenter sous des formes très différentes et sont généralement classifiés selon deux critères. Un premier critère est l'équilibre thermodynamique du mélange et la température des différentes particules qui le composent. Un second critère est le degré d'ionisation du gaz, pouvant varier de $\alpha < 1$ à $\alpha \approx 1$. On classe alors les plasmas selon les catégories suivantes :

– **Les plasmas fortement ionisés** : les espèces ont une température identique dont la valeur atteint quelques millions de degrés. Le plasma est alors totalement ionisé. Ces plasmas se retrouvent par exemple au cœur des étoiles, où se produisent des réactions de fusion nucléaire.

– **Les plasmas faiblement ionisés**, parmi lesquels on distingue deux sous-groupes :

**Les plasmas thermiques* : les électrons et les ions sont à l'équilibre thermodynamique contrairement aux neutres qui ne le sont pas forcément. En général, les neutres ont une température de quelques milliers de degrés tandis que les particules chargées ont une température de quelques dizaines de milliers de degrés. Ces plasmas se retrouvent par exemple dans les arcs électriques utilisés pour la soudure ou la découpe.

**Les plasmas froids* : le mélange est en fort déséquilibre. Les électrons ont une température élevée tandis que les ions et les neutres sont à l'équilibre. Ce type de plasma permet d'obtenir un milieu doté de propriétés chimiques avantageuses tout en gardant la caractéristique thermodynamique raisonnable et dispose ainsi de nombreuses applications. Les plasmas dans les luminaires, de dépollution ou de décontamination, ainsi que les plasmas interstellaires entrent dans cette classe.

1-4 Processus réactionnels

De par leur sensibilité aux forces électromagnétiques, les particules chargées d'un plasma sont très mobiles et les collisions avec les particules avoisinantes sont fréquentes. Ces collisions peuvent être de deux types : élastiques ou inélastiques. Dans le cas d'une collision élastique entre deux particules, il y a échange de quantité de mouvement et d'énergie cinétique, mais l'énergie totale est conservée. Les particules ne changent pas de structure interne et sont simplement déviées. À l'inverse, un choc inélastique produit un changement de la structure interne des particules et amène potentiellement à leur création ou à leur destruction. Le plasma est donc le siège d'incessants

processus réactionnels, qui mettent en jeu photons, électrons, ions, atomes et molécules. À ceux-ci s'ajoutent divers mécanismes de production d'espèces chargées à partir de surfaces.

1-4-1 Les processus radiatifs

Les processus radiatifs regroupent l'ensemble des mécanismes d'absorption ou d'émission de photons. Lorsqu'une particule absorbe un photon, un électron de son nuage électronique peut passer sur une couche supérieure, voire se détacher de la particule, et celle-ci se retrouve alors dans un état excité ou ionisé. À l'inverse, l'émission de photons peut avoir lieu lors de la désexcitation d'une particule.

1-4-2 Les processus électroniques

Les processus électroniques résultent d'une collision entre un électron et un atome ou une molécule. Ceux-ci peuvent être très nombreux selon le gaz considéré. Dans le cas de l'air, les réactions électroniques dominantes sont les suivantes :

- ***Ionisation par choc*** : il s'agit du principal mécanisme de production d'électrons. L'énergie fournie par la collision d'un électron avec une molécule neutre est suffisante pour arracher un électron de son nuage électronique. La molécule neutre est alors ionisée et un électron supplémentaire est créé.
- ***Excitation des molécules neutres*** : lorsque l'énergie transférée par le choc n'est pas suffisante pour arracher un électron, elle peut néanmoins permettre à un électron du nuage électronique de passer sur une couche supérieure. La particule se retrouve alors excitée et peut devenir un métastable.
- ***Attachement électronique*** : dans certains gaz, comme le dioxygène, les électrons ont tendance à s'attacher aux molécules neutres. Ces gaz, dits électronégatifs, ont donc la particularité de permettre l'apparition d'ions négatifs.
- ***Recombinaison*** : cette réaction se produit lors de la collision entre un électron et un ion positif. L'ion regagne alors un électron et produit une molécule neutre.
- ***Détachement électronique*** : une molécule excitée entre en collision avec un ion négatif et lui transmet son surplus d'énergie, permettant à un électron de s'en détacher.

1-4-3 Les processus moléculaires

Ces processus regroupent entre autres l'ionisation ou l'excitation de molécules ou atomes suite à un choc inélastique ou à l'absorption d'un photon, ainsi que la réassociation d'atomes pour former une molécule ou inversement la dissociation d'une molécule pour former plusieurs atomes ou molécules.

1-5 Modèle d'équilibre dans les plasmas

Dans un plasma, plusieurs processus atomiques entrent généralement en jeu, parmi lesquels il y a l'ionisation collisionnelle, la recombinaison radiative, la recombinaison diélectronique, l'excitation ou la désexcitation collisionnelle, l'excitation ou la désexcitation radiative et la photoionisation.

Pour interpréter correctement le rayonnement émergent d'un plasma et en déduire ses propriétés physiques, il y a lieu de suggérer des modèles dépendant de plusieurs paramètres, en particulier la densité n_e et la température T_e des électrons.

Ces modèles approximatifs se présentent dans le modèle d'équilibre thermodynamique complet (ETC), modèle d'équilibre thermodynamique local (ETL), le modèle coronal (CM) et le modèle collisionnel-radiatif (CR).

1-5-1 Modèle d'équilibre thermodynamique complet (ETC)

Un plasma est constitué d'un grand nombre de particules, matérielles ou non (les photons). Ces particules possèdent une certaine énergie cinétique et potentielle, elles bougent dans l'espace, et entrent en collision avec les particules voisines. S'il n'existe aucun échange de matière ni d'énergie avec le milieu extérieur, un état d'équilibre peut être atteint, dans lequel chaque processus est contrebalancé par le processus inverse. Un état de micro-réversibilité est alors atteint : tout mécanisme qui tend à faire perdre de l'énergie à une particule est instantanément compensé par le mécanisme inverse qui tend à lui faire gagner cette même énergie. On parle alors d'équilibre thermodynamique complet (ETC), où toutes les particules du plasma ont la même énergie moyenne, et où tous les processus collisionnels et radiatifs sont micro réversibles.

1-5-2 Lois vérifiées par un plasma à l'ETC

- **Loi de distribution de Maxwell**

Un plasma à l'ETC est isotrope : les particules ne privilégient aucune direction de propagation. Les normes de vecteurs vitesses de ces particules sont donc distribuées autour d'une valeur moyenne nulle ; cette distribution stationnaire est décrite par la loi de Maxwell : le nombre dn de particules d'une espèce donnée dont la vitesse est comprise entre v et $v + dv$ dans un plasma de température T vérifie la relation suivante :

$$\frac{dn}{n} = \left(\frac{m}{2\pi k_{\beta} T} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{mv^2}{2k_{\beta} T} \right] 4\pi v^2 dv \quad (1-2)$$

m est la masse de la particule et n le nombre total de particules.

- **Distribution de Boltzmann**

Dans un plasma à l'ETC, la population des niveaux (des états) d'énergie des atomes (ou des ions) est donnée par la distribution de Boltzmann [1, 2]:

$$\frac{N_n}{N_m} = \frac{g_n}{g_m} \exp \left[-\frac{E_n - E_m}{k_{\beta} T} \right] \quad (1-3)$$

Où N_n et N_m représentent les densités des atomes (ou des ions) correspondant respectivement aux niveaux d'énergie n et m , g_n et g_m sont les dégénérescences et E_n et E_m les énergies des niveaux n et m . T est la température du système. Cette température s'appelle aussi la température d'excitation[3] et si l'excitation des atomes (ou des ions) dans ce système est principalement réalisée par l'impact d'électrons, elle est égale à la température des électrons T_e .

On peut aussi déterminer la population d'un niveau d'énergie n des atomes (ou des ions) N_n par rapport à la densité totale des atomes (ou des ions) N dans le plasma [1,2]:

$$\frac{N_n}{N} = \frac{g_n}{Z(T)} \exp \left[-\frac{E_n}{k_{\beta} T} \right] \quad (1-4)$$

$Z(T)$ représente la fonction de partition:

$$Z(T) = \sum_k g_k \exp \left[-\frac{E_k}{k_{\beta} T} \right] \quad (1-5)$$

où la sommation se réalise sur tous les niveaux d'énergie d'atome (ou d'ion).

- **Equation de Saha**

Dans un plasma en équilibre thermodynamique, la relation entre les densités des électrons, des atomes et des ions (une fois ionisés) peut être décrite par l'équation de Saha[1, 2]:

$$\frac{N_e N_i}{N_a} = 2 \frac{Z_i}{Z_a} \left(\frac{2\pi m_e k_\beta T}{h^2} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{E_{ion}}{k_\beta T} \right] \quad (1-6)$$

où N_e , N_a et N_i représentent respectivement la densité des électrons, des atomes et des ions, Z_a et Z_i sont respectivement la fonction de partition des atomes et des ions, E_{ion} l'énergie d'ionisation d'atome depuis le niveau de base et T la température du système. Cette température s'appelle aussi la température d'ionisation[3]. Si l'ionisation des atomes dans ce système se réalise principalement par l'impact d'électron, la température d'ionisation est égale à la température des électrons T_e .

L'équation de Saha peut être aussi utilisée pour les ions plusieurs fois ionisés. Dans ce cas, elle donne la relation entre la densité des électrons et la densité des espèces lourdes du plasma ayant des niveaux d'ionisation successifs [1, 2]:

$$\frac{N_e N_{(r+1)}}{N_{(r)}} = 2 \frac{Z_{(r+1)}}{Z_{(r)}} \left(\frac{2\pi m_e k_\beta T}{h^2} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{E_{ion}^{(r)}}{k_\beta T} \right] \quad (1-7)$$

où r indique le niveau d'ionisation d'une espèce (par exemple : $r = 0$ - atome (non-ionisé), $r = 1$ - ion une fois ionisé, $r = 2$ - ion deux fois ionisé,...).

- **Loi de Planck**

Lorsque le flux radiatif absorbé par un élément de volume du plasma est égal au flux émis par ce même élément de volume, l'équilibre thermodynamique est atteint. Le milieu est alors un corps noir s'il absorbe tous les rayonnements à toutes les longueurs d'onde. Toutes les radiations contribuent à son équilibre thermique.

La fonction de Planck $L_\lambda^0(T)$, décrit la luminance spectrale d'un corps noir à la température T :

$$L_\lambda^0(T) = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \left[\exp \left(\frac{hc}{\lambda k_\beta T} \right) - 1 \right]^{-1} \quad (1-8)$$

où h est la constante de planck, λ la longueur d'onde et k_B est la constante de Boltzmann.

1-5-3 Modèle d'équilibre thermodynamique local (ETL)

Seuls les plasmas rencontrés en astrophysique, dans les étoiles notamment, peuvent être considérés à l'équilibre thermodynamique complet. Les échanges de matière et d'énergie avec le milieu environnant sont alors totalement négligeables devant les phénomènes internes à ces systèmes. Prenons par exemple le soleil : sur 10^{12} photons émis à l'intérieur du soleil, seul 1 ne sera pas réabsorbé et sortira du soleil pour aller dans l'espace. Les plasmas utilisés au laboratoire ne sont pas à l'ETC. Ils présentent des gradients de température et de concentration. Des phénomènes de transport de masse et d'énergie non réversibles ont lieu au sein de ces plasmas, et le rayonnement n'y est pas totalement réabsorbé. L'équilibre entre la matière et le rayonnement n'existe plus, c'est le champ électrique extérieur qui fournit l'énergie nécessaire au maintien du plasma. Dans les plasmas suffisamment denses pour favoriser les phénomènes de collisions ($N_e \geq 10^{21} m^{-3}$), en présence de champ électrique ou de forces extérieures modérés, la distribution des vitesses des électrons est presque toujours maxwellienne [4]. La distance moyenne parcourue par les électrons entre deux collisions est si faible que ne peuvent apparaître que de très petites perturbations dans la fonction de distribution dans le temps et l'espace. Localement, il y a alors micro-réversibilité des processus dus aux collisions, le plasma est dit à l'état d'équilibre thermodynamique local (ETL). Les populations de toutes les espèces et de leurs niveaux excités restent bien décrites par les lois de Maxwell, de Boltzmann, de Saha [5]. Par contre il n'y a pas micro-réversibilité des processus dus au rayonnement, ce qui implique que la loi de Planck n'est plus valable.

1-5-4 Modèle coronal (MC)

Ce modèle a été développé initialement lors de l'étude de la couronne solaire. Il est applicable à des plasmas stationnaires de densité faible et de température électronique élevée, comme les couronnes stellaires, les plasmas tokamak produits en laboratoire à des fins de fusion, les sources d'ions (Electron Beam Ion Trap) (EBIT). Dans les plasmas peu denses hauts températures, l'équilibre thermodynamique est loin d'être réalisé, et les phénomènes d'ionisation et d'excitation ne peuvent plus être écrits par les lois simples de Saha et de Boltzmann [6]. La désexcitation radiative de niveaux atomiques excités devient importante et il est alors nécessaire de faire une analyse de

tous les processus radiatifs et de collision. De telles études ont été pour la première fois entreprises par les astrophysiciens pour les plasmas stellaires. Ainsi, dans le cas des couronnes stellaires, où les densités d'électrons sont faibles ($10^7 \text{cm}^{-3} \leq n_e \leq 10^{12} \text{cm}^{-3}$), avec une température électronique élevée ($T_e \geq 10^6 \text{K}$), seuls certains processus atomiques restent prépondérants [7]. Le modèle coronal décrivant l'état stationnaire d'un tel plasma se résume aux processus suivants : excitation par collision, désexcitation radiative spontanée, ionisation par collision et/ou photoionisation, recombinaisons diélectronique et radiative [8].

1-5-5 Modèle collisionnel radiatif (MCR)

Le modèle collisionnel-radiatif (MCR) est un modèle intermédiaire entre les deux modèles ETL et MC déjà vus. On l'utilise lorsqu'on étudie des plasmas moyennement denses, pour de tels plasmas, la densité électronique se situe dans la gamme ($10^{12} \text{cm}^{-3} \leq n_e \leq 10^{22} \text{cm}^{-3}$). A ces densités, on ne peut plus négliger les processus d'excitation et de désexcitation collisionnelle entre les niveaux excités.

Il s'agit du modèle le plus général pour lequel le peuplement et le dépeuplement des niveaux sont assurés par tous les processus collisionnels et radiatifs importants. La figure 1-1 représente schématiquement ce modèle. Le système d'équations (1-9) est d'une grande complexité, compte tenu du nombre d'ions et de niveaux considérés.

$$\frac{dN_n^q}{dt} = - \sum_{m \neq n} N_n^q (R_{nm} + n_e C_{nm}) + \sum_{m \neq n} N_n^{q'} (R_{nm} + n_e C_{nm}) \quad (1-9)$$

Il va donc falloir trouver des simplifications, notamment pour le cas des éléments lourds, cas qui pose le plus de problèmes (le nombre de niveaux détaillés caractérisés par leur nombre quantique J est énorme : plusieurs millions) ; le calcul des taux de réaction des différents processus étant déjà un problème en soi pour les éléments légers.

On peut, tout d'abord, tenir compte des simplifications suivantes :

- On limite le nombre de niveaux.

Pour cela, on introduit le concept de *bande thermique* [9], qui traduit le fait que les niveaux les plus élevés sont d'énergie très proche du niveau fondamental de l'ion supérieur. Si cette différence d'énergie est plus petite que l'énergie thermique kT_e , les processus collisionnels sont hautement probables et s'équilibrent. On peut donc supposer ces niveaux à l'ETL, par rapport au niveau fondamental de l'ion supérieur.

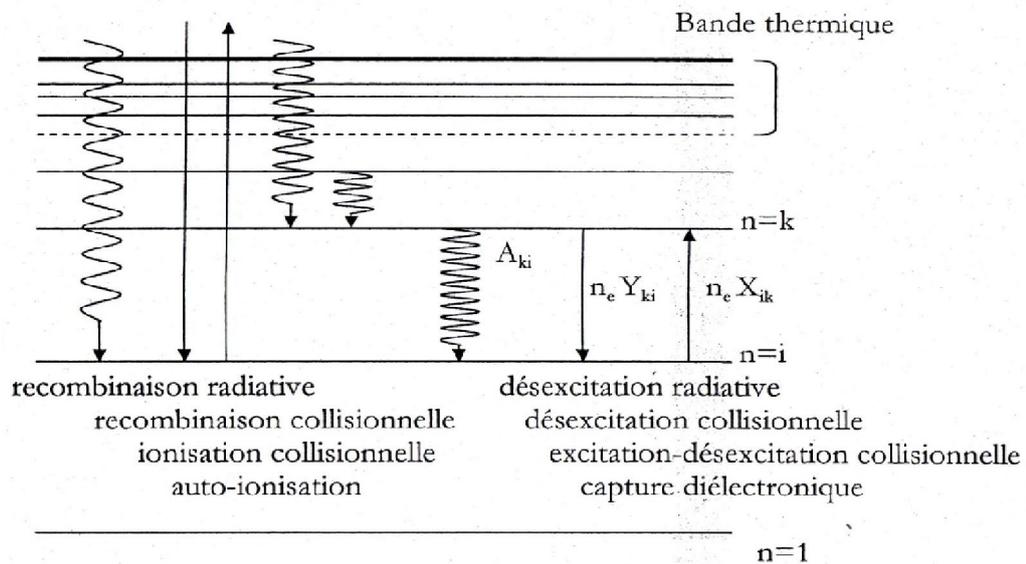


Fig.1-1: Représentation schématique des processus intervenant dans les modèles collisionnels radiatifs (cas optiquement mince)

- Dans le cas où l'expérience l'autorise, on peut supposer toutes les populations (des niveaux excités et fondamentaux) à l'équilibre stationnaire :

$$\frac{dN_n^q}{dt} = 0 \quad (1-10)$$

où N_n^q la population du niveau n de l'ion de charge q .

On peut formuler cette hypothèse si les populations varient lentement par rapport aux paramètres du plasma. Dans ces cas, le système d'équations se résume à :

$$- \sum_{m \neq n} N_n^q (R_{nm} + n_e C_{nm}) + \sum_{m \neq n} N_n^{q'} (R_{nm} + n_e C_{nm}) = 0 \quad (1-11)$$

Les termes R et C représentent les processus radiatifs et collisionnels. Le premier terme correspond aux mécanismes de dépeuplement du niveau (terme négatif) et le deuxième (positif) prend en compte tous les processus de peuplement du niveau à partir des autres niveaux notés m , de charge q' .

Il faut effectuer une inversion de matrice pour résoudre le système. Toutefois, en général, dans certaines zones du plasma, l'interaction laser-matière, est suffisamment rapide pour que les populations ioniques n'aient pas le temps d'atteindre l'équilibre stationnaire collisionnel-radiatif (retard à l'ionisation ou à la recombinaison).

On remarquera qu'à grande densité les processus collisionnels dominant et assurent la micro-réversibilité. Alors, l'équilibre collisionnel radiatif tend vers l'équilibre thermodynamique.

1-6 Spectroscopie du plasma

1-6-1 Introduction

La spectroscopie est fondamentalement une discipline expérimentale qui concerne l'étude de l'absorption, l'émission ou la diffusion de rayonnement électromagnétique par des atomes ou des molécules qui peuvent être en phase solide, liquide, gazeuse ou en milieu ionisé tel que le plasma. Par contre, la modélisation de ses phénomènes implique l'utilisation de la mécanique quantique qui est une discipline théorique concernant de nombreux aspects de la physique et de la chimie et en particulier la spectroscopie, notamment la spectroscopie des plasmas.

Le rayonnement émis par un atome ou un ion immergé dans un plasma dépend non seulement des propriétés de l'émetteur isolé, mais aussi de son environnement. Il est généralement caractérisé par un profil spectral qui donne la répartition de l'intensité autour de la fréquence centrale.

Le profil des raies spectrales est une représentation très pertinente de l'atome émetteur et de son environnement. La mesure de profils spectraux combinés avec une théorie adéquate représente de ce fait un moyen approprié de diagnostic des plasmas d'astrophysique ou de laboratoire.

La physique des plasmas à haute température constitue la base scientifique fondamentale de la fusion contrôlée. Pour ce type de plasma, il y'a aucun moyen direct pour obtenir des informations sur leurs propriétés physiques comme la densité et la température électronique, et il faut donc les déduire par des méthodes de diagnostic indirectes.

Les méthodes de profils de raies doivent s'affranchir des difficultés liées à la diversité et à la complexité des mécanismes d'élargissement, car un profil de raie spectrale est une fonction complexe des interactions émetteur-perturbateur, émetteur-champ extérieur, et de la structure interne de l'émetteur.

1-6-2 Mécanismes d'élargissement des profils de raies

Le spectre du rayonnement émis par un plasma peut être généralement séparé en deux composantes (figure 1-2). La première est nommée *fond continu* ou bien spectre continu, et correspond au rayonnement émis par les électrons lors des collisions avec les lourds ou lors des recombinaisons. La seconde est appelée *spectre de raie* ou encore *spectre discontinu*. Elle correspond aux photons qui sont émis par un atome, un ion ou une molécule lorsqu'ils se désexcitent. La longueur d'onde de ces raies est reliée à l'énergie de la transition. Une raie spectrale émise par un atome ou un ion est théoriquement infiniment mince, mais dans la réalité toute raie présente un certain élargissement. Il dépend des conditions physiques du milieu dans lequel se trouve la particule émettrice [10] et peut avoir plusieurs causes, mais sans aucune influence de l'état d'équilibre du plasma. Dans cette partie, nous allons nous intéresser aux différents mécanismes d'élargissement des raies spectrales.

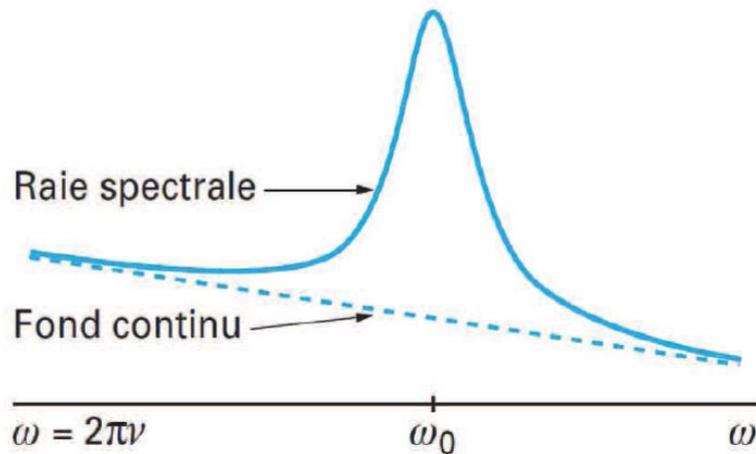


Figure 1-2 : Raie spectrale «posée» sur le fond continu de rayonnement

- **Élargissement naturel**

D'un point de vue classique, on peut considérer l'atome émetteur comme un oscillateur ayant une durée d'émission limitée. Le spectre de Fourier d'une onde de fréquence ν_0 ayant une durée de vie finie $\Delta\tau$ présente une largeur $\Delta\nu$ définie par l'équation :

$$\Delta\tau\Delta\nu \approx 1 \quad (1-12)$$

L'élargissement de la raie émise est inversement proportionnel à la durée de vie du niveau de l'émetteur : il suit un profil lorentzien. Cette largeur dite "naturelle" est très faible. Elle sera donc toujours négligeable vis à vis des élargissements mesurés expérimentalement.

- **Élargissement Doppler**

Lorsqu'une particule émettrice est animée d'une vitesse de composante V suivant la direction d'observation, l'émission de la particule est sujet à des variations de longueur d'onde λ . Si la raie émise est centrée sur la fréquence λ_0 , alors l'effet Doppler va décaler cette longueur d'onde :

$$\Delta\lambda = \lambda_0 \frac{V}{c} \quad (1-13)$$

avec $\Delta\lambda$ le glissement de la longueur de l'onde, c la vitesse de la lumière, λ_0 la longueur d'onde émise par l'atome au repos. Si la fonction de distribution des vitesses est maxwellienne, pour des atomes émetteurs de masse m à la température T , la vitesse moyenne est égale à :

$$u = \sqrt{\frac{3kT}{m}} \quad (1-14)$$

La superposition des raies émises par le plasma contenant un ensemble d'atomes avec des vecteurs vitesse orientés dans toutes les directions de l'espace avec des modules répartis selon une loi maxwellienne, conduit à un profil Doppler de type gaussien de mi-largeur $\Delta\lambda_D$ à $1/e$:

$$I(\lambda) = I(\lambda_0) \exp\left(-\frac{\lambda - \lambda_0}{\Delta w_D}\right) \quad (1-15)$$

Δw_D est relié à la mi-largeur à mi-hauteur $\Delta\lambda_D$ de la raie par l'équation suivante :

$$\Delta\lambda_D = \sqrt{\ln 2} \Delta w_D = \frac{\lambda_0}{c} \sqrt{\frac{2 kT \ln 2}{m}} \quad (1-16)$$

avec $\Delta\lambda_D$: Largeur caractéristique du profil de Doppler, k : constante de Boltzmann et T la température.

L'élargissement Doppler ne dépend pas de la densité électronique. Ce phénomène d'élargissement est prédominant pour les plasmas à haute température et faible densité électronique.

- **Élargissements collisionnels**

Les collisions de l'atome émetteur avec d'autres particules (atome, électron, ion) sont à l'origine de l'élargissement collisionnel des raies. Cet élargissement étant d'autant plus important que les densités sont élevées, il est souvent désigné sous le nom d'effet de pression. L'élargissement collisionnel entraîne généralement un élargissement proprement dit et un déplacement du centre de la raie.

On distingue trois types d'élargissements collisionnels :

- l'élargissement dû à la collision de l'atome excité avec les particules chargées (électrons, ions) ou élargissement Stark
- l'élargissement dû aux collisions de l'atome excité avec des atomes ou des molécules neutres sur l'état fondamental ou élargissement de Van Der Waals.
- l'élargissement dû aux collisions de l'atome excité avec des atomes ou des molécules neutres de même nature. L'atome émetteur accomplira une transition résonnante. On parle d'élargissement de résonance.

Ces phénomènes engendrent l'élargissement des raies spectrales selon un profil lorentzien. Dans les plasmas ionisés à plus de 1%, l'élargissement Stark devient prédominant. Par conséquent, nous allons expliciter plus en détails ce dernier phénomène.

Lorsqu'une particule, que l'on appellera perturbateur chargé positivement ou négativement, entre en collision avec une particule qui émet un rayonnement, le potentiel d'interaction entre les deux particules modifie l'hamiltonien de la particule émettrice et donc les niveaux d'énergie de départ et d'arrivée de la transition considérée [11]. De plus, les champs électriques produits par les perturbateurs (électrons, ions) fluctuent. Il en résulte que la raie d'émission sera élargie, l'élargissement étant lié à la densité des perturbateurs. En d'autres termes, à partir de la largeur de la raie d'émission, il sera possible d'estimer la densité des perturbateurs. Les champs électriques créés par les électrons et les ions sont différents à cause de la différence entre leurs vitesses. Les électrons sont des particules légères, donc rapides, pour lesquelles on peut admettre que la durée de la collision est très petite par rapport à la durée de l'émission du train d'onde ; c'est l'approximation dite des impacts ; le profil d'une raie élargie dans ces conditions est un profil de dispersion, ou profil de Lorentz.

Les ions, au contraire, sont des particules lourdes, peu rapides, et on admet dans les calculs que le champ électrique des ions auquel est soumis l'atome émetteur reste constant pendant toute la durée de l'émission ; c'est l'approximation quasi statique qui est diamétralement opposée à l'approximation des impacts ; on retombe dans le cas de l'effet Stark classique, dans lequel l'atome émetteur est soumis à un champ électrique constant. Pour les molécules autres que l'hydrogène la contribution des ions dans l'effet Stark est négligeable.

La largeur Stark des raies dépend peu de la température, mais varie linéairement avec la densité électronique. Ainsi, la densité électronique d'un plasma peut être déterminée à partir de la largeur Stark de la raie. Il est intéressant de noter que cette méthode de mesure de densité électronique est complètement indépendante de l'état thermodynamique du plasma.

1-6-3 Quelques méthodes de traitement des spectres d'émission

L'exploitation des spectres obtenus par spectroscopie optique d'émission, dans le but d'obtenir la température ou la densité électronique du plasma, peut être réalisée à partir de méthodes différentes. Nous allons présenter ici quelques unes des techniques les plus utilisées.

- **Méthode de Larentz-Fowler-Milne**

Le coefficient d'émission d'une raie spectrale ε_{ul} en fonction de la température dans le cas de l'ETL se met sous la forme suivante :

$$\varepsilon_{ul} = \frac{h\lambda_{ul}}{4\pi c} g_u A_{ul} \frac{N(T, P)}{U(T)} \exp\left[-\frac{E_u}{kT}\right] \quad (1-17)$$

avec $N(T, P)$ la densité de particules à la température T et à la pression P.

- **Graphe de Boltzmann**

Nous avons vu précédemment que, lorsqu'une population de particules était à l'équilibre thermodynamique, le peuplement de ses niveaux était soumis à la loi de Boltzmann. Pour un niveau quelconque m , on a :

$$n_m = g_m \frac{n(T)}{Z(T)} \exp\left[-\frac{E_m}{kT}\right] \quad (1-18)$$

On peut relier l'intensité d'une raie au peuplement des différents niveaux à l'aide du coefficient d'émission :

$$\varepsilon = \frac{h\nu}{4\pi} A_{ml} n_m \quad (1-19)$$

avec A_{ml} la probabilité de transition entre le niveau m et l , n_m le nombre d'atomes dans l'état m , h la constante de Planck et ν la fréquence de la raie.

Pour obtenir la température du plasma, il faut mesurer la population de plusieurs niveaux, puis déterminer graphiquement T à l'aide de la pente de la fonction :

$$\ln\left(\frac{n_m}{g_n}\right) = -\frac{E_m}{kT} + \ln\left[\frac{n(T)}{Z(T)}\right] \quad (1-20)$$

Bien entendu, comme la grandeur qui nous intéresse ici est la température, on pourra travailler en intensité relative et en négligeant les constantes :

$$\ln\left(\frac{\varepsilon_{relatif}\lambda}{A_{ml}g_n}\right) = -\frac{E_m}{kT} + B \quad (1-21)$$

Le tracé de cette dernière équation nous donne deux informations primordiales. L'allure du graphique permet de nous assurer que le peuplement des niveaux suit une loi de Boltzmann si l'on obtient une droite. Dans ce cas, le milieu est à l'ETL, on considère alors que $T_{excitation} = T_e = T_l$. La pente de cette droite nous donne accès à la température d'excitation.

- **Diagnostics par rapport aux intensités de raies**

Le rapport des coefficients d'émissions pour deux raies (1) et (2) d'un même atome est :

$$\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} = \frac{\nu_1 A_1 g_1}{\nu_2 A_2 g_2} \exp \left[-\frac{E_1 - E_2}{kT} \right] \quad (1-22)$$

avec g et E sont respectivement les poids statistiques et l'énergie par rapport au niveau fondamental de chacune des transitions. Cette technique de diagnostic est identique au graphe de Boltzmann. Elle est assez rapide à mettre en place et ne nécessite pas le calcul de la fonction de partition ou de la densité totale de l'espèce considérée. Cependant, comme elle correspond à un graphe de Boltzmann avec seulement deux points, cette méthode est assez peu précise.

Les méthodes présentées ici pour mesurer la température d'un plasma par spectroscopie ne sont pas exhaustives. Nous pouvons citer d'autres méthodes comme la mesure de température à partir du fond continu ou bien la méthode d'Olsen-Richte, les effets des électrons suprathériques sur les intensités et les fréquences Doppler des raies de plasmas [12], ainsi que le problème lié au transport de particules des impuretés et la distribution des états de charge des impuretés dans les plasmas [13,14].

1-7 Conclusion

Nous avons abordé dans ce chapitre les différents types de plasmas ainsi que les méthodes approximatives pour interpréter correctement le rayonnement émergent d'un plasma et en déduire ses propriétés physiques. Nous avons aussi exposé les mécanismes d'élargissement des profils de raies. Les différentes méthodes de traitements des spectres ont été énoncées.

Références

- [1] B. Milic, *Osnovefizikegasneplazme (Bases de la physique du plasma)*, Naucnaknjiga, Beograd, 1977 – en serbe.
- [2] H. R. Griem, *Principles of Plasma Spectroscopy*, Cambridge University Press, Cambridge, 1997.
- [3] A. Thorne, U. Litzen and S. Johansson, *Spectrophysics: Principles and Applications*, (Springer-Verlag, Berlin, 1999).
- [4] H.R.Griem, Validity of Local Thermal Equilibrium in Plasma Spectroscopy, *Phys. review A*, 131 (1963) 1170-1176.
- [5] T.Fujimoto et R.W.P. McWhirter, Validity criteria for local thermodynamic equilibrium in plasma spectroscopy, *Phys. review A*, 42 (1990) 6588-6601.
- [6] V. Nagels-Silver, *Thèse de doctorat*, (École polytechnique-France, 2004).
- [7] D. Salzman, *Atomic Physics in Hot Plasmas*, (Oxford University Press, New york 1998).
- [8] J.C. Raymond and N.C. Brickhouse, *Atomic Processes in Astrophysics*, *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.*, **237**, 321 (1996).
- [9] E Kononov. & K.Koshelev, *Sov. J. Quant. E1.*, **4**, 11 (1975)
- [10] J. Chapelle. L'arc électrique et ses applications : Etude physique de l'arc électrique – Tome 1. CNRS édition, (1984).
- [11] Maxime Ribiere. Spectroscopies d'émission et d'absorption appliquée à l'analyse de plasmas produits par impulsion laser. PhD thesis, Université de Rouen, Rouen, Novembre (2008).
- [12] P. Guio and J. Lilensten, *Annales Geophysicae*, **17** (1999) 903-912.
- [13] V. A. Shurygin, *Plas. Phys. Control Fusion*, 41 (1999) 355-375.
- [14] V. A. Shurygin, *Plasma Physics Reports*, **30** (2004) 443.

Chapitre 02 :

Processus Atomiques Élémentaires Dans Les Plasmas

2-1 Introduction

Lorsqu'une assemblée d'électrons et d'ions se trouve confinée dans un volume fini de l'espace, divers processus de collision peuvent se produire de par les interactions électron-électron, ion-ion et électron-ion. Le rayonnement total émergent d'un plasma astrophysique résulte de la superposition de tous les processus radiatifs dont l'importance relative dépend de la longueur d'onde, des températures et des densités des particules chargées, ainsi que le cas échéant du flux de rayonnement qui irradie le plasma [1]. Ce rayonnement émis du plasma représente une source unique d'information. Notamment, l'interprétation de l'intensité des raies émises permet de déterminer les conditions physiques régnant dans le plasma, telles que la température et la densité électronique, l'état d'ionisation, la composition chimique, etc.

Cette partie énumère donc les différents processus intervenant dans le bilan détaillé du peuplement/dépeuplement des niveaux. Si nous considérons un ion au sein d'un plasma, on peut supposer qu'il subira des interactions de nature diverse avec le milieu environnant. Ces mécanismes responsables du changement d'état de l'ion, auront une origine collisionnelle et/ou radiative. Parmi les processus importants d'émission de rayonnement par un plasma chaud ($T_e > 10^6$ K) on trouve l'excitation, l'ionisation et la recombinaison par suite des collisions électron-ion ou bien après photoionisation. Dans ce qui suit nous allons donner un aperçu sur ces processus et d'autres.

2-2 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 :

$$(Z, N)^* \Leftrightarrow (Z, N) + h\nu \quad (2-1)$$

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 [2, 3, 4]. Pour les ions hautement ionisés les effets relativistes doivent être inclus.

2-2-1 Emission spontanée et photoexcitation

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 basse E_i avec émission d'un photon d'énergie :

$$h\nu_{ji} = E_j - E_i \quad (2-2)$$

correspondant à une raie spectrale de nombre d'onde :

$$\sigma_{ji} = \frac{1}{\lambda_{ji}} = \frac{E_j - E_i}{hc} \quad (2-3)$$

L'émission spontanée est une émission incohérente : un ion se désexcite en émettant un photon d'énergie égale à celle de la transition. Ce processus est dominant pour des niveaux dont la différence d'énergie est grande. Le coefficient d'émission spontanée, noté A_{ji} , varie en Z^4 : on peut donc aisément déduire que les phénomènes radiatifs domineront pour les ions lourds. Le processus inverse, la photoexcitation, est un processus d'interaction avec le champ de rayonnement, ou encore un processus de réabsorption. Le taux correspondant à cette réaction est noté B_{ij} , il s'agit de la probabilité d'absorption donnée par Einstein qui s'écrit :

$$B_{ij} = \int \Psi_{ij}(\nu)u(\nu)d\nu \quad (2-4)$$

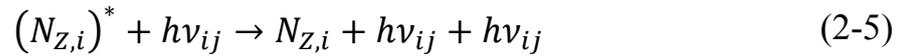
Où $\psi(\nu)$ est le profil de la raie d'absorption, $u(\nu)$ est la densité spectrale d'énergie du rayonnement. Dans les ions fortement chargés, plusieurs types de transitions radiatives peuvent intervenir.

La plus importante transition radiative est de type dipolaire électrique, communément appelée transition optiquement permise. Cependant, les transitions de type quadrupolaire électrique, dipolaire et quadrupolaire magnétique, appelées transitions optiquement interdites, peuvent dans certains cas jouer un rôle important. Les règles de sélection pour chacun de ces quatre types de

transition sont résumées dans le tableau 2-1. Les raies interdites émises des plasmas chauds peuvent être observées aussi intenses que les raies optiquement permises pourvu que le plasma émissif soit de faible densité [5].

2-2-2 Emission stimulée

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.



Cette émission, cohérente, est à la base de l'effet laser, elle est caractérisée par son taux de réaction B_{ji} , noté coefficient d'Einstein pour l'émission, dépend fortement du rayonnement présent. Les coefficients A_{ji} , B_{ij} , B_{ji} sont reliés par les relations d'Einstein :

$$B_{ji} = \frac{c^3}{8\pi h \nu_{ij}^3} A_{ji} \quad ; \quad g_j B_{ji} = g_i B_{ij} \quad (2-6)$$

où g_j et g_i sont respectivement les poids statistiques du niveau j et du niveau i .

De plus, afin de prendre en compte la réabsorption du rayonnement par le plasma de façon simplifiée, on introduit un facteur d'échappement auquel on attribue, une valeur entre 0 (plasma optiquement mince) et 1 (plasma optiquement épais), qui pondère le taux du processus radiatif. Il représente effectivement la fraction locale du rayonnement qui s'échappe et dépend entre autres de la population d'ions dans l'état fondamental.

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

$$\tau_j = \left(\sum_i A_{ji} \right)^{-1} \quad (2-7)$$

Type de la transition	Dipôle		Quadrupôle	
	Electrique (E1)	Magnétique (M1)	Electrique (E2)	Magnétique (M2)
Configuration τ	$\Delta\tau \neq 0$	$\Delta\tau = 0$	$\Delta\tau = 0$	$\Delta\tau \neq 0$
Parité π	changement de π	pas changement de π	pas de changement de π	changement de π
l	$\Delta l = \pm 1$	$\Delta l = 0$	$\Delta l = 0, \pm 2$	$\Delta l = \pm 1$
S	$\Delta S = 0$	$\Delta S = 0$	$\Delta S = 0$	$\Delta S = 0, \pm 1$
L	$\Delta L = 0, \pm 1$	$\Delta L = 0$	$\Delta L = 0, \pm 1, \pm 2$	Si $\Delta S = 0, \Delta L = 0, \pm 1, \pm 2$ Si $\Delta S = \pm 1, \Delta L = 0, \pm 1$ (0 ↔ 0)
J	$\Delta J = 0, \pm 1$ (0 ↔ 0)	$\Delta J = 0, \pm 1$ (0 ↔ 0)	$\Delta J = 0, \pm 1, \pm 2$ (0 ↔ 0, 0 ↔ 1) (1/2 ↔ 1/2)	$\Delta J = 0, \pm 1, \pm 2$ (0 ↔ 0, 0 ↔ 1) (1/2 ↔ 1/2)
M	$\Delta M = 0, \pm 1$	$\Delta M = 0, \pm 1$	$\Delta M = 0, \pm 1, \pm 2$	$\Delta M = 0, \pm 1, \pm 2$

n : nombre quantique principal ($n = 1$: couche K, $n = 2$: couche L, ...)

l : moment angulaire orbital ($0 \leq l \leq n - 1$; $l = 0$: électron s , $l = 1$: électron p)

s : spin

j : nombre quantique interne, moment cinétique.

Un niveau est représenté par la notation suivante : $2^{S+1}L_J$

où $\|l_1 - l_2\| \leq L \leq l_1 + l_2$

S : spin total

J : moment angulaire total, $\|L - S\| \leq J \leq L + S$

Remarque : $2^{S+1}L_J$ est appelé niveau.

Tableau 2-1: Règle de sélection des probabilités de transition radiatives pour les différents types [5].

2-2-3 Le coefficient de taux de transition radiative

La probabilité de transition d'une émission spontanée par unité de temps à partir d'un état excité $Y'J'M'$ à un état YJM d'énergie plus bas [3] est :

$$a = \frac{64\pi^4 e^2 \nu^3}{3c^3 h} |\langle \psi_0 | r | \psi_0' \rangle|^2 \quad (2-8)$$

$$a = \frac{64\pi^4 e^2 a_0^2 \sigma^3}{3h} \sum_q |\langle YJM | P_q^{(1)} | Y'J'M' \rangle|^2 \quad (2-9)$$

où :

$$P_q^{(1)} = \sum_{i=1}^N r_q^{(1)}(i) = \sum_{i=1}^N r_i C_q^{(1)}(i) \quad (2-10)$$

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 (2-9) 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 :

$$\langle YJM | P_q^{(1)} | Y'J'M' \rangle = (-1)^{J-M} \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix} \langle YJ | P^{(1)} | Y'J' \rangle \quad (2-11)$$

Une quantité qui mesure l'intensité de raie est la force de raie définie comme [6] :

$$S = |\langle YJ | P^{(1)} | Y'J' \rangle|^2 \quad (2-12)$$

La substitution de la relation (2-12) dans (2-9) donne une relation qui lie la probabilité de transition à la force de raie S :

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

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

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

et la probabilité de transition radiative en poids statistique est :

$$gA = \frac{64\pi^4 e^2 a_0^2 \sigma^3}{3h} S = 2,0261 \cdot 10^{-6} \sigma^3 S \quad (s^{-1}) \quad (2-15)$$

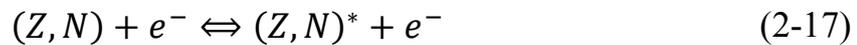
où σ est en cm^{-1} et S en unité de $e^2 a_0^2$.

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

$$I \propto \sigma^4 S \quad (2-16)$$

2-3 Excitation et désexcitation collisionnelle

Lors d'une collision d'un électron du plasma avec un ion de charge Z , ce dernier peut passer dans un état excité, ou encore se désexciter en absorbant l'énergie correspondante à l'électron incident. Ces deux processus, inverses l'un de l'autre se traduisent par le bilan :



Le calcul des sections efficaces de ces processus est complexe, néanmoins des valeurs approchées ont été calculées, sans la prise en compte des transitions interdites [7,8]. On peut néanmoins observer [9] que les taux augmentent avec la température et qu'ils sont d'autant plus grands que les niveaux excités sont proches les uns des autres. Il est donc légitime de déduire que le peuplement des hauts niveaux excités est étroitement lié aux processus collisionnels.

2-3-1 Le coefficient de taux d'excitation

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.

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 est donnée par [10]:

$$\sigma_{i \rightarrow j}^{exc} = \frac{1}{g_i} \left(\frac{\chi_H}{\varepsilon} \right) \Omega_{ij} \pi a_0^2 \quad (2-18)$$

où Ω_{ij} est la force de collision, ε : l'énergie de l'électron d'impact, a_0 : le rayon de Bohr et χ_H le potentiel d'ionisation.

Le coefficient de taux d'excitation par l'électron d'impact est donné par [10]:

$$C_{i \rightarrow j} = \frac{8 \cdot 10^{-8}}{\sqrt{T_e}} \frac{1}{g_i} \int_{\Delta E_{ij}/T_e}^{\infty} \Omega_{ij} e^{-\varepsilon/T_e} d\left(\frac{\varepsilon}{T_e}\right) \quad (2-19)$$

où

$$\Delta E_{ij} = E_i' - E_j' \quad (2-20)$$

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

$$C_{j \rightarrow i} = \frac{g_i}{g_j} C_{i \rightarrow j} e^{\Delta E_{ij}/T_e} \quad (2-21)$$

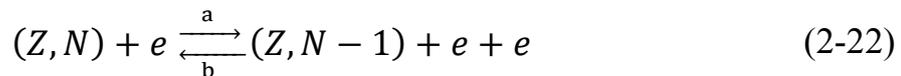
Des sections efficaces et des coefficients de taux d'excitation par l'électron d'impact sont calculés pour la séquence isoélectronique à partir de H- jusqu'aux néonoïdes (Ne-like). Pour ces données, il était plus commode, pour estimer les sections efficaces et les taux d'utiliser des équations analytiques simples [10, 13]. Récemment, Ralchenko et al. [14] présentent une comparaison des sections efficaces pour les processus de collision pour l'atome d'hélium.

2-4 L'ionisation par électron d'impact

L'ionisation et la recombinaison, qui sont des processus inverses l'un de l'autre, jouent un rôle fondamental dans les plasmas. La recombinaison d'un électron à un ion s'effectue le plus souvent sur un état excité, puis l'ion se désexcite par une cascade de transitions, jusqu'à atteindre l'état fondamental ou un état métastable proche du fondamental [15].

2-4-1 L'ionisation collisionnelle et la recombinaison à trois-corps

Au cours d'une collision entre un électron du plasma et un ion de charge Z , un électron lié de cet ion est porté dans le continuum (a).



Lors de la collision de deux électrons avec un ion de charge $Z+1$ (b), il peut y avoir capture de l'un des électrons. Il s'agit du processus de recombinaison collisionnelle. L'énergie ainsi récupérée est cédée à l'autre électron.

Le processus inverse de l'ionisation est appelé recombinaison à trois corps. Il implique une interaction d'un ion avec deux électrons libres dans laquelle il y a capture de l'un des deux électrons et diffusion simultanée du second. La recombinaison à trois-corps n'est importante que dans le cas de plasmas denses ($ne > 10^{19} \text{ cm}^{-3}$) [15]. Le processus d'ionisation peut être soit direct soit indirect (excitation-autoionisation).

- Ionisation directe

L'ion diffuse l'électron incident et un de ses électrons liés est arraché directement lors de l'interaction. Dans ce cas, il faut que l'énergie de l'électron incident soit supérieure à celle de liaison de l'électron arraché de l'ion. Si l'énergie cinétique de l'électron incident est suffisamment grande pour y avoir une extraction d'un électron appartenant à une couche interne de l'ion, cela aboutit à un ion $X^{(z+1)+}$ dans un état simplement ou doublement excité qui peut se désexciter radiativement [16].

- Ionisation indirecte

L'électron incident peut, s'il est suffisamment énergétique, exciter un électron appartenant à une sous-couche interne de l'ion cible X^{Z+} . Cela donne naissance à un niveau autoionisant de l'ion, qui peut être suivi par l'autoionisation. Dans cette deuxième voie d'ionisation, il faut que l'énergie de l'électron incident soit supérieure ou égale à la première énergie d'ionisation de l'ion [1, 15, 16,17]. Cette ionisation indirecte qui a été étudiée à partir du milieu des années 1960 joue un rôle capital dans la détermination de l'état d'ionisation d'un plasma chaud.

2-5 La photoionisation et la recombinaison radiative

La photoionisation et la recombinaison radiative appartiennent aux processus radiatifs de base caractérisant l'interaction du rayonnement électromagnétique avec des atomes ou des ions. L'émission radiative résultant des collisions électron-ion est responsable de l'apparition de traits spectraux intenses dans les régions des VUV et X, qui sont fréquemment utilisés pour la recherche sur les interactions fondamentales radiatives et collisionnelles et pour la détermination spectroscopique des propriétés de base du plasma, comme par exemple la température électronique, la densité électronique, la polarisation du rayonnement et la distribution des états de charge. Les

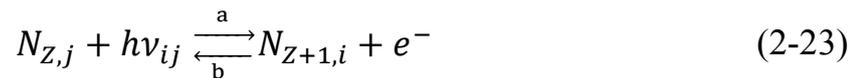
propriétés de photoionisation et de recombinaison radiative ont été considérées dans plusieurs articles et revues [5,16, 18, 19, 20].

2-5-1 La photoionisation

L'ionisation radiative est aussi appelée photoionisation, c'est le processus inverse de la recombinaison radiative. Elle se produit lorsqu'un rayonnement électromagnétique ionise un ion du plasma, elle n'est significative que pour des flux de photons très grands. Dans les plasmas de Z élevé, la photoionisation et son mécanisme inverse jouent un rôle crucial dans la zone de réémission, ils représentent l'un des processus privilégiés de la conduction du rayonnement X vers l'intérieur de la cible.

2-5-2 La recombinaison radiative

La recombinaison radiative permet la capture d'un électron libre par un ion de charge $Z+1$:



L'énergie ainsi libérée est émise sous la forme d'un photon (b). On notera que l'efficacité de la recombinaison radiative diminue avec la température et que son importance augmente avec Z [21, 22]. La recombinaison radiative se produit préférentiellement vers les niveaux peu excités de l'ion Z , et se propage sous forme de cascade radiative.

2-6 La recombinaison diélectronique et autoionisation

Ce mécanisme intervient pour expliquer l'existence des niveaux doublement excités (caractérisés par les raies satellites). Le processus de recombinaison diélectronique exige la réalisation de deux événements simultanés :

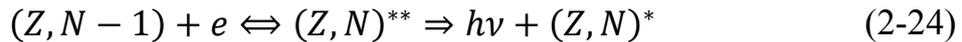
- 1- capture d'un électron libre dans un état excité de l'ion
- 2- excitation de l'électron initialement en couche K

Il s'agit d'un processus résonnant car l'électron ne peut être capturé en couche L que s'il a l'énergie correspondante.

Cet état doublement excité peut se désexciter de deux façons différentes. L'un des électrons tombe vers le niveau fondamental en transférant son énergie à l'autre électron qui est ainsi libéré par l'ion : c'est l'*effet Auger*. Mais, dans certaines conditions, il peut y avoir désexcitation radiative. Ce mécanisme est appelé stabilisation de la recombinaison radiative. Les raies caractéristiques de ce réarrangement sont les *satellites* de la raie issue de l'ion charge $Z+1$. De tous les processus décrits jusqu'alors, la recombinaison diélectronique est le mécanisme le plus difficile à modéliser car il fait intervenir des états doublement excités.

2-6-1 Capture diélectronique

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 :



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 :

$$\varepsilon_{im} = E_i - E_m \quad (2-25)$$

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 [3]:

$$\begin{aligned} B_{mj}^d &= \frac{h^3}{2(2\pi mkT)^{3/2}} \frac{g_j \Gamma_{jm}^a}{g_m} e^{-E_{jm}/KT} \\ &= \frac{4\pi^{3/2} a_0^3}{T^{3/2}} \frac{g_j \Gamma_{jm}^a}{g_m} e^{-E_{jm}/KT} \end{aligned} \quad (2-26)$$

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_i et g_m sont les poids statistiques des niveaux j et m . T est la température en Rydberg.

2-6-2 Stabilisation 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 :

$$B_{jk} = \frac{A_{jk}^r}{\sum_{m'} \Gamma_{jm'}^a + \sum_{k'} A_{jk'}^r} \quad (2-27)$$

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

$$\alpha_{mjk}^d(T) = B_{mk}^d(T) B_{jk} \quad (2-28)$$

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

$$\alpha_{jk}^d(T) = \frac{4\pi^{3/2} a_0^3 \Gamma_{jm}^a}{T^{3/2}} e^{-E_s/T} \frac{g_j}{G_m} \frac{\sum_m \Gamma_{jm}^a A_{jk}^r}{\sum_{m'} \Gamma_{jm'}^a + \sum_{k'} A_{jk'}^r} \quad (2-29)$$

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 :

$$\alpha^d(T) = \sum_j \sum_k \alpha_{jk}^d(T) \quad (2-30)$$

2-7 Simulation numérique et codes de calcul

2-7-1 Introduction

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 de 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. 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 [23].

2-7-2 Le code HULLAC

Le code HULLAC (Hebrew University Lawrence Livermore Atomic Code) [24] est bien approprié pour la description détaillée de spectre présentant des raies isolées ou des faisceaux de transition pour des plasmas d'éléments de numéro atomique faible ou modérés ($Z \leq 30$). Ce code est a priori également utilisable pour le calcul de raies isolées et de faisceaux de transition d'élément de Z élevé, mais l'approche détaillée est impraticable numériquement dans le cas de multiples sous-couches ouvertes, ou de sous-couches à moitié remplies de moment cinétique orbital $l > 1$, ce qui est très fréquent dans le cas d'élément de Z élevé [24].

Dans le code HULLAC on donne en entrée une liste de configurations. Celles-ci sont associées en groupes à l'intérieur desquels l'interaction de configuration (IC) est pleinement prise en compte. On choisit ensuite les processus à considérer, à savoir : calcul des énergies des niveaux, des taux radiatifs lié-lié, lié-libre, des taux d'autoionisation et optionnellement des taux collisionnels.

Les taux des processus inverses sont obtenus par le principe de micro-réversibilité ou de bilan détaillé. Par exemple le taux R_{ji} de recombinaison diélectronique de j vers i est relié au taux d'autoionisation D_{ij} de i vers j par :

$$g_j R_{ji} = 1.656 \times 10^{-22} g_i D_{ij} \frac{N_e [cm^{-3}]}{T_e^{1/2} [eV]} \exp\left(-\frac{E_{ij}}{KT}\right) \quad (2-31)$$

Où E_{ij} est l'écart d'énergie entre les niveaux i et j et g_k est la dégénérescence du niveau k .

Les populations des niveaux sont obtenues à partir de l'équation de Saha-Boltzmann, avec la fonction de partition incluant tous les niveaux discrets simplement et multiplement excités obtenus par le code.

2-7-3 Le code SCO

Le code SCO (Superconfiguration Code for Opacity) [25, 26] est fondé sur le formalisme des supraconfigurations [27], pour calculer les spectres d'absorption des plasmas à l'ETL.

Dans l'approximation des supraconfigurations (SC), il s'agit de regrouper les configurations électroniques afin de simplifier le traitement du calcul des spectres d'opacité.

Le code détermine à l'aide d'un calcul de l'atome moyen (AM) la liste des SC pertinentes. Le modèle de l'AM détermine, par un calcul auto-cohérent, la structure électronique moyenne du plasma, c'est-à-dire les énergies des orbitales, leurs fonctions d'onde associées, et leurs populations fractionnaires, correspondant à la configuration moyenne.

En particulier le modèle de l'AM fournit en premier lieu les énergies des états à un électron dont les couches proches en énergie sont regroupées en supracouches. Ce regroupement est effectué sous la condition que la dispersion en énergie des couches incluses doit être inférieure à k_{BT} . Les SC sont alors obtenues en regroupant les supracouches avec leur population électronique.

La quantité de base calculée par le code SCO est la section efficace de photoabsorption obtenue avec le traitement des transitions liées-liées et liées-libres des SC. Les transitions libres-libres ou Bremsstrahlung inverse sont calculées à partir de la formule classique proposée par Kramers ou via un calcul quantique utilisant les fonctions d'onde libres du potentiel de l'atome moyen.

Le choix du nombre de supracouches à inclure et donc la division des états atomiques en supracouches est répété de manière itérative jusqu'à l'obtention de la convergence du spectre. Cette convergence est atteinte lorsque les divisions successives en supracouches ne font plus varier le spectre. De cette manière la pertinence et la validité de l'approximation des SC sont vérifiées. Enfin les effets d'élargissement des niveaux sont traités avec un profil de Voigt pour les convolutions des mécanismes d'élargissements (Doppler, Stark, collisions électroniques, largeur naturelle).

La diminution de complexité des calculs avec le formalisme utilisé par SCO par rapport aux descriptions détaillées permet d'obtenir rapidement des prédictions théoriques pour les transmissions mesurables.

2-7- 4 Le code ATOM

Le programme ATOM [23] 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 : $n_1 \leq n_0 + 6$ ou n_0 est le niveau fondamental [23].

2.7-5 Le code TRANSPEC

TRANSPEC [28-29] est un modèle collisionnel-radiatif incluant le transfert de rayonnement dans les raies, écrit pour l'analyse spectroscopique des plasmas. Il a été initialement écrit pour la spectroscopie de couche K, s'appliquant à toute une classe de plasmas chauds (température électronique allant de quelques dizaines d'eV à quelques milliers d'eV) constitués d'ions de numéro atomique intermédiaire tels que $6 \leq Z \leq 26$. La spectroscopie de couche K est celle qui concerne principalement des ions ayant 1, à 3 électrons liés. Ces restrictions initiales correspondent en fait aux bornes de certaines tables de données atomiques disponibles dans la littérature. L'émission en couche K présente l'avantage d'être simple dans la mesure où les raies intenses sont peu

nombreuses, bien résolues les unes des autres. Comme le numéro atomique n'est pas très élevé, les profils de raies sont sensibles à l'élargissement Stark. Ces profils de raie sont perturbés par le plasma existant autour de l'ion émetteur. Ainsi, comme les raies sont bien individualisées, leur largeur est caractéristique de la densité électronique du plasma. TRANSPEC inclut donc la modélisation de l'élargissement Stark sur des raies de couche K (raies de résonance et satellites).

Pour un plasma homogène, le code TRANSPEC peut être utilisé en mode « monocellule ». Dans ce cas, il suffit de rentrer une densité, une température, la nature de l'élément à étudier et la taille du plasma afin d'obtenir le spectre dans une gamme de longueur d'onde donnée. Il prend en compte le couplage radiatif possible entre les cellules qui sont traversées par le rayonnement émis par le plasma lui-même. Le code se révèle être plus qu'un simple code collisionnel-radiatif : il calcule de façon cohérente les populations avec le transfert radiatif sur les raies optiquement épaisses.

Le code fonctionne en trois étapes [30] :

1. Calcul des populations dans les diverses cellules et aux différents instants, de façon cohérente avec le rayonnement. Un fichier contenant les populations des niveaux est alors généré. (POP)
2. Choix d'une gamme spectrale et génération des émissivités et des opacités dans chaque cellule. (HOP)
3. Calcul du spectre émergent du plasma dans une gamme de longueur d'onde donnée. (ETOC)

2-7-7 Le code COWAN

Les codes de physique atomique peuvent être utilisés pour calculer une base de données qui peut être utilisé pour la modélisation du plasma. Le code de structure atomique Cowan (CATS) est une adaptation des codes de structure atomique de R.D.Cowan [3]. L'entrée au CATS se compose de l'étape d'ionisation et une liste de configurations électroniques. CATS résout les équations de Hartree-Fock avec des corrections relativistes pour chaque orbitale de chaque configuration d'entrée. Les niveaux de la structure fine sont générés pour chaque configuration et couplage intermédiaire, et interaction de configuration sont inclus en utilisant la théorie de perturbation. Les niveaux d'énergie et leurs désignations : fonctions d'ondes, intégrales de Slater, les coefficients de mélange, et les forces d'oscillateur pour les transitions entre les niveaux sont stockées dans les fichiers de données atomiques. L'onde plane de Born (PTB), sections efficaces d'excitation par électron

d'impact peuvent aussi éventuellement être calculées. D'autres codes d'excitation collisionnelle (ACE) sont utilisés pour fournir une meilleure qualité de choix de sections efficaces par électron d'impact que celles calculées par CATS. La méthode de l'onde déformée (DW) avec CATS est utilisée pour calculer les sections efficaces. Le Programme d'ionisation général pour les processus impliquant des électrons et des rayonnements (GIPPER code) [31] utilise CATS pour calculer les sections efficaces pour les processus d'ionisation. Les processus considérés comprennent la photoionisation, l'ionisation par impact électronique par collision, et l'autoionisation. Divers méthodes de calcul sont disponibles et les fonctions d'ondes déformées sont employées. CATS, ACE, et GIPPER peuvent fonctionner moyennement à la fois. Ces codes écrivent des fichiers de base de données dans un format cohérent [32].

2-7-6 Le code FAC

Le code FAC (Flexible Atomic Code) [33] 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

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 "Distorted Wave" (DW) [34].

2-8 Conclusion

Dans ce chapitre, les différents processus collisionnel et radiatifs élémentaire dans les plasmas ont été exposés. Nous avons aussi abordé la nécessité de la connaissance au préalable des codes de calcul pour le traitement des données atomiques. Plusieurs codes de calcul ont été décrits.

Références

- [1] M.K. Steven, E. Behar, A. Kinkhabwala et al., *X-ray spectroscopy of astrophysical plasmas*, Phil. Trans. R. Soc. Lond., **360**, 1923, (2002).
- [2] E. V. Condon and G. H. Shortley, *The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge University Press, Cambridge, reprinted in (1970).
- [3] R. D. Cowan, *the Theory of Atomic Structure and Spectra*, University of California Press, USA, (1981).
- [4] I. I. Sobelman, *Atomic Spectra and Radiative Transitions*, 2nd ed., Springer, Berlin, (1992).
- [5] H.J. Kunze, *Introduction to Plasma Spectroscopy*, (Springer, Berlin 2009).
- [6] H. A. Bethe and E. E. Salpeter, *Quantum Mechanics of one-and Two-Electron Systems*, Springer-Verlag, Berlin, (1957).
- [7] Mewe, R., *Astron. And Anstrophys.***20**, 215 (1972)
- [8] Van Regemorter, H., *Astrophys. J.*, **136**, 906 (1962)
- [9] Lee, R. W., Whitten, B.L. & Strout, R.E., *J. Quant. Spect. Radiat. Trans.*, **32**, 91 (1984)
- [10] C. De Michelis and M. Mattioli, *Nuclear Fusion*, **21**(1981) 677.
- [11] D. R. Bates, A. Dalgarno, *Atomic and Molecular Processes*, D.R. Bates, ed., Acad. Press, NY (1962) 245.
- [12] A. Burgess and I. C. Percival, *Advances in Atomic and molecular Physics*, eds. D. R. Bates and I. Estermann, Academic Press, NY, (1968).
- [13] L. A. Vainshtein , I. I. Sobelman and E. A. Yukov, *Cross-Sections of Excitation of Atoms and Ions by Electrons*, Nauka, Moscow (1973).
- [14] Yu. V. Ralchenko, R. K. Janev, T. Kato, D. V. Fursa et al. NIFS-DATA Series, **59** (2000).
- [15] D. Salzman, *Atomic Physics in Hot Plasmas*, (Oxford University Press, New york 1998).
- [16-1] J.V. Paradijs and A.M. Bleeker, *X-Ray Spectroscopy in Astrophysics*, (Springer, Netherlands 1997).
- [17] F.G. Dortan, *Thèse de doctorat*, (Université Paris XI, 2003).
- [18] A.K. Pradhan and S.N. Nahar, *Atomic Astrophysics and Spectroscopy*, (Cambridge 2011).
- [19] D. Naujoks, *Plasma-Material Interaction in Controlled Fusion*, (Springer, Berlin 2006).
- [20] D.H. Sampson, *Atomic Photoionization*, (Springer, Berlin 1982).
- [21] McWirther, R.W.P., *Phys. Rep.*, **37**, 165 (1978)
- [22] M. J. Seaton, *Mon. Not. Roy. Astr. Soc.* **119**, 81 (1959)
- [23] V. P. Shevelko and L. A. Vainshtein, *Atomic Physics for Hot Plasma*, IOP Publishing, UK, (1993).
- [24] A. Bar-Shalom, M. Klapisch et J. Oreg : HULLAC, an integrated computer package for atomic processes in plasmas. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 71:169,(2001).38, 108
- [25] T. Blenski, A. Grimaldi et F. Perrot : A superconfiguration code based on the local density approximation. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 65:91–100,(2000). 40
- [26] T. Blenski, A. Grimaldi et F. Perrot :Hartree-Fock statistical approach to atomsand photoabsorption in plasmas. *Physical Review E*, 55:4889, (1997).40, 108
- [27] A. Bar-Shalom, J. Oreg, W. Goldstein, D. Shvarts et A. Zigler :Supertransition- arrays: A model for the spectral analysis of hot, dense plasma. *Phys. Rev.A*, 40:3183–3193, (1989). 40
- [28] O. Peyrusse, *J. Phys. B*, **33**, 4303 (2000)
- [29] O. Peyrusse, *JQSRT* **71**, 571 (2001)
- [30] O. Peyrusse, *JQSRT*, **51**, 281 (1994)

- [31] B. J. Archer, R. E. H. Clark, C. J. Fontes, and H. Zhang: GIPPER USER MANUAL Version 1.5b, Los Alamos National Laboratory P.O. Box 1663, MS F663 Los Alamos, New Mexico 87545, (2000).
- [3] J. Abdallah, Jr., D. P. Kilcrease, A. Y a .Faenov and T. A. Pikuz: The Calculation of Satellite Line Structures in Highly Stripped Plasmas, Multicharged Ion Spectra Data Center,(1998), 1462, 95050
- [33] M. F. Gu, FAC 1.0.7, <http://kipac-tree.stanford.edu/fac/>
- [34] M. F. Gu, can. J. phys,vol 86 (2008) 675--689

Chapitre 03:

Fondement théorique du calcul des sections efficaces

3-1 Introduction

L'excitation et l'ionisation collisionnelles sont des processus majeurs de peuplement des niveaux en physique des plasmas et font l'objet de nombreuses études pour obtenir des bases exhaustives de sections efficaces concernant les ions qui intéressent en particulier la communauté des astrophysiciens ou encore celle des physiciens de la fusion magnétique et inertielle. Les excitations collisionnelles ne se limitent pas à peupler les niveaux excités des ions, elles jouent aussi un rôle important dans les phénomènes d'ionisation collisionnelle par le biais d'excitations successives [1]. La détermination de leur section efficace est donc une tâche incontournable mais ardue aussi bien expérimentalement que théoriquement.

Pour les plasmas chauds, les expériences ne donnent accès qu'à des résultats globaux qu'il faut ensuite ré-analyser pour extraire les taux d'excitations collisionnelle des populations des différents niveaux, elles-mêmes déduites des propriétés radiatives du milieu étudié. Les mesures directes existantes de sections efficaces ne couvrent principalement que les atomes et molécules neutres ainsi que quelques ions faiblement ionisés [2]. L'obtention de résultats concernant des ions moyennement ou fortement ionisés passe donc obligatoirement par une étude théorique.

De nombreuses équipes travaillent à déterminer, de la façon la plus précise possible, ces sections efficaces et de nombreuses théories et méthodes de calcul ont été élaborées. Henry [1, 3], Sobelman [4], Fano [5] ou encore Carthy et Weigold [6] ont fait des présentations détaillées. Nous limiterons notre étude aux deux approches envisageables en présence de champ électrique : l'approximation de Born et la méthode des ondes déformées "Distorted Waves".

3-2 Principes généraux sur la diffusion

Parmi toutes les réactions possibles qui surviennent lors de collisions entre particules, on nomme diffusions celles pour lesquelles l'état final est constitué des mêmes particules que l'état initial.

Lorsqu'il existe un flux incident F_i de particules (nombre de particules par unité de surface et de temps) qui interagit avec un centre diffuseur, le nombre de particules diffusées dans l'angle solide $d\Omega$ autour de la direction $(\theta; \varphi)$ s'écrit :

$$dn = F_i \sigma(\theta, \varphi) d\Omega \quad (3-1)$$

où $\sigma(\theta, \varphi)$ est la section efficace différentielle de diffusion dans la direction (θ, φ) . La section efficace totale de diffusion σ est définie par :

$$\sigma = \int \sigma(\theta, \varphi) d\Omega \quad (3-2)$$

L'ionisation collisionnelle et la recombinaison diélectronique mettent en œuvre des techniques similaires et peuvent en être extrapolées. Il existe, pour leur calcul, une grande variété de méthodes avec une précision croissante mais dont les difficultés théoriques et surtout numériques augmentent notablement. Elles sont présentées successivement.

3-3 Les excitations collisionnelles par la théorie des perturbations

3-3-1 Les méthodes perturbatives

La résolution exacte des problèmes de mécanique quantique n'est en général possible que dans des cas très simples et les tentatives de solutions numériques de l'équation de Schrödinger en trois dimensions se heurtent aussi très rapidement aux limites des calculateurs, en particulier lorsqu'il y a plus d'un électron.

Lorsque l'environnement est très légèrement modifié par rapport à une situation microscopique soluble exactement, la théorie des perturbations propose de calculer initialement ces solutions exactes puis de calculer approximativement les corrections qui leur sont imposées par la perturbation [7, 8, 9]. L'une des applications majeures de cette théorie est le calcul des probabilités

de transitions collisionnelles ou radiatives dans le spectre continu sous l'influence d'une perturbation constante.

Le système (électron libre + ion, par exemple) est régi par l'équation de Schrödinger :

$$2i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (H_0 + V(t))\Psi \quad (3-3)$$

où H_0 est le Hamiltonien non perturbé, V le potentiel perturbateur et Ψ la fonction d'onde totale qui peut être développée sur la base des états propres non perturbés :

$$\Psi = \sum_k a_k(t) \psi_k^{(0)} \quad (3-4)$$

Cette notation est discrète. Si le spectre des états propres est continu :

$$\Psi = \int a_\nu(t) \psi_\nu^{(0)} d\nu \quad (3-5)$$

Les conditions de normalisation sur les coefficients a_ν sont équivalentes aux précédentes :

$$\sum_k |a_k(t)|^2 = 1 \rightarrow \int |a_\nu|^2 d\nu = 1 \quad (3-6)$$

Néanmoins, la normalisation des fonctions propres à l'unité n'est plus possible, elle s'écrit pour le cas continu [7] :

$$\int \psi_{\nu'} \psi_\nu^* dq = \delta(\nu' - \nu) \quad \text{et} \quad \int \delta(\nu' - \nu) d\nu' = 1 \quad (3-7)$$

Si le système est initialement dans l'état n ($a_k(t=0) = \delta_{kn}$), les coefficients de chaque fonction

propre valent au premier ordre $a_{kn}(t) = -i \int \frac{V_{kn}(t')}{2} dt' = -i \int \frac{V_{kn}}{2} e^{i(E_n - E_k)t/2} dt$

où $V_{kn}(t) = \int \psi_k^* V(t) \psi_n dr = V_{kn} e^{i(E_n - E_k)t/2}$ est l'élément de matrice de perturbation.

La probabilité de transition par unité de temps de l'état initial vers les états compris dans l'intervalle $[\nu_k; \nu_k + d\nu_k]$ vaut :

$$dW_{nk} = \frac{|a_{nk}|^2 dv_k}{t} = \pi |V_{nk}|^2 \delta(E_k^{(0)} - E_n^{(0)}) dv_k \quad (3-8)$$

si le spectre des états dégénérés est continu sur v et avec la normalisation (3-7).

3-3-2 La formule de Born

Lorsque les interactions responsables de la diffusion sont assimilables à des perturbations, il est possible d'obtenir des formules simples de sections efficaces à l'aide de la théorie précédente sans effectuer de développement compliqué (i.e. en ondes partielles) des fonctions d'onde [4, 10]. Cette méthode est adaptée au cas où les électrons libres sont rapides par rapport aux électrons atomiques (en particulier les électrons mis en jeu dans la transition). Dans cette limite "hautes énergies", il est possible de négliger les effets d'échange entre l'électron libre et les liés (du fait de la grande différence d'énergie entre les électrons libres et liés, leurs intégrales de recouvrement sont très faibles).

La probabilité d'une transition par excitation collisionnelle entre les états atomiques ψ_{Ma_0} et ψ_{aM} associés aux électrons libres φ_{k_0} et φ_k respectivement s'écrit au premier ordre de la théorie des perturbations (3-8):

$$dW = \pi \int \left| \varphi_{k_i}^*(r) \left\langle \psi_{a_i} M_i \left| \sum_{i=1}^N \frac{2}{|r_i - r|} - \frac{2Z}{r} \right| \psi_{a_f} M_f \right\rangle \varphi_{k_f}(r) \right|^2 \delta(E_i - E_f) d\mathbf{k}_f \quad (3-9)$$

$E_i = E_{a_i} + k_i^2$ et $E_f = E_{a_f} + k_f^2$ où k_f est l'impulsion de l'électron libre et la fonction d'onde libre finale, développée en ondes planes, proportionnelle à $e^{ik_f r}$ est normalisée par la condition (3-7), ce qui implique que $\varphi_{k_f}(r) = (2\pi)^{-3/2} e^{ik_f r}$.

D'après la formule (3-1), la section efficace différentielle d'excitation collisionnelle correspond à cette probabilité de transition pour un flux incident d'électrons libres égal à 1

$$\text{(soit } \varphi_{k_i}(r) = e^{ik_i r} / \sqrt{v_i} = k_i^{-1/2} e^{ik_i r} \text{)}.$$

L'intégration sur k_f s'effectue en écrivant :

$$\delta(E_i - E_f) d\mathbf{k}_f = \delta(k_f^2 - [k_i^2 + E_{ai} - E_{af}]) \frac{k_j}{2} dk_j^2 d\Omega \quad (3-10)$$

ce qui permet de remplacer ces termes par $\frac{k_f}{2} d\Omega$ où la valeur de k_f est fixée par $k_f = (k_i^2 + E_{ai} - E_{af})^{1/2}$ et la somme sur les états atomiques finaux et la moyenne sur les états initiaux conduisent à la **formule de Born** :

$$d\sigma^B = \frac{1}{16\pi^2} \frac{k_f}{k_i g_i} \sum_{M_i M_f} \left| \int e^{-i(k_i - k_f)r} \left\langle \psi_{a_i M_i} \left| \sum_{i=1}^N \frac{2}{|r - r_i|} - \frac{2Z}{r} \right| \psi_{a_f M_f} \right\rangle d(r) \right|^2 d\Omega \quad (3-11)$$

où g_i est le poids statistique de l'état a_i .

Il est possible d'en donner une formulation plus compacte en effectuant l'intégration sur r qui transforme $d\sigma^B$ en :

$$d\sigma^B = \frac{8\pi}{k_i^2 g_i} \sum_{M_i M_f} \left| \left\langle \psi_{a_i M_i} \left| \sum_{i=1}^N e^{-iq \cdot r_i} \right| \psi_{a_f M_f} \right\rangle \right|^2 \frac{dq}{q^3} \quad (3-12)$$

où $q = k_i - k_f$, l'interaction avec le noyau atomique, mono électronique, s'annulant pour des états atomiques distincts.

Le développement de l'exponentielle complexe [10] :

$$e^{-iq \cdot r_i} = \sum_{t=0}^{\infty} (2t+1) i^{-t} j_t(qr_i) \sum_{m=-t}^t C_m^{(t)*}(\hat{q}) C_m^{(t)}(\hat{r}_i) \quad (3-13)$$

où $C_m^{(t)}(\hat{q}) = \sqrt{\frac{4\pi}{2t+1}} Y_{tm}(\hat{q})$ est l'harmonique sphérique renormalisée, j_t la fonction de Bessel sphérique d'ordre t , et le théorème de Wigner-Eckart permettent de simplifier la somme en :

$$d\sigma^B = \frac{8\pi}{k_i^2 g_i} \sum_{t=0}^{\infty} (2t+1) \left\langle a_i J_i \left| \left| \sum_i j_t(qr_i) C_i^{(t)} \right| \right| a_f J_f \right\rangle^2 \frac{dq}{q^3} \quad (3-14)$$

où l'élément de matrice central peut être séparé en parties angulaire et radiale à l'instar des éléments de matrice électriques multipolaires, seule la partie radiale $\langle l_i | r^t C^{(t)} | l_f \rangle$ étant modifiée en :

$$\left\langle l_i \left| \left| \sum_i j_t(qr) C^{(t)} \right| \right| l_f \right\rangle = (-1)^{l_i} [l_i, l_f]^{1/2} \begin{pmatrix} l_i & t & l_f \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \int_0^\infty P_{l_i}(r) j_k(qr) P_{l_f}(r) dr \quad (3-15)$$

Avec l_i et l_f correspondant aux électrons liés actifs dans la transition.

$$d\sigma^B = \frac{8\pi}{k_i^2 g_i} \sum_{t=0}^{\infty} (2t+1) \langle a_i J_i || C^{(t)} || a_f J_f \rangle^2 \left(\int_0^\infty P_{l_i}(r) j_k(qr) P_{l_f}(r) dr \right)^2 \frac{dq}{q^3} \quad (3-16)$$

et la section efficace totale a donc pour expression :

$$\sigma_{a_0 a}^B = \frac{8\pi}{k_i^2 g_i} \sum_{t=0}^{\infty} (2t+1) \langle a_i J_i || C^{(t)} || a_f J_f \rangle^2 \int_{k_i - k_f}^{k_i + k_f} [R_t(q)]^2 \frac{dq}{q^3} \quad (3-17)$$

où $R_t(q)$ est l'intégrale radiale précédente.

3-3-3 La formule de Bethe

Les valeurs admissibles de t sont contraintes par le 3j de la relation (3-15): $t = |l_i - l_f|$, $l_i - l_f + 2, \dots, l_i + l_f$ et correspondent successivement à des interactions électron-atome multipolaires. Il est souvent suffisant de s'en tenir à la multiplicité minimale $t_{min} = |l_i - l_f|$ dans la mesure où les éléments successifs de t dans (3-17) décroissent rapidement. Il n'est pas possible d'en donner une formulation analytique simple, mais un calcul numérique montre, qu'en général, la section efficace multipolaire σ_{t+2} est 5 à 10 fois inférieure à σ_t

De plus, il est possible de simplifier les fonctions de Bessel au premier ordre du développement :

$$j_t(qr) \xrightarrow{qr \rightarrow 0} \frac{2^t t! q^t}{(2t+1)!} r^t \quad (3-18)$$

Dans le cas des transitions dipolaires (i.e. optiquement permises), $\Delta l = \pm 1$, $t = 1$, les deux approximations précédentes transforment l'élément de matrice de (3-14) en :

$$\sum_{t=0}^{\infty} [t] \left\langle a_i J_i \left| \left| \sum_i j_t(qr_i) C_i^{(t)} \right| \right| a_f J_f \right\rangle^2 = \frac{q^2}{3} \left\langle a_i J_i \left| \left| \sum_i r C_i^{(1)} \right| \right| a_f J_f \right\rangle^2 = \frac{q^2 g}{\Delta E} f_{a_i a_f} \quad (3-19)$$

où $f_{a_i a_f}$ est la force d'oscillateur dipolaire électrique :

$$f_{a_i a_f} = \frac{\Delta E}{3 g_i} \left\langle a_i J_i \left| \left| \sum_i r C_i^{(1)} \right| \right| a_f J_f \right\rangle^2 \quad (3-20)$$

L'approximation résultante s'appelle **formule de Bethe** et s'écrit en unités a_0^2 :

$$\sigma_{a_i a_f}^{Bethe} = \frac{8\pi}{k_i^2 \Delta E} f_{a_i a_f} \ln \left(\frac{k_i + k_f}{k_i - k_f} \right) \approx \frac{8\pi}{E_i \Delta E} f_{a_i a_f} \ln \left(\frac{4E_i}{\Delta E} \right) = \frac{8\pi}{\Delta E^2} f_{a_i a_f} \frac{\ln 4X}{X} \quad (3-21)$$

à forte énergie ($E_i \gg \Delta E$), X représentant le rapport de l'énergie incidente à l'énergie de seuil.

3-3-4 Quelques remarques sur les sections efficaces de Born

Un certain nombre de caractéristiques générales sur les sections efficaces de Born (et aussi de Bethe) peuvent être dégagées. Ainsi pour les transitions sans changement de spin ($\Delta S = 0$) :

À forte énergie ($E_i \gg \Delta E$)

- pour les transitions optiquement permises : $\Delta l = \pm 1$, $\sigma^B \propto \frac{\ln E_i}{E_i}$
- pour les transitions interdites optiquement : $\Delta l \neq \pm 1$, $\sigma^B \propto \frac{1}{E_i}$

À faible énergie ($E_i \approx \Delta E$)

- $\sigma^B \propto k_f = \sqrt{E_i - \Delta E}$

Il faut noter, en outre, la loi d'échelle en fonction de la charge du noyau pour un hydrogénoïde:

$$\sigma_Z = \sigma_H / Z^4 \quad (3-22)$$

Ces formules donnent de bons résultats comparées à l'expérience pour les énergies élevées ($\geq 10\Delta E$) mais se montrent beaucoup plus approximatives en dessous de ces énergies.

Du fait qu'elle ne prend pas en compte l'attraction coulombienne de l'ion, la méthode de Born donne une section efficace nulle à l'énergie du seuil, ce qui reste valable pour un atome neutre mais pas dans le cas d'ions multichargés.

Les limites de cette approximation apparaissent aussi dans son incapacité à traiter des transitions avec changement de spin (d'après l'élément de matrice angulaire de (3-17), à tenir compte de la modification des orbitales libres dans le potentiel de l'ion...).

3-3-5 Quelques raffinements possibles

Pour échapper aux limites intrinsèques de l'approximation de Born, tout en conservant l'approche simple de la théorie des perturbations, il existe essentiellement trois axes qui permettent d'améliorer les résultats et les rendre plus conformes à ceux de l'expérience.

- La distorsion des ondes incidentes et sortantes par le champ de l'atome. L'attraction coulombienne fait croître le flux d'électrons libres à proximité du noyau, ce qui mène à un accroissement notable de la section efficace au seuil de réaction, désormais non nulle. L'approximation la plus simple consiste à perturber l'électron libre par un champ coulombien créé par une charge égale au degré d'ionisation de l'ion et donc à remplacer les fonctions de Bessel par des fonctions de Coulomb dans la formule de Born (approximation Coulomb-Born). L'étape suivante, appelée les ondes déformées "Distorted Waves" (DW), remplace ce champ par le potentiel créé par l'ion.
- La prise en compte des effets d'échange entre l'électron libre et l'ion. L'antisymétrisation de l'électron libre avec les électrons liés de l'ion, déjà antisymétrisés, permet de traiter les transitions d'intercombinaison ($\Delta S = 1$).
- La renormalisation des sections efficaces pour assurer la conservation du nombre total de particules diffusées. L'approximation de Born suppose que l'ensemble des transitions qui peuvent se produire au cours de la collision sont négligeables devant les diffusions élastiques qui ne modifient pas l'état de l'ion. Il existe néanmoins un certain nombre de "voies" possibles de réactions qui peuvent devenir résonnantes pour une énergie donnée et être extrêmement favorisées au détriment des diffusions élastiques, déséquilibrant ainsi largement le bilan de conservation (par exemple, les transitions autorisées à l'intérieur d'une même couche).

Remarquons que ces effets s'estompent tous à forte énergie, où l'approximation de Born redevient pertinente.

Ces développements ne peuvent être effectués qu'en acceptant un développement en ondes partielles des fonctions d'onde libres, la représentation simple en $q = k_f - k_i$ n'étant plus utilisable.

3-4 L'approximation des ondes déformées "Distorted Waves" (DW)

3-4-1 Développement en ondes partielles distordues

Il est possible d'accéder aux équations des ondes déformées "Distorted Waves" par la théorie des perturbations en remplaçant dans la probabilité de transition (3-9) les ondes planes, qui vérifient une équation de Schrödinger sans potentiel perturbateur ($(-\nabla^2 - k^2)\varphi_k(r) = 0$), par des ondes distordues par le potentiel de l'ion émetteur

$$(-\nabla^2 + 2V(r) - k^2)\varphi_k(r) = 0 \quad (3-23)$$

Sachant que toute fonction de carré sommable peut être développée sur la base des harmoniques sphériques, nous pouvons écrire pour la fonction d'onde sortante :

$$\varphi_{k_f}(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{k_f} \sum_{l_f m_f} i_f^l \frac{F_{l_f}^{k_f}(r)}{r} Y_{l_f m_f}(\hat{r}) Y_{l_f m_f}^*(\hat{k}_f) \quad (3-24)$$

où les fonctions $F_l^k(r)$ vérifient :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - 2U_{aM}(r) + k^2 \right] F_l^k(r) = 0 \quad (3-25)$$

et dont l'amplitude est prise égale à 1 pour r grand. On montre qu'avec ces coefficients, la fonction

d'onde finale atteint bien la condition de normalisation requise : $\langle \varphi_{k_f}(r) | \varphi_{k'_f}(r) \rangle = \delta(k_f - k'_f)$

[10]: $\int F_l^k F_l^{k'} dr = \pi \sqrt{E} \delta(E - E')$, $\delta(E - E') = \delta(k - k')/2k$ et $\sum_{lm} Y_{lm}(\hat{k}) Y_{lm}(\hat{k}') = \delta(\theta_k - \theta_{k'}) \delta(\varphi_k - \varphi_{k'}) / \sin \theta_{k'}$ [9].

La section efficace différentielle d'excitation collisionnelle s'obtient à partir de la probabilité de transition (3-9) lorsque le flux d'électrons incidents est unitaire. En remarquant que les ondes

planes incidente $e^{ik_i r}/\sqrt{k_i}$ et sortante $e^{ik_f r}/(2\pi)^{3/2}$ diffèrent d'un facteur $\frac{(2\pi)^{3/2}}{\sqrt{k_i}}$ tout en admettant le même développement (3-13) que les ondes distordues :

$$\frac{e^{ikr}}{(2\pi)^{3/2}} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_l \frac{i^l k r j_l(kr)}{k r} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\hat{k}) Y_{lm}(\hat{r}) \quad (3-26)$$

où $kr j_l(kr)$ a aussi une amplitude de 1 aux r grands, nous pouvons écrire la fonction d'onde distordue entrante :

$$\varphi_{k_i}(r) = \frac{4\pi}{k_i^{3/2}} \sum_{l_i m_i} i^{l_i} \frac{F_{l_i}^{k_i}(r)}{r} Y_{l_i m_i}(\hat{r}) Y_{l_i m_i}^*(\hat{k}_i) \quad (3-27)$$

où $F_{l_i}^{k_i}$ est normalisée à 1 à l'infini et vérifie la même équation différentielle (3-25) que $F_{l_f}^{k_f}$ avec $U_{a_i M_i}(r)$ et k_i^2 .

La moyenne sur l'angle d'incidence de l'électron libre initial et la somme sur celui de l'électron sortant simplifient les harmoniques sphériques dépendantes de \hat{k}_f et \hat{k}_i apparues dans $d\sigma$:

$$\int \frac{d\Omega_i}{4\pi} \int d\Omega_f Y_{l_f m_f}(\hat{r}) Y_{l_f m_f}^*(\hat{k}_f) Y_{l_i m_i}^*(\hat{k}_i) Y_{l_i m_i}(\hat{r}) = \frac{1}{4\pi} \delta_{l_f l_i} \delta_{m_f m_i} \delta_{l_i l_i} \delta_{m_i m_i} \quad (3-28)$$

et mènent à la section efficace :

$$\sigma_{a_i M_i m_i^*, a_f M_f m_f^*} = \frac{4\pi}{k_f k_i^3} \sum_{l_f, m_f, l_i, m_i} \left| \int \frac{F_{l_i}^{k_i}(r)}{r} Y_{l_i m_i}^* \left(\psi_{a_i M_i} \left| \sum_{i=1}^N \frac{2}{|r-r_i|} - \frac{2Z}{r} \right| \psi_{a_f M_f} \right) \frac{F_{l_f}^{k_f}(r)}{r} Y_{l_f m_f} dr \right|^2 \quad (3-29)$$

où m_i^* et m_f^* représentent les spins des électrons libres.

Nous allons donner une autre forme à cette section efficace de manière à fournir au paragraphe suivant une formule très simple de la force de collision. Les fonctions $F_{l_i}^{k_i}$ et $F_{l_f}^{k_f}$ sont normalisées à 1 à l'infini, nous les renormalisons $F_{l_i}^{-1/2}$ et $F_{l_f}^{-1/2}$ et multiplions donc la formule précédente par $k_f k_i$, moyennons le spin de l'électron incident et sommons le spin de l'électron libre final :

$$\sigma_{a_i M_i, a_f M_f} = \frac{2\pi}{k_i^2} \sum_{l_i m_i m_i^*}^{l_f m_f m_f^*} \left| \langle \Psi_{a_i M_i, k_i l_i m_i m_i^*} | V_{interaction} | \Psi_{a_f M_f, k_f l_f m_f m_f^*} \rangle \right|^2 \quad (3-30)$$

où $\langle \Psi_{a_i M_i, k_i l_i m_i m_i^*} | V_{interaction} | \Psi_{a_f M_f, k_f l_f m_f m_f^*} \rangle$ représente l'élément de matrice d'interaction de (3-29) entre les systèmes initial ψ_i et final ψ_f composés de l'onde partielle $\frac{F_l^k}{r} Y_{lm} \delta_{m^*}$ et de l'ion ψ_{aM} antisymétrisés.

En toute rigueur, il est possible d'établir les formules de section efficace DW précédentes à l'aide des équations du couplage fermé "Close Coupling" (CC), plus générales et rigoureuses [4, 11, 12, 13], et non plus par la voie perturbative précédente. En résumé, la méthode du couplage fermé "Close Coupling" établit un système intégro-différentiel complet soluble de manière itérative pour le calcul des états du système ion-électron. Le nombre des états possibles est variable mais peut comprendre ceux résultant de réactions "parasites" telles l'ionisation collisionnelle, l'effet Auger ou encore la création de complexes temporaires.... Des temps de calcul expansif et une grande complexité de programmation sont les coûts induits par la grande précision de cette méthode. L'approche DW les réduit significativement en supposant que le couplage entre tous les différents états possibles est très faible, ce qui permet de réduire le nombre de canaux de réaction à 2 [14, 15, 16]. La précision reste très acceptable, en particulier pour les ions multichargés [2, 3, 17].

3-5 Les différentes méthodes d'évaluation des sections efficaces d'ionisation

Il existe trois différentes méthodes pour l'évaluation théorique des sections efficaces d'ionisation $\sigma_z^{ion}(\mathcal{E}/\chi_z)$: les méthodes classiques, les approximations de Coulomb-Born (CB) et les équations semi-empiriques.

3-5-1 Les méthodes classiques

La méthode classique la plus fréquemment utilisée est la méthode de paramètre d'impact classique d'échange, initialement développé par Burgess [18]. 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.

3.5.2 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. [19]. L'équation proposée pour la section efficace:

$$\sigma_z^{ion} = \pi a_0^2 \frac{\xi}{2l_0 + 1} \left(\frac{\chi_H}{\chi_Z} \right)^2 \phi_i(u) (cm^2) \quad (3-31)$$

où a_0 est le rayon de Bohr, ξ est le nombre des électrons périphériques dans la sous-couche considérée (de nombre orbital l_0) ayant une énergie χ_Z , $u = \varepsilon/\chi_Z$

La fonction ϕ_i est définie par :

$$\phi_i(u) = \left(\frac{u-1}{u} \right) \frac{C_1}{(u+1) + C_2} \quad (3-32)$$

Les paramètres C_1 et C_2 sont obtenus par une méthode de moindre carré à partir d'un calcul numérique et sont présentés sur des graphes ou des tableaux [19].

3-5-3 Les équations semi empiriques

Plusieurs équations sont présentées par Kato et al. [20] pour le calcul des sections efficaces et coefficients de taux d'ionisation. Parmi eux on peut citer l'équation de Lotz [20], Arnaud et al. [21] et celui du groupe de Belfast [22-23].

L'équation de Lotz a été largement utilisée pour le calcul des sections efficaces et les coefficients de taux d'ionisation [20,24]. Lotz déduit la section efficace d'ionisation en se basant sur des données expérimentales pour les ions faiblement ionisés avec des faibles charges Z :

$$\sigma = \sum_{j=1}^{N_{sc}} a_j \zeta_j \frac{\ln u_j}{u_j \chi_j^2} \{1 - b_j \exp[-C_j(u_j - 1)]\} \quad (3-33)$$

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 ions Sc au Zn.

Arnaud et Rothenflug [20] 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 [25] pour la section efficace d'ionisation directe (en cm^2) :

$$\sigma = \sum_j \frac{1}{u_j \chi_j^2} \left[a_j \left(1 - \frac{1}{u_j} \right) + b_j \left(1 - \frac{1}{u_j} \right)^2 + c_j \ln(u_j) + d_j \frac{\ln(u_j)}{u_j} \right] \quad (3-34)$$

Les coefficients a_j , b_j , c_j et d_j sont des constantes tabulées [21].

Bell et al. [22] et Lennon et al. [23] donnent des sections efficaces d'ionisation pour les ions : dans la séquence H-O [22] et F-Ni [23].

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

$$\sigma = \frac{1}{u \chi^2} \left[A \ln u + \sum_{i=1}^N B_i \left(1 - \frac{1}{u} \right)^i \right] \quad (3-35)$$

Les coefficients A et B_i sont obtenus par ajustement de moindre carré, ils sont donnés sur des tableaux pour $N=5$ [22-23].

3-6 Calcul des sections efficaces d'ionisation pour les ions héliumoides

3-6-1 Introduction

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 des différents niveaux, les longueurs d'onde des différentes transitions, les sections efficaces et les coefficients des taux des processus élémentaires dans les plasmas.

Le calcul théorique de la section efficace d'ionisation par impact électronique est un problème complexe car il fait intervenir trois corps après la collision. Bien que des progrès significatifs aient été réalisés ces dernières années, aucune théorie n'est à l'heure actuelle pleinement satisfaisante.

La méthode dite de couplage convergent fermé "Convergent Close Coupling" (CCC) donne des résultats encourageants [26, 27], mais la nécessité d'inclure un grand nombre de niveaux dans le

modèle d'atome utilisé la rend lourde à mettre en pratique. Le model "Binary-Encounter-Bethe" (BEB) de Y.K. Kim et M. E. Rudd [28] est généralement en excellent accord avec les résultats expérimentaux disponibles, et est d'application simple.

Cependant, le calcul direct (analytique) de ces données devient impossible pour les atomes à plusieurs électrons et aussi pour les grands nombres quantiques [29]. Dans ce cas on fait appel aux programmes et codes de calcul. 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'expérience. Dans notre travail nous avons choisi le code FAC (Flexible Atomic Code) [30-31] pour calculer les sections efficaces d'ionisation d'He neutre et des ions héliumoides : Li^+ , Ar^{+16} et Fe^{+24} , qui va être utilisé par la suite pour le calcul des taux et les processus atomiques élémentaires pour l'hélium neutre et d'autres ions héliumoides.

3-6-2 Bases théoriques de calcul du code FAC

Les niveaux d'énergie d'un ion atomique de N électrons sont obtenus par la diagonalisation de l'hamiltonien relativiste H dont la relation est donnée comme suit :

$$H = \sum_{i=1}^N H_D(i) + \sum_{i=1}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (3-36)$$

où $H_D(i)$ est l'opérateur de Dirac de l'hamiltonien pour un potentiel dû à une charge nucléaire. Les états de base Φ_ν , où sont généralement dénommés comme des fonctions d'état de configuration (CSF), sont des sommes antisymétriques des produits de N électrons de Dirac spinors φ_{nkm} :

$$\varphi_{nkm} = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} P_{nk}(r)\chi_{km}(\theta, \phi, \sigma) \\ iQ_{nk}(r)\chi_{-km}(\theta, \phi, \sigma) \end{pmatrix} \quad (3-37)$$

où χ_{km} est la fonction habituelle du spin-angulaire, n est le nombre quantique principal et k est le nombre quantique du moment angulaire relative, qui est liée à la quantité de mouvement angulaire orbital et totale à travers la relation :

$$k = (l - j)(2j + 1) \quad (3-38)$$

et m est la composante Z du moment cinétique total

Les fonctions d'états atomiques approximatifs sont données :

$$\Psi = \sum_{\nu} b_{\nu} \Phi_{\nu} \quad (3-39)$$

où b_{ν} sont les coefficients de mélange obtenus à partir de la diagonalisation de l'hamiltonien total.

- **Choix du potentiel central local**

Les orbitales radiales d'électron doivent être connues pour la construction de la matrice d'hamiltonien. Dans la méthode standard de Dirac Fock–Slater, les composantes P_{nk} et Q_{nk} satisfont l'équation de Dirac couplé pour un champ centrale locale $V(r)$:

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dr} + \frac{k}{r}\right) P_{nk} &= \alpha \left(\varepsilon_{nk} - V + \frac{2}{\alpha^2}\right) Q_{nk} \\ \left(\frac{d}{dr} - \frac{k}{r}\right) Q_{nk} &= \alpha(-\varepsilon_{nk} + V) P_{nk} \end{aligned} \quad (3-40)$$

où α est la constante de la structure fine, et ε_{nk} sont les valeurs propres de l'énergie des orbitales radiales.

- **La solution de l'équation de Dirac**

Puisque le potentiel dépend des orbitales cherché, une itération auto-cohérent est nécessaire pour résoudre le système (3-40). À chaque itération, les orbitales de l'étape précédente sont utilisées pour dériver le potentiel. Par conséquent, il suffit de résoudre le problème des valeurs propres avec un potentiel connu. Comme c'est la norme, nous convertissons (3-40) dans l'équation de Schrödinger en éliminant la petite composante et effectuer la transformation [32] :

$$P_a = \xi_a(r) F_a(r) \quad (3-41)$$

$$\xi_a(r) = \sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{2} [\varepsilon_a - V(r)]} \quad (3-42)$$

$$Q_a = \frac{\alpha}{2\xi_a^2} \left(\frac{d}{dr} P_a + \frac{k}{r} P_a\right) \quad (3-43)$$

En vertu cette transformation que nous avons :

$$\frac{d^2}{dr^2} F_a(r) + \left\{ 2[\varepsilon_a - U(r)] - \frac{k(k+1)}{r^2} \right\} F_a(r) = 0 \quad (3-44)$$

où $U(r)$ est le potentiel effectif défini comme :

$$U(r) = V(r) - \frac{\alpha^2}{2} \{ [V(r) - \varepsilon_a]^2 - W(r) \} \quad (3-45)$$

$$W(r) = \frac{1}{4\xi^2(r)} \left[\frac{d^2}{dr^2} V(r) + \frac{3\alpha^2}{4\xi^2(r)} \left(\frac{d}{dr} V(r) \right)^2 - \frac{2k}{r} \frac{d}{dr} V(r) \right] \quad (3-46)$$

Nous utilisons la méthode Numerov standard pour résoudre (3-44). Cependant, il est d'usage d'effectuer une autre transformation avant la recherche de la solution,

$$t = t(r) \quad (3-47)$$

$$F_a(r) = \left(\frac{dt}{dr} \right)^{-1/2} G_a(t) \quad (3-48)$$

où $t(r)$; en fonction de la distance radiale, est convenablement choisie de telle sorte qu'une grille uniforme peut être utilisée dans la nouvelle variable t , et la transformation correspondante sur la fonction d'onde est d'amener l'équation différentielle de la forme $G_a(t)$ à une forme de Schrödinger, sans le premier terme dérivé :

$$\frac{d^2}{dt^2} G_a(t) = \left(\frac{dt}{dr} \right)^{-2} G_a(t) \left\{ \frac{k(k+1)}{r^2} - 2[\varepsilon_a - U(r)] + \frac{1}{2} \left(\frac{dt}{dr} \right)^{-1} \frac{d^3 t}{dr^3} - \frac{3}{4} \left(\frac{dt}{dr} \right)^{-2} \left(\frac{d^2 t}{dr^2} \right)^2 \right\} \quad (3-49)$$

Deux types de $t(r)$ ont été utilisés dans le passé. L'un est une transformation logarithmique, $t(r) \propto \ln(r)$, qui a été utilisée dans le code MCHF [33], et l'autre est une forme hybride,

$t(r) = c_1 r + c_2 \ln(r)$, par exemple, qui est utilisé dans le code ATOM [34].

Le programme FAC 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 sections efficaces différentielles de l'ionisation par impact électronique sont obtenues par la théorie relativiste des ondes déformées (DW) en fonction des forces de collision comme dans l'excitation par impact électronique [31].

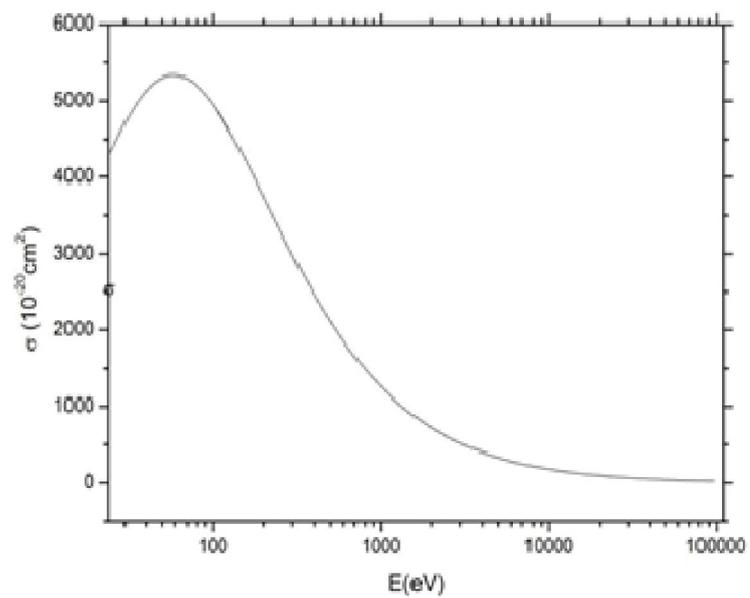
3-6-3 Résultats de calcul et discussion

Les résultats de calcul des sections efficaces d'ionisation de l'He neutre et les ions héliumoides tel que Li^+ , Ar^{+16} et Fe^{+24} obtenus sont reportés sur les figures (3-1), (3-2), (3-3) et (3-4) respectivement dans la gamme énergétique (10 - 10^5) eV. Les tableaux (3-1), (3-2), (3-3) et (3-4) présentent quelques valeurs de ces sections efficaces d'ionisation.

Nous remarquons, d'après les figures (3-1) et (3-2) de l'He neutre et Li^+ respectivement, que les valeurs des sections efficaces diminuent légèrement avec la température ; alors que pour les ions fortement chargés comme Ar^{+16} et Fe^{+24} ces sections efficaces prennent des valeurs très petites avec l'augmentation de la température et deviennent presque nulles autour de 10^5 eV et cela d'après les tableaux 3-3 et 3-4. Mentionnons que dans l'intervalle de température [10^1 - 10^3] eV, l'état de charge héliumoides du Fe et Ar est relativement abondant.

Malgré l'absence de confirmation expérimentale, nous avons donc choisi de se limiter aux résultats théoriques obtenus par le code FAC pour notre étude car, à notre connaissance, une comparaison des résultats donnés par FAC pour les ions héliumoides étudiés et d'autres publiés n'est pas disponible sauf pour des ions hydrogénoïdes ou héliumoides donnés dans les références [35-39].

E(eV)	σ (10^{-20}cm^2)
24.6	4328.8
100.8	4934.8
1009.1	1257.6
10092.6	166.1

Tableau 3-1: Sections efficaces d'ionisation de l'He**Figure 3-1:** sections efficaces de l'He neutre

E(eV)	$\sigma(10^{-20}\text{cm}^2)$	E(eV)	$\sigma(10^{-20}\text{cm}^2)$
79.13	506.20	474.16	394.49
107.67	523.24	576.64	354.09
153.08	534.13	777.08	296.83
187.45	541.86	1074.81	242.38
216	527.81	1572.97	185.12
279.56	493.73	2508.32	129.27
362.59	438.75	3000	114.51

Tableau 3-2: Sections efficaces d'ionisation de Li^+ .

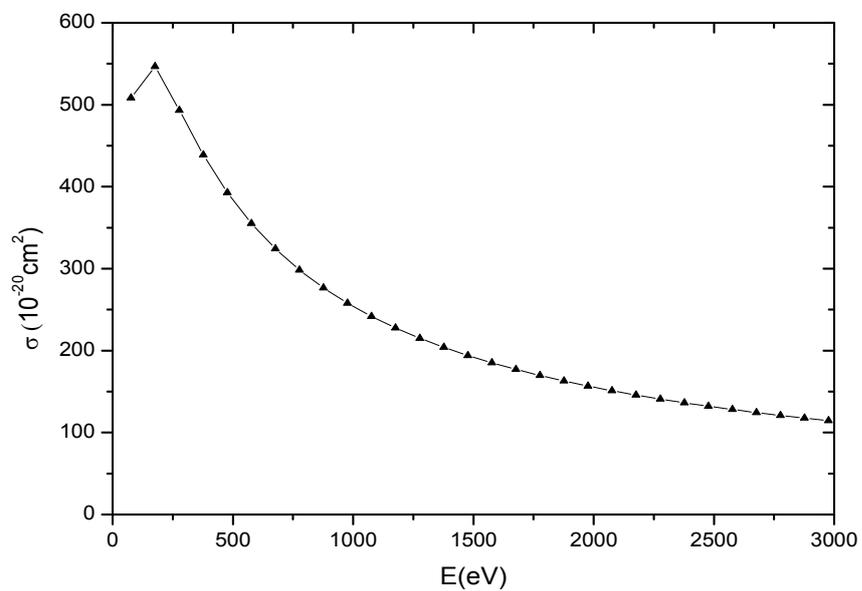


Figure 3-2: sections efficaces de Li^+ .

E (eV)	σ (10^{-20}cm^2)	E (eV)	σ (10^{-20}cm^2)
1824.3	0.112	21124	0.160
2924.3	0.149	22424	0.156
4324.3	0.176	24224	0.150
6624.3	0.195	27324	0.141
8524.3	0.198	29524	0.131
11524	0.193	40024	0.111
19424	0.166		

Tableau 3-3: Sections efficaces d'ionisation de d'Ar⁺¹⁶.

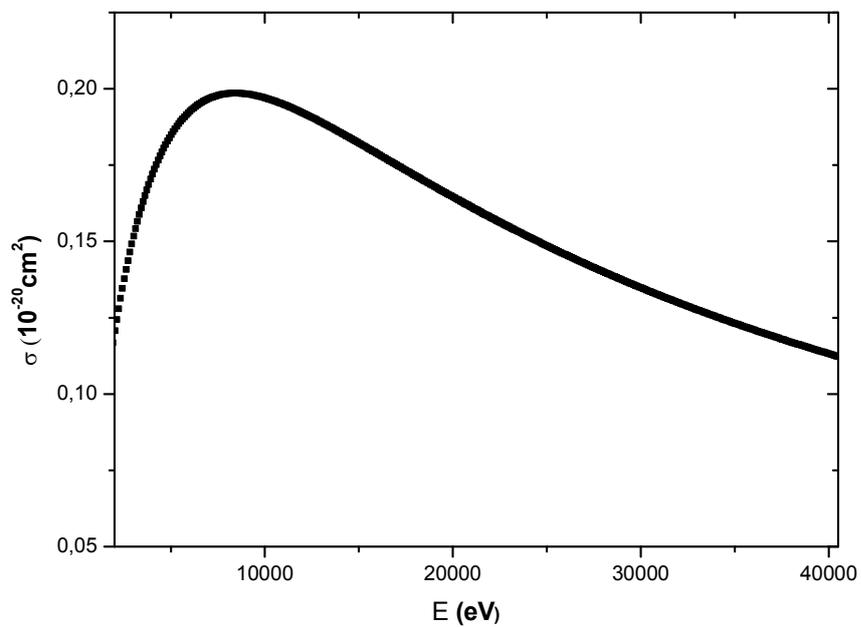


Figure 3-3: sections efficaces d'Ar¹⁶⁺.

E (eV)	σ (10^{-20}cm^2)	E (eV)	σ (10^{-20}cm^2)
2873.7	0.019	61874	0.028
6473.7	0.032	80874	0.024
9373.7	0.038	90874	0.022
14174	0.041	100870	0.020
18874	0.042	107870	0.019
29674	0.039		

Tableau 3-4: Sections efficaces d'ionisation de Fe^{+24} .

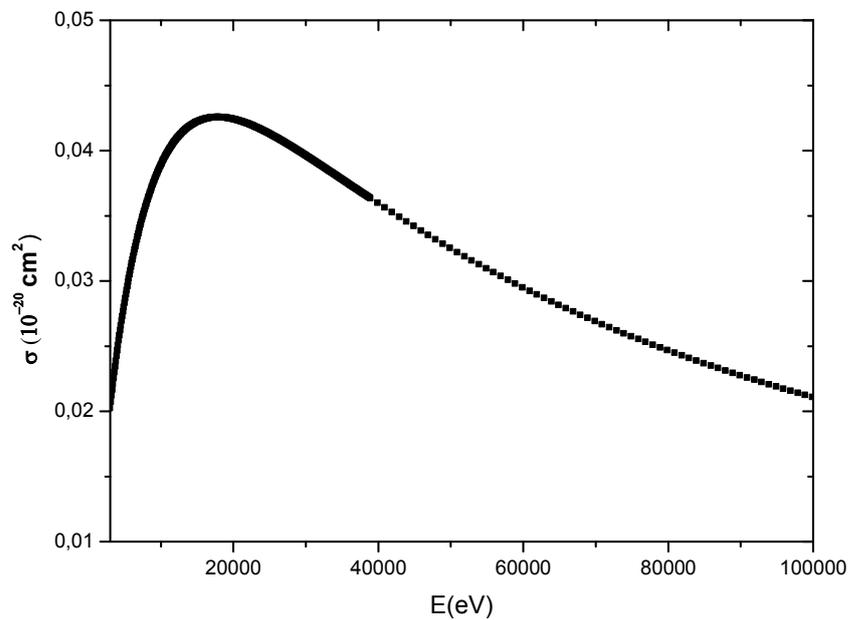


Figure 3-4: sections efficaces de Fe^{24+} .

3-7 Conclusion

Nous avons, dans cette partie, présenté les méthodes théoriques pour le calcul des sections efficaces ainsi que les approximations effectuées pour rendre les résultats plus précis. Les différents types des sections efficaces ont été exposés. Nous avons aussi mené un calcul des sections efficaces d'ionisation de quelques ions héliumoïde basé sur un programme numérique.

Références

- [1] R. J. W. Henry. Applying large computers to problems in physics : electroncollision cross sections in atomic physics. *Rep. Prog. Phys.* (1993), 327-362.
- [2] I. D. Williams. Electron-ion scattering. *Rep. Prog. Phys.* 62 (1999), 1431- 1469.
- [3] R. J. W. Henry. Excitation of atomic positive ions by electron impact. *Phys. Rep.* 68, no 1 (1981), 1-91.
- [4] I. I. Sobelman, L. A. Vainshtein, et E. A. Yukov. *Excitation of Atoms and Broadening of Spectral Lines*. Springer-Verlag, Berlin, (1981).
- [5] U. Fano et A. R. P. Rau. *Atomic collisions and spectra*. Academic Press, London, (1986).
- [6] Carthy et Weigold. *Electron Ion Collisions*. (1993).
- [7] L. Landau et E. Lifchitz. *Physique Théorique : Mécanique quantique*. Mir, Moscou, (1975).
- [8] J. L. Basdevant. *Mécanique quantique*. éditions de l'Ecole Polytechnique, Palaiseau, (1993).
- [9] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, et F. Laloe. *Mécanique quantique*. Hermann, Paris, (1973).
- [10] R. D. Cowan. *The theory of atomic structure and spectra*. University of California Press, Berkeley, (1981).
- [11] M. J. Seaton. *Atomic and Molecular Processes / The theory of excitation and ionization by electron impact* (p.374-420). D. R. Bates / Academic Press, New York, (1962).
- [12] M. J. Seaton. *Adv. Atom. Molec.Phys.* 11 (1975), 83.
- [13] H. Friedrich. *Theoretical Atomic Physics*. Springer-Verlag, Berlin, (1991).
- [14] M. E. Riley et D. G. Truhlar. *J. Chem. Phys.* 63 (1975), 2182.
- [15] N. F. Mott et H. F. W. Massey. *The Theory of Atomic Collisions*. Oxford University Press, Oxford, (1965).
- [16] M. J. Seaton. *Rep. Prog. Phys.* 46 (1983), 167.
- [17] P. L. Hagelstein. Relativistic distorted-wave results for nickel-like gadolinium. *Phys. Rev. A* 34 (1986), 874-884.
- [18] A. Burgess and I. C. Percival, *Advances in Atomic and molecular Physics*, eds. D. R. Bates and I. Estermann, Academic Press, NY, (1968).
- [19] L. A. Vainshtein , I. I. Sobelman and E. A. Yukov, *Cross-Sections of Excitation of Atoms and Ions by Electrons*, Nauka, Moscow (1973).
- [20] T. Kato et al. *NIFS-Data-Series*, **14** (1991).
- [21] M. Arnaud and R. Rothenflug, *Astron, Astrophys. Supp. Ser.* **60** (1985) 425.
- [22] K. L. Bell et al., *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **12** (1983) 891.
- [23] M. A. Lennon et al., *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **17** (1988) 1285.
- [24] V. P. Shevelko and L. A. Vainshtein, *Atomic Physics for Hot Plasmas*, IOP Publishing, london, (1993).
- [25] S. M. Younger, *JQSRT*, **26** (1981) 329.
- [26] K. Bartschat and I. Bray. Electron-impact ionization of atomic hydrogen from the 1S and 2S states, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 29: (1996), L577-L583
- [27] I. Bray, I. E Mc Carthy, J. Wigley and A. T. Stelbovics, Calculation of electron scattering on the He⁺ ion, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 26 (1993) : L831-L836
- [28] Y. Kim, M. E Rudd, Binary-encounter-dipole model for electron-impact ionization, *Phys. Rev. A*, 50 (1994): 3954-3967
- [29] E.H. Guedda, Contribution à des structures atomiques et processus élémentaires dans les plasmas: Applications aux : hydrogénoïdes et aux héliumoïdes; thèse de doctorat, université Badji Mokhtar Annaba, Algerie (2006).

- [30] M. F. Gu, FAC 1.0.7, <http://kipac-tree.stanford.edu/fac/>
- [31] M. F. Gu, *can. J. phys.*, vol 86 (2008) 675—689
- [32] L.V.Chermysheva and V.L.Yakhontov. *Comput.Phys.Commun.* 119, 232 (1999)
- [33] C.Froese Fischer, T.Brage, and P.Jonsson, *Computational atomic physics: An MCHF approach*. Institute of Physics Publishing, Bristol, UK (2000).
- [34] M.Y.Amusia and L.V.Chermysheva. *Computation of atomic processes: A handbook for ATOM programs*, Institute of Physics Publishing, Bristol, UK, (1997).
- [35] H.Tawra and M.Kato, *Electron Impact Ionization Data for Atomic and ions*, NIFS-DATA, 509-5292, Toki Japan, (1999).
- [36] R.K.Janev, J.G.Wang, I.Murakami and T.Kato, *Cross Sections and Rate Coefficients for Electron-Impact Ionization of Hydrocarbon Molecules*, NIFS-DATA, 509-5292, Japan (2001).
- [37] H.Suno and T.Kato, *Cross Section Database for Carbon Atoms and Ions: Electron-impact Ionization, Excitation and charge Exchange in Collisions with Hydrogen Atoms*, NIFS-DATA, 509-5292, Japan, (2005).
- [38] S.Zou, L.Pichl, M.Kimura and T.Kato, *Total partial and differential ionization cross sections in in proton-hydrogen collisions at low energy*, NIFS-DATA-71, Japan, (2003)
- [39] D.Margreiter, H.Deutsch, T.D.Mark, *Asemiclassical approach to the calculation of electron impact ionization cross sections of atoms: from hydrogen to uranium*, *International Journal of Mass Spectrometry and Ion Processes*, 139, (1994), 127-139

Chapitre 04

Etude des taux d'ionisation : Application aux ions héliumoides

4-1 Introduction

Les électrons Non-Maxwelliens et suprathérmiques (ou ‘chauds’) présentent un sujet d'intérêt continu à la physique des plasmas et la fusion car ces électrons peuvent jouer un rôle important dans la formation, l'évolution et les propriétés radiatives d'une large variété de sources plasma. La distribution d'énergie électronique Non-Maxwellienne a été prédite ou détectée dans des diverses sources de laboratoire incluant les tokamaks [1, 2], des plasmas Laser [3, 4, 5], et des plasmas à force pulsée [5,6,7,8], aussi bien qu'à des sources astrophysiques comme des fusées de signalisation solaires [9,10,11] et des noyaux galactiques actifs [12], où ils sont produits par des champs électriques forts ou des interactions laser-plasma résonantes. De plus, les sources collisionnelle de rayon X (RX) qui mesurent les processus atomiques de base, comme des pièges d'ion de faisceau électronique [13] sont typiquement conduites par des faisceaux électroniques, qui sont principalement Non-Maxwellien. Les modèles collisionnel-radiatifs atomiques qui incluent les effets non-maxwellien et les distributions d'énergies électroniques sont donc d'intérêts significatifs, tant dans les données de physique atomiques que comme les outils spectroscopiques qui peuvent déterminer la présence et les caractéristiques de la fonction de distribution d'électron (EDF) dans des plasmas à partir des mesures spectroscopiques non invasives.

La simulation numérique des plasmas est un grand défi en raison de la complexité des problèmes réalistes, elle est aussi un moyen puissant d'investigation des phénomènes physiques, parallèle et complémentaire aux approches théoriques et expérimentales. Elle permet d'obtenir des informations détaillées sur des systèmes complexes, devant lesquels les méthodes de calcul analytiques sont impuissantes, et permet aussi d'accéder à des grandeurs souvent inaccessibles à l'expérience. Le coût numérique peut devenir très important lorsque la fonction de distribution s'éloigne de l'équilibre thermodynamique, parce qu'une méthode cinétique est alors nécessaire. Lorsque la solution reste proche de l'équilibre, une description fluide peut être suffisante.

4-2 Eléments de théorie

4-2-1 Fonctions de distributions

Le gaz modélisé par un système de N particules ponctuelles classiques indiscernables, est décrit par un hamiltonien H dépendant des coordonnées et des impulsions de toutes les particules. L'espace des phases d'un tel système ayant $6N$ dimensions, la fonction de distribution dans l'espace des phases dépend, outre du temps, de $6N$ variables coordonnées et impulsions.

Beaucoup de ces propriétés, que le gaz soit ou non en équilibre thermodynamique, sont en effet convenablement décrites en moyen de la fonction de distribution à une particule $f(r, p, t)$, fonction de 6 variables coordonnées et impulsions ainsi que du temps.

Lorsque les particules sont indépendantes, il suffit pour décrire complètement le système au niveau classique ou pour déterminer les propriétés macroscopiques, de connaître la fonction de distribution à un corps $f(r, p, t)$ dans l'espace de phase associé à la particule où $f(q_1, q_2, q_3, p_1, p_2, p_3, t)$.

La distribution $f(r, p, t)$ ainsi introduite peut être interpréter de la manière suivante : $f(r, p, t)d^3rd^3p$ représente le nombre moyen de particules contenues dans l'élément de volume de l'espace de phase d^3rd^3p à l'instant t :

$$d\tau = dq_1 dq_2 dq_3 dp_1 dp_2 dp_3 \quad (4-1)$$

La connaissance de $f(r, p, t)$ permet de déduire tous les propriétés du système dans le cadre de l'approximation de particule indépendante.

Le nombre moyen de particules par unité de volume à l'instant t , $n(r, t)$ est obtenue en intégrant la fonction $f(r, p, t)$ dans l'espace des impulsions des particules [14] :

$$n(r, t) = \iiint f(r, p, t) d^3p \quad (4-2)$$

La valeur moyenne (locale) au point r et à l'instant t de n'importe quelle grandeur $Q(r, p, t)$ liée à une particule est ainsi donnée en fonction de la fonction $f(r, p, t)$ par [14] :

$$Q(\vec{r}, \vec{p}, t) = \frac{1}{n(r, t)} \iiint f(r, p, t) d^3p \quad (4-3)$$

Ça peut s'agir de l'énergie cinétique, de la quantité de mouvement, ou toute autre propriété caractéristique des particules.

4-2-2 Fonction de distribution Maxwellienne

Si notre système est collisionnel avec une fréquence de collision ν , après un temps long comparé au temps de collision $1/\nu$, l'équipartition de l'énergie par collisions va toujours faire tender le système vers une fonction de distribution des vitesses Maxwellienne :

$$f(v) = n_e \left(\frac{m_e}{2\pi k_B T_e} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{m_e v^2}{2k_B T_e} \right) \quad (4-4)$$

Où m_e est la masse des particules, n_e est le nombre d'électrons, T_e est la température et k_B est la constante de Boltzmann.

On remarque que dans ce cas, la fonction de distribution est définie par un seul paramètre, la température T_e . La distribution Maxwellienne est la seule distribution pour laquelle la température est définie.

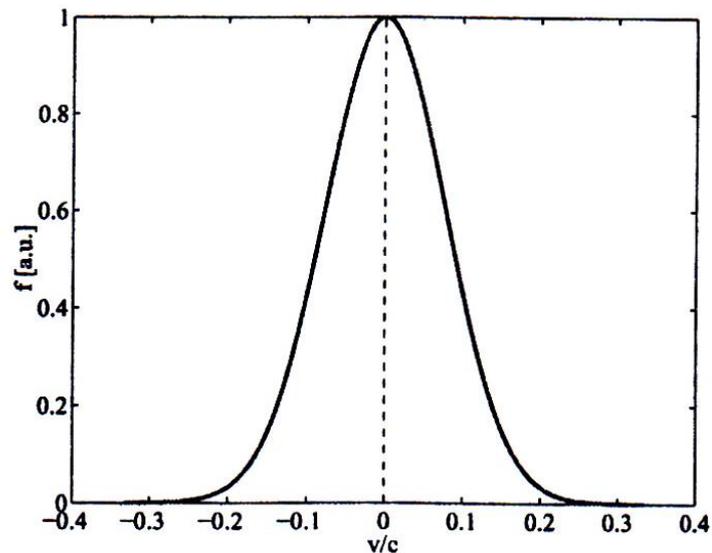


Figure 4-1: Distribution Maxwellienne normalisée

4-2-3 Fonction de distribution Non-Maxwellienne

La compréhension du rôle d'électrons chauds dans les plasmas est particulièrement importante à cause de leur influence sur la dynamique de plasma, la production de radiation et les bilans énergétiques. Un majeur conducteur historique dans l'étude des plasmas avec les électrons chauds est la question de réchauffements dans le laser motorisé aux schémas de fusion par

confinement inertiels. Des lasers intenses interagissant avec des cibles denses peuvent déposer l'énergie significative dans des électrons chauds à travers l'absorption résonante [15,16], de tels électrons peuvent mener aux pertes d'énergie significatives et avoir des effets délétères sur la stabilité et le contrôle de plasma [17]. Dans d'autre cas, les effets d'électrons chauds sont désirables, par exemple quand ils augmentent la production de radiation de haute énergie des sources plasma relativement à basses énergies [6, 18, 19, 20]. Si les électrons chauds sont avantageux ou nuisibles, les détectant et les caractérisant dans des plasmas de laboratoire est une étape importante vers le contrôle de leurs effets.

Les effets des électrons chauds sur les spectres de raies K-shell modélisé ont été largement étudiés en utilisant les fonctions de distributions électroniques à deux températures [21,22]. Les électrons chauds ont été montrés pour affecter le Pincements des spectres K-shell pour Al X [18], les dispositifs à foyer de plasma d'Ar [23], et les plasmas produits par l'irradiation laser de solide Mg [24], des groupes à gaz d'Ar [19, 25, 26, 27]. Plus récemment, les diagnostics spectroscopiques des électrons chauds pour L-shell ont été développés pour Kr [28], Cu [29, 30], et Zn [30] lasers de plasma et pour les plasmas de Pincement Mo X [20]. Les études réalisées sur K- et L-shell ont déterminé que les électrons chauds augmentent l'équilibre de l'état de charge moyen des plasmas et amplifient les intensités des lignes d'émissions formés à partir de l'excitation collisionnelle directe.

Ces études sur les électrons chauds ont été adaptées aux expériences particulières, et leurs conclusions ont été limitées pour fixer les formes de la distribution d'énergie utilisées pour d'écrire les électrons chauds. Des distributions d'énergie électroniques gaussiennes ont été utilisés pour décrire les électrons chauds produits par les impulsions laser intenses sur des cibles des groupes de gaz [19,25,26,28], des électrons chauds dans des plasmas formés par l'irradiation laser de cibles solides modelés avec des fonctions de distribution gaussiennes [24] et maxwellienne [29,30], et des électrons chauds dans des plasmas de force pulsée ont été modelés en utilisant des distributions gaussienne [18,23] et des distributions de la loi de puissance [20].

Les formes des fonctions de distributions sont présentées comme suit [31] :

$$\text{Maxwellienne : } F_M(\varepsilon', T_e) = 2 \sqrt{\frac{\varepsilon}{\pi T_e^3}} \exp \left[-\varepsilon/T_e \right] \quad (4-5)$$

$$\text{Gaussienne : } F_G(\varepsilon', \varepsilon_0) = \frac{1}{w\sqrt{\pi}} \left(\frac{2}{1-\text{erf}(-\varepsilon/w)} \right) \exp \left[-\left(\frac{\varepsilon-\varepsilon_0}{w} \right)^2 \right] \quad (4-6)$$

$$\text{La loi de puissance : } F_p(\varepsilon', \varepsilon_0) = \left(\frac{\gamma-1}{\varepsilon_0^{1-\gamma}} \right); \quad \varepsilon \geq \varepsilon_0 \quad (4-7)$$

Où $T_e, \varepsilon', \varepsilon_0, w$ sont les énergies des électrons correspondants à chaque distribution. γ est une constante de désintégration.

4-3 Calcul des données atomiques

4-3-1 Taux de transition radiative

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. Pour les ions hautement ionisés les effets relativistes doivent être inclus.

La désexcitation radiative spontanée est caractérisée par la probabilité de transition radiative entre un niveau j et un niveau i , notée A_{ji} . Cette probabilité de transition est la plus forte pour le type dipolaire électrique.

Une étude détaillée a été menée en utilisant le programme FAC [32] suivant plusieurs configurations pour le calcul des taux de transitions radiatives. 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 transitions ou les taux de transitions radiatives sont calculées dans l'approximation multipôle (single) avec des rangs arbitraires. Pour la configuration choisie, les résultats obtenus pour les taux de transition radiative sont exposés au tableau (4-1). Nos résultats sont généralement comparables aux calculs de Lindroth et al. [33, 34, 35] et les calculs MZ [35, 36] pour l'He neutre.

Transition	E (eV)	E (eV)	E (eV)	A (sec ⁻¹)	A (sec ⁻¹)	A (sec ⁻¹)
Lindroth MZ	Lindroth [33]	MZ [35]	FAC [32]	Lindroth [33]	MZ [35]	FAC [32]
1s2p3P ₀₋₂ s ² 1S ₀ E111-P331	36.8762	36.660	36.767		0.00	0.00
1s2p3 P ₀₋₂ p ² 1S ₀ F111-P331	41.1208	40.816	42.317		0.00	0.00
1s2p3 P ₀₋₂ p ² 3 P ₀ F'331-P331	38.7094		38.659			0.00
1s2p3P ₀₋₂ p ² 3 P ₁ F'333-P331	38.7096	42.320	38.659	3.9120E09	9.43E07	4.549E09
1s2p3P ₀₋₂ p ² 3 P ₂ F'335-P331	38.7103		38.659		0.00	0.00
1s2p3 P ₀₋₂ p ² 1D ₂ F155-P331	38.9446		39.563		0.00	0.00
1s2p3 P ₁₋₂ s ² 1S ₀ E111-P333	36.8762	36.660	36.767	3.41E02	1.53E03	1.2309E02
1s2p3P ₁₋₂ p ² 1S ₀ F111-P333	41.1208	40.816	42.318	1.60E01	7.14E02	1.2994E02
1s2p3P ₁₋₂ p ² 3 P ₀ F'331-P333	38.7095	42.320	38.659	1.1736E10	2.82E08	1.3650E10
1s2p3 P ₁₋₂ p ² 3 P ₁ F'333-P333	38.7096	42.320	38.660	2.9341E09	7.09E07	3.4125E09
1s2p3P ₁₋₂ p ² 3p ₂ F'335-P333	38.7103	42.320	38.660	2.9524E09	7.05E07	3.4124E09
1s2p3P ₁₋₂ p ² 1D ₂ F155-P333	38.9446	38.543	39.563	6.17E03	7.09E04	2.4797E02
1s2p3 P ₂₋₂ s ² 1S ₀ E111-P335	36.8762		36.768			0.00
1s2p3P ₂₋₂ p ² 1S ₀ F111-P335	41.1208		38.660			0.00
1s2p3P ₂₋₂ p ² 3 P ₀ F'331-P335	38.7094		42.318			0.00
1s2p3 P ₂₋₂ p ² 3 P ₁ F'333-P335	38.7096	42.320	38.660	4.8906E09	1.17E08	5.6880E09
1s2p3P ₂₋₂ p ² 3 P ₂ F'335-P335	38.7103	42.320	38.660	8.8571E09	2.12E08	1.0238E10
1s2p3P ₂₋₂ p ² 1D ₂ F155-P335	38.9446	38.543	39.564		1.26E05	6.1034E02
1s2p1P ₁₋₂ s ² 1S ₀ E111-P133	36.6226	36.491	35.469	2.3793E09	3.04E09	2.6570E09
1s2p1P ₁₋₂ p ² 1S ₀ F111-P133	40.8672	40.648	41.020	8.0859E09	9.54E09	12.1961E09
1s2p1P ₁₋₂ p ² 3 P ₀ F'331-P133	38.4559	42.747	37.361	5.37E01	2.93E01	3.6035E01
1s2p1P ₁₋₂ p ² 3 P ₁ F'333-P133	38.4560	42.747	37.361	8.14E01	7.42E01	0.1174E01
1s2p1P ₁₋₂ p ² 3 P ₂	38.4567	42.747	37.362	6.41E05	2.49E02	8.1938E02

F'335-P133						
1s2p1P ₁₋₂ p ² 1D ₂ F155-P133	38.6910	38.375	38.265	1.0203E10	1.50E10	1.3236E10
1s2s3S _{1-2s2p3} P ₀ C331-S313	38.4936	38.420	38.722	6.2232E09	6.83E09	6.8588E09
1s2s3S _{1-2s2p3} P ₁ C333-S313	38.4937	38.4941	38.732	6.2232E09	6.83E09	6.8587E09
1s2s3S _{1-2s2p3} P ₂ C335-S313	38.4941	38.421	38.723	6.2232E09	6.83E09	6.8585E09
1s2s3S _{1-2s2p1} P ₁ C133-S313	40.3274	39.737	41.506	7.96E01	2.94E02	5.1799E01
1s2s1S _{0-2s2p3} P ₀ C331-S111	37.6974	37.675	37.033		0.00	0.00
1s2s1S _{0-2s2p3} P ₁ C333-S111	37.6976	37.675	37.033	1.09E02	2.88E02	7.2739E01
1s2s1S _{0-2s2p3} P ₂ C335-S111	37.6979		37.033			0.00
1s2s1S _{0-2s2p1} P ₁ C133-S111	39.5313	38.991	39.816	6.4397E09	8.19E09	7.4560E09

Tableau 4-1: les taux de transition radiative pour quelques niveaux de transition pour l'He neutre.

C=2s2p, E=2s2s, F=2p2p, P= 1s2p S= 1s2s, F'/= 2p3p

4-3-2 Taux d'auto-ionisation pour un plasma d'hélium neutre

L'électron incident peut, s'il est suffisamment énergétique, exciter un électron appartenant à une sous-couche interne de l'ion cible. Cela donne naissance à un niveau autoionisant de l'ion, qui peut être suivi par l'autoionisation. Dans cette deuxième voie d'ionisation, il faut que l'énergie de l'électron incident soit supérieure ou égale à la première énergie d'ionisation de l'ion. Cette ionisation indirecte joue un rôle capital dans la détermination de l'état d'ionisation d'un plasma chaud. Ce mécanisme intervient pour expliquer l'existence des niveaux doublement excités (caractérisés par les raies satellites).

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 (4-2) montre une comparaison faite pour les niveaux 2l2l' de l'He neutre 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'auto

ionisation sont généralement de même ordre de grandeur sauf pour quelques sous niveaux donnés par MZ.

Transition	E(eV)	E (eV)	E (eV)	$\Gamma(\text{sec}^{-1})$	$\Gamma(\text{sec}^{-1})$	$\Gamma(\text{sec}^{-1})$
Lindroth MZ	Lindroth [33]	MZ [35]	FAC [32]	Lindroth [33]	MZ [35]	FAC [32]
$1s2p3P_0-2s^21S_0$ E111-P331	36.8762	36.660	36.767	1.878E14	1.48E14	1.792E14
$1s2p3P_0-2p^21S_0$ F111-P331	41.1208	40.816	42.317	8.942E12	2.78E12	3.2964E12
$1s2p3P_0-2p^23P_0$ F/331-P331	38.7094		38.659	2.067E06	3.79E07	1.2338E04
$1s2p3P_0-2p^23P_1$ F/333-P331	38.7096	42.320	38.659	6.890E05	6.40E04	3.6301E05
$1s2p3P_0-2p^23P_2$ F/335-P331	38.7103		38.659	4.471E11	2.53E10	1.7992E07
$1s2p3P_0-2p^21D_2$ F155-P331	38.9446		39.563	9.860E13	8.02E13	1.7960E14
$1s2p3P_1-2s^21S_0$ E111-P333	36.8762	36.660	36.767	1.878E14	1.48E14	1.7922E14
$1s2p3P_1-2p^21S_0$ F111-P333	41.1208	40.816	42.318	8.942E12	2.78E12	3.2964E12
$1s2p3P_1-2p^23P_0$ F/331-P333	38.7095	42.320	38.659	2.067E06	3.79E07	1.2338E04
$1s2p3P_1-2p^23P_1$ F/333-P333	38.7096	42.320	38.660	6.890E05	6.40E04	3.6301E05
$1s2p3P_1-2p^23P_2$ F/335-P333	38.7103	42.320	38.660	4.471E11	2.53E10	1.7992E07
$1s2p3P_1-2p^21D_2$ F155-P333	38.9446	38.543	39.563	9.860E13	8.02E13	1.7960E14
$1s2p3P_2-2s^21S_0$ E111-P335	36.8762		36.768	1.878E14	1.48E14	1.7922E14
$1s2p3P_2-2p^21S_0$ F111-P335	41.1208		38.660	8.942E12	2.78E12	3.2964E12
$1s2p3P_2-2p^23P_0$ F/331-P335	38.7094		42.318	2.067E06	3.79E07	1.2338E04
$1s2p3P_2-2p^23P_1$ F/333-P335	38.7096	42.320	38.660	6.890E05	6.40E04	3.6301E05
$1s2p3P_2-2p^23P_2$ F/335-P335	38.7103	42.320	38.660	4.471E11	2.53E10	1.7992E07
$1s2p3P_2-2p^21D_2$ F155-P335	38.9446	38.543	39.564	9.860E13	8.02E13	1.7960E14
$1s2p1P_1-2s^21S_0$ E111-P133	36.6226	36.491	35.469	1.878E14	1.48E14	1.7922E14
$1s2p1P_1-2p^21S_0$ F111-P133	40.8672	40.648	41.020	8.942E12	2.78E12	3.2964E12

1s2p1P ₁ -2p ² 3 P ₀ F/331-P133	38.4559	42.747	37.361	2.067E06	3.79E07	1.2338E04
1s2p1P ₁ -2p ² 3 P ₁ F/333-P133	38.4560	42.747	37.361	6.890E05	6.40E04	3.6301E05
1s2p1P ₁ -2p ² 3 P ₂ F/335-P133	38.4567	42.747	37.362	4.471E11	2.53E10	1.7992E07
1s2p1P ₁ -2 p ² 1D ₂ F155-P133	38.6910	38.375	38.265	9.860E13	8.02E13	1.7960E14
1s2s3S ₁ -2s2p3 P ₀ C331-S313	38.4936	38.420	38.722	1.237E13	1.20E13	0.7035E13
1s2s3S ₁ -2s2p3 P ₁ C333-S313	38.4937	38.4941	38.732	1.237E13	1.20E13	0.7032E13
1s2s3S ₁ -2s2p3 P ₂ C335-S313	38.4941	38.421	38.723	1.236E13	1.20E13	0.7026E13
1s2s3S ₁ -2s2p1 P ₁ C133-S313	40.3274	39.737	41.506	5.677E13	5.61E13	10.339E13
1s2s1S ₀ -2s2p3P ₀ C331-S111	37.6974	37.675	37.033	1.237E13	1.20E13	0.7035E13
1s2s1S ₀ -2s2p3P ₁ C333-S111	37.6976	37.675	37.033	1.237E13	1.20E13	0.7032E13
1s2s1S ₀ -2s2p3P ₂ C335-S111	37.6979		37.033	1.236E13		0.7026E13
1s2s1S ₀ -2s2p1P ₁ C133-S111	39.5313	38.991	39.816	5.677E13	5.61E13	10.339E13

Tableau 4-2 : les taux d'auto ionisation pour quelques niveaux de transition pour l'He neutre.

C=2s2p, E=2s2s, F=2p2p, P= 1s2p S= 1s2s, F'= 2p3p

4-4 Calcul des coefficients de taux d'ionisation pour les ions héliumoïdes

Les coefficients de taux d'ionisation pour différents ions sont importants pour comprendre l'équilibre d'ionisation à la fois aux plasmas de laboratoire et d'astrophysiques. Plusieurs formules empiriques ont été proposées pour calculer des coefficients de taux d'ionisation ainsi que les sections efficaces. Le processus d'ionisation à partir des états métastables est également important dans l'expérience.

Dans cette réaction, un électron incident ionise un atome, un ion ou une molécule, généralement de l'état fondamental vers le continue. La réaction implique le transfert d'énergie et de quantité de mouvement entre l'électron incident et un électron lié au noyau avec une certaine énergie. Pour déloger cet électron lié, l'électron incident doit donc avoir une énergie E_i au moins aussi grande qu'un certain seuil χ_i qui est le potentiel d'ionisation de l'atome. Le tableau 4-3 donne les potentiels d'ionisation pour différents atomes.

Potentiel Ionisation (eV)	Élément	Symbole	Numéro Atomique
24.587	Hélium	He	2
21.564	Néon	Ne	10
15.759	Argon	Ar	18
14.534	Azote	N	7
13.999	Krypton	Kr	36
13.618	Oxygène	O	8
13.598	Hydrogène	H	1
12.13	Xénon	Xe	54
11.26	Carbone	C	6
9.394	Zinc	Zn	30
9.322	Béryllium	Be	4
9.225	Or	Au	79
9	Platine	Pt	78
7.98	Tungstène	W	74
7.87	Fer	Fe	26
7.726	Cuivre	Cu	29
7.646	Magnésium	Mg	12
7.099	Molybdène	Mo	42
6.82	Titane	Ti	22
5.986	Aluminium	Al	13

Tableau 4-3 : Potentiel d'ionisation de quelques éléments. [3]

Le coefficient du taux d'ionisation τ est donné en fonction de la section efficace d'ionisation $\sigma(E)$ par l'intégrale :

$$\tau = \int v\sigma(E)f(E)dE, \quad v = \sqrt{\frac{2E}{M}} \quad (4-8)$$

où M est la masse des particules, $f(E)$ est la fonction de distribution en fonction de l'énergie, E représente l'énergie d'impact électronique et v est la vitesse des particules.

Dans notre cas, on distingue deux types de fonctions de distribution : maxwellienne et non-maxwellienne.

4-4-1 Méthode de calcul en utilisant une distribution maxwellienne

Dans ce cas la fonction de distribution $f_M(E)$, exprimée en fonction de l'énergie d'impact, s'écrit sous la forme suivante :

$$f_M(E) = \frac{2\sqrt{E}}{T^{3/2}\sqrt{\pi}} e^{-\frac{E}{T}}, \quad (4-9)$$

où T est la température en (eV). Cette fonction de distribution sera injectée dans la formule (4-8) du taux d'ionisation. Les résultats obtenus concernant la détermination du taux d'ionisation de l'He neutre et les ions héliumoïdes tel que Li^+ , Ar^{+16} et Fe^{+24} sont reportés sur les figures (4-2), (4-3), (4-4) et (4-5) respectivement.

4-4-2 Résultats et discussion

Les résultats obtenus pour le calcul des coefficients des taux d'ionisation de l'hélium neutre sont comparés à ceux publiés dans [37, 38, 39, 40, 41]. La figure (4-2) montre les valeurs de ces taux pour une distribution maxwellienne. En général, une bonne concordance a été remarquée sur les courbes de la figure (4-2). Des écarts importants sont observés pour les faibles températures dans la gamme énergétique [20-200] (eV). En effet, aux faibles températures, (T inférieur à 12.5 eV pour l'hélium) les taux d'ionisation sont très sensibles au comportement des sections efficaces [37]. Il existe des écarts considérables entre les différentes méthodes théoriques et/ou empiriques.

L'approximation de Born de l'onde plane n'est pas valide aux faibles énergies et donne des sections efficaces plus petites d'un facteur de 2 que celles obtenues par un calcul basé sur la méthode des ondes déformées (DW) [37]. Ces écarts sont acceptables dans l'intervalle [200 -700] (eV), alors qu'ils sont très faibles à partir de 1000 eV. Le tableau (4-4) montre quelques écarts relatifs par rapport à Kato et al. [37] des taux d'ionisation de l'hélium neutre. Nous avons trouvé des écarts relatifs de l'ordre de 20%.

N.B :

τ_M : taux d'ionisation dans le cas de la distribution maxwellienne

$\Delta \tau_M / \tau_{kato} = \tau_M - \tau_{kato} / \tau_{kato}$: Ecart relatif des taux d'ionisation dans le cas de la distribution maxwellienne.

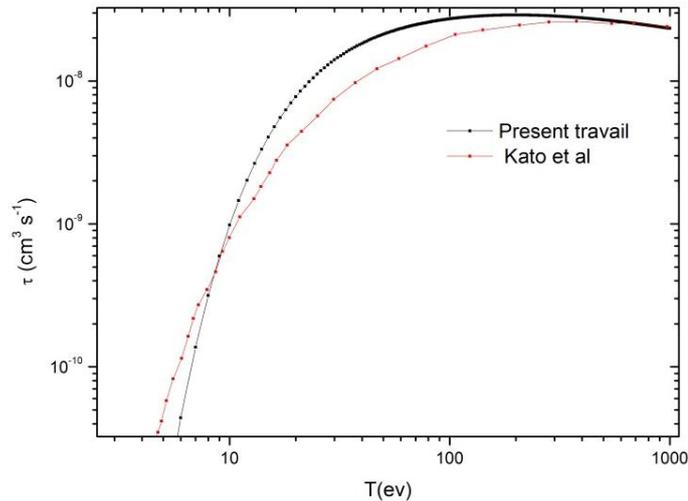


Figure 4-2: Coefficients du taux d'ionisation pour He (cas de la distribution maxwellienne)

T (eV)	τ_{Kato}	τ_M	$\Delta \tau_M / \tau_{kato}$
24.6	5.41 E-09	0.10 E-09	0.98
100	1.99 E-08	2.74 E-08	0.27
1000	2.38 E-08	2.38 E-08	0.00

Tableau 4-4: Les écarts relatifs des taux d'ionisation pour He neutre dans le cas de la distribution maxwellienne

Pour le lithium héliumöide on remarque que les erreurs sont trop faibles entre la gamme énergétique 10eV- 100eV et la gamme 500eV-1000eV, alors qu'elles sont considérables autour de 150eV. En absence des données expérimentales, Arnaud et Rothenflug [39] inclus les processus d'excitation et d'autoionisation alors que Belfast ne le fait pas. Ce choix est important, surtout pour

Na les ions de Li et Mg à Ar séquences (de moins en moins importantes avec l'augmentation du nombre d'électrons). Cela se traduit par les différences des températures élevées.

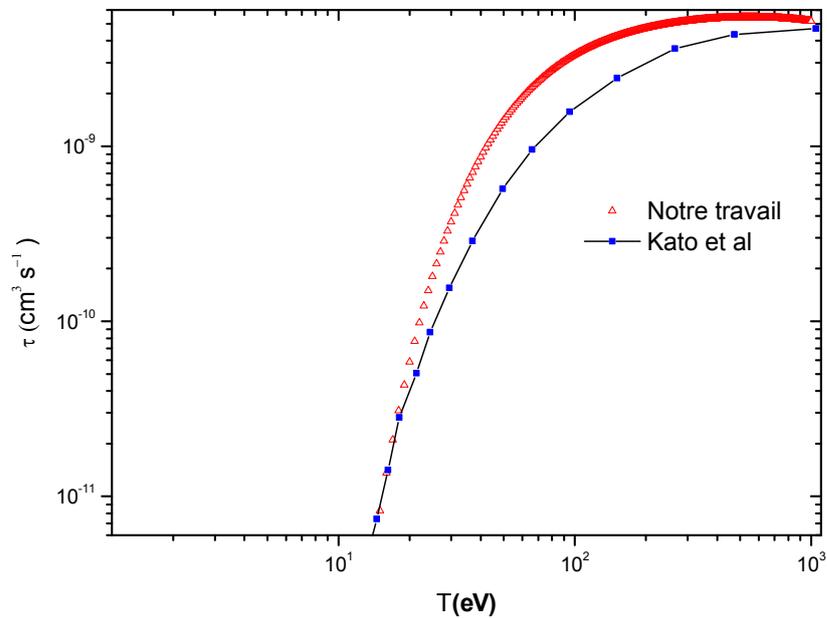


Figure 4-3: Coefficients du taux d'ionisation pour Li^+ (cas de la distribution maxwellienne)

T (eV)	τ_{Kato}	τ_{M}	$\Delta \tau_{\text{M}} / \tau_{\text{kato}}$
18.08	2.82 E-11	2.80 E-11	0.00
100	1.64 E-09	3.32 E-09	1.02
350	3.88 E-09	5.30 E-09	0.36
1000	4.63E-09	5.17E-09	0.11

Tableau 4-5: Les écarts relatifs des taux d'ionisation pour Li^+ dans le cas de la distribution maxwellienne

Pour l'argon héliumoïde on remarque que les erreurs sont trop faibles dans la gamme énergétique [8000eV- 10000eV], alors qu'elles sont considérables dans la gamme [3000eV-5000eV].

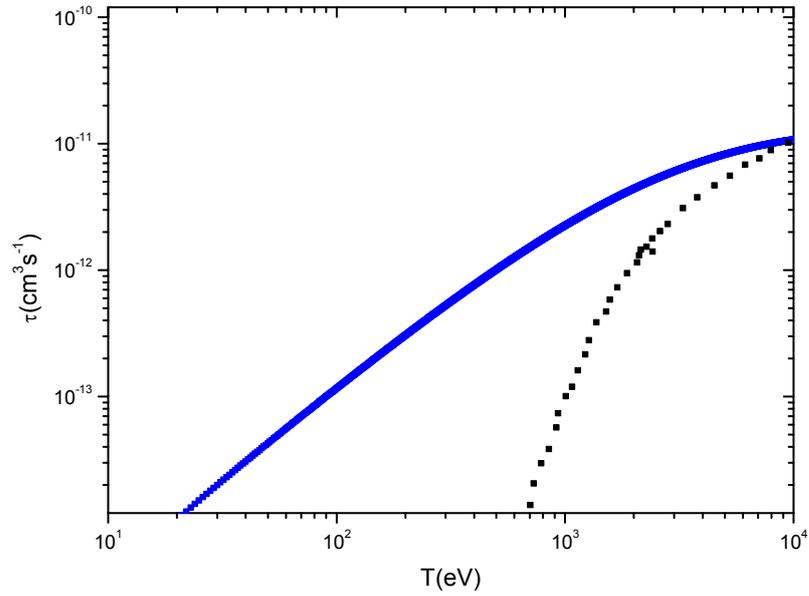


Figure 4-4: Coefficients du taux d'ionisation pour Ar^{+16} (cas de la distribution maxwellienne)

T (eV)	τ_{Kato}	τ_{M}	$\Delta \tau_{\text{M}} / \tau_{\text{kato}}$
3026	2.49E-12	6.07E-12	1.43
5265	5.57E-12	8.44E-12	0.51
8025	1.00E-11	1.00E-11	0.00
10000	1.07E-11	1.07E-11	0.00

Tableau 4-6: Les écarts relatifs des taux d'ionisation pour Ar^{+16} dans le cas de la distribution maxwellienne

Dans les plasmas réels, nous devons tenir compte de l'ionisation des états excités car les populations des états excités ne sont pas toujours négligeables par rapport à la population de l'état fondamental. Les coefficients de taux sont ceux de l'état fondamental, sauf pour les données recommandées pour les ions du fer proposé par Pindzola [41].

Les résultats de calcul des taux d'ionisation du fer héliumoïde obtenus sont reportés sur la figure (4-5). Ces résultats sont comparés à ceux publiés par Kato et al. [37]. En général, une bonne concordance a été remarquée sur les deux courbes de la figure (4-5). Cependant le tableau (4-7) montre les erreurs relatives entre les taux de Kato et al. (τ_{Kato}), Belfast (τ_{Belfast}) et ceux du présent

travail (τ_M). Les erreurs calculées sont considérables dans la gamme 10^3eV - 10^4eV , alors qu'elles sont trop faibles autour de 1500eV et 10^5eV .

Les formules des sections efficaces de Lotz [38], AR [39] et Belfast [40] sont très similaires les unes aux autres [37], l'ajustement de polynômes de Chebychev des coefficients de taux indiquées dans Penzola [41] ne peut pas reproduire les véritables coefficients des taux à très basse température. En effet, les valeurs des coefficients des taux augmentent très rapidement à des températures basses.

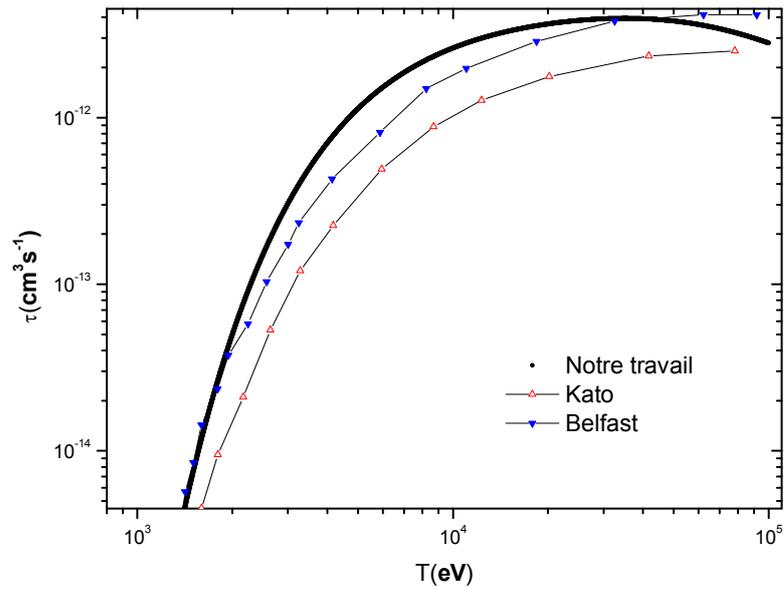


Figure 4-5: Coefficients du taux d'ionisation pour Fe^{+24} (cas de la distribution maxwellienne)

T (eV)	τ_M	τ_{Belfast}	τ_{Kato}	$\Delta \tau / \tau$
1500	8.23 E-15	2.80-15		00
6100	1.52 E-12	8.95 E-13	5.13E-13	0.69 - 1.96
40100	4.20E-12	4.20 E-12	2.35E-12	00 - 0.78

Tableau 4-7: Les écarts relatifs des taux d'ionisation pour Fe^{24+} dans le cas de la distribution maxwellienne

4-4-3 Méthode de calcul en utilisant une distribution non-maxwellienne

Nous utilisons une distribution non-maxwellienne en énergie pour le calcul des taux d'ionisation à partir des sections efficaces. Cette distribution a été utilisée pour étudier l'influence des électrons chauds sur les propriétés radiatives d'un plasma d'hélium [42]. Les plasmas produits à basse pression exhibent souvent des fonctions de distributions non-maxwelliennes pour les électrons qui peuvent être représentées par une distribution à deux températures qui correspondent à une population chaude et une autre froide.

Dans notre cas, nous avons choisi une distribution Non-Maxwellienne qui prend la forme [42]:

$$f_{NM}(E) = (1 - f_{hot})f_M(T_{bulk}) + f_{hot}f_M(T_{hot}), \quad (4-10)$$

où f_{hot} est une fraction normalisée des électrons chauds, f_M la distribution maxwellienne, T_{bulk} et T_{hot} sont les températures des électrons froids et chauds respectivement. Selon *Escarguel et al.* [42], la valeur exacte de la température T_{hot} n'est pas importante : en effet, les études [42] ont prouvé que la dépendance spectrale à l'égard de la température T_{hot} est plutôt faible si $k_B T_{hot}$ est plus grand que l'énergie d'ionisation.

L'injection de la relation (4-10) dans l'équation (4-8), ainsi que les sections efficaces d'ionisation calculées par le code FAC [32] pour l'He neutre et les autres ions (Li^+ , Ar^{+16} et Fe^{+24}), nous ont permis d'obtenir les taux d'ionisation pour différentes valeurs de la fraction des électrons chauds f_{hot} .

4-4-4 Résultats et discussion

Les résultats obtenus du calcul des coefficients du taux d'ionisation de l'He neutre et les ions héliumoïdes Li^+ , Ar^{+16} et Fe^{+24} sont reportés sur les figures (4, 6-12) dans le cas de la distribution Non- Maxwellienne.

Les figures (4-6) et (4-7) présentent les résultats de calcul des taux d'ionisation de l'hélium neutre pour la distribution non-maxwellienne pour différentes fractions des électrons chauds. La température T_{bulk} a été prise pour une valeur moyenne de $k_B T_{bulk}$ égale à 0.85 eV. La valeur exacte de cette température n'influe pas sur l'allure de la courbe des taux d'ionisation. En effet les fractions des électrons froids sont prises faibles par rapport aux électrons chauds.

Si on s'intéresse aux hautes températures, on remarque que les courbes des taux d'ionisation sont très sensibles aux fractions des électrons chauds. Le tableau (4-8) montre quelques écarts

relatifs par rapport à Kato et al. [37] pour différentes fractions (80%, 90% et 100%). Les courbes des taux d'ionisation sur la figure (4-6) s'éloignent de celui de Kato et al. [37] au fur et à mesure que la fraction des électrons chauds diminue. Cependant, pour une fraction de 100% des électrons chauds, les courbes s'approchent de celle obtenue par la distribution maxwellienne. Ceci montre une sensibilité remarquable des taux d'ionisation en fonction des fractions des électrons chauds.

Cependant, et pour la figure (4-7), on remarque une bonne concordance entre les courbes du présent travail et celle de Kato et al. [37] pour les différentes fractions (1%, 2%, 4%). Le tableau (4-8) montre quelques écarts relatifs. Ces écarts sont acceptables dans l'intervalle [20-1000] (eV) alors qu'elles sont trop faibles autour de 100eV.

Il est important de noter que lorsque les énergies de distributions d'électrons sont plus grandes que l'énergie de Threshold, la majeure partie de la forte dépendance de la vitesse des coefficients de taux des énergies de distributions s'annule. En particulier, les coefficients de taux d'ionisation ne sont que faiblement dépendant de l'énergie de distribution des électrons dans la mesure où $T_e \gg \Delta E$

Lorsque les sections efficaces se décroît très rapidement (comme dans les figures : (3-3) et (3-4), les énergies de distributions ont un impact significatif sur les coefficients de taux. Les coefficients de taux d'ionisation sont assez insensibles à la forme des fonctions de distributions car ses sections efficaces sont intégrées sur toute la fonction de distribution d'électrons (The electrons distribution function EDF). L'insensibilité relative de l'ionisation collisionnelle envers les énergies de distributions d'électrons a des conséquences importantes pour les modèles collisionnel radiatifs à deux températures (chaude et froide) ou l'insensibilité des effets d'électrons chauds a été observée pour les distributions maxwelliennes [31].

NB :

τ_{NM} : taux d'ionisation dans le cas de la distribution non- maxwellienne

$\Delta \tau_{NM} / \tau_{kato} = \tau_{NM} - \tau_{kato} / \tau_{kato}$: Ecart relatif des taux d'ionisation dans le cas de la distribution non-maxwellienne

f_{hot} : La fraction des électrons chauds.

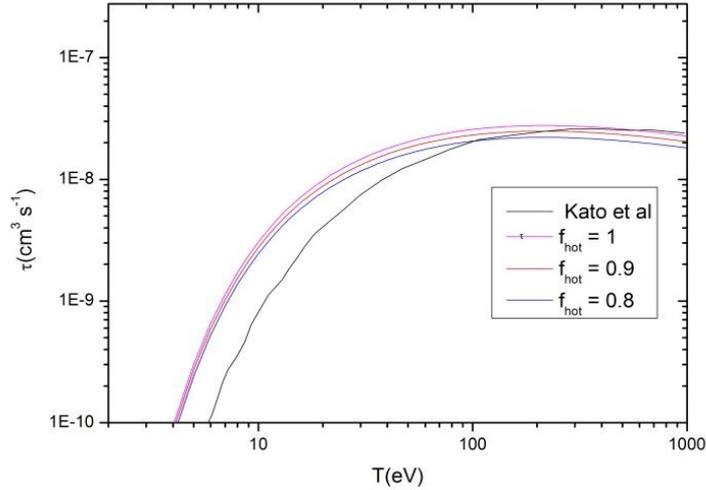


Figure 4-6: Coefficients du taux d'ionisation pour l'hélium neutre (cas de la distribution non- maxwellienne) pour $f_{hot}=0.8, 0.9, 1.0$

T (eV)	τ_{Kato}	f_{hot}	τ_{NM}	$\Delta \tau_{NM} / \tau_{kato}$
25.09	5.61 E-09	0.8	9.36 E-09	0.66
		0.9	10.57E-09	0.88
		1.0	12.18E-09	1.17
100	1.99 E-08	0.8	2.03 E-08	0.015
		0.9	2.25 E-08	0.12
		1.0	2.55 E-08	0.27
700	2.49 E-08	0.8	1.99E-08	0.20
		0.9	2.16E-08	0.13
		1.0	2.49E-08	0.00
1000	2.45E-08	0.8	1.80E-08	0.26
		0.9	2.03E-08	0.17
		1.0	2.30E-08	0.06

Tableau 4-8: Les écarts relatifs des taux d'ionisation de l'He neutre dans le cas de la distribution non- maxwellienne pour $f_{hot}=0.8, 0.9, 1.0$

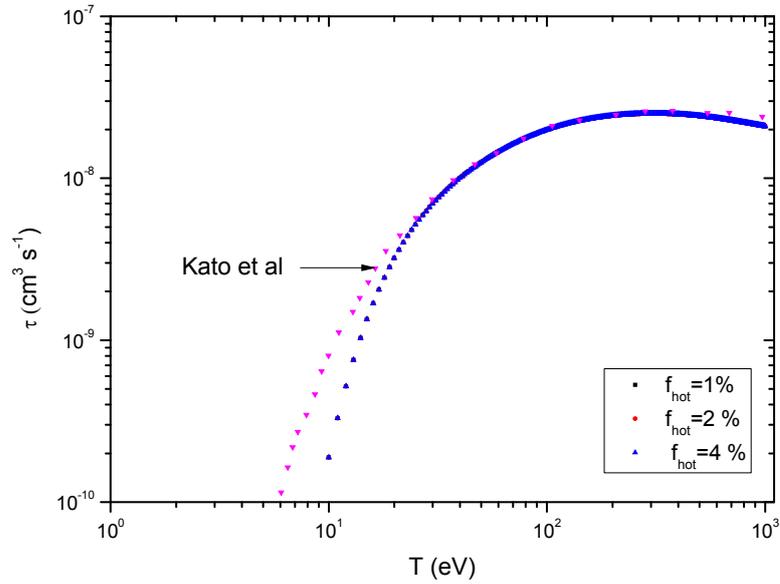


Figure 4-7: Coefficients du taux d'ionisation pour l'hélium neutre (cas de la distribution non- maxwellienne) pour $f_{hot}= 0.01, 0.02, 0.04$

T (eV)	τ_{Kato}	f_{hot}	τ_{NM}	$\Delta \tau_{NM} / \tau_{kato}$
21.24	4.44 E-09	0.01	3.61E-09	0.18
		0.02	3.61E-09	0.18
		0.04	3.61E-09	0.18
106	2.11 E-08	0.01	2.04 E-08	0.03
		0.02	2.04 E-08	0.03
		0.04	2.04 E-08	0.03
972.3	2.40 E-08	0.01	2.11E-08	0.12
		0.02	2.11E-08	0.12
		0.04	2.11E-08	0.12

Tableau 4-9: Les écarts relatifs des taux d'ionisation de l'He neutre dans le cas de la distribution non- maxwellienne pour $f_{hot}= 0.01, 0.02, 0.04$

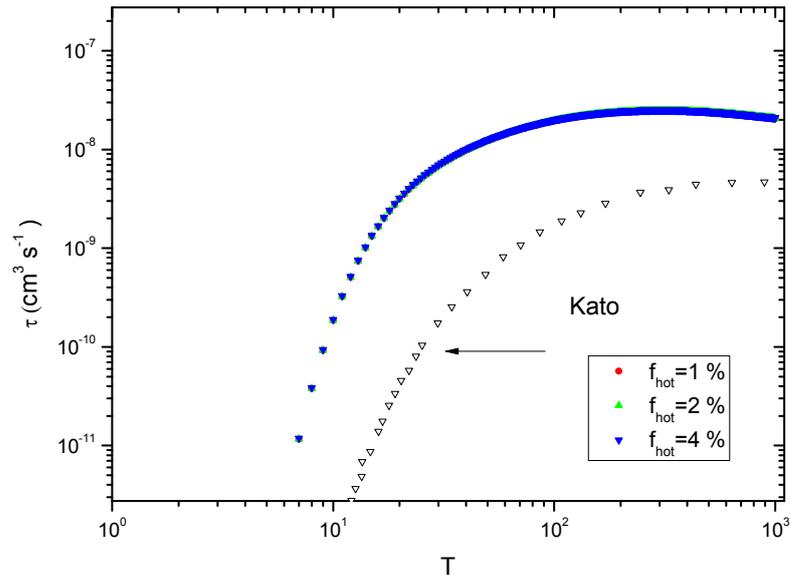


Figure 4-8: Coefficients du taux d'ionisation pour Li^+ (cas de la distribution non- maxwellienne) pour $f_{hot} = 0.01, 0.02, 0.04$

T (eV)	τ_{Kato}	f_{hot}	τ_{NM}	$\Delta \tau_{\text{NM}} / \tau_{\text{kato}}$
20.33	4.58E-11	0.01	3.14E-09	0.99
		0.02	3.14E-09	0.99
		0.04	3.14E-09	0.99
108.15	1.88E-09	0.01	2.01E-08	0.89
		0.02	2.01E-08	0.89
		0.04	2.01E-08	0.89
895	4.70E-09	0.01	2.10E-08	0.95
		0.02	2.10E-08	0.95
		0.04	2.10E-08	0.95

Tableau 4-10: Les écarts relatifs des taux d'ionisation de Li^{+1} dans le cas de la distribution non- maxwellienne pour $f_{hot} = 0.01, 0.02, 0.04$

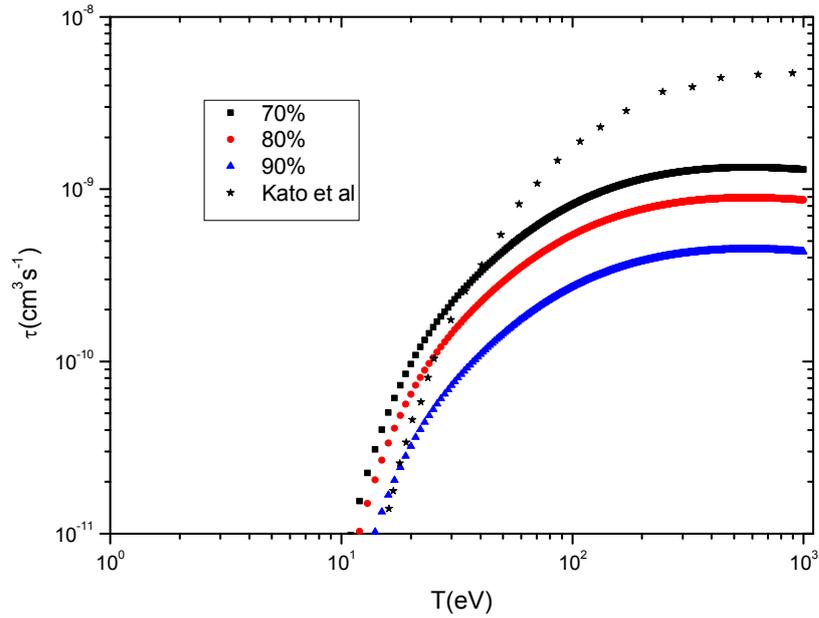


Figure 4-9: Coefficients du taux d'ionisation pour Li^+ (cas de la distribution non- maxwellienne) pour $f_{hot}= 0.7, 0.8, 0.9$

T (eV)	τ_{Kato}	f_{hot}	τ_{NM}	$\Delta \tau_{\text{NM}} / \tau_{\text{kato}}$
16.06	1.39E-11	0.7	5.03E-11	2.61
		0.8	3.35E-11	1.41
		0.9	1.67E-11	0.20
40	3.62E-10	0.7	3.30E-10	0.08
		0.8	2.20E-10	0.39
		0.9	1.10E-10	0.69
1000	4.60E-09	0.7	1.29E-09	0.71
		0.8	8.66E-10	17.8
		0.9	4.33E-10	7.76

Tableau 4-11: Les écarts relatifs des taux d'ionisation de Li^{+1} dans le cas de la distribution non- maxwellienne pour $f_{hot}= 0.7, 0.8, 0.9$

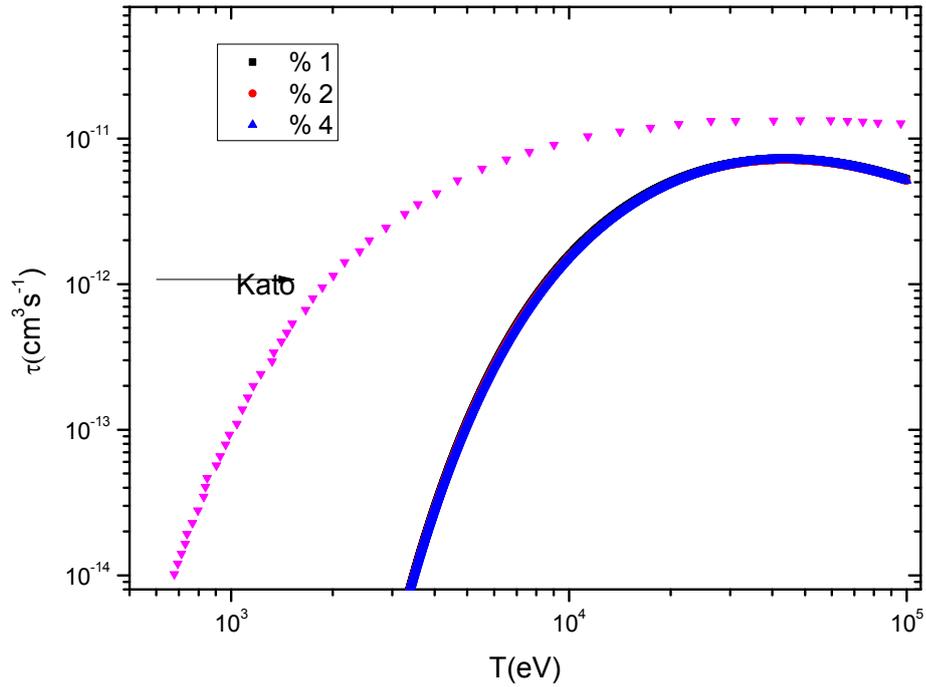


Figure 4-10: Coefficients du taux d'ionisation pour Ar^{16+} (cas de la distribution non- maxwellienne) pour $f_{hot} = 0.01, 0.02, 0.04$

T (eV)	τ_{Kato}	f_{hot}	τ_{NM}	$\Delta \tau_{\text{NM}} / \tau_{\text{kato}}$
9021.7	9.08E-12	0.01	1.17E-12	0.87
		0.02	1.17E-12	0.87
		0.04	1.17E-12	0.87
11378.7	1.03E-11	0.01	2.09E-12	0.95
		0.02	2.09E-12	0.95
		0.04	2.09E-12	0.95
96063	1.27E-11	0.01	2.10E-12	0.93
		0.02	2.10E-12	0.93
		0.04	2.10E-12	0.93

Tableau 4-12: Les écarts relatifs des taux d'ionisation de Ar^{16+} dans le cas de la distribution non- maxwellienne pour $f_{hot} = 0.01, 0.02, 0.04$

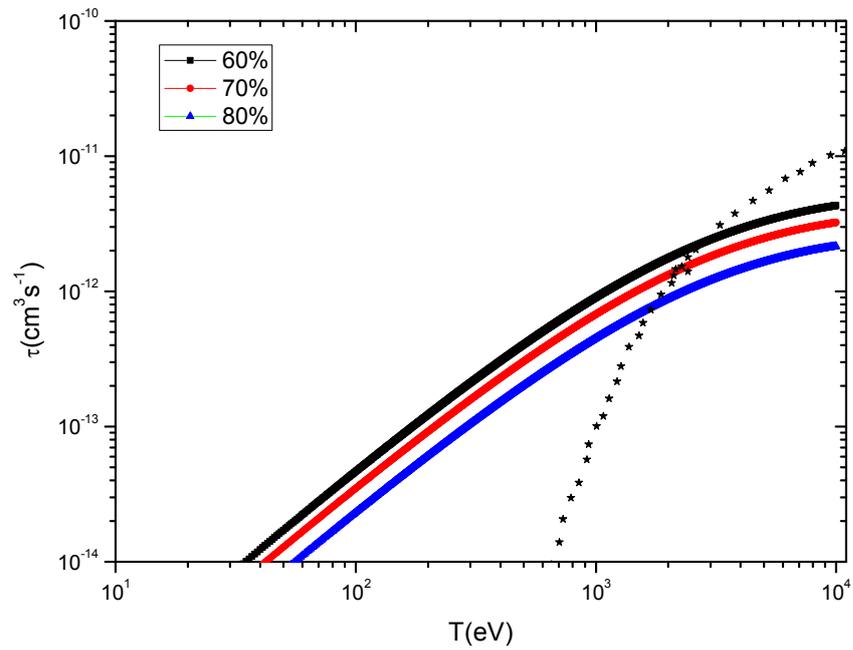


Figure 4-11: Coefficients du taux d'ionisation pour Ar^{16+} (cas de la distribution non- maxwellienne) pour $f_{hot} = 0.6, 0.7, 0.8$

T (eV)	τ_{Kato}	f_{hot}	τ_{NM}	$\Delta \tau_{\text{NM}} / \tau_{\text{kato}}$
1007	1.00E-13	0.6	9.07E-13	8.07
		0.7	6.80E-13	5.80
		0.8	4.53E-13	3.53
2430	2.06E-12	0.6	2.06E-12	0.00
		0.7	1.54E-12	0.25
		0.8	1.03E-12	0.50

Tableau 4-13: Les écarts relatifs des taux d'ionisation de Ar^{16+} dans le cas de la distribution non- maxwellienne pour $f_{hot} = 0.6, 0.7, 0.8$

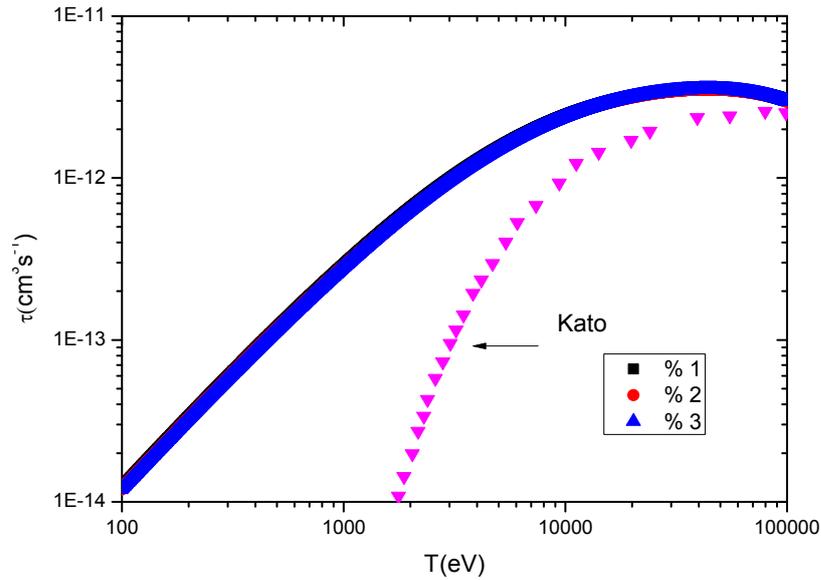


Figure 4-12: Coefficients du taux d'ionisation pour Fe^{+24} (cas de la distribution non- maxwellienne) pour $f_{hot} = 0.01, 0.02, 0.03$

T (eV)	τ_{Kato}	f_{hot}	τ_{NM}	$\Delta \tau_{\text{NM}} / \tau_{\text{kato}}$
18800	1.63E-12	0.01	3.16E-12	0.93
		0.02	3.16E-12	0.93
		0.04	3.16E-12	0.93
39381	2.35E-12	0.01	3.60E-12	0.53
		0.02	3.60E-12	0.53
		0.04	3.60E-12	0.53
98780	2.52E-12	0.01	3.05E-12	0.21
		0.02	3.05E-12	0.21
		0.04	3.05E-12	0.21

Tableau 4-14: Les écarts relatifs des taux d'ionisation de Fe^{+24} dans le cas de la distribution non- maxwellienne pour $f_{hot} = 0.01, 0.02, 0.04$

Pour les plus petites températures froides, même les petites fractions d'électrons chauds sont importantes, car les distributions maxwelliennes des électrons froids comptent moins d'électrons ayant des énergies supérieures à l'énergie de threshold. Alors l'effet principal d'une fraction d'électrons chauds f_{hot} est de diminuer les taux d'une distribution maxwellienne d'électrons froids par un petit facteur de l'ordre de $(1-f_{hot})$, c'est pourquoi les fractions des électrons froids sont prises

faibles par rapport aux électrons chauds pour les taux d'ionisations dans le cas d'une distribution non-maxwellienne.

Les plus grandes densités électroniques font déplacer les populations des niveaux vers l'équilibre de Boltzmann, ou les collisions entre les niveaux excités peuvent avoir plus d'impact sur la dynamique des populations à haute énergie ce qui diminue l'impact ou bien l'effet des électrons chauds et c'est ce que nous remarquons sur les figures : (4-8), (4-10), (4-11), (4-12) dans la gamme énergétique [10^3 - 10^5] eV.

4-5 Conclusion

Nous avons étudié dans ce chapitre les éléments de théorie incluant dans le calcul des coefficients de taux d'ionisation pour l'Hélium neutre et les ions héliumoides étudiés. Les fonctions de distributions Maxwellienne et Non-Maxwellienne ont été exposées. Nous avons abordés aussi les probabilités de transitions radiatives et d'autoionisation de l'hélium neutre. Les données obtenues par le programme FAC sont comparés aux calculs de Lindroth [33-34-35] et MZ [35-36]. Nous avons utilisés une distribution Maxwellienne et Non-Maxwellienne pour le calcul des taux d'ionisation de l'hélium neutre et les ions héliumoides (Li^+ , Ar^{+16} , Fe^{+24}) à partir des sections efficaces calculer par le code FAC. Les résultats obtenus sont comparés à ceux publié par Kato et al. [37].

Références

- [1] R. Bartiromo, F. Bombarda, and R. Giannella, *Phys. Rev. A* **32**, 531 (1985).
- [2] J. M. Liu, J. S. De Groot, J. P. Matte, T. W. Johnston, and R. P. Drake, *Phys. Of Plasmas* **1**, 3570, (1994).
- [3] A. G. Zhidkov, A. Sasaki, T. Tajima, T. Auguste, P. D'Olivera, S. Hulin, P. Monot, A. Ya.Faenov, T. A. Pikuz, and I. Yu.Skobelev, *Phys. Rev. E* **60**, 3273 (1999).
- [4] A. G. Zhidkov, A. Sasaki, I. Fukumoto, T. Tajima, T. Auguste, P. D'Oliveira, S. Hulin, P. Monot, A. Ya. Faenov, T. A. Pikuz, and I. Yu.Skobelev, *Phys. Plasmas* **8**, 3718 (2001).
- [5] K.G. Whitney and P.E. Pulsifer, *Phys. Rev. E* **47**, 1968 (1993).
- [6] P. Choi, C. Deeney, and C.S. Wong, *Physics Letters A* **128**, 80 (1988).
- [7] V.L. Kantsyrev, D.A. Fedin, A.S. Shlyaptseva, S. Hansen, D. Chamberlain, and N. Ouart, *Phys. Of Plasmas* **10**, 2519 (2003).
- [8] N. R. Pereira and K.G. Whitney, *Phys. Rev. A* **38**, 319, (1988).
- [9] J.M. McTiernan and V. Petrosian, *Astrophys. J.* **359**, 541 (1990).
- [10] U. Feldman, *PhysicaScripta***65**, 185 (2002).
- [11] T. Kato, T. Fujiwara, and Y. Hanaoka, *Astroph. J.* **492**, 822 (1998)
- [12] M.G. Baring, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **253**, 388 (1991).
- [13] P. Beiersdorfer, S.R. Elliott, A. Osterheld, T. Stohlker, J. Autrey, G.V. Brown, A.J. Smith, and K. Widmann, *Phys. Rev. A* **53**, 4000 (1996).
- [14] Christian NGO, Hélène NGO, *Physique statistique à l'équilibre et hors équilibre*, Masson Paris Milan Barcelone, (1995).
- [15] W. L. Kruer, *The Physics of Laser Plasma Interactions* (Addison Wesley, 1988).
- [16] A. B. Langdon, *Phys. Rev. Lett.* **44**, 575 (1980).
- [17] R. W. Harvey, V. S. Chan, S. C. Chiu, T. E. Evans, M. N. Rosenbluth, and D. G. Whyte, *Phys. of Plasmas* **7**, 4590 (2000).
- [18] J. Abdallah, Jr., A.Ya. Faenov, D. Hammer, S.A. Pikuz, G. Csanak, and R.E.H. Clark, *Phys. Scr.* **53**, 705 (1996).
- [19] J. Abdallah, Jr., A.Ya. Faenov, I.Y. Skobelev, A.I. Magunov, T.A. Pikuz, T. Auguste, P. D'Oliveira, S. Hulin, and P. Monot, *Phys. Rev. A* **63**, 032706 (2001).
- [20] A.S. Shlyaptseva, S.B. Hansen, V.L. Kantsyrev, D.A. Fedin, N. Ouart, K.B. Fournier, and U.I. Safronova, *Phys. Rev. E* **67**, 026409 (2003).
- [21] A.H. Gabriel and K.J. Phillips, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **189**, 319 (1979).
- [22] F.B. Rosmej, *J. Phys. B* **30**, L819 (1997).
- [23] J. Abdallah, Jr., R.E.H. Clark, A.Ya. Faenov, L. Karpinski, S.A. Pikuz, V.M. Romanova, M. Sadowski, M. Scholz, and A. Szydlowski, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **62**, 85 (1999).
- [24] J. Abdallah, Jr., A.Ya. Faenov, T.A. Pikuz, M.D. Wilke, G.A. Kyrala, and R.E.H. Clark, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **62**, 1 (1999).
- [25] G. C. Junkel-Vives, J. Abdallah, Jr., T. Auguste, P. D'Oliveira, S. Hulin, P. Monot, S. Dobosz, A. Ya. Faenov, A. I. Magunov, T. A. Pikuz, I. Yu. Skobelev, A. S. Boldarev, and V. A. Gasilov, *Phys. Rev. E* **65**, 036410 (2002).
- [26] G.C. Junkel-Vives, J. Abdallah, Jr., F. Blasco, C. Stenz, F. Salin, A.Ya. Faenov, A.I. Magunov, T.A. Pikuz, and I.Yu.Skobelev, *Phys. Rev. A* **64**, 021201 (2001).
- [27] S.H. Glenzer, F.B. Rosmej, R.W. Lee, C.A. Back, K.G. Estabrook, B.J. MacGowan, T.D. Shepard, and R.E. Turner, *Phys.Rev. Lett.***81**, 365 (1998).

- [28] S.B. Hansen, A.S. Shlyaptseva, A.Y. Faenov, I.Y. Skobelev, A.I. Magunov, T.A. Pikuz, F. Blasco, F. Dorchies, C. Stenz, F. Salin, T. Auguste, S. Dobosz, P. Monot, P. D' Oliveira, S. Hulin, U.I. Safronova, and K.B. Fournier, *Phys. Rev. E* **66**, 046412 (2002).
- [29] K.B. Fournier, A.Ya. Faenov, T.A. Pikuz, I.Yu. Skobelev, V.S. Belyaev, V.I. Vinogradov, A.S. Kyrilov, A.P. Matafonov, I. Bellucci, S.Martellucci, G. Petrocelli, T. Auguste, S. Hulin, P. Monot, and P. D'Oliveira, *Phys. Rev. E* **67**, 16402 (2003).
- [30] K.B. Fournier, A.Ya. Faenov, T.A. Pikuz, I.Yu. Skobelev, F. Flora, S. Bollanti, P. Di Lazzaro, D. Murra, A. Reale, L. Reale, G. Tomassetti, A. Ritucci, I. Bellucci, S. Martellucci, G. Petrocelli, V.S. Belyaev, V.I. Vinogradov, A.S. Kyrilov, and A.P. Matafonov, *JQSRT* **81**, 167 (2003).
- [31] S. B. Hansen, A. S. Shlyaptseva, Effects of the electron energy distribution function on modeled x-ray spectra, *Phys. Rev. E* **70**, 036402 (2004)
- [32] M. F. Gu, FAC 1.0.7, <http://kipac-tree.stanford.edu/fac/>
- [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. Genesisio, R. Stamm, L. A. Vainshtein, M. F. Gu, E. Lindroth and F. Khelfaoui, *Contrib. Plasma Phys.* **46** (2006) 655-660.
- [37] T. Kato, K. Masai and M. Arnaud, *NIFS-Data-Series*, 14 (1991).
- [38] W. Lotz, *Report Institute fur Plasma Physics*, (1968) IPP 1/76
- [39] M. Arnaud and R. Rothenflug, *Astron. Astrophys. Supp. Ser.* **60** (1985) 425.
- [40] K. L. Bell et al., *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **12**(1983) 891.
- [41] M. S. Pindzola, D. C. Griffin, C. Bottcher, S. M. Younger and H. T. Hunter, *Nuclear Fusion S.S.*, **21**(1987).
- [42] A. Escarguel, F. B. Rosmej, C. Brault, Th. Pierre, R. Stamm and K. Quotb, *Plasma Phys. Control. Fusion* **49** (2007) 85–93

Conclusion générale et perspectives

Au cours de ce travail, nous avons étudié théoriquement les différentes méthodes d'évaluation des sections efficaces d'ionisation des ions héliumoides et quelques processus atomiques élémentaires dans les plasmas, en particulier l'ionisation, les transitions radiatives et l'autoionisation. Nous nous sommes précisément intéressés au calcul des coefficients des taux d'ionisation pour l'Hélium neutre et d'autres ions héliumoides comme : Li^+ , Ar^{+16} et Fe^{+24} en utilisant deux types de distributions : maxwellienne et non-maxwellienne.

Les mesures directes existantes de sections efficaces ne couvrent principalement que les atomes et molécules neutres ainsi que quelques ions faiblement ionisés. L'obtention de résultats concernant des ions moyennement ou fortement ionisés passe donc obligatoirement par une étude théorique. De nombreuses équipes travaillent à déterminer, de la façon la plus précise possible, ces sections efficaces et de nombreuses théories et méthodes de calcul ont été élaborées. Nous avons exploré les méthodes théoriques pour le calcul des sections efficaces ainsi que les approximations effectuées. Nous avons aussi mené un calcul des sections efficaces d'ionisation de l'Hélium neutre et quelques ions héliumoides basé sur le programme numérique FAC dont nous avons exposés ces bases théoriques ainsi que ces méthodes de calcul. Les sections efficaces différentielles de l'ionisation par impact électronique sont obtenues par la théorie relativiste des ondes déformées (DW) en fonction des forces de collision dans la gamme énergétique ($10\text{-}10^5$) eV.

Nous avons aussi abordé les taux des transitions radiatives et d'autoionisation de l'Hélium neutre pour les niveaux $2l2l'$ calculer par le code FAC. Notre calcul est basé sur une diagonalisation d'ensemble des niveaux $2lnl'$. Une comparaison entre nos résultats, un calcul basé sur une théorie de perturbation relativiste de plusieurs corps et les résultats du code MZ, montre, en général, une concordance entre les résultats et elles sont de même ordre de grandeur sauf pour quelques sous niveaux donnés par MZ.

Une étude détaillée a été menée pour le calcul des taux d'ionisation de l'Hélium neutre et les ions héliumoides : Li^+ , Ar^{+16} et Fe^{+24} qui sont obtenus à partir des sections efficaces et générés par un calcul numérique.

Nous avons utilisé deux distributions : maxwellienne et non-maxwellienne en énergie. En général, une bonne concordance a été remarquée sur les courbes de notre travail et celle de Kato et al pour une distribution maxwellienne. Des écarts relatifs importants sont observés pour les faibles températures dans la gamme énergétique [20-200] (eV), alors qu'ils sont très faibles à partir de 1000 eV.

D'une autre part, une distribution non-maxwellienne a été utilisée pour étudier l'influence des électrons chauds sur les propriétés radiatives d'un plasma d'hélium. Les plasmas produits à basse pression exhibent souvent des fonctions de distributions non-maxwelliennes pour les électrons qui peuvent être représentées par une distribution à deux températures qui correspondent à une population chaude et une autre froide. Les résultats de calcul des taux d'ionisation de l'hélium neutre pour la distribution non-maxwellienne pour différentes fractions des électrons chauds sont comparés à ceux de Kato et al. La température T_{bulk} a été prise pour une valeur moyenne de $k_B T_{bulk}$ égale à 0.85 eV. La valeur exacte de cette température n'influe pas sur l'allure de la courbe des taux d'ionisation. En effet les fractions des électrons froids sont prises faibles par rapport aux électrons chauds. Nous avons pu remarquer que les courbes des taux d'ionisation sont très sensibles aux fractions des électrons chauds.

Comme perspectives, On peut généraliser l'étude en considérant d'autres ions héliumoïdes. Nous comptons aussi continuer à calculer les coefficients des taux d'ionisation de l'Hélium neutre en utilisant d'autres formes de distribution non-maxwellienne.

Annexe A

Les sections efficaces d'ionisation pour quelques ions héliumoides

Tableau A-1: Sections efficaces d'ionisation de Li^+ calculé par le code FAC dans la gamme énergétique [100-700] eV

E(eV)	σ (10^{-20}cm^2)				
1.0000E+02	5.4133E+02	1.0310E+02	5.4398E+02	1.0620E+02	5.4630E+02
1.0010E+02	5.4142E+02	1.0320E+02	5.4406E+02	1.0630E+02	5.4637E+02
1.0020E+02	5.4151E+02	1.0330E+02	5.4414E+02	1.0640E+02	5.4644E+02
1.0030E+02	5.4160E+02	1.0340E+02	5.4422E+02	1.0650E+02	5.4651E+02
1.0040E+02	5.4169E+02	1.0350E+02	5.4430E+02	1.0660E+02	5.4658E+02
1.0050E+02	5.4178E+02	1.0360E+02	5.4438E+02	1.0670E+02	5.4665E+02
1.0060E+02	5.4187E+02	1.0370E+02	5.4446E+02	1.0680E+02	5.4672E+02
1.0070E+02	5.4196E+02	1.0380E+02	5.4453E+02	1.0690E+02	5.4678E+02
1.0080E+02	5.4205E+02	1.0390E+02	5.4461E+02	1.0700E+02	5.4685E+02
1.0090E+02	5.4214E+02	1.0400E+02	5.4469E+02	1.0710E+02	5.4692E+02
1.0100E+02	5.4222E+02	1.0410E+02	5.4477E+02	1.0720E+02	5.4698E+02
1.0110E+02	5.4231E+02	1.0420E+02	5.4484E+02	1.0730E+02	5.4705E+02
1.0120E+02	5.4240E+02	1.0430E+02	5.4492E+02	1.0740E+02	5.4712E+02
1.0130E+02	5.4248E+02	1.0440E+02	5.4499E+02	1.0750E+02	5.4718E+02
1.0140E+02	5.4257E+02	1.0450E+02	5.4507E+02	1.0760E+02	5.4725E+02
1.0150E+02	5.4266E+02	1.0460E+02	5.4515E+02	1.0770E+02	5.4731E+02
1.0160E+02	5.4274E+02	1.0470E+02	5.4522E+02	1.0780E+02	5.4738E+02
1.0170E+02	5.4283E+02	1.0480E+02	5.4529E+02	1.0790E+02	5.4744E+02
1.0180E+02	5.4291E+02	1.0490E+02	5.4537E+02	1.0800E+02	5.4751E+02
1.0190E+02	5.4300E+02	1.0500E+02	5.4544E+02	1.0810E+02	5.4757E+02
1.0200E+02	5.4308E+02	1.0510E+02	5.4552E+02	1.0810E+02	5.4757E+02
1.0210E+02	5.4316E+02	1.0520E+02	5.4559E+02	1.0820E+02	5.4763E+02
1.0220E+02	5.4325E+02	1.0520E+02	5.4559E+02	1.0830E+02	5.4770E+02
1.0230E+02	5.4333E+02	1.0530E+02	5.4566E+02	1.0840E+02	5.4776E+02
1.0230E+02	5.4333E+02	1.0540E+02	5.4573E+02	1.0850E+02	5.4782E+02
1.0240E+02	5.4341E+02	1.0550E+02	5.4581E+02	1.0860E+02	5.4789E+02
1.0250E+02	5.4350E+02	1.0560E+02	5.4588E+02	1.0870E+02	5.4795E+02
1.0260E+02	5.4358E+02	1.0570E+02	5.4595E+02	1.0880E+02	5.4801E+02
1.0270E+02	5.4366E+02	1.0580E+02	5.4602E+02	1.0890E+02	5.4807E+02
1.0280E+02	5.4374E+02	1.0590E+02	5.4609E+02	1.0900E+02	5.4813E+02
1.0290E+02	5.4382E+02	1.0600E+02	5.4616E+02	1.0910E+02	5.4819E+02
1.0300E+02	5.4390E+02	1.0610E+02	5.4623E+02	1.0920E+02	5.4825E+02

1.0930E+02	5.4831E+02	1.1340E+02	5.5054E+02	1.1470E+02	5.5115E+02
1.0940E+02	5.4837E+02	1.1350E+02	5.5059E+02	1.1480E+02	5.5119E+02
1.0950E+02	5.4843E+02	1.1360E+02	5.5064E+02	1.1490E+02	5.5124E+02
1.0960E+02	5.4849E+02	1.1370E+02	5.5068E+02	1.1500E+02	5.5128E+02
1.0970E+02	5.4855E+02	1.1380E+02	5.5073E+02	1.1510E+02	5.5133E+02
1.0980E+02	5.4861E+02	1.1110E+02	5.4935E+02	1.1520E+02	5.5137E+02
1.0990E+02	5.4867E+02	1.1120E+02	5.4941E+02	1.1530E+02	5.5141E+02
1.1000E+02	5.4873E+02	1.1130E+02	5.4946E+02	1.1540E+02	5.5146E+02
1.1010E+02	5.4879E+02	1.1140E+02	5.4951E+02	1.1550E+02	5.5150E+02
1.1020E+02	5.4884E+02	1.1150E+02	5.4957E+02	1.1560E+02	5.5154E+02
1.1030E+02	5.4890E+02	1.1160E+02	5.4962E+02	1.1570E+02	5.5159E+02
1.1040E+02	5.4896E+02	1.1170E+02	5.4967E+02	1.1580E+02	5.5163E+02
1.1050E+02	5.4902E+02	1.1180E+02	5.4973E+02	1.1590E+02	5.5167E+02
1.1060E+02	5.4907E+02	1.1190E+02	5.4978E+02	1.1600E+02	5.5171E+02
1.1070E+02	5.4913E+02	1.1200E+02	5.4983E+02	1.1610E+02	5.5175E+02
1.1080E+02	5.4918E+02	1.1210E+02	5.4989E+02	1.1620E+02	5.5180E+02
1.1090E+02	5.4924E+02	1.1220E+02	5.4994E+02	1.1630E+02	5.5184E+02
1.1100E+02	5.4930E+02	1.1230E+02	5.4999E+02	1.1640E+02	5.5188E+02
1.1100E+02	5.4930E+02	1.1240E+02	5.5004E+02	1.1650E+02	5.5192E+02
1.1110E+02	5.4935E+02	1.1250E+02	5.5009E+02	1.1660E+02	5.5196E+02
1.1120E+02	5.4941E+02	1.1260E+02	5.5014E+02	1.1670E+02	5.5200E+02
1.1130E+02	5.4946E+02	1.1270E+02	5.5019E+02	1.1680E+02	5.5204E+02
1.1140E+02	5.4951E+02	1.1280E+02	5.5024E+02	1.1680E+02	5.5204E+02
1.1150E+02	5.4957E+02	1.1290E+02	5.5029E+02	1.1690E+02	5.5208E+02
1.1160E+02	5.4962E+02	1.1300E+02	5.5034E+02	1.1700E+02	5.5212E+02
1.1170E+02	5.4967E+02	1.1310E+02	5.5039E+02	1.1710E+02	5.5216E+02
1.1180E+02	5.4973E+02	1.1320E+02	5.5044E+02	1.1720E+02	5.5220E+02
1.1190E+02	5.4978E+02	1.1330E+02	5.5049E+02	1.1730E+02	5.5223E+02
1.1200E+02	5.4983E+02	1.1340E+02	5.5054E+02	1.1740E+02	5.5227E+02
1.1210E+02	5.4989E+02	1.1350E+02	5.5059E+02	1.1750E+02	5.5231E+02
1.1220E+02	5.4994E+02	1.1360E+02	5.5064E+02	1.1760E+02	5.5235E+02
1.1230E+02	5.4999E+02	1.1370E+02	5.5068E+02	1.1770E+02	5.5239E+02
1.1240E+02	5.5004E+02	1.1380E+02	5.5073E+02	1.1780E+02	5.5242E+02
1.1250E+02	5.5009E+02	1.1390E+02	5.5078E+02	1.1790E+02	5.5246E+02
1.1260E+02	5.5014E+02	1.1390E+02	5.5078E+02	1.1800E+02	5.5250E+02
1.1270E+02	5.5019E+02	1.1400E+02	5.5083E+02	1.1810E+02	5.5253E+02
1.1280E+02	5.5024E+02	1.1410E+02	5.5087E+02	1.1820E+02	5.5257E+02
1.1290E+02	5.5029E+02	1.1420E+02	5.5092E+02	1.1830E+02	5.5261E+02
1.1300E+02	5.5034E+02	1.1430E+02	5.5097E+02	1.1840E+02	5.5264E+02
1.1310E+02	5.5039E+02	1.1440E+02	5.5101E+02	1.1850E+02	5.5268E+02
1.1320E+02	5.5044E+02	1.1450E+02	5.5106E+02	1.1860E+02	5.5271E+02
1.1330E+02	5.5049E+02	1.1460E+02	5.5110E+02	1.1870E+02	5.5275E+02

1.1880E+02	5.5278E+02	1.2280E+02	5.5399E+02	1.2690E+02	5.5488E+02
1.1890E+02	5.5282E+02	1.2290E+02	5.5402E+02	1.2700E+02	5.5490E+02
1.1900E+02	5.5285E+02	1.2300E+02	5.5405E+02	1.2710E+02	5.5491E+02
1.1910E+02	5.5289E+02	1.2310E+02	5.5407E+02	1.2720E+02	5.5493E+02
1.1920E+02	5.5292E+02	1.2320E+02	5.5410E+02	1.2730E+02	5.5495E+02
1.1930E+02	5.5296E+02	1.2330E+02	5.5412E+02	1.2740E+02	5.5496E+02
1.1940E+02	5.5299E+02	1.2340E+02	5.5415E+02	1.2750E+02	5.5498E+02
1.1950E+02	5.5302E+02	1.2350E+02	5.5417E+02	1.2760E+02	5.5499E+02
1.1960E+02	5.5306E+02	1.2360E+02	5.5419E+02	1.2770E+02	5.5501E+02
1.1970E+02	5.5309E+02	1.2370E+02	5.5422E+02	1.2780E+02	5.5503E+02
1.1970E+02	5.5309E+02	1.2380E+02	5.5424E+02	1.2790E+02	5.5504E+02
1.1980E+02	5.5312E+02	1.2390E+02	5.5427E+02	1.2800E+02	5.5506E+02
1.1990E+02	5.5315E+02	1.2400E+02	5.5429E+02	1.2810E+02	5.5507E+02
1.2000E+02	5.5319E+02	1.2410E+02	5.5431E+02	1.2820E+02	5.5509E+02
1.2010E+02	5.5322E+02	1.2420E+02	5.5434E+02	1.2830E+02	5.5510E+02
1.2020E+02	5.5325E+02	1.2430E+02	5.5436E+02	1.2840E+02	5.5512E+02
1.2030E+02	5.5328E+02	1.2440E+02	5.5438E+02	1.2840E+02	5.5512E+02
1.2040E+02	5.5331E+02	1.2450E+02	5.5440E+02	1.2850E+02	5.5513E+02
1.2050E+02	5.5334E+02	1.2460E+02	5.5443E+02	1.2860E+02	5.5515E+02
1.2060E+02	5.5337E+02	1.2470E+02	5.5445E+02	1.2870E+02	5.5516E+02
1.2070E+02	5.5340E+02	1.2480E+02	5.5447E+02	1.2880E+02	5.5517E+02
1.2080E+02	5.5343E+02	1.2490E+02	5.5449E+02	1.2890E+02	5.5519E+02
1.2090E+02	5.5346E+02	1.2500E+02	5.5451E+02	1.2900E+02	5.5520E+02
1.2100E+02	5.5349E+02	1.2510E+02	5.5453E+02	1.2910E+02	5.5521E+02
1.2110E+02	5.5352E+02	1.2520E+02	5.5455E+02	1.2920E+02	5.5523E+02
1.2120E+02	5.5355E+02	1.2530E+02	5.5457E+02	1.2930E+02	5.5524E+02
1.2130E+02	5.5358E+02	1.2540E+02	5.5459E+02	1.2940E+02	5.5525E+02
1.2140E+02	5.5361E+02	1.2550E+02	5.5462E+02	1.2950E+02	5.5527E+02
1.2150E+02	5.5364E+02	1.2550E+02	5.5462E+02	1.2960E+02	5.5528E+02
1.2160E+02	5.5367E+02	1.2560E+02	5.5464E+02	1.2970E+02	5.5529E+02
1.2170E+02	5.5370E+02	1.2570E+02	5.5465E+02	1.2980E+02	5.5530E+02
1.2180E+02	5.5373E+02	1.2580E+02	5.5467E+02	1.2990E+02	5.5531E+02
1.2190E+02	5.5375E+02	1.2590E+02	5.5469E+02	1.3000E+02	5.5533E+02
1.2200E+02	5.5378E+02	1.2600E+02	5.5471E+02	1.3010E+02	5.5534E+02
1.2210E+02	5.5381E+02	1.2610E+02	5.5473E+02	1.3020E+02	5.5535E+02
1.2220E+02	5.5384E+02	1.2620E+02	5.5475E+02	1.3030E+02	5.5536E+02
1.2230E+02	5.5386E+02	1.2630E+02	5.5477E+02	1.3040E+02	5.5537E+02
1.2240E+02	5.5389E+02	1.2640E+02	5.5479E+02	1.3050E+02	5.5538E+02
1.2250E+02	5.5392E+02	1.2650E+02	5.5481E+02	1.3060E+02	5.5539E+02
1.2260E+02	5.5394E+02	1.2660E+02	5.5482E+02	1.3070E+02	5.5540E+02
1.2260E+02	5.5394E+02	1.2670E+02	5.5484E+02	1.3080E+02	5.5541E+02
1.2270E+02	5.5397E+02	1.2680E+02	5.5486E+02	1.3090E+02	5.5542E+02

1.3100E+02	5.5543E+02	1.3500E+02	5.5568E+02	3.3710E+02	4.5940E+02
1.3110E+02	5.5544E+02	1.3510E+02	5.5569E+02	3.4710E+02	4.5405E+02
1.3120E+02	5.5545E+02	1.3520E+02	5.5569E+02	3.5710E+02	4.4879E+02
1.3130E+02	5.5546E+02	1.3530E+02	5.5569E+02	3.6710E+02	4.4362E+02
1.3130E+02	5.5546E+02	1.3540E+02	5.5570E+02	3.7710E+02	4.3854E+02
1.3140E+02	5.5547E+02	1.3550E+02	5.5570E+02	3.8710E+02	4.3355E+02
1.3150E+02	5.5548E+02	1.3560E+02	5.5570E+02	3.9710E+02	4.2865E+02
1.3160E+02	5.5549E+02	1.3570E+02	5.5570E+02	4.0710E+02	4.2385E+02
1.3170E+02	5.5550E+02	1.3580E+02	5.5570E+02	4.1710E+02	4.1913E+02
1.3180E+02	5.5550E+02	1.3590E+02	5.5570E+02	4.2710E+02	4.1451E+02
1.3190E+02	5.5551E+02	1.3600E+02	5.5571E+02	4.2710E+02	4.1451E+02
1.3200E+02	5.5552E+02	1.3610E+02	5.5571E+02	4.3710E+02	4.0998E+02
1.3210E+02	5.5553E+02	1.3620E+02	5.5571E+02	4.4710E+02	4.0554E+02
1.3220E+02	5.5554E+02	1.3630E+02	5.5571E+02	4.5710E+02	4.0118E+02
1.3230E+02	5.5554E+02	1.3640E+02	5.5571E+02	4.6710E+02	3.9691E+02
1.3240E+02	5.5555E+02	1.3650E+02	5.5571E+02	4.7710E+02	3.9273E+02
1.3250E+02	5.5556E+02	1.3660E+02	5.5571E+02	4.8710E+02	3.8863E+02
1.3260E+02	5.5557E+02	1.3670E+02	5.5571E+02	4.9710E+02	3.8461E+02
1.3270E+02	5.5557E+02	1.3680E+02	5.5571E+02	5.0710E+02	3.8067E+02
1.3280E+02	5.5558E+02	1.3690E+02	5.5571E+02	5.1710E+02	3.7681E+02
1.3290E+02	5.5559E+02	1.3700E+02	5.5571E+02	5.2710E+02	3.7302E+02
1.3300E+02	5.5559E+02	1.3710E+02	5.5571E+02	5.3710E+02	3.6931E+02
1.3310E+02	5.5560E+02	1.3710E+02	5.5571E+02	5.4710E+02	3.6567E+02
1.3320E+02	5.5560E+02	1.4710E+02	5.5497E+02	5.5710E+02	3.6210E+02
1.3330E+02	5.5561E+02	1.5710E+02	5.5301E+02	5.6710E+02	3.5860E+02
1.3340E+02	5.5562E+02	1.6710E+02	5.5010E+02	5.7710E+02	3.5517E+02
1.3350E+02	5.5562E+02	1.7710E+02	5.4643E+02	5.8710E+02	3.5180E+02
1.3360E+02	5.5563E+02	1.8710E+02	5.4218E+02	5.9710E+02	3.4850E+02
1.3370E+02	5.5563E+02	1.9710E+02	5.3748E+02	6.0710E+02	3.4526E+02
1.3380E+02	5.5564E+02	2.0710E+02	5.3244E+02	6.1710E+02	3.4208E+02
1.3390E+02	5.5564E+02	2.1710E+02	5.2714E+02	6.2710E+02	3.3896E+02
1.3400E+02	5.5565E+02	2.2710E+02	5.2165E+02	6.3710E+02	3.3590E+02
1.3410E+02	5.5565E+02	2.3710E+02	5.1603E+02	6.4710E+02	3.3289E+02
1.3420E+02	5.5566E+02	2.4710E+02	5.1032E+02	6.5710E+02	3.2994E+02
1.3420E+02	5.5566E+02	2.5710E+02	5.0456E+02	6.6710E+02	3.2705E+02
1.3430E+02	5.5566E+02	2.6710E+02	4.9879E+02	6.7710E+02	3.2420E+02
1.3440E+02	5.5566E+02	2.7710E+02	4.9302E+02	6.8710E+02	3.2141E+02
1.3450E+02	5.5567E+02	2.8710E+02	4.8727E+02	6.9710E+02	3.1867E+02
1.3460E+02	5.5567E+02	2.9710E+02	4.8157E+02	7.0710E+02	3.1597E+02
1.3470E+02	5.5567E+02	3.0710E+02	4.7593E+02	7.1710E+02	3.1332E+02
1.3480E+02	5.5568E+02	3.1710E+02	4.7034E+02	7.1710E+02	3.1332E+02
1.3490E+02	5.5568E+02	3.2710E+02	4.6483E+02	7.2710E+02	3.1072E+02

Tableau A-2: Sections efficaces d'ionisation d'Ar⁺¹⁶ calculé par le code FAC dans la gamme énergétique [5.0 E+03-2.5 E+04] eV

E(eV)	σ (10^{-20} cm^2)				
5.0243E+03	1.8495E-01	8.7243E+03	1.9848E-01	1.2424E+04	1.9088E-01
5.1243E+03	1.8593E-01	8.7243E+03	1.9848E-01	1.2524E+04	1.9057E-01
5.2243E+03	1.8685E-01	8.8243E+03	1.9843E-01	1.2624E+04	1.9025E-01
5.3243E+03	1.8773E-01	8.9243E+03	1.9837E-01	1.2724E+04	1.8994E-01
5.4243E+03	1.8856E-01	9.0243E+03	1.9830E-01	1.2824E+04	1.8962E-01
5.5243E+03	1.8935E-01	9.1243E+03	1.9821E-01	1.2924E+04	1.8930E-01
5.6243E+03	1.9009E-01	9.2243E+03	1.9811E-01	1.3024E+04	1.8898E-01
5.7243E+03	1.9080E-01	9.3243E+03	1.9800E-01	1.3124E+04	1.8865E-01
5.8243E+03	1.9146E-01	9.4243E+03	1.9788E-01	1.3224E+04	1.8833E-01
5.8243E+03	1.9146E-01	9.5243E+03	1.9776E-01	1.3324E+04	1.8800E-01
5.9243E+03	1.9208E-01	9.6243E+03	1.9762E-01	1.3424E+04	1.8766E-01
6.0243E+03	1.9267E-01	9.7243E+03	1.9747E-01	1.3524E+04	1.8733E-01
6.1243E+03	1.9323E-01	9.8243E+03	1.9731E-01	1.3624E+04	1.8699E-01
6.2243E+03	1.9374E-01	9.9243E+03	1.9714E-01	1.3724E+04	1.8666E-01
6.3243E+03	1.9423E-01	1.0024E+04	1.9697E-01	1.3824E+04	1.8632E-01
6.4243E+03	1.9468E-01	1.0124E+04	1.9678E-01	1.3924E+04	1.8598E-01
6.5243E+03	1.9511E-01	1.0224E+04	1.9659E-01	1.4024E+04	1.8564E-01
6.6243E+03	1.9550E-01	1.0324E+04	1.9639E-01	1.4124E+04	1.8529E-01
6.7243E+03	1.9586E-01	1.0424E+04	1.9619E-01	1.4224E+04	1.8495E-01
6.8243E+03	1.9620E-01	1.0524E+04	1.9597E-01	1.4324E+04	1.8460E-01
6.9243E+03	1.9651E-01	1.0624E+04	1.9575E-01	1.4424E+04	1.8426E-01
7.0243E+03	1.9680E-01	1.0724E+04	1.9552E-01	1.4524E+04	1.8391E-01
7.1243E+03	1.9706E-01	1.0824E+04	1.9529E-01	1.4524E+04	1.8391E-01
7.2243E+03	1.9729E-01	1.0924E+04	1.9505E-01	1.4624E+04	1.8356E-01
7.3243E+03	1.9750E-01	1.1024E+04	1.9481E-01	1.4724E+04	1.8321E-01
7.4243E+03	1.9770E-01	1.1124E+04	1.9456E-01	1.4824E+04	1.8286E-01
7.5243E+03	1.9786E-01	1.1224E+04	1.9430E-01	1.4924E+04	1.8251E-01
7.6243E+03	1.9801E-01	1.1324E+04	1.9404E-01	1.5024E+04	1.8215E-01
7.7243E+03	1.9814E-01	1.1424E+04	1.9377E-01	1.5124E+04	1.8180E-01
7.8243E+03	1.9825E-01	1.1524E+04	1.9350E-01	1.5224E+04	1.8145E-01
7.9243E+03	1.9834E-01	1.1624E+04	1.9323E-01	1.5324E+04	1.8109E-01
8.0243E+03	1.9842E-01	1.1624E+04	1.9323E-01	1.5424E+04	1.8074E-01
8.1243E+03	1.9847E-01	1.1724E+04	1.9295E-01	1.5524E+04	1.8038E-01
8.2243E+03	1.9851E-01	1.1824E+04	1.9266E-01	1.5624E+04	1.8003E-01
8.3243E+03	1.9853E-01	1.1924E+04	1.9237E-01	1.5724E+04	1.7967E-01
8.4243E+03	1.9854E-01	1.2024E+04	1.9208E-01	1.5824E+04	1.7931E-01
8.5243E+03	1.9854E-01	1.2124E+04	1.9179E-01	1.5924E+04	1.7896E-01
8.6243E+03	1.9851E-01	1.2224E+04	1.9149E-01	1.6024E+04	1.7860E-01
		1.2324E+04	1.9118E-01	1.6124E+04	1.7824E-01

1.6224E+04	1.7788E-01	2.0324E+04	1.6349E-01	2.1424E+04	1.5980E-01
1.6324E+04	1.7753E-01	2.0324E+04	1.6349E-01	2.1524E+04	1.5947E-01
1.6424E+04	1.7717E-01	2.0424E+04	1.6315E-01	2.1624E+04	1.5914E-01
1.6524E+04	1.7681E-01	2.0524E+04	1.6281E-01	2.1724E+04	1.5882E-01
1.6624E+04	1.7645E-01	2.0624E+04	1.6247E-01	2.1824E+04	1.5849E-01
1.6724E+04	1.7610E-01	2.0724E+04	1.6214E-01	2.1924E+04	1.5816E-01
1.6824E+04	1.7574E-01	2.0824E+04	1.6180E-01	2.2024E+04	1.5784E-01
1.6924E+04	1.7538E-01	2.0924E+04	1.6146E-01	2.2124E+04	1.5751E-01
1.7024E+04	1.7503E-01	2.1024E+04	1.6113E-01	2.2224E+04	1.5719E-01
1.7124E+04	1.7467E-01	2.1124E+04	1.6080E-01	2.2324E+04	1.5687E-01
1.7224E+04	1.7431E-01	2.1224E+04	1.6047E-01	2.2424E+04	1.5655E-01
1.7324E+04	1.7396E-01	2.1324E+04	1.6013E-01	2.2524E+04	1.5622E-01
1.7424E+04	1.7360E-01	2.1424E+04	1.5980E-01	2.2624E+04	1.5590E-01
1.7424E+04	1.7360E-01	2.1524E+04	1.5947E-01	2.2724E+04	1.5559E-01
1.7524E+04	1.7324E-01	2.1624E+04	1.5914E-01	2.2824E+04	1.5527E-01
1.7624E+04	1.7289E-01	2.1724E+04	1.5882E-01	2.2924E+04	1.5495E-01
1.7724E+04	1.7253E-01	2.1824E+04	1.5849E-01	2.3024E+04	1.5463E-01
1.7824E+04	1.7218E-01	2.1924E+04	1.5816E-01	2.3124E+04	1.5432E-01
1.7924E+04	1.7182E-01	2.2024E+04	1.5784E-01	2.3224E+04	1.5400E-01
1.8024E+04	1.7147E-01	2.2124E+04	1.5751E-01	2.3224E+04	1.5400E-01
1.8124E+04	1.7112E-01	2.2224E+04	1.5719E-01	2.3324E+04	1.5369E-01
1.8224E+04	1.7076E-01	2.2324E+04	1.5687E-01	2.3424E+04	1.5338E-01
1.8324E+04	1.7041E-01	2.2424E+04	1.5655E-01	2.3524E+04	1.5307E-01
1.8424E+04	1.7006E-01	2.2524E+04	1.5622E-01	2.3624E+04	1.5276E-01
1.8524E+04	1.6971E-01	2.2624E+04	1.5590E-01	2.3724E+04	1.5245E-01
1.8624E+04	1.6936E-01	2.2724E+04	1.5559E-01	2.3824E+04	1.5214E-01
1.8724E+04	1.6900E-01	2.2824E+04	1.5527E-01	2.3924E+04	1.5183E-01
1.8824E+04	1.6866E-01	2.2924E+04	1.5495E-01	2.4024E+04	1.5152E-01
1.8924E+04	1.6831E-01	2.3024E+04	1.5463E-01	2.4124E+04	1.5122E-01
1.9024E+04	1.6796E-01	2.3124E+04	1.5432E-01	2.4224E+04	1.5091E-01
1.9124E+04	1.6761E-01	2.3224E+04	1.5400E-01	2.4324E+04	1.5061E-01
1.9224E+04	1.6726E-01	2.0324E+04	1.6349E-01	2.4424E+04	1.5030E-01
1.9324E+04	1.6691E-01	2.0424E+04	1.6315E-01	2.4524E+04	1.5000E-01
1.9424E+04	1.6657E-01	2.0524E+04	1.6281E-01	2.4624E+04	1.4970E-01
1.9524E+04	1.6622E-01	2.0624E+04	1.6247E-01	2.4724E+04	1.4940E-01
1.9624E+04	1.6588E-01	2.0724E+04	1.6214E-01	2.4824E+04	1.4910E-01
1.9724E+04	1.6553E-01	2.0824E+04	1.6180E-01	2.4924E+04	1.4880E-01
1.9824E+04	1.6519E-01	2.0924E+04	1.6146E-01	2.5024E+04	1.4850E-01
1.9924E+04	1.6485E-01	2.1024E+04	1.6113E-01	2.5124E+04	1.4820E-01
2.0024E+04	1.6451E-01	2.1124E+04	1.6080E-01		
2.0124E+04	1.6417E-01	2.1224E+04	1.6047E-01		
2.0224E+04	1.6383E-01	2.1324E+04	1.6013E-01		

Tableau A-3: Sections efficaces d'ionisation de Fe^{+24} calculé par le code FAC dans la gamme énergétique [1.0 E+04 - 4.0E+04] eV

E(eV)	σ (10^{-20}cm^2)				
1,01E+04	3,90E-02	1,36E+04	4,17E-02	1,72E+04	4,26E-02
1,02E+04	3,91E-02	1,37E+04	4,18E-02	1,73E+04	4,26E-02
1,03E+04	3,93E-02	1,38E+04	4,18E-02	1,74E+04	4,26E-02
1,04E+04	3,94E-02	1,39E+04	4,19E-02	1,75E+04	4,26E-02
1,05E+04	3,95E-02	1,40E+04	4,19E-02	1,76E+04	4,26E-02
1,06E+04	3,96E-02	1,41E+04	4,19E-02	1,77E+04	4,26E-02
1,07E+04	3,97E-02	1,42E+04	4,20E-02	1,78E+04	4,26E-02
1,08E+04	3,98E-02	1,43E+04	4,20E-02	1,79E+04	4,26E-02
1,09E+04	3,99E-02	1,44E+04	4,20E-02	1,80E+04	4,26E-02
1,10E+04	4,00E-02	1,45E+04	4,21E-02	1,81E+04	4,26E-02
1,11E+04	4,01E-02	1,46E+04	4,21E-02	1,82E+04	4,26E-02
1,12E+04	4,02E-02	1,47E+04	4,21E-02	1,83E+04	4,26E-02
1,13E+04	4,02E-02	1,48E+04	4,22E-02	1,84E+04	4,26E-02
1,14E+04	4,03E-02	1,49E+04	4,22E-02	1,85E+04	4,26E-02
1,15E+04	4,04E-02	1,50E+04	4,22E-02	1,86E+04	4,26E-02
1,16E+04	4,05E-02	1,51E+04	4,23E-02	1,86E+04	4,26E-02
1,17E+04	4,06E-02	1,52E+04	4,23E-02	1,87E+04	4,26E-02
1,18E+04	4,06E-02	1,53E+04	4,23E-02	1,88E+04	4,26E-02
1,19E+04	4,07E-02	1,54E+04	4,23E-02	1,89E+04	4,25E-02
1,20E+04	4,08E-02	1,55E+04	4,23E-02	1,90E+04	4,25E-02
1,21E+04	4,09E-02	1,56E+04	4,24E-02	1,91E+04	4,25E-02
1,22E+04	4,09E-02	1,57E+04	4,24E-02	1,92E+04	4,25E-02
1,23E+04	4,10E-02	1,57E+04	4,24E-02	1,93E+04	4,25E-02
1,24E+04	4,11E-02	1,58E+04	4,24E-02	1,94E+04	4,25E-02
1,25E+04	4,11E-02	1,59E+04	4,24E-02	1,95E+04	4,25E-02
1,26E+04	4,12E-02	1,60E+04	4,24E-02	1,96E+04	4,25E-02
1,27E+04	4,13E-02	1,61E+04	4,25E-02	1,97E+04	4,25E-02
1,28E+04	4,13E-02	1,62E+04	4,25E-02	1,98E+04	4,25E-02
1,28E+04	4,13E-02	1,63E+04	4,25E-02	1,99E+04	4,24E-02
1,29E+04	4,14E-02	1,64E+04	4,25E-02	2,00E+04	4,24E-02
1,30E+04	4,14E-02	1,65E+04	4,25E-02	2,01E+04	4,24E-02
1,31E+04	4,15E-02	1,66E+04	4,25E-02	2,02E+04	4,24E-02
1,32E+04	4,15E-02	1,67E+04	4,25E-02	2,03E+04	4,24E-02
1,33E+04	4,16E-02	1,68E+04	4,25E-02	2,04E+04	4,24E-02
1,34E+04	4,16E-02	1,69E+04	4,25E-02	2,05E+04	4,24E-02
1,35E+04	4,17E-02	1,70E+04	4,26E-02	2,06E+04	4,23E-02
		1,71E+04	4,26E-02	2,07E+04	4,23E-02

2,08E+04	4,23E-02
2,09E+04	4,23E-02
2,10E+04	4,23E-02
2,11E+04	4,23E-02
2,12E+04	4,22E-02
2,13E+04	4,22E-02
2,14E+04	4,22E-02
2,15E+04	4,22E-02
2,15E+04	4,22E-02
2,16E+04	4,22E-02
2,17E+04	4,21E-02
2,18E+04	4,21E-02
2,19E+04	4,21E-02
2,20E+04	4,21E-02
2,21E+04	4,21E-02
2,22E+04	4,20E-02
2,23E+04	4,20E-02
2,24E+04	4,20E-02
2,25E+04	4,20E-02
2,26E+04	4,20E-02
2,27E+04	4,19E-02
2,28E+04	4,19E-02
2,29E+04	4,19E-02
2,30E+04	4,19E-02
2,31E+04	4,18E-02
2,32E+04	4,18E-02
2,33E+04	4,18E-02
2,34E+04	4,18E-02
2,35E+04	4,17E-02
2,36E+04	4,17E-02
2,37E+04	4,17E-02
2,38E+04	4,17E-02
2,39E+04	4,16E-02
2,40E+04	4,16E-02
2,41E+04	4,16E-02
2,42E+04	4,15E-02
2,43E+04	4,15E-02
2,44E+04	4,15E-02
2,44E+04	4,15E-02
2,45E+04	4,15E-02
2,46E+04	4,14E-02
2,47E+04	4,14E-02

2,48E+04	4,14E-02
2,49E+04	4,13E-02
2,50E+04	4,13E-02
2,51E+04	4,13E-02
2,52E+04	4,13E-02
2,53E+04	4,12E-02
2,54E+04	4,12E-02
2,55E+04	4,12E-02
2,56E+04	4,11E-02
2,57E+04	4,11E-02
2,58E+04	4,11E-02
2,59E+04	4,10E-02
2,60E+04	4,10E-02
2,61E+04	4,10E-02
2,62E+04	4,09E-02
2,63E+04	4,09E-02
2,64E+04	4,09E-02
2,65E+04	4,08E-02
2,66E+04	4,08E-02
2,67E+04	4,08E-02
2,68E+04	4,07E-02
2,69E+04	4,07E-02
2,70E+04	4,07E-02
2,71E+04	4,07E-02
2,72E+04	4,06E-02
2,73E+04	4,06E-02
2,73E+04	4,06E-02
2,74E+04	4,06E-02
2,75E+04	4,05E-02
2,76E+04	4,05E-02
2,77E+04	4,05E-02
2,78E+04	4,04E-02
2,79E+04	4,04E-02
2,80E+04	4,03E-02
2,81E+04	4,03E-02
2,82E+04	4,03E-02
2,83E+04	4,02E-02
2,84E+04	4,02E-02
2,85E+04	4,02E-02
2,86E+04	4,01E-02
2,87E+04	4,01E-02
2,88E+04	4,01E-02

2,89E+04	4,00E-02
2,90E+04	4,00E-02
2,91E+04	4,00E-02
2,92E+04	3,99E-02
2,93E+04	3,99E-02
2,94E+04	3,99E-02
2,95E+04	3,98E-02
2,96E+04	3,98E-02
2,97E+04	3,98E-02
2,98E+04	3,97E-02
2,99E+04	3,97E-02
3,00E+04	3,96E-02
3,01E+04	3,96E-02
3,02E+04	3,96E-02
3,02E+04	3,96E-02
3,03E+04	3,95E-02
3,04E+04	3,95E-02
3,05E+04	3,95E-02
3,06E+04	3,94E-02
3,07E+04	3,94E-02
3,08E+04	3,94E-02
3,09E+04	3,93E-02
3,10E+04	3,93E-02
3,11E+04	3,93E-02
3,12E+04	3,92E-02
3,13E+04	3,92E-02
3,14E+04	3,91E-02
3,15E+04	3,91E-02
3,16E+04	3,91E-02
3,17E+04	3,90E-02
3,18E+04	3,90E-02
3,19E+04	3,90E-02
3,20E+04	3,89E-02
3,21E+04	3,89E-02
3,22E+04	3,88E-02
3,23E+04	3,88E-02
3,24E+04	3,88E-02
3,25E+04	3,87E-02
3,26E+04	3,87E-02
3,27E+04	3,87E-02
3,28E+04	3,86E-02
3,29E+04	3,86E-02

3,30E+04	3,86E-02
3,31E+04	3,85E-02
3,31E+04	3,85E-02
3,32E+04	3,85E-02
3,33E+04	3,84E-02
3,34E+04	3,84E-02
3,35E+04	3,84E-02
3,36E+04	3,83E-02
3,37E+04	3,83E-02
3,38E+04	3,83E-02
3,39E+04	3,82E-02
3,40E+04	3,82E-02
3,41E+04	3,81E-02
3,42E+04	3,81E-02
3,43E+04	3,81E-02
3,44E+04	3,80E-02
3,45E+04	3,80E-02
3,46E+04	3,80E-02
3,47E+04	3,79E-02
3,48E+04	3,79E-02
3,49E+04	3,78E-02
3,50E+04	3,78E-02
3,51E+04	3,78E-02
3,52E+04	3,77E-02
3,53E+04	3,77E-02
3,54E+04	3,77E-02
3,55E+04	3,76E-02
3,56E+04	3,76E-02
3,57E+04	3,75E-02
3,58E+04	3,75E-02
3,59E+04	3,75E-02
3,60E+04	3,74E-02
3,60E+04	3,74E-02
3,61E+04	3,74E-02
3,62E+04	3,74E-02
3,63E+04	3,73E-02
3,64E+04	3,73E-02
3,65E+04	3,73E-02
3,66E+04	3,72E-02
3,67E+04	3,72E-02
3,68E+04	3,71E-02
3,69E+04	3,71E-02

3,70E+04	3,71E-02
3,71E+04	3,70E-02
3,72E+04	3,70E-02
3,73E+04	3,70E-02
3,74E+04	3,69E-02
3,75E+04	3,69E-02
3,76E+04	3,68E-02
3,77E+04	3,68E-02
3,78E+04	3,68E-02
3,79E+04	3,67E-02
3,80E+04	3,67E-02
3,81E+04	3,67E-02
3,82E+04	3,66E-02
3,83E+04	3,66E-02
3,84E+04	3,65E-02
3,85E+04	3,65E-02
3,86E+04	3,65E-02
3,87E+04	3,64E-02
3,88E+04	3,64E-02
3,89E+04	3,64E-02
3,89E+04	3,64E-02
3,99E+04	3,60E-02
4,09E+04	3,56E-02

Liste de publications et communications

- 1- Dilmi. S, Guedda. E.H, Boumali. A.M., Etude des taux d'ionisation d'un plasma Maxwellien d'hélium, Revue des Sciences Fondamentales et Appliquées, vol. 3 N°. 1 (2011), 13-17
- 2- Dilmi. S et Guedda. E H, Calcul des coefficients de taux d'ionisation du lithium héliumöide, Séminaire international sur la physique de plasma, ouargla 13-17 Février (2011).
- 3- Dilmi. S et Guedda. E H, Calcul des coefficients de taux d'ionisation du fer héliumöide, Revue des Sciences Fondamentales et Appliquées, vol. 4 N°. 1 (2012), 52-56
- 4- Dilmi. S, Guedda. E. H, Calcul des coefficients de taux d'ionisation du fer héliumöide, SENALAP'2012, El-Oued, 17-18 Janvier (2012)
- 5- Dilmi. S, Guedda. E H et Boumali A M, Calcul des taux d'ionisation de l'hélium neutre, Canadian journal of physics, **91**: 390–393 (2013)
- 6- Dilmi. S et Guedda. E H, Calcul des taux de transition radiative et d'autoionisation pour un plasma d'hélium Neutre, Séminaire international sur la physique de plasma, Ouargla 10-12 Mars (2013).