

*Un modèle hybride pour le calcul de propriétés radiatives des plasmas chauds combinant niveaux, configurations et supraconfigurations à l'équilibre thermodynamique local.*

Le calcul d'opacités

Introduction  
Faisceaux détaillés  
Faisceaux statistiques

SCORCG

Construction  
Difficultés  
Exemples

Applications et optimisation

Coalescence  
Moments d'ordres supérieurs  
Expériences

Conclusion

Quentin PORCHEROT<sup>1</sup>

Thèse de doctorat effectuée dans le cadre d'une formation par la recherche d'Ingénieur de l'Armement sous la direction de :

Jean-Christophe PAIN<sup>1</sup> Franck GILLERON<sup>1</sup> Thomas BLENSKI<sup>2</sup>

<sup>1</sup>CEA, DAM, DIF

<sup>2</sup>CEA, DSM, IRAMIS

17 janvier 2012

# Propriétés radiatives des plasmas

Domaine d'étude

## Le calcul d'opacités

Introduction  
Faisceaux détaillés  
Faisceaux statistiques

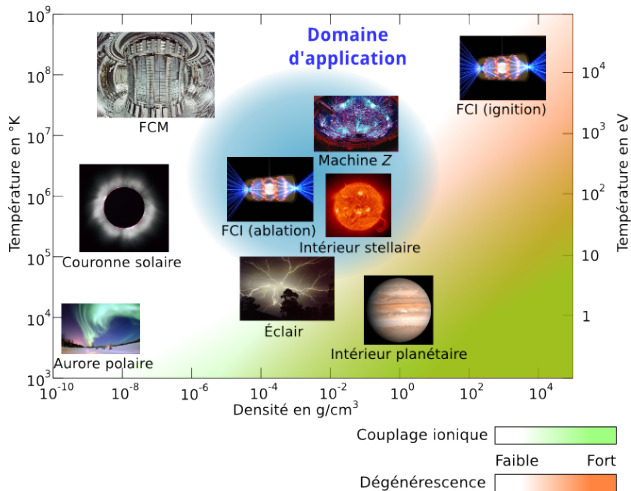
## SCORCG

Construction  
Difficultés  
Exemples

## Applications et optimisation

Coalescence  
Moments d'ordres supérieurs  
Expériences

## Conclusion

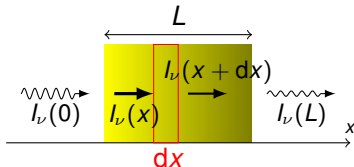


# Propriétés radiatives des plasmas

## Opacité et transport de rayonnement

### ■ Milieu absorbant uniforme :

- ▶ densité  $\rho$  ;
- ▶ épaisseur  $L$ .



### ■ Transport de rayonnement :

- ▶  $\frac{dI_\nu}{dx} = -\alpha_\nu I_\nu + j_\nu$
- ▶  $\alpha_\nu$  absorption,  $j_\nu$  émission ;
- ▶ Libre parcours moyen :

$$\lambda_\nu = \frac{1}{\alpha_\nu}$$

### ■ Opacité et émissivité :

$$\kappa_\nu = \frac{\alpha_\nu}{\rho} \quad \epsilon_\nu = \frac{j_\nu}{\rho}$$

### ■ Transmission :

$$T_\nu = \frac{I_\nu(L)}{I_\nu(0)} = e^{-\rho L \kappa_\nu}$$

### ■ $\rho L$ est la *masse surfacique* ;

### ■ Équilibre thermodynamique local :

- ▶ collisions dominant ;
- ▶ loi de Planck pour le rayonnement.

$$\frac{\epsilon_\nu}{\kappa_\nu} = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1}$$

# Propriétés radiatives des plasmas

Processus et contributions

Le calcul  
d'opacités

Introduction  
Faisceaux détaillés  
Faisceaux  
statistiques

SCORCG

Construction  
Difficultés  
Exemples

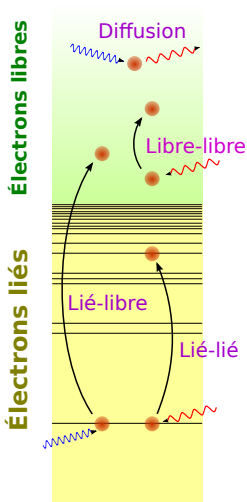
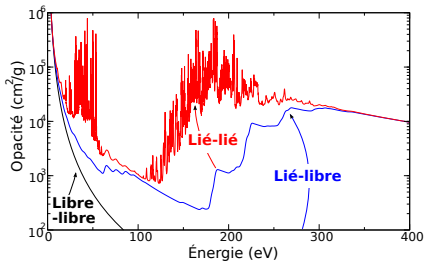
Applications et  
optimisation

Coalescence  
Moments d'ordres  
supérieurs  
Expériences

Conclusion

4 types de processus contribuent à l'opacité :

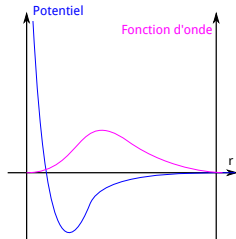
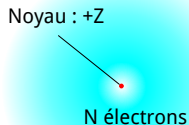
- rayonnement – électrons libres
  - ▶ diffusion
  - ▶ Bremsstrahlung inverse
- rayonnement – électrons liés
  - ▶ photoionisation
  - ▶ photoexcitation



- Potentiel  $\leftrightarrow$  Fonctions d'onde de probabilité
- Approximation du champ central  
 $\Rightarrow$  Caractérisation des électrons liés :

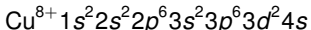
Nom	Lettre	Condition
principal	$n$	$n \geq 1$
orbital	$l$	$0 \leq l < n$
magnétique	$m_l$	$-l \leq m_l \leq l$
spin	$m_s$	$m_s = \pm 1/2$

- Rôle des nombres quantiques
  - ▶  $n \leftrightarrow$  couche électronique ;
  - ▶  $nl \leftrightarrow$  orbitale ou sous-couche ;
  - ▶  $m_l, m_s \Rightarrow$  dégénérescence  $4l + 2$  orbitale  $nl$ .



- Une configuration électronique est définie par :

- ▶ le numéro atomique  $Z$  ;
- ▶ la charge  $Q$   
 $\Rightarrow Z - Q$  électrons liés ;
- ▶ le nombre d'électrons  $w_k$  dans chaque orbitale  $n_k \ell_k$  ;
- ▶ Exemple : cuivre ionisé 8 fois



- Sa dégénérescence est égale à

$$g_c = \prod_{k=1}^q C_{4\ell_k+2}^{w_k} = \prod_{k=1}^q \frac{(4\ell_k + 2)!}{(4\ell_k + 2 - w_k)! w_k!};$$

- $\text{Cu}^{8+} [\text{Ar}]3d^2 4s : g_c = 90$

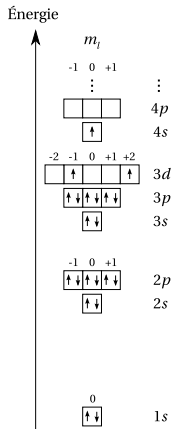


FIGURE:  
 $\text{Cu}^{8+} [\text{Ar}] 3d^2 4s$

# Faisceaux de transition détaillés

Structure fine d'une configuration



Le calcul  
d'opacités

Introduction  
Faisceaux détaillés  
Faisceaux  
statistiques

SCORCG

Construction  
Difficultés  
Exemples

Applications et  
optimisation

Coalescence  
Moments d'ordres  
supérieurs  
Expériences

Conclusion

Configuration  $C \supset$  Niveaux  $|\gamma J\rangle \ni$  États  $|\gamma J M_J\rangle$ .

Diagonalisation du Hamiltonien

$\Rightarrow$  obtention des  $|\gamma J\rangle$

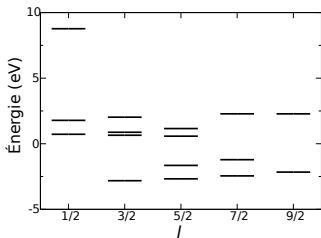


FIGURE:  $\text{Cu}^{8+} [\text{Ar}] 3d^2 4s$ .  $E_{\text{av}} = 0$ .

■ Moment cinétique total  $J$   
conservé

$\Rightarrow$  niveaux  $|\gamma J\rangle$  en partie  
définis par  $J$ .

■ On a :

$$\sum_{J=J_{\min}}^{J_{\max}} (2J+1) Q(J) = g_C,$$

$Q(J)$  nombre de niveaux  
de moment  $J$

# Faisceaux de transition détaillés

Structure fine d'une configuration



Configuration  $C \supset$  Niveaux  $|\gamma J\rangle \ni$  États  $|\gamma J M_J\rangle$ .

Si le mélange de configurations est négligeable.

Diagonalisation du Hamiltonien

$\Rightarrow$  obtention des  $|\gamma J\rangle$

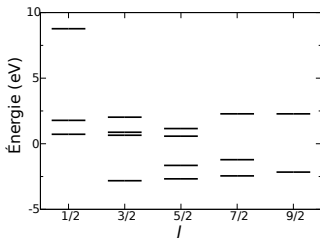


FIGURE:  $\text{Cu}^{8+} [\text{Ar}] 3d^2 4s$ .  $E_{\text{av}} = 0$ .

■ Moment cinétique total  $J$  conservé

$\Rightarrow$  niveaux  $|\gamma J\rangle$  en partie définis par  $J$ .

■ On a :

$$\sum_{J=J_{\min}}^{J_{\max}} (2J+1) Q(J) = g_C,$$

$Q(J)$  nombre de niveaux de moment  $J$

Le calcul d'opacités

Introduction  
Faisceaux détaillés  
Faisceaux statistiques

SCORCG

Construction  
Difficultés  
Exemples

Applications et optimisation

Coalescence  
Moments d'ordres supérieurs  
Expériences

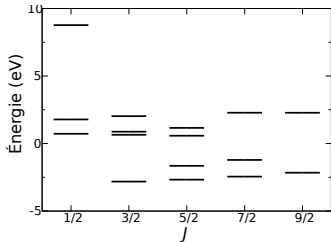
Conclusion



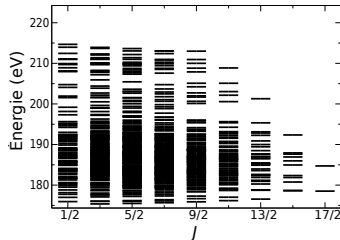
# Faisceaux de transition détaillés

Faisceaux de transition dipolaires électriques

Raie E1 (dipolaire électrique) :  $\gamma J$  initial  $\rightarrow \gamma' J'$  final.



$\text{Cu}^{8+} [\text{Ne}] 3s^2 3p^6 3d^2 4s.$



$\text{Cu}^{8+} [\text{Ne}] 3s^2 3p^5 3d^2 4s 4d.$

## Règles de sélection E1

- Détermine les raies E1 autorisées ;
- Moments cinétiques :
  - ▶  $\Delta l = \pm 1$  ;
  - ▶  $\Delta J = 0, \pm 1, 0 \not\rightarrow 0.$

# Faisceaux de transition détaillés

Faisceaux de transition dipolaires électriques

Processus physiques  $\Rightarrow$  élargissement des raies.

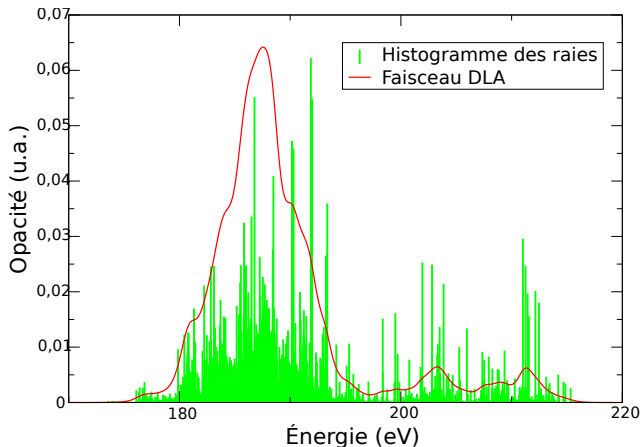


FIGURE: Faisceau de transition Cu  $3d^24s - 3p^53d^24s4d$ .

# Faisceaux de transition détaillés

Complexité des faisceaux de transition



Le calcul d'opacités

Introduction

Faisceaux détaillés

Faisceaux statistiques

SCORCG

Construction

Difficultés

Exemples

Applications et optimisation

Coalescence

Moments d'ordres supérieurs

Expériences

Conclusion

## Complexité des configurations $(n_k \ell_k^{w_k})_{k=1,q}$

- $Q(J)$  nombre de niveaux d'état de moment cinétique  $J$ .  
$$\sum_J (2J+1) Q(J) = g_C = \prod_{k=1}^q C_{4\ell_k+2}^{w_k}$$
- diagonalisation du Hamiltonien :  $\mathcal{O}(g_C^3)$  par bloc ;
- nombre de raies :  $\mathcal{O}(g_C g_{C'})$  ;
- on peut montrer que la complexité d'une configuration ne dépend pratiquement que de  $g_C$ .

## Prolifération des niveaux et des raies

Espèce	$k_B T$	Transition	$g_{\text{initial}}$	$g_{\text{final}}$	$N_{\text{raies}}$
Fe VI	20 eV	$3d^3-3d^24f$	120	630	721
Ge X	40 eV	$3d^44p-3d^45d$	1260	2100	22 845
Sm III	10 eV	$4f^6-4f^56d$	3003	20 020	25 680
Gd VI	20 eV	$4f^45d-4f^35d6d$	10 010	36 400	1 139 911
Br IX	40 eV	$3d^64p4d^2-3d^54p4d^24f^3$	56 700	952 560	$213 \cdot 10^6$



Composantes du spectre en opacité, la prise en compte des raies détaillées ont des conséquences importantes :

- les spectres en transmission et en émission, outils de diagnostic ;
- les opacités moyennes dont dépend le transfert de rayonnement dans les plasmas chauds.



Le calcul  
d'opacités

Introduction

Faisceaux détaillés

Faisceaux  
statistiques

SCORCG

Construction

Difficultés

Exemples

Applications et  
optimisation

Coalescence

Moments d'ordres  
supérieurs

Expériences

Conclusion

## Applications

**FCI (LIL/LMJ)** transport de rayonnement dans la cavité et les ablateurs CH, Ge et Cu ;

**FCM (ITER)** absorption du tungstène dans le divertor ;

**Physique stellaire** modélisation des corps stellaires (ex. Soleil, Céphéides) très sensible à l'opacité.

**Laboratoire** diagnostic des plasmas expérimentaux (ex. LULI)

## Avantages de l'approche détaillée

- structure fine  $\mapsto$  raies E1 ;
- très bonne modélisation des faisceaux « poreux » ;
- permet une prise en compte de l'interaction de configuration ;

## Approche souhaitable si

- Z faible ou intermédiaire :
  - ▶ configurations simples ;
  - ▶ nombre de configurations réduit.
- Faible température :
  - ▶ peu d'états excités ;
  - ▶ facteur de Boltzmann $\Rightarrow$  peuplement des niveaux.

## Limites

- Configurations complexes :
  - ▶ nombre de niveaux ;
  - ▶ nombre de raies.
- Haute température :
  - ▶ prolifération des configurations ;
  - ▶ configurations excitées complexes.

## UTA = Unresolved Transition Array

- des faisceaux de transition  $\{f_{\text{raie}}\}$  n'ont pas de structure détaillée (coalescence) ;
- ces faisceaux peuvent être modélisés par une gaussienne ;
- 3 paramètres :

- ▶ l'« aire » ou intensité totale

$$\mu_0 = \sum_{\text{raies}} f_{\text{raie}};$$

- ▶ la moyenne

$$\mu_1 = \frac{1}{\mu_0} \sum_{\text{raies}} f_{\text{raie}} E_{\text{raie}};$$

- ▶ la dispersion ou variance

$$\mu_2^{(c)} = \frac{1}{\mu_0} \sum_{\text{raies}} f_{\text{raie}} (E_{\text{raie}} - \mu_1)^2.$$

## Formalisme UTA :

- calcul exact des moments ;
- configurations non détaillées.

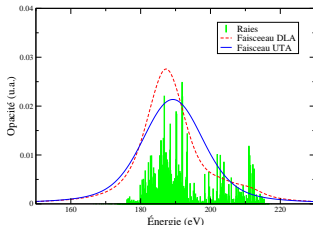


FIGURE: UTA et faisceau *coalescent*

1. BAUCHE-ARNOULT et coll., *PRA* **20**, 2424 (1979)

# Faisceaux de transition statistiques

Séparation spin-orbite



Le calcul d'opacités

- Introduction
- Faisceaux détaillés
- Faisceaux statistiques

SCORCG

- Construction
- Difficultés
- Exemples

Applications et optimisation

- Coalescence
- Moments d'ordres supérieurs
- Expériences

Conclusion

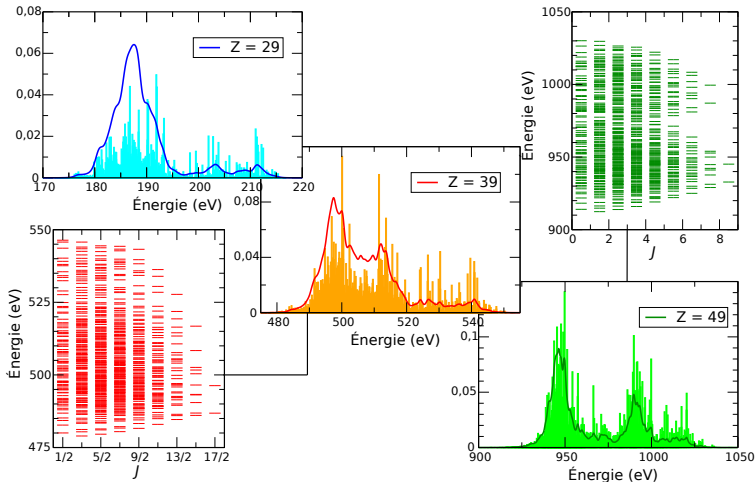


FIGURE: Intégrale de spin-orbite  $\sim Z^4$  vs. intégrales coulombiennes  $\sim Z$ .



### La méthode UTA

- accélère le calcul des faisceaux de transition ;
- est adapté aux faisceaux coalescents.

### Mais est inadapté

- aux cas relativistes (séparation spin-orbite) ;

### Formalisme SOSA (spin-orbit split array)

- Orbitale  $\mapsto$  sous-couches relativistes ;
- Configuration  $\mapsto$  SCR (sous-configurations relativistes) ;
- Faisceaux de transition  $\mapsto$  sous-faisceaux relativistes  $\Rightarrow$  séparation spin-orbite incluse.
- **Attention au mélange de SCR !**

2. C. BAUCHE-ARNOULT et coll., *PRA* **31**, 2248 (1985)

#### Le calcul d'opacités

Introduction

Faisceaux détaillés

Faisceaux statistiques

#### SCORCG

Construction

Difficultés

Exemples

#### Applications et optimisation

Coalescence

Moments d'ordres supérieurs

Expériences

#### Conclusion



### La méthode UTA

- accélère le calcul des faisceaux de transition ;
- est adapté aux faisceaux coalescents.

### Mais est inadapté

- aux cas relativistes (séparation spin-orbite) ;
- à un grand nombre de configurations.

### Formalisme STA (super-transition array)

- Orbitales  $\mapsto$  *supracouche* (regroupement d'orbitales) ;
- Configurations  $\mapsto$  *supraconfiguration*
- Faisceaux de transition  $\mapsto$  *suprafaisceaux de transition*  
 $\Rightarrow$  moins d'entités, moins de transitions

2. BAR-SHALOM et coll., *PRA* **40**, 3183 (1989).

## Forces des approches statistiques

- calculs rapides, y compris pour les configurations complexes ;
- possibilité d'utiliser différents formalismes statistiques ;
- adaptées aux plasmas avec de nombreuses configurations.

### Le calcul d'opacités

- Introduction
- Faisceaux détaillés
- Faisceaux statistiques

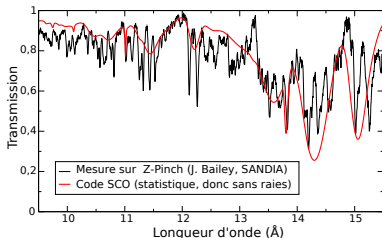
### SCORCG

- Construction
- Difficultés
- Exemples

### Applications et optimisation

- Coalescence
- Moments d'ordres supérieurs
- Expériences

### Conclusion



## Limites

- structures d'absorption non toutes reproduites ;
- basses températures ;
- couches fermées.

# Faisceaux de transition statistiques

Approche détaillée



Le calcul  
d'opacités

Introduction

Faisceaux détaillés

Faisceaux  
statistiques

SCORCG

Construction

Difficultés

Exemples

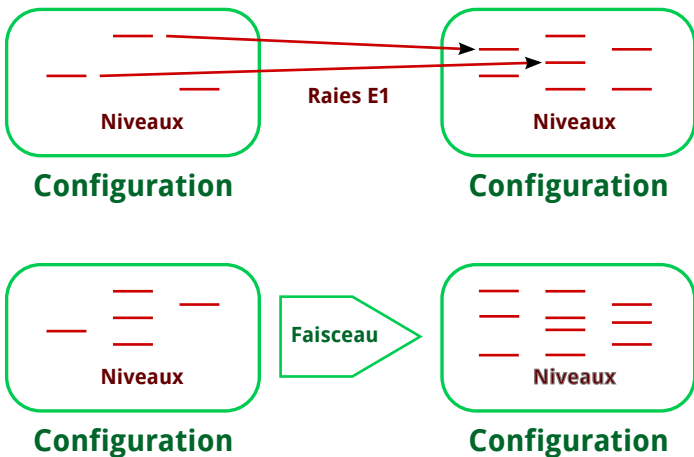
Applications et  
optimisation

Coalescence

Moments d'ordres  
supérieurs

Expériences

Conclusion



# Faisceaux de transition statistiques

Approches statistiques



Le calcul  
d'opacités

- Introduction
- Faisceaux détaillés
- Faisceaux statistiques

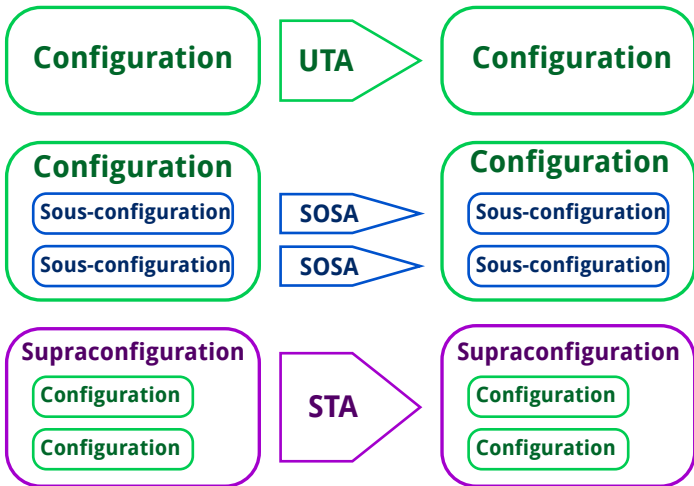
SCORCG

- Construction
- Difficultés
- Exemples

Applications et  
optimisation

- Coalescence
- Moments d'ordres supérieurs
- Expériences

Conclusion



# Construction de l'approche hybride

Motivations de l'approche hybride



Le calcul  
d'opacités

Introduction

Faisceaux détaillés

Faisceaux  
statistiques

SCORCG

Construction

Difficultés

Exemples

Applications et  
optimisation

Coalescence

Moments d'ordres  
supérieurs

Expériences

Conclusion

## Approche détaillée

- rendu de toutes les structures du spectre ;
- adaptée aux faisceaux de transition simples ;
- prend en compte la température dans la forme des faisceaux.

## Approche statistique

- faible temps de calcul ;
- faisceaux complexes pris en compte ;
- STA  $\supset$  nombreux UTA.

## « Cahier des charges » de notre modèle hybride

- Applicable à l'équilibre thermodynamique local (É.T.L) ;
- Applicable pour de nombreux éléments ;
- Modéliser l'effet du voisinage ionique ;
- Maîtriser le temps de calcul ;
- Simple d'utilisation et automatique.

# Construction de l'approche hybride

Choix des outils pour notre modèle



## Le calcul d'opacités

Introduction

Faisceaux détaillés

Faisceaux statistiques

## SCORCG

Construction

Difficultés

Exemples

## Applications et optimisation

Coalescence

Moments d'ordres supérieurs

Expériences

## Conclusion

- **Thermodynamique et calculs statistiques : SCO<sup>3</sup>**
  - ▶ mélange de supraconfigurations et de configurations ;
  - ▶ approximation de Pauli pour les effets relativistes ;
  - ▶ calcul des fonctions d'onde dans la cellule de Wigner-Seitz ;
  - ▶ prend en compte la relaxation des orbitales.
  
- **Calculs détaillés avec RCG (Cowan, Los Álamos)<sup>4</sup>**
  - ▶ code disponible et utilisé depuis plusieurs décennies ;
  - ▶ traitement des effets relativistes comme dans SCO ;
  - ▶ nombreuses options de calcul (ex. passage d'intégrales radiales) ;
  
- **Approximations**
  - ▶ interaction de configuration limitée aux SCR ;
  - ▶ Fonctions d'onde des (supra)configurations écrantées à l'intérieur des cellules ioniques.

3. T. BLENSKI et coll., *JQSRT* **65**, 91 (2000).

4. R. D. COWAN, *The Theory of Atomic Structure and Spectra*, 1981.

# Construction de l'approche hybride

Couplage entre SCO et RCG\*



Le calcul d'opacités

Introduction

Faisceaux détaillés

Faisceaux statistiques

SCORCG

Construction

Difficultés

Exemples

Applications et optimisation

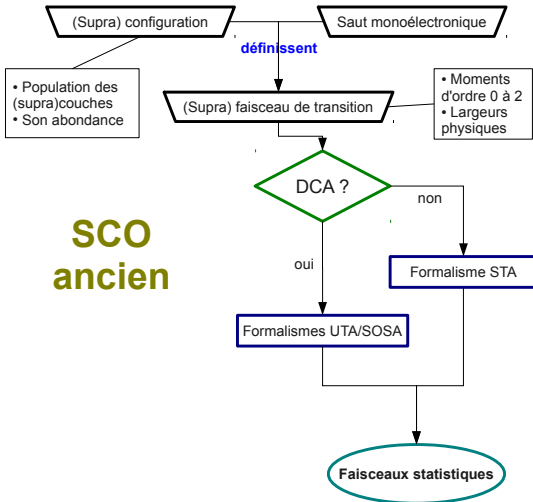
Coalescence

Moments d'ordres supérieurs

Expériences

Conclusion

## Gestion du calcul lié-lié



Avant :

**SCO  
ancien**

# Construction de l'approche hybride

Couplage entre SCO et RCG\*



Le calcul d'opacités

Introduction  
Faisceaux détaillés  
Faisceaux statistiques

SCORCG

Construction  
Difficultés  
Exemples

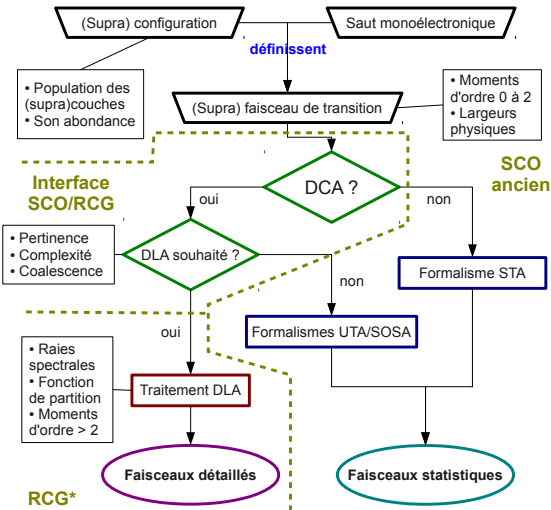
Applications et optimisation

Coalescence  
Moments d'ordres supérieurs  
Expériences

Conclusion

## Gestion du calcul lié-lié

Après :





# Problèmes posés par l'approche hybride

Fonctions de partition et probabilités des espèces

La thermodynamique de l'espèce  $X$  à la température  $k_B T = 1/\beta$  est caractérisée par sa fonction de partition

$$U_X = g_X e^{-\beta E_X}.$$

$X$  peut être :

- une configuration ;
- une supraconfiguration

Pour une configuration :

- Non-détaillée :

$$\begin{aligned} U_C^{(S)} &= g_C e^{-\beta E_C} \\ &= \sum_{\gamma \in C} (2J + 1) e^{-\beta E_{\gamma}} \end{aligned}$$

- Détaillée :

$$U_C^{(D)} = \sum_{\gamma \in C} (2J + 1) e^{-\beta E_{\gamma}}$$

## Maxwell-Boltzmann (É. T. L.)

Compare les probabilités de deux espèces :

$$\frac{\mathcal{P}(Y)}{\mathcal{P}(X)} = \frac{U_Y}{U_X} \left( = \frac{g_Y}{g_X} e^{-\beta(E_Y - E_X)} \right)$$

$$\text{Probabilité : } \mathcal{P}(C) = \frac{U_C}{\sum_{C'} U_{C'}}$$

# Problèmes posés par l'approche hybride

Fonctions de partition et probabilités des espèces



Le calcul  
d'opacités

Introduction  
Faisceaux détaillés  
Faisceaux  
statistiques

SCORCG

Construction  
Difficultés  
Exemples

Applications et  
optimisation

Coalescence  
Moments d'ordres  
supérieurs  
Expériences

Conclusion

La thermodynamique de l'espèce  $X$  à la température  $k_B T = 1/\beta$  est caractérisée par sa fonction de partition

$$\mathcal{U}_X = g_X e^{-\beta E_X}.$$

$X$  peut être :

- une configuration ;
- une supraconfiguration

Maxwell-Boltzmann (É. T. L.)

Compare les probabilités de deux espèces :

$$\frac{\mathcal{P}(Y)}{\mathcal{P}(X)} = \frac{\mathcal{U}_Y}{\mathcal{U}_X} \left( = \frac{g_Y}{g_X} e^{-\beta(E_Y - E_X)} \right)$$

Pour une configuration :

- Non-détaillée :

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_C^{(S)} &= g_C e^{-\beta E_C} \\ &= \sum_{\gamma J \in C} (2J + 1) e^{-\beta E_C} \end{aligned}$$

- Détaillée :

$$\mathcal{U}_C^{(D)} = \sum_{\gamma J \in C} (2J + 1) e^{-\beta E_{\gamma J}}$$

$$\text{Probabilité : } \mathcal{P}(C) = \frac{\mathcal{U}_C^{(?)}}{\sum_{C'} \mathcal{U}_{C'}^{(?)}}$$

Convexité  $\Rightarrow \mathcal{U}_C^{(D)} > \mathcal{U}_C^{(S)}$   
à température finie

### Problèmes :

- (D) = ensemble des configurations d'où partent des DTA ;
- Des UTA/SOSA peuvent partir des configurations de (D) ;
- Des autres configurations ne partent que des UTA/SOSA.

### Jeu détaillé

Fonctions de partition :

- pour une configuration :

$$u_C = \begin{cases} u_C^{(S)} & \text{si } C \notin (D) \\ u_C^{(D)} & \text{si } C \in (D) \end{cases} ;$$

- pour l'ensemble :

$$u = u^{(D)} = \sum_{C \in (D)} u_C^{(D)} + u_C^{(S)}$$

### Jeu statistique

Fonctions de partition :

- pour une configuration

$$u_C = u_C^{(S)} = g_C e^{-\beta E_C}$$

- pour l'ensemble

$$u = u^{(S)} = \sum_C u_C^{(S)}$$

### Problèmes :

- (D) = ensemble des configurations d'où partent des DTA ;
- Des UTA/SOSA peuvent partir des configurations de (D) ;
- Des autres configurations ne partent que des UTA/SOSA.

### Jeu détaillé

Fonctions de partition :

- pour une configuration :

$$u_C = \begin{cases} u_C^{(S)} & \text{si } C \notin (D) \\ u_C^{(D)} & \text{si } C \in (D) \end{cases} ;$$

- pour l'ensemble :

$$u = u^{(D)} = \sum_{C \in (D)} u_C^{(D)} + u_C^{(S)}$$

### Jeu statistique

Fonctions de partition :

- pour une configuration

$$u_C = u_C^{(S)} = g_C e^{-\beta E_C}$$

- pour l'ensemble

$$u = u^{(S)} = \sum_C u_C^{(S)}$$

Comment appliquer les jeux ?



Choix des équations utilisées dans l'approche hybride :

Contribution	Jeu de probabilités	Niveau $\subset$ configuration :
Lié-libre	Jeu statistique	$\frac{2J+1}{g_c}$ (SWAP)
Lié-lié statistique	Jeu statistique	
Lié-lié détaillé	Jeu statistique	



### Le calcul d'opacités

- Introduction
- Faisceaux détaillés
- Faisceaux statistiques

### SCORCG

- Construction
- Difficultés
- Exemples

### Applications et optimisation

- Coalescence
- Moments d'ordres supérieurs
- Expériences

### Conclusion

## Propriétés à conserver

- la normalisation des probabilités :  $\sum_x \mathcal{P}(X) = 1$  ;
- **dépendance en  $k_B T$  la forme des faisceaux détaillés** ;
- Maxwell-Boltzmann entre les configurations ;
- conservation de l'opacité hors région spectrale détaillée ;
- mêmes probabilités d'espèces d'une approche à l'autre.

Choix des équations utilisées dans l'approche hybride :

Contribution	Jeu de probabilités	Niveau $\subset$ configuration :
Lié-libre	Jeu statistique	$\frac{(2J + 1) e^{-\beta(E_{\gamma J} - E_C)}}{\mathcal{U}_C^{(D)}}$
Lié-lié statistique	Jeu statistique	
Lié-lié détaillé	Jeu statistique	

### Propriétés à conserver

- la normalisation des probabilités :  $\sum_X \mathcal{P}(X) = 1$  ;
- dépendance en  $k_B T$  la forme des faisceaux détaillés ;
- **Maxwell-Boltzmann entre les configurations** ;
- conservation de l'opacité hors région spectrale détaillée ;
- mêmes probabilités d'espèces d'une approche à l'autre.

#### Le calcul d'opacités

- Introduction
- Faisceaux détaillés
- Faisceaux statistiques

#### SCORCG

- Construction
- Difficultés
- Exemples

#### Applications et optimisation

- Coalescence
- Moments d'ordres supérieurs
- Expériences

#### Conclusion

Choix des équations utilisées dans l'approche hybride :

Contribution	Jeu de probabilités	Niveau $\subset$ configuration :
Lié-libre	Jeu détaillé	$\frac{(2J + 1) e^{-\beta(E_{\gamma J} - E_C)}}{\mathcal{U}_C^{(D)}}$
Lié-lié statistique	Jeu détaillé	
Lié-lié détaillé	Jeu détaillé	

### Propriétés à conserver

- la normalisation des probabilités :  $\sum_X \mathcal{P}(X) = 1$  ;
- dépendance en  $k_B T$  la forme des faisceaux détaillés ;
- Maxwell-Boltzmann entre les configurations ;
- **conservation de l'opacité hors région spectrale détaillée** ;
- mêmes probabilités d'espèces d'une approche à l'autre.

#### Le calcul d'opacités

- Introduction
- Faisceaux détaillés
- Faisceaux statistiques

#### SCORCG

- Construction
- Difficultés
- Exemples

#### Applications et optimisation

- Coalescence
- Moments d'ordres supérieurs
- Expériences

#### Conclusion

Choix des équations utilisées dans l'approche hybride :

Contribution	Jeu de probabilités	Niveau $\subset$ configuration :
Lié-libre	Jeu statistique	$\frac{(2J + 1) e^{-\beta(E_{\gamma J} - E_C)}}{\mathcal{U}_C^{(D)}}$
Lié-lié statistique	Jeu statistique	
Lié-lié détaillé	<b>Jeu détaillé</b>	

### Propriétés à conserver

- la normalisation des probabilités :  $\sum_X \mathcal{P}(X) = 1$  ;
- dépendance en  $k_B T$  la forme des faisceaux détaillés ;
- Maxwell-Boltzmann entre les configurations ;
- conservation de l'opacité hors région spectrale détaillée ;
- **mêmes probabilités d'espèces d'une approche à l'autre.**

Approche retenue

#### Le calcul d'opacités

- Introduction
- Faisceaux détaillés
- Faisceaux statistiques

#### SCORCG

- Construction
- Difficultés
- Exemples

#### Applications et optimisation

- Coalescence
- Moments d'ordres supérieurs
- Expériences

#### Conclusion



### ■ Tailles de tableaux limitantes :

- ▶ 20 (supra)couches dans SCO ;
- ▶  $Q(J) \leq 4000$  ;
- ▶ 800 000 raies / faisceau ;
- ▶ 8 orbitales ouvertes / faisceau ;
- ▶  $w_k \leq 2$  si  $l_k \geq 4^a$  ;

⇒ critères rudimentaires pour ne pas détailler des faisceaux trop complexes.

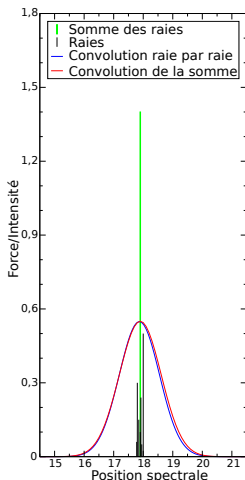
### ■ Gestion des ressources paramétrable :

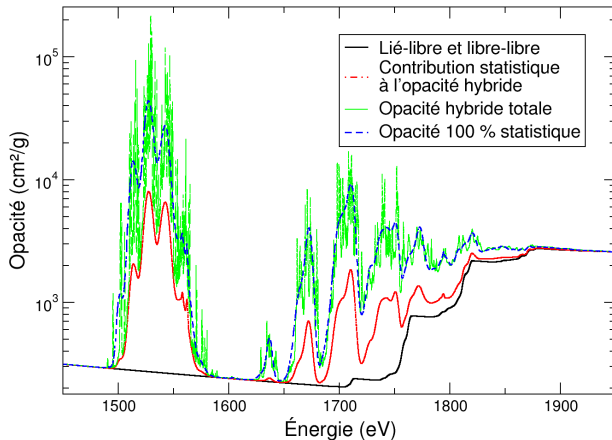
- ▶ le nombre de configurations ;
- ▶ la dernière orbitale individuelle  $b$  ;
- ▶ le traitement des raies  $c$  ;
- ▶ le nombre de raies / faisceau.

a. Algèbre de Racah

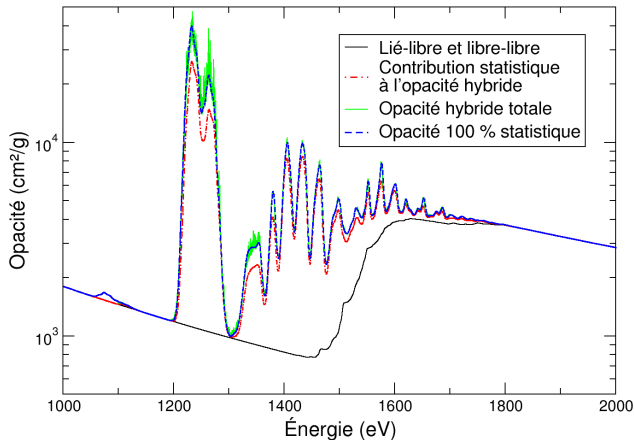
b. Toutes les autres orbitales sont regroupées dans une unique supracouche-chapeau.

c. J. ABDALLAH JR et coll., *HEDP* **3**, 309 (2007).





**FIGURE:** Opacité de la couche K de l'aluminium ( $Z = 13$ ) à 37 eV et  $10 \text{ mg/cm}^3$  avec 200 (supra)configurations.



**FIGURE:** Opacité de la couche *L* du germanium ( $Z = 32$ ) à 43 eV et  $25 \text{ mg/cm}^3$  avec 500 (supra)configurations. La couche *3d* est à moitié remplie.

# Exemples de calculs hybrides

Nombre de raies



Le calcul  
d'opacités

- Introduction
- Faisceaux détaillés
- Faisceaux statistiques

SCORCG

- Construction
- Difficultés
- Exemples

Applications et  
optimisation

- Coalescence
- Moments d'ordres supérieurs
- Expériences

Conclusion

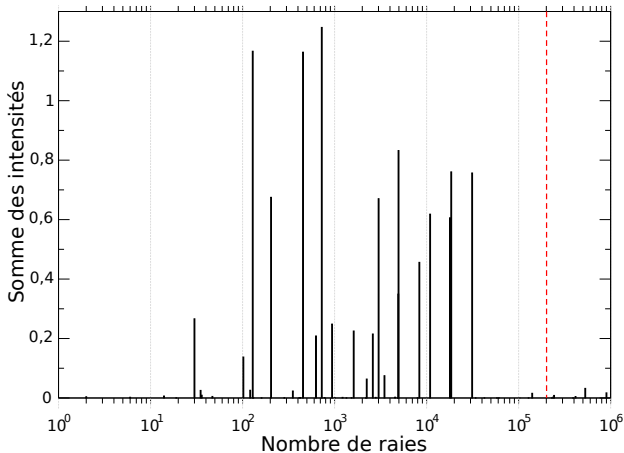


FIGURE: Somme des intensités des faisceaux ayant même nombre de raies dans le plasma d'aluminium.

# Exemples de calculs hybrides

Nombre de raies

## Le calcul d'opacités

- Introduction
- Faisceaux détaillés
- Faisceaux statistiques

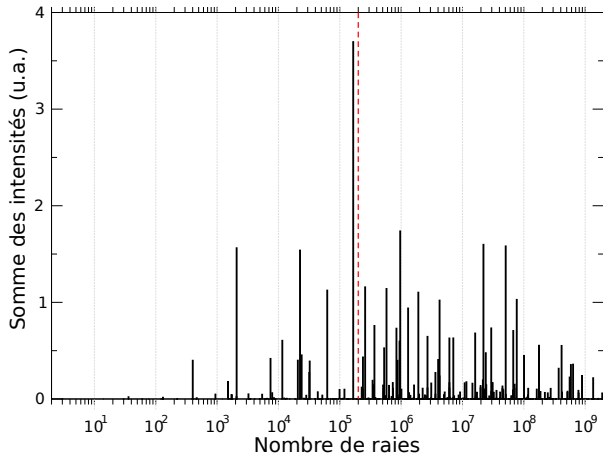
## SCORCG

- Construction
- Difficultés
- Exemples

## Applications et optimisation

- Coalescence
- Moments d'ordres supérieurs
- Expériences

## Conclusion



**FIGURE:** Somme des intensités des faisceaux ayant même nombre de raies dans le plasma de germanium.

# Exemples de calculs hybrides

Spectre d'aluminium obtenu sur HELEN<sup>5</sup>



Le calcul  
d'opacités

Introduction  
Faisceaux détaillés  
Faisceaux  
statistiques

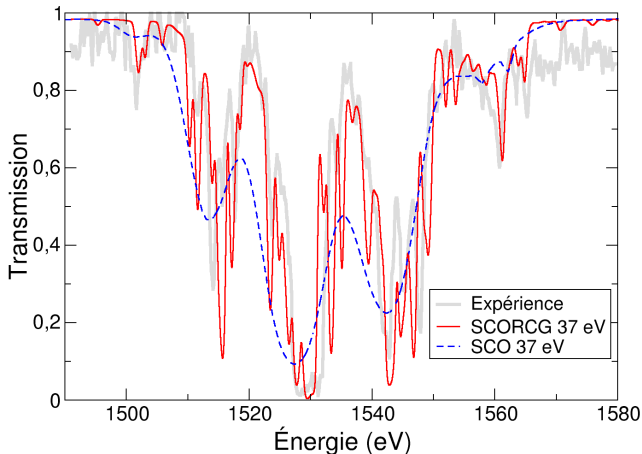
SCORCG

Construction  
Difficultés  
Exemples

Applications et  
optimisation

Coalescence  
Moments d'ordres  
supérieurs  
Expériences

Conclusion



**FIGURE:** Transmission de l'aluminium dans les conditions de l'expérience de Davidson,  $T = 37$  eV,  $\rho = 0,01$  g/cm<sup>3</sup> et  $\rho l = 54$   $\mu$ g/cm<sup>2</sup>.

5. S. J. DAVIDSON et coll. *Appl. Phys. Lett.* **52**, 847 (1987),

# Exemples de calculs hybrides

Spectre d'aluminium obtenu sur HELEN<sup>5</sup>

Le calcul  
d'opacités

Introduction  
Faisceaux détaillés  
Faisceaux  
statistiques

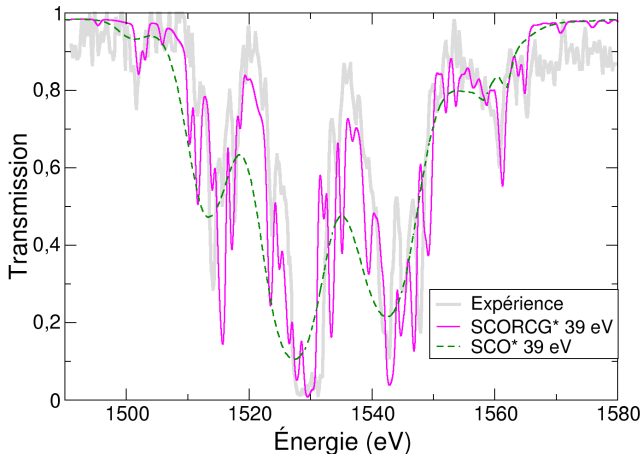
SCORCG

Construction  
Difficultés  
Exemples

Applications et  
optimisation

Coalescence  
Moments d'ordres  
supérieurs  
Expériences

Conclusion



**FIGURE:** Transmission de l'aluminium dans les conditions de l'expérience de Davidson,  $T = 37$  eV,  $\rho = 0,01$  g/cm<sup>3</sup> et  $\rho l = 54$   $\mu$ g/cm<sup>2</sup>.

5. S. J. DAVIDSON et coll. *Appl. Phys. Lett.* **52**, 847 (1987),

# Exemples de calculs hybrides

Spectre de cuivre obtenu au LULI<sup>6</sup>



Le calcul  
d'opacités

Introduction  
Faisceaux détaillés  
Faisceaux  
statistiques

SCORCG

Construction  
Difficultés  
Exemples

Applications et  
optimisation

Coalescence  
Moments d'ordres  
supérieurs  
Expériences

Conclusion

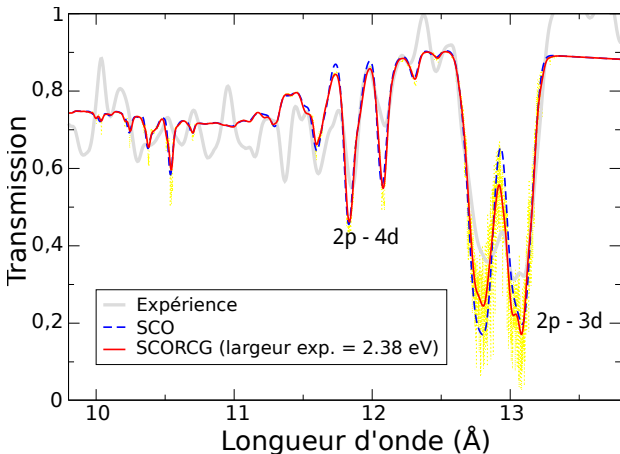


FIGURE: Transmission du cuivre à 16 eV et 0,005 g/cc, masse surfacique  $\rho l = 20 \mu\text{g}/\text{cm}^2$

6. G. LOISEL ET COLL. *High Energy Density Physics* **5**, 173 (2009).



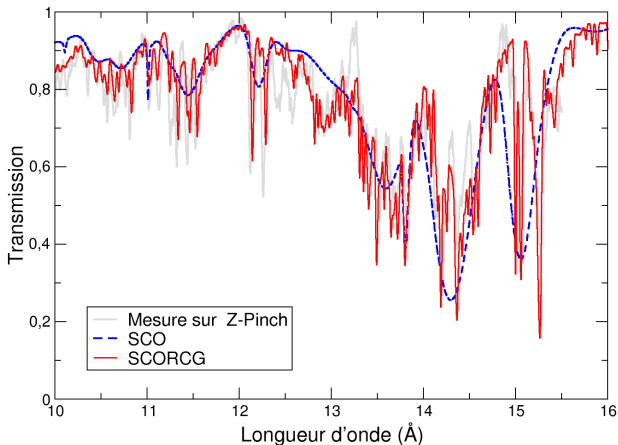


FIGURE: Transmission du fer à 155 eV et 58 mg/cm<sup>3</sup>.

7. J. E. BAILEY et coll., *PRL* **99**, 265002(4) (2007).

### ■ Élargissements physiques de SCORCG :

- ▶ naturel (lorentzien, très faible) ;
- ▶ Doppler (gaussien, faible) ;
- ▶ Stark (gaussien ?) ;
- ▶ collisionnel (lorentzien) ;

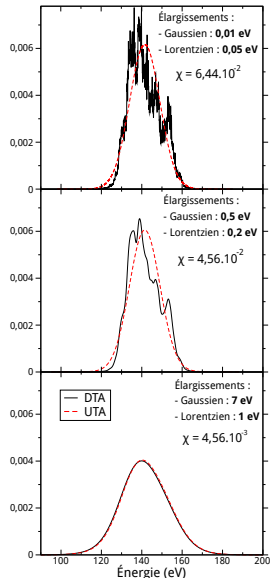
⇒ convolution lors du calcul de l'opacité (profil de Voigt).

### ■ Erreur instrumentale :

⇒ convolution lors du calcul de la transmission (gaussien).

### ■ Coalescence :

- ▶ élargissement élevé  
⇒ *coalescence* des structures détaillées ;
- ▶ approche quantitative  
⇒ critère ?



### Indicateur de forme

$$\chi = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(f_{(S)}(h\nu) - f_{(D)}(h\nu))^2}{f_{(S)} + f_{(D)}} dh\nu$$

$$f_{(S)}(h\nu) = f_{CC'} \Phi_{CC'}(h\nu)$$

$$f_{(D)}(h\nu) = \sum_{\text{raie}} \frac{2J+1}{g_C} f_{\text{raie}} \Phi_{\text{raie}}(h\nu)$$

### Propriétés

- $\chi$  petit  
⇒ faisceaux proches ;
- $\chi$  grand  
⇒ faisceaux différents ;
- les « ailes » sont aussi prises en compte.

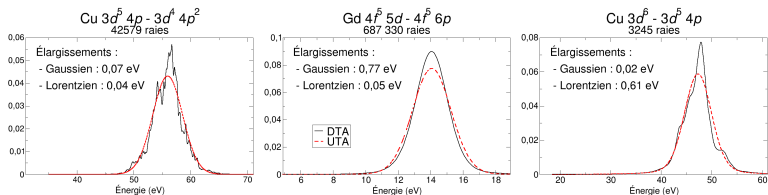


FIGURE: Faisceaux de transition à des élargissements tels que  $\chi = 0,02$ .

## Élargissements pour lesquels $\chi \simeq 0,02$

Z	Transition	$N_{\text{raies}}$	$w_S$	$\frac{w_G}{w_S}$	$\frac{w_L}{w_S}$
13	$2p^4 3p - 2p^3 3s 3p$	778	4,32 eV	0,459	0,282
29	$3d^2 - 3d 4f$	81	1,82 eV	0,860	0,676
	$3d^5 4p - 3d^5 5d$	30969	0,883 eV	1,023	0,702
64	$3d^5 4p - 3d^4 4p^2$	42579	2,46 eV	0,059	0,026
	$3p^5 3d^7 - 3p^4 3d^7 4d$	111240	7,64 eV	0,394	0,198
	$4f^4 - 4f^3 6d$	14087	2,70 eV	0,167	0,074
	$4f^4 5d - 4f^3 5d^2$	524362	2,20 eV	0,173	0,030
	$4f^5 5d - 4f^5 6p$	687330	0,903 eV	0,852	0,530

### Critère *a posteriori*

Faisceau coalescent quand :

$$\chi \leq 0,02$$

Élargissements en jeu :

- Statistique  $w_S$  ;
- Gaussien  $w_G$  ;
- Lorentzien  $w_L$ .

## Élargissements pour lesquels $\chi \simeq 0,02$

Z	Transition	$N_{\text{raies}}$	$w_S$	$\frac{w_G}{w_S}$	$\frac{w_L}{w_S}$
13	$2p^4 3p - 2p^3 3s 3p$	778	4,32 eV	0,459	0,282
29	$3d^2 - 3d 4f$	81	1,82 eV	0,860	0,676
	$3d^5 4p - 3d^5 5d$	30969	0,883 eV	1,023	0,702
	$3d^5 4p - 3d^4 4p^2$	42579	2,46 eV	0,059	0,026
64	$3p^5 3d^7 - 3p^4 3d^7 4d$	111240	7,64 eV	0,394	0,198
	$4f^4 - 4f^3 6d$	14087	2,70 eV	0,167	0,074
	$4f^4 5d - 4f^3 5d^2$	524362	2,20 eV	0,173	0,030
	$4f^5 5d - 4f^5 6p$	687330	0,903 eV	0,852	0,530

Condition suffisante de convergence UTA - DTA ( $\chi \leq 0,02$ ) :

- lorsque  $w_G + 1,5w_L \gtrsim w_S$  ;
- lorsque  $2w_G + 3w_L \gtrsim w_S$  sauf si :
  - ▶ le faisceau a peu de raies (moins de 1000) ;
  - ▶ il est de la forme  $(l^w l' - l^w l'')$  ;

# Effets des moments d'ordres 3 et 4

Une description statistique plus précise des faisceaux<sup>8</sup>

La distribution des raies dans un faisceau de transition non séparé n'est pas gaussienne.

## Moments de faisceaux

Moment centré d'ordre  $n$  :

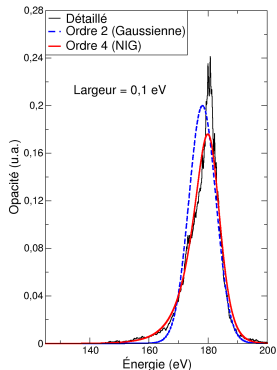
$$\mu_n^{(c)} = \frac{\sum_{\text{raies}} (E_{\text{raies}} - \mu_1)^n \cdot f_{\text{raies}}}{\sum_{\text{raies}} f_{\text{raies}}}$$

$$n = 2 \quad \text{variance} \quad \sigma^2 = \mu_2^{(c)}$$

$$n = 3 \quad \text{asymétrie} \quad \alpha_3 = \frac{\mu_3^{(c)}}{\sigma^3}$$

$$n = 4 \quad \text{kurtosis} \quad \alpha_4 = \frac{\mu_4^{(c)}}{\sigma^4}$$

Ge XII  $3p^5 3d^5 - 3p^5 3d^4 4p$



8. J.-C. PAIN et coll., *HEDP* 5, 294 (2009).

# Effets des moments d'ordres 3 et 4

Une description statistique plus précise des faisceaux<sup>8</sup>

La distribution des raies dans un faisceau de transition non séparé n'est pas gaussienne.

## Moments de faisceaux

Moment centré d'ordre  $n$  :

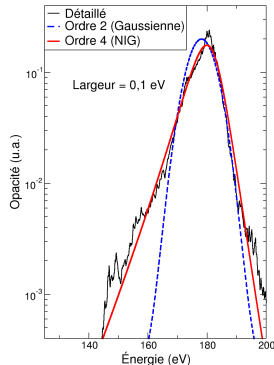
$$\mu_n^{(c)} = \frac{\sum_{\text{raies}} (E_{\text{raies}} - \mu_1)^n \cdot f_{\text{raies}}}{\sum_{\text{raies}} f_{\text{raies}}}$$

$$n = 2 \quad \text{variance} \quad \sigma^2 = \mu_2^{(c)}$$

$$n = 3 \quad \text{asymétrie} \quad \alpha_3 = \frac{\mu_3^{(c)}}{\sigma^3}$$

$$n = 4 \quad \text{kurtosis} \quad \alpha_4 = \frac{\mu_4^{(c)}}{\sigma^4}$$

Ge XII  $3p^5 3d^5 - 3p^5 3d^4 4p$



8. J.-C. PAIN et coll., *HEDP* 5, 294 (2009).

# Distribution des moments d'ordres 3 et 4

Exemple de l'aluminium à 40 eV sur 100 configurations

Le calcul  
d'opacités

Introduction  
Faisceaux détaillés  
Faisceaux  
statistiques

SCORCG

Construction  
Difficultés  
Exemples

Applications et  
optimisation

Coalescence  
Moments d'ordres  
supérieurs  
Expériences

Conclusion

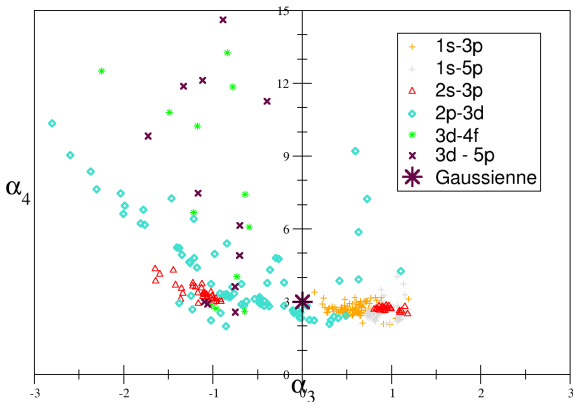


FIGURE: Distribution des moments d'ordre 3 et 4 dans le calcul SCORCG de l'aluminium à 40 eV.



# Effets des moments d'ordres 3 et 4

Coalescence des distributions statistiques à l'ordre 4

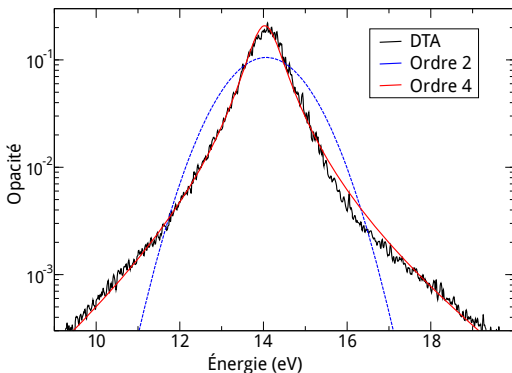


Faisceaux  $e^w e^{w'} - e^w e^{w''}$

- kurtosis très élevé ;
- coalescence :
  - ▶ difficile à l'ordre 2 ;
  - ▶ facile à l'ordre 4.

Gd [Xe]4f<sup>5</sup>5d-[Xe]4f<sup>5</sup>6p

- Moments :
  - ▶  $\alpha_3 = 0,5876$  ;
  - ▶  $\alpha_4 = 17,066$ .
- 687 330 raies E1.



## Le calcul d'opacités

- Introduction
- Faisceaux détaillés
- Faisceaux statistiques

## SCORCG

- Construction
- Difficultés
- Exemples

## Applications et optimisation

- Coalescence
- Moments d'ordres supérieurs
- Expériences

## Conclusion

# Effets des moments d'ordres 3 et 4

Coalescence des distributions statistiques à l'ordre 4



Faisceaux  $l^w l' - l^w l''$

- kurtosis très élevé ;
- coalescence :
  - ▶ difficile à l'ordre 2 ;
  - ▶ facile à l'ordre 4.

Le calcul d'opacités

Introduction

Faisceaux détaillés

Faisceaux statistiques

SCORCG

Construction

Difficultés

Exemples

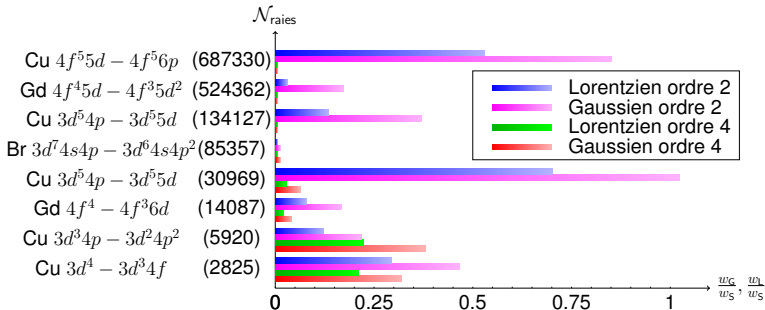
Applications et optimisation

Coalescence

Moments d'ordres supérieurs

Expériences

Conclusion



# Effets des moments d'ordres 3 et 4

Coalescence des distributions statistiques à l'ordre 4



Faisceaux  $l^w l' - l^w l''$

- kurtosis très élevé ;
- coalescence :
  - ▶ difficile à l'ordre 2 ;
  - ▶ facile à l'ordre 4.

Intérêt de l'ordre 4

Faisceaux complexes :  
convergence à élargissement  
réduit.

Il y a des exceptions !

Le calcul  
d'opacités

Introduction

Faisceaux détaillés

Faisceaux  
statistiques

SCORCG

Construction

Difficultés

Exemples

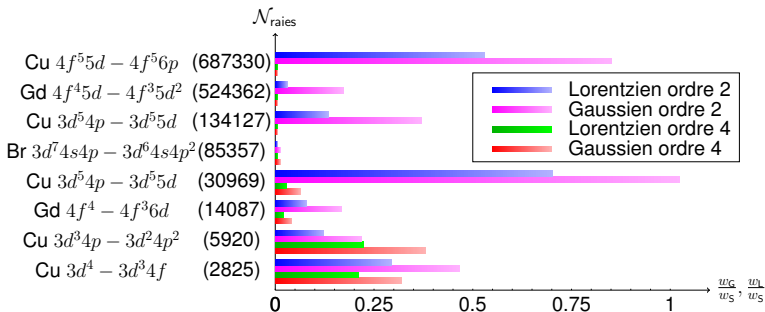
Applications et  
optimisation

Coalescence

Moments d'ordres  
supérieurs

Expériences

Conclusion



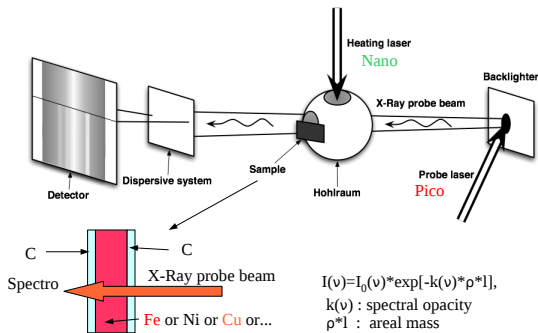


FIGURE: Dispositif expérimental pour la spectroscopie plasma.

# Interprétation d'expériences

Transmission de l'aluminium<sup>9</sup>

Le calcul  
d'opacités

Introduction  
Faisceaux détaillés  
Faisceaux  
statistiques

SCORCG

Construction  
Difficultés  
Exemples

Applications et  
optimisation

Coalescence  
Moments d'ordres  
supérieurs  
Expériences

Conclusion

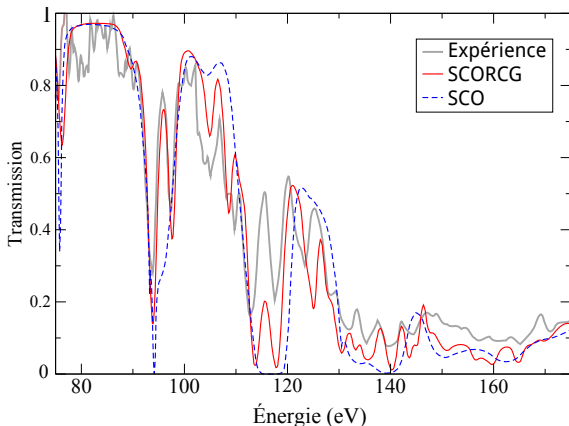


FIGURE: Transmission de l'aluminium dans les conditions de l'expérience d'Eidmann ,  $\rho = 0,01 \text{ g/cm}^3$  et  $\rho l = 30 \text{ } \mu\text{g/cm}^2$ .

9. K. EIDMANN et coll., *Europhys. Lett.* **44**[4], 459 (1998)

# Interprétation d'expériences

Transmission de l'aluminium<sup>9</sup>

Le calcul  
d'opacités

Introduction  
Faisceaux détaillés  
Faisceaux  
statistiques

SCORCG

Construction  
Difficultés  
Exemples

Applications et  
optimisation

Coalescence  
Moments d'ordres  
supérieurs  
Expériences

Conclusion

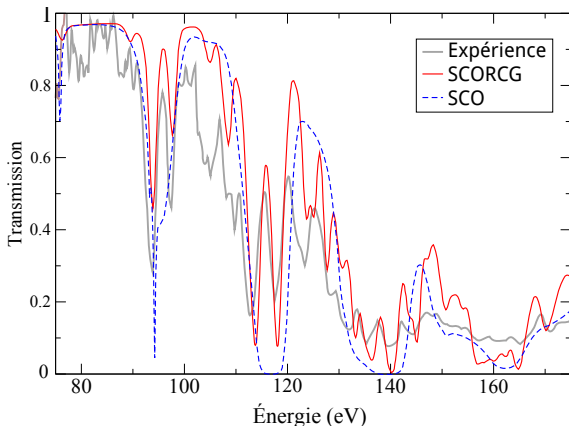


FIGURE: Transmission de l'aluminium dans les conditions de l'expérience d'Eidmann ,  $\rho = 0,01 \text{ g/cm}^3$  et  $\rho l = 30 \text{ } \mu\text{g/cm}^2$ .

9. K. EIDMANN et coll., *Europhys. Lett.* **44**[4], 459 (1998)

# Interprétation d'expériences

Bromure de sodium à environ 40 eV<sup>10</sup>



Le calcul  
d'opacités

Introduction  
Faisceaux détaillés  
Faisceaux  
statistiques

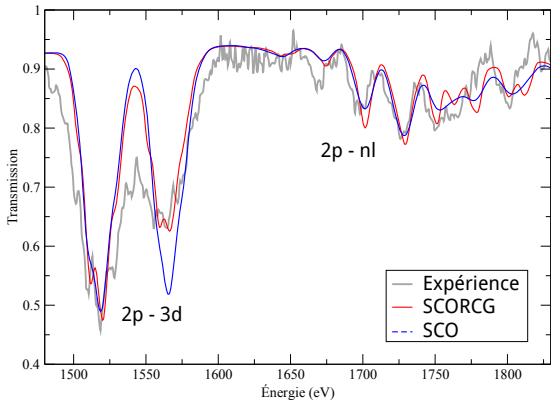
SCORCG

Construction  
Difficultés  
Exemples

Applications et  
optimisation

Coalescence  
Moments d'ordres  
supérieurs  
Expériences

Conclusion



**FIGURE:** Transmission à  $kT = 42$  eV et  $\rho = 0,01$  g/cm<sup>3</sup>. Comparaison de SCO et SCORCG avec l'expérience.

10. J. BAILEY et coll., *JQSRT* **81**, 31 (2003)

# Interprétation d'expériences

Bromure de sodium à environ 40 eV<sup>10</sup>

## Le calcul d'opacités

Introduction  
Faisceaux détaillés  
Faisceaux statistiques

## SCORCG

Construction  
Difficultés  
Exemples

## Applications et optimisation

Coalescence  
Moments d'ordres supérieurs  
Expériences

## Conclusion

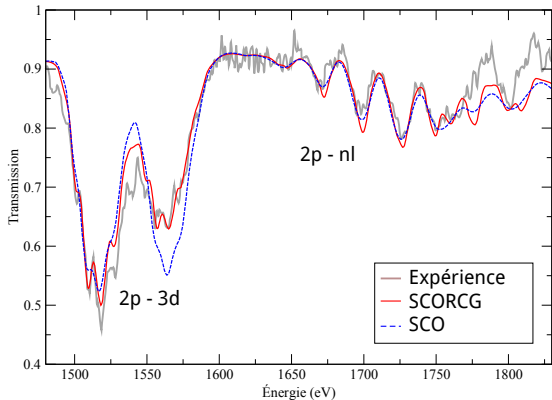


FIGURE: Transmission avec gradient. Comparaison de SCO et SCORCG avec l'expérience.

10. J. BAILEY et coll., *JQSRT* **81**, 31 (2003)



# Conclusion et perspectives

Apport de la thèse



Le calcul  
d'opacités

Introduction

Faisceaux détaillés

Faisceaux  
statistiques

SCORCG

Construction

Difficultés

Exemples

Applications et  
optimisation

Coalescence

Moments d'ordres  
supérieurs

Expériences

Conclusion

- Nous voulions élaborer une méthode pour :
  - ▶ introduire des faisceaux détaillés dans un calcul statistique ;
  - ▶ compléter un calcul détaillé par des faisceaux statistiques.
- L'approche hybride que nous avons développée s'applique :
  - ▶ aux plasmas de corps purs chauds et denses ;
  - ▶ à l'équilibre thermodynamique local.
- Mise en œuvre dans le code SCORCG, elle a permis :
  - ▶ de calculer en ligne l'opacité des plasmas chauds de la manière la plus autonome possible ;
  - ▶ un calcul d'opacité efficace pour les plasmas d'éléments légers et intermédiaires ;
  - ▶ de restituer des structures d'absorption incalculables par des méthodes statistiques ;
  - ▶ de tester certains aspects des approches statistiques ;
  - ▶ de proposer des interprétations d'expériences.



### Le calcul d'opacités

Introduction  
Faisceaux détaillés  
Faisceaux statistiques

### SCORCG

Construction  
Difficultés  
Exemples

### Applications et optimisation

Coalescence  
Moments d'ordres supérieurs  
Expériences

Conclusion

## ■ Axes d'amélioration pour l'approche hybride :

- ▶ condition nécessaire pour le critère de coalescence ;
- ▶ la prise en compte de l'interaction de configuration ;
- ▶ l'amélioration du calcul des faisceaux statistiques à basse température ;
- ▶ la mise en œuvre d'algorithmes permettant le calcul purement statistique des moments d'ordre 3 et 4 ;
- ▶ l' « extraction » des configurations simples à l'intérieur des supraconfigurations ;

## ■ Autres axes d'amélioration du calcul d'opacité :

- ▶ la sélection des (supra)configurations nécessaires au calcul ;
- ▶ le calcul des profils de raies ;
- ▶ le modèle de matière.



## Le calcul d'opacités

- Introduction
- Faisceaux détaillés
- Faisceaux statistiques

## SCORCG

- Construction
- Difficultés
- Exemples

## Applications et optimisation

- Coalescence
- Moments d'ordres supérieurs
- Expériences

Conclusion

## ■ Encadrement de la thèse :

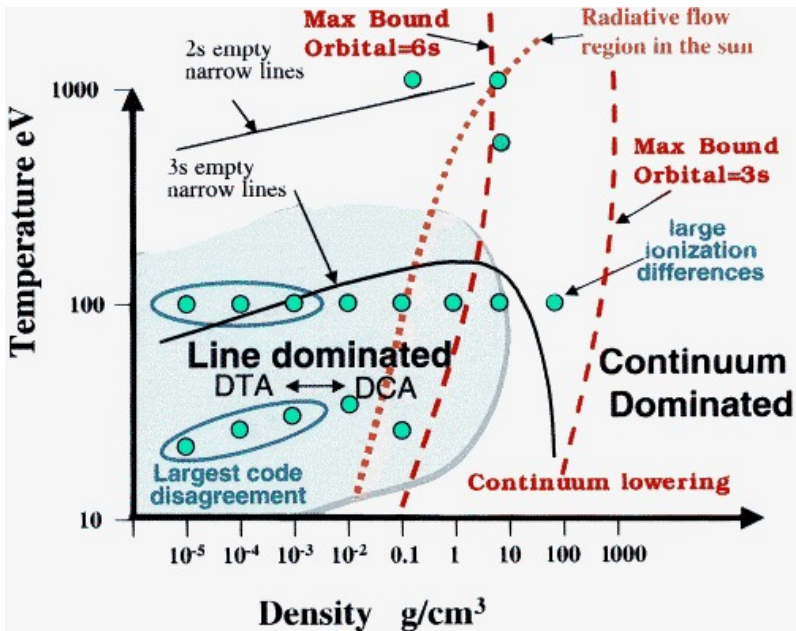
- ▶ Laboratoire de physique atomique des plasmas au CEA/DAM/DIF ;
- ▶ CEA/DSM/IRAMIS (directeur de thèse).

## ■ Collaborateurs :

- ▶ Les théoriciens d'IRAMIS ;
- ▶ les expérimentateurs d'IRAMIS et du LULI ;
- ▶ le service d'Astrophysique du CEA ;
- ▶ le groupe « plasmas chauds » du Laboratoire Aimé Cotton

## ■ Le Corps des Ingénieurs de l'Armement (financement).

# Domaines de l'opacité du fer



# Bromure de sodium à environ 40 eV<sup>11</sup>

Construction d'un gradient de température

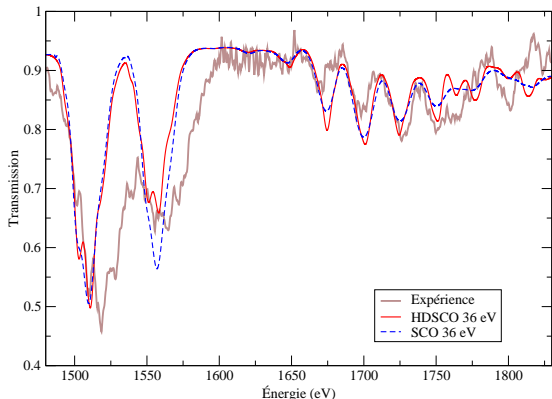


FIGURE: Transmission à  $kT = 36$  eV et  $\rho = 0,01$  g/cm<sup>3</sup>. Comparaison de SCO et SCORCG avec l'expérience.

11. J. BAILEY et coll., *JQSRT* **81**, 31 (2003)

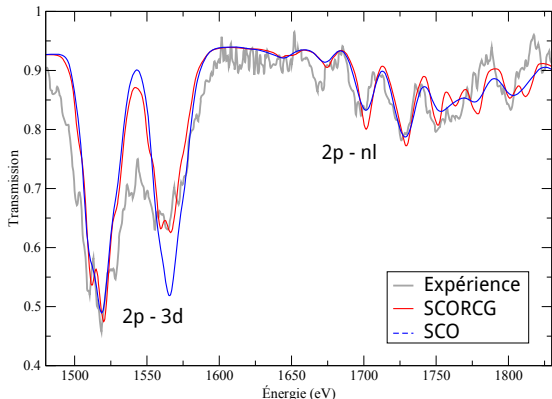


FIGURE: Transmission à  $kT = 42$  eV et  $\rho = 0,01$  g/cm<sup>3</sup>. Comparaison de SCO et SCORCG avec l'expérience.

11. J. BAILEY et coll., *JQSRT* **81**, 31 (2003)

# Bromure de sodium à environ 40 eV<sup>11</sup>

Construction d'un gradient de température

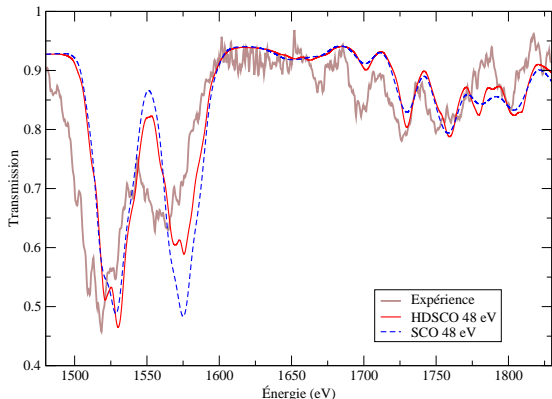


FIGURE: Transmission à  $kT = 48$  eV et  $\rho = 0,01$  g/cm<sup>3</sup>. Comparaison de SCO et SCORCG avec l'expérience.

11. J. BAILEY et coll., *JQSRT* **81**, 31 (2003)

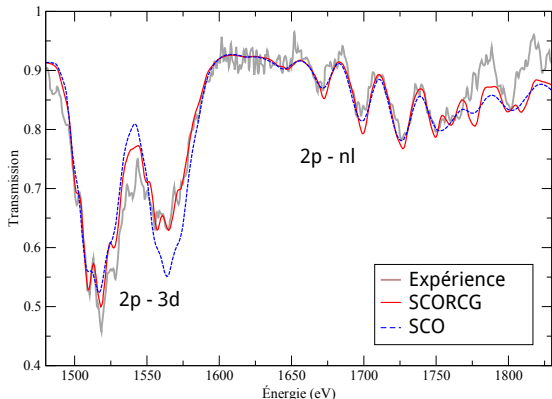


FIGURE: Transmission mélangeant les trois températures. Comparaison de SCO et SCORCG avec l'expérience.

11. J. BAILEY et coll., *JQSRT* **81**, 31 (2003)



