ÉCOLE POLYTECHNIQUE

Thèse présentée pour obtenir le grade de

Docteur de l'École Polytechnique

Spécialité : Physique

par Quentin PORCHEROT

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

Soutenue publiquement le 17 janvier 2012 devant le jury composé de :

M. Thomas BLENSKI	CEA/DSM/IRAMIS	Directeur de thèse
M. Franck GILLERON	CEA/DAM – Île-de-France	Encadrant CEA
M. Gilles MAYNARD	LPGP – Université Paris XI	Rapporteur
M. Jean-Christophe PAIN	CEA/DAM – Île-de-France	Encadrant CEA
M. Olivier PEYRUSSE	CELIA – Université Bordeaux I	Rapporteur
M. Jean-Marcel RAX	LPP – École Polytechnique	Président
M. Frank ROSMEJ	LULI – Université Paris VI	

REMERCIEMENTS

Une thèse de doctorat est une expérience irremplaçable. Les profanes la perçoivent uniquement comme une aventure intellectuelle, alors que c'est aussi une aventure humaine, aussi bien pour l'étudiant que pour son encadrement. J'ai eu la chance de la mener dans des conditions très favorables à tout point de vue, et je le dois à un trop grand nombre de personnes pour procéder à une énumération détaillée de chacun.

Je tiens tout d'abord à remercier l'encadrement remarquable dont j'ai bénéficié à la DIF. Merci Jean-Christophe d'avoir encadré la thèse de la création du sujet aux dernières corrections avec dévouement. Si la HDR avait une épreuve « pratique », je pense que tu l'as passée avec succès. Ta disponibilité, tes connaissances et tes encouragements ont été indispensables à la poursuite des travaux et la publication des résultats. Merci d'avoir consacré tant de temps à me former, m'assister dans les formalités, corriger mes publications. À Franck, je te dois beaucoup pour la mise en œuvre de l'approche objet de la thèse. Tu as osé mettre les mains dans le code RCG, que plus personne n'osait toucher sans grandes précautions, de ce fait la construction de SCORCG est autant de ton fait que du mien. J'ai aussi apprécié ta franchise, ton réalisme et ton pragmatisme, qui ont souvent tempéré l'enthousiasme de Jean-Christophe. Vous avez été tous les deux une très bonne paire d'encadrants.

Si, dans l'encadrement de ma thèse, Jean-Christophe a joué le rôle du père et Franck celui de l'oncle, alors Thomas, directeur de thèse, a joué le rôle du grand-père un peu distant (20 km à pied, ça use, ça use…) mais bienveillant et toujours de bon conseil. Tu as suivi pendant près de trois ans la thèse de loin, en apprenant peut-être plus de mes encadrants que de moi-même. Mais ton implication dans la correction du manuscrit a été remarquable, bien que tardive. Polonais d'origine, mais très bon francophone, ton avis sur la rédaction a été très pertinent, à mi-chemin entre celui d'un directeur de thèse et celui d'un rapporteur.

Mes remerciements vont ensuite à Gilles MAYNARD et Olivier PEYRUSSE, qui ont accepté de rapporter la thèse, tâche difficile car ils ont eu six semaines pour lire et critiquer plus de 200 pages. Les deux autres membres du jury, Jean-Marcel RAX et Frank ROSMEJ, ont été mes professeurs en master 2 *Sciences de la fusion*, il y a quatre ans. Je leur dois d'avoir été initié, avec l'aide de leurs collègues, à la complexité passionnante de la physique des plasmas de FCI.

Grâce aux coopérations dans lesquelles mes encadrants sont impliqués, SCORCG a pu se faire connaître et être mis à l'épreuve. D'une part, Jacques et Claire BAUCHE, professeurs maintenant retraités que j'ai abondamment cités dans ma bibliographie, sont les initiateurs de l'école française de l'étude des faisceaux de transition, et j'ai pu bénéficier de leurs enseignements à l'occasion de quelques journées de cours à la DIF. D'autre part, les expérimentateurs comme Frédéric THAIS ou Guillaume LOISEL, et les astrophysiciens comme Sylvaine TURCK-CHIÈZE ou Dominique GILLES ont fait appel à nous pour des calculs d'opacité de plasmas chauds, et certains des spectres produits à l'occasion figurent dans le dernier chapitre de la thèse.

J'ai eu le privilège de mener mes recherches dans des conditions très convenables, en dépit des contraintes spécifiques au bâtiment où était mon bureau. Relativement isolé de mes encadrants et de mon laboratoire de rattachement, je ne me suis cependant jamais senti seul, et j'ai apprécié la compagnie des stagiaires, doctorants et postdoctorants que j'avais – et ai encore – l'occasion de retrouver de temps à autre.

Tout au long de ma thèse, j'ai joui d'une très grande autonomie de la part de mon employeur officiel qu'est le Corps des Ingénieurs de l'Armement. Je remercie Pierre DALLOT pour s'être intéressé à mes travaux, et dont j'aurais aimé faire la connaissance dès le début de la thèse. J'ai été muté à Arcueil début septembre, mais ma nouvelle hiérarchie m'a laissé la liberté de terminer « en mission » la rédaction du manuscrit pendant les deux premiers mois de mon poste. Mission accomplie, au vu de ce que m'a permis de produire ce précieux temps libéré.

J'en viens maintenant à ceux dont le soutien affectif a été irremplaçable tout au long de la thèse. Je m'adresse en premier lieu à ma famille, dont l'éloignement relatif ne m'a guère empêché de les voir régulièrement, pour les bons moments comme pour les coups durs. Merci en particulier à mes parents et mes grands-parents d'avoir fait le déplacement pour assister à ma soutenance, et pour le petit coup de main dans l'organisation de celle-ci.

Parmi les amis, je commence par mentionner Adrien qui est venu de Toulouse pour assister à la soutenance alors qu'il n'est pas du tout scientifique. Un petit clin d'œil à ceux qui, se sont lancés dans une thèse en même temps que moi, comme Vincent et Lili, loin des yeux mais près du cœur, ou un peu plus tard et plus près comme Laurent, Toan ou Mélanie. Je devrais remercier tous ceux qui sont venus à ma soutenance, car ils ont rempli la salle au-delà ce que j'espérais, et tous ceux avec qui j'ai partagé de très bons moments pendant les trois années - et un peu plus - qu'a duré la thèse. Nul besoin de les nommer, ils se reconnaîtront.

TABLE DES MATIÈRES

I Calcul d'opacité dans les plasmas chauds **5**

1 Physique des plasmas et opacité **7**
1.1 Physique des plasmas chauds 7
1.1.1 Généralités sur les plasmas 7
1.1.2 Grandeurs physiques et extension du domaine d'étude 9
1.1.3 Couplage entre ions 11
1.2 Rayonnement, opacité et É. T. L. 12
1.2.1 Processus atomiques dans les plasmas chauds 12
1.2.2 Opacité et transport de rayonnement 14
1.2.3 Équilibre thermodynamique local 16
1.3 L'opacité des plasmas 19
1.3.1 Contribution des processus à l'opacité 19
1.3.2 Émissivité, transmission et opacités moyennes 22
1.3.3 Applications 25

2 Structure atomique **27**
2.1 Structure des états liés de l'atome 27
2.1.1 Notions de mécanique quantique 27
2.1.2 Résolution exacte dans le cas hydrogénoïde 30
2.1.3 Approximation des électrons indépendants et du champ central ; conséquences du principe de Pauli 33
2.2 Configurations électroniques 35
2.2.1 Nature et contenu d'une configuration électronique 36
2.2.2 Les états de moment cinétique 38
2.2.3 Multiplicité des termes et niveaux de même J 40
2.3 Fonctions d'onde, énergie et structure atomique 44
2.3.1 Énergie et intégrales de structure atomique 44
2.3.2 Calcul autocohérent 46
2.3.3 Périodicité et comportement en fonction de Z 47

3 Transitions et opacité **49**
3.1 Faisceaux de transition 49
3.1.1 Généralités sur les transitions dipolaires électriques 49
3.1.2 Raies dipolaires électriques 51
3.1.3 Concept et typologie des faisceaux de transition 53
3.2 Élargissements des raies 55
3.2.1 Physique des élargissements 56
3.2.2 Élargissements et profil de Voigt 57
3.2.3 Approximation du profil de Voigt par la distribution de Pearson VII 58
3.3 Calcul détaillé d'opacités 59
3.3.1 Opacité lié-lié détaillée ; probabilités à l'É. T. L. 59
3.3.2 Un modèle direct pour le calcul détaillé d'opacités 62
3.3.3 Premières interprétations de spectres expérimentaux 63

II Vers l'approche hybride **67**

4 Approches statistiques **69**
4.1 Atome moyen et modèle de Thomas-Fermi 69
4.1.1 Modèle de Thomas-Fermi 69
4.1.2 L'atome moyen en couches 71
4.1.3 Statistique sur la population des sous-couches 72
4.2 Calcul statistique des faisceaux de transition 73
4.2.1 Traitement statistique d'une configuration 73
4.2.2 UTA (Unresolved transition array) 75
4.2.3 Séparation spin-orbite 78
4.3 Supraconfigurations et suprafaisceaux de transition 79
4.3.1 Limites de l'approche en configurations 79
4.3.2 Supraconfigurations, suprafaisceaux de transition et opacité . . . 80
4.3.3 Récurrence sur les fonctions de partition 82

5 De SCO à SCORCG **85**
5.1 Le code SCO 85
5.1.1 Physique mise en œuvre 85
5.1.2 Déroulement d'un calcul 87
5.1.3 Statistique des populations 89
5.2 SCO + RCG $\rightarrow$ SCORCG 90
5.2.1 Choix de SCO et RCG 90
5.2.2 Adaptation de RCG 91
5.2.3 Interface SCO : RCG* 92
5.3 Possibilités du code SCORCG 93
5.3.1 Physique ajustable 93
5.3.2 Gestion de la structure électronique 98
5.3.3 Spectres calculés par SCORCG 101

6 Validation, apports et limites de SCORCG **103**
6.1 Opacité hybride 103
6.1.1 Expression de l'opacité hybride 103
6.1.2 Détaillé vs. statistique 105
6.1.3 Utilisation des jeux 108
6.2 Apports et comparaisons 111
6.2.1 Par rapport aux approches détaillées 111
6.2.2 Par rapport aux approches statistiques 115
6.3 Limites de SCORCG 117
6.3.1 Calculs détaillés complexes 117
6.3.2 Thermodynamique et structure atomique 118
6.3.3 Revue des approximations 120

III Optimisation et exploitation **123**

7 Réduction de la complexité **125**
7.1 Complexité des calculs de transitions lié-lié . . . 125
7.1.1 Statistique des niveaux d'une configuration . . . 125
7.1.2 Calcul d'un faisceau de transition détaillé . . . 128
7.1.3 Les configurations excitées . . . 131
7.2 Gestion des raies spectrales . . . 134
7.2.1 Réduction numérique du nombre de raies traitées dans un faisceau 134
7.2.2 Réduction à l'aide d'un ou deux élargissements moyens . . . 135
7.2.3 Les limites de MUTA . . . 139
7.3 Coalescence des faisceaux . . . 142
7.3.1 Indicateur de forme . . . 142
7.3.2 Critère de coalescence complète . . . 145
7.3.3 Porosité et force de raie : intérêt et limites . . . 148

8 Approches statistiques améliorées **151**
8.1 Au-delà de l'ordre 2 . . . 151
8.1.1 Limites de la modélisation statistique à l'ordre 2 . . . 151
8.1.2 Moments d'ordre 3 et 4 sur un calcul d'opacité . . . 153
8.1.3 Coalescence à l'ordre 4 . . . 157
8.2 Moments et température . . . 162
8.2.1 Exemples de faisceaux modifiés par la température . . . 162
8.2.2 Effet de la température sur les probabilités des niveaux . . . 165
8.3 Traitement à l'ordre 2 des effets de la température . . . 167
8.3.1 Correction à l'ordre 2 des fonctions de partition et des probabilités 167
8.3.2 Réécriture de l'opacité corrigée . . . 169
8.3.3 Méthode des distributions . . . 172

9 Interprétation d'expériences **175**
9.1 Spectroscopie plasma . . . 175
9.1.1 Convolution de la transmission . . . 175
9.1.2 Effet de la non-uniformité spatiale . . . 177
9.1.3 Protocoles expérimentaux . . . 178
9.2 Spectres à résolution moyenne . . . 181
9.2.1 Campagne 2008 au LULI . . . 181
9.2.2 Bromure de sodium sur machine Z . . . 184
9.2.3 Niobium de Perry . . . 188
9.3 Spectres présentant des effets de structure fine . . . 190
9.3.1 Aluminium sur HELEN . . . 190
9.3.2 Aluminium sur le laser ASTERIX IV . . . 192
9.3.3 Fer sur machine Z . . . 192

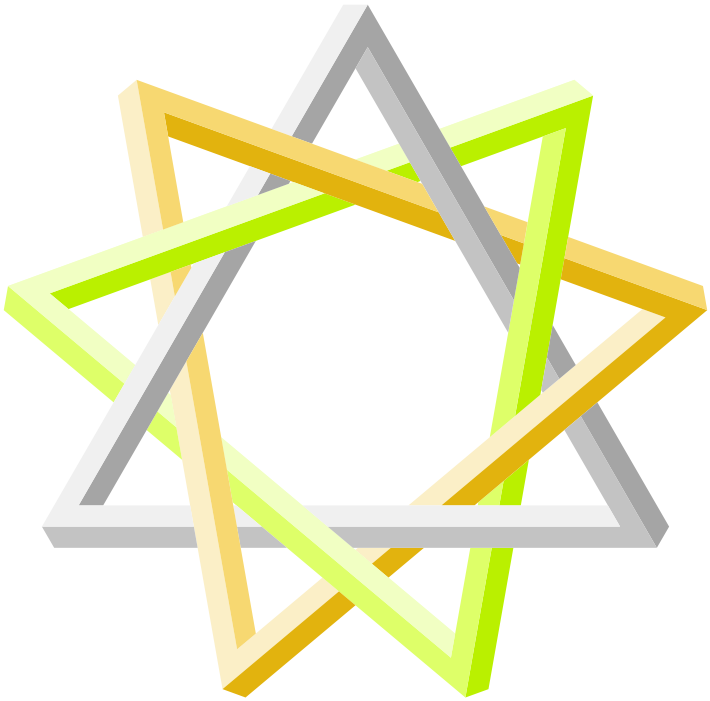
Annexes **205**

A Champ de rayonnement **207**

B Traitement des élargissements **211**
B.1 Brève physique des élargissements 211
B.2 Approximation du profil de Voigt 213
B.2.1 HWHM d'un profil de Voigt 213
B.2.2 Utilisation de la distribution de Pearson VII 214

C Statistique à l'ordre 4 **219**
C.1 Moments statistiques 219
C.1.1 Généralités 219
C.1.2 Moments d'ordre supérieur à 2 ; asymétrie et kurtosis 221
C.2 Distributions statistiques paramétrées à l'ordre 4 222
C.2.1 Gram-Charlier à l'ordre 3 et 4 222
C.2.2 Gaussienne genéralisée 226
C.2.3 Gaussienne normale inverse 227
C.3 Distributions de Pearson 230
C.3.1 La distribution de Pearson IV 230
C.3.2 Autres distributions de Pearson utiles 231
C.3.3 Domaines d'usage des distributions de Pearson 233

D Sortie du code SCORCG **235**



Étoile dont les neuf branches
Pointent vers chaque chapitre,
Trois par trois regroupées
En triangles imbriquées,

Nœud gordien qu'un laser tranche
Net, non sans bavure arbitre
Une question trop ardue
Pour être résolue

Avec force complétude,
Tant la variété des formes
Ne peut souffrir d'uniforme,
Et simple approche d'étude,

À ceux qui t'auront lue
Montre la voie ; résolue,
Rayonne de ton éclat.
L'opacité des plasmas,

Simplifiée par tes idées,
À peine échevelée,
Tellement moins évidée,
Bien mieux sera calculée.

INTRODUCTION

Ce manuscrit de thèse présente les résultats de trois années de recherches effectuées au centre CEA/DIF de Bruyères-le-Châtel. Ce travail a consisté à concevoir, développer et exploiter une approche *hybride* du calcul des propriétés radiatives des plasmas chauds, associant un code d'opacité statistique et un outil de calcul de structure atomique fine. Cette approche soulève des problèmes liés à la thermodynamique des plasmas, à la physique atomique et à la modélisation des transitions atomiques associées aux processus radiatifs dans les plasmas. Caractérisées par l'opacité – section efficace d'absorption par unité de masse – les propriétés radiatives des plasmas chauds déterminent la quantité d'énergie transportée par rayonnement dans les plasmas denses rencontrés en astrophysique et en fusion par confinement inertiel (FCI). La mise en œuvre de cette approche s'est faite à travers un nouveau code hybride, appelé *SCORCG*, qui associe le code de calcul d'opacité SCO et le code de structure atomique RCG de COWAN.

Contexte

Le calcul des propriétés radiatives de la matière à l'état de plasma a beaucoup intéressé les astrophysiciens à partir des années 1930, car les intérieurs d'étoiles sont des plasmas chauds et denses. Pour arriver à modéliser la structure et l'évolution stellaires, l'équation d'état et la quantité d'énergie transportée par rayonnement sont nécessaires. De manière plus générale, opacité et équation d'état sont importantes dans la modélisation de l'hydrodynamique radiative des plasmas chauds de laboratoire pour les expériences de FCI[1].

Chacun des deux problèmes, équation d'état et transport de rayonnement, fait l'objet d'une recherche active depuis cette époque, car les enjeux associés croissent avec les moyens à disposition pour étudier la matière dans des conditions difficiles à réaliser en laboratoire. D'une part, les applications des plasmas chauds se sont multipliées. La FCI, la réalisation de sources X et l'interprétation des expériences de spectroscopie dans les domaines X et ultraviolet permettent le développement de l'*astrophysique de laboratoire*, qui a pour objet la mise à l'échelle, la production et l'étude de plasmas chauds dans les conditions accessibles aux expérimentateurs. D'autre part, l'essor très rapide de l'informatique et les capacités croissantes de calcul permettent de prendre en compte une physique de plus en plus complexe.

Cette thèse se concentre sur le volet théorie de la modélisation de l'opacité des plasmas chauds de corps purs à l'équilibre thermodynamique local. Le rayonnement interagit avec la matière à travers des processus impliquant ions, électrons libres et photons. Complexe, la modélisation de ces processus fait l'objet d'un certain nombre d'approximations. Parmi celles-ci, les différents types de processus radiatifs, selon qu'ils concernent des électrons libres ou liés, sont traités séparément. Pour simplifier les calculs, les nombreux états dans lesquels peuvent se trouver les différents ions du plasma sont regroupés dans des configurations, voire des supraconfigurations, en négligeant une partie des interactions entre elles. À la fin du XXè siècle, l'amélioration des capacités de calcul des ordinateurs a permis de développer des modèles de calcul d'opacité de plus en plus performants, mais suivant deux filières.

[1] Fusion par confinement inertiel.

Qualifiée de *détaillée*, la première filière est fondée sur le calcul d'un maximum d'états des ions présents dans le plasma et de toutes les transitions entre ceux-ci. Elle permet des calculs d'opacité résolus en raies, mais n'est efficace que pour les éléments légers à la structure atomique relativement simple. Pour des éléments plus lourds, y compris les métaux de transition légers comme le fer, un calcul détaillé et exhaustif est extrêmement coûteux en ressources informatiques et rarement nécessaire. Les raies en très grand nombre forment des structures d'absorption non-résolues, où elles ne sont pas toujours séparables les unes des autres. Parmi les codes de calcul détaillé d'opacité on peut citer OPAL, HULLAC, FAC, OPAS, ATOMIC, PrismSPECT... Dans cette thèse, nous avons retenu le code de structure atomique RCG de COWAN pour des raisons de physique atomique similaire à celle de SCO, d'efficacité et de flexibilité.

La seconde filière, *statistique*, repose sur le constat que les structures d'absorption peuvent être approchées par des calculs exploitant les propriétés statistiques des transitions. À différents degrés de raffinement, les méthodes statistiques permettent de traiter un très grand nombre de transitions en un temps très réduit par rapport à ce qu'une approche détaillée permet. Cependant, le traitement statistique des transitions radiatives, s'il a permis d'accéder aux propriétés radiatives des plasmas d'élements moins légers comme le fer ou le brome, est incapable de décrire des structures d'absorption trop résolues. Parmi les nombreux outils de calcul statistique d'opacité, celui que nous avons retenu est SCO, développé au CEA et confronté avec succès à de nombreux résultats expérimentaux.

Dans cette thèse, nous proposons de développer et exploiter un modèle *hybride* de calcul d'opacité *ab initio* qui associe les deux types d'approches évoquées plus haut. L'originalité de ce modèle est le calcul *in situ* de l'opacité en prenant en compte l'effet de l'environnement du plasma sur les fonctions d'onde, y compris dans les calculs détaillés. Il a cependant fallu résoudre des problèmes physiques et numériques dans la conception et l'exploitation de ce code, problèmes auxquels nous nous sommes efforcés d'apporter une réponse, voire une mise en œuvre dans la thèse. Le code de calcul obtenu, SCORCG, a déjà servi à interpréter des expériences de spectroscopie, dont certaines sont présentées à la fin de ce manuscrit, et à valider certaines approximations faites dans les calculs d'opacité statistiques ou détaillés.

Guide de lecture

J'ai choisi de rédiger la thèse en trois parties de trois chapitres chacune. Chaque partie correspond, par coïncidence plus que par choix, à environ une année de travail. La première partie correspond à l'élaboration du premier modèle de calcul détaillé d'opacité lié-lié utilisant les codes de COWAN de manière intensive, dont les premiers résultats sont arrivés au printemps 2009 et ont commencé à être présentés l'automne suivant à l'occasion des *Doctoriales*. La deuxième partie a pour objet le couplage de SCO avec RCG qui a été mis en place au printemps 2010 et dont les résultats ont été beaucoup plus diffusés, non seulement à l'occasion de mes présentations, mais aussi et peut-être plus dans les publications des équipes de théoriciens et d'expérimentateurs avec lesquels nous collaborons. Dans la troisième partie, différentes pistes d'amélioration du calcul d'opacité hybride sont envisagées, puis des expériences de spectroscopie sont interprétées, à l'aide de notre outil capable d'effectuer des calculs intensifs exploitant au maximum les capacités de SCO et RCG.

Bien que la thèse soit rédigée pour une lecture dans l'ordre des chapitres, ce qui va suivre indique en quoi consiste chacun d'eux, et ce qu'on peut s'attendre à y trouver

pour un accès plus rapide aux informations. Les quatre premiers chapitres consistent en une introduction à la théorie et aux concepts utilisés dans l'approche hybride. Les chapitres 5 et 6 forment véritablement le cœur de la thèse, car c'est là qu'est présentée l'approche hybride du calcul d'opacité, ses possibilités, ses apports et ses limites. Les trois derniers chapitres présentent différents aspects d'utilisation et d'amélioration du code SCORCG.

Introduction à la thèse, le premier chapitre rappelle les fondements de la physique du calcul d'opacité des plasmas chauds. Le deuxième chapitre présente différentes approches du calcul de la structure atomique et introduit la notion de configuration. Une méthode originale de calcul du nombre de niveaux dans une configuration y est notamment présentée. Le troisième chapitre introduit la notion de transition atomique, aborde le problème du calcul des profils de transitions et questionne le profil de Voigt. Un premier modèle combinant approches détaillée et statistique du calcul d'opacité est proposé à la fin de ce chapitre. Les transitions lié-lié y sont entièrement calculées par le code RCG. Le quatrième chapitre introduit les méthodes statistiques de calcul d'opacité, à l'atome moyen, au niveau des configurations et des supraconfigurations.

La théorie introduite, les codes de calcul SCO et SCORCG sont présentés au cinquième chapitre, dans lequel l'aspect numérique du calcul hybride d'opacité est développé. Les problèmes physiques et numériques posés par l'approche hybride font l'objet du sixième chapitre, qui conclut par une revue des approximations utilisées dans le modèle développé.

Opérationnel, le code SCORCG peut être amélioré selon deux axes principaux. Le septième chapitre porte sur l'évaluation de la complexité du calcul d'opacité, au niveau d'un faisceau de transition et de l'excitation des configurations par la température, la gestion du très grand nombre de transitions détaillées et leur résolution lorsque les faisceaux de transition sont élargis par les processus physiques. Le huitième chapitre a pour objet l'amélioration des approches statistiques utilisées dans les calculs, en affinant la modélisation statistique des faisceaux. Une amélioration peut être obtenue par prise en compte de l'effet de la faible température sur la description statistique des faisceaux de transition ou par les moments d'ordre supérieur.

Le dernier chapitre passe en revue une grande partie des problèmes abordés dans la thèse dans le contexte d'une confrontation de notre modèle avec des résultats expérimentaux.

I

CALCUL D'OPACITÉ DANS LES PLASMAS CHAUDS



OPACITÉ DES PLASMAS CHAUDS ET DENSES À L'É. T. L.

Dans les plasmas chauds et denses, de nombreux processus physiques qui impliquent les ions, les électrons et le rayonnement, ont lieu. Ces processus sont à l'origine de la composition et de l'opacité spectrale du plasma. Ce chapitre est consacré aux processus physiques qui jouent un rôle dans notre approche du calcul d'opacité dans les plasmas chauds, ainsi que dans l'interprétation d'expériences.

1.1 Physique des plasmas chauds

Après avoir introduit les concepts généraux sur l'état du plasma, nous abordons le problème de l'équation d'état, pour finir sur les processus en jeu dans un plasma chaud. Pour alléger le texte, certaines notions ne sont pas définies immédiatement lors de leur apparition.

1.1.1 Généralités sur les plasmas

Le *plasma* est un état de la matière, très rare sur Terre mais de loin le plus abondant dans l'Univers. À l'état de plasma, la matière est composée non pas d'atomes et de molécules neutres, mais de particules chargées :

- des électrons libres, de charge $-e$, où e est la charge élémentaire (unités CGS), et auxquels l'indice roman e fait référence dans les quantités qui les concernent ;
- des ions[1], de charge positive $+Qe$, où Q est la *charge* de l'ion, et auxquels l'indice roman i fait référence ;
- des photons, chacun caractérisés par leur énergie $h\nu$, constituant tous ensemble le *rayonnement* auquel l'indice roman r fait quelquefois référence.

Les ions contiennent eux-mêmes un noyau atomique de charge $+Z$ entouré de $N = Z - Q$ électrons liés. Un plasma contient plusieurs états de charge Q, dont l'abondance

[1] Nous faisons abstraction du fait que plusieurs ions peuvent former des quasi-molécules [1].

peut être calculée comme nous le verrons par la suite. Caractéristique de l'état plasma, l'ionisation des atomes neutres peut être engendrée par la température et la pression.

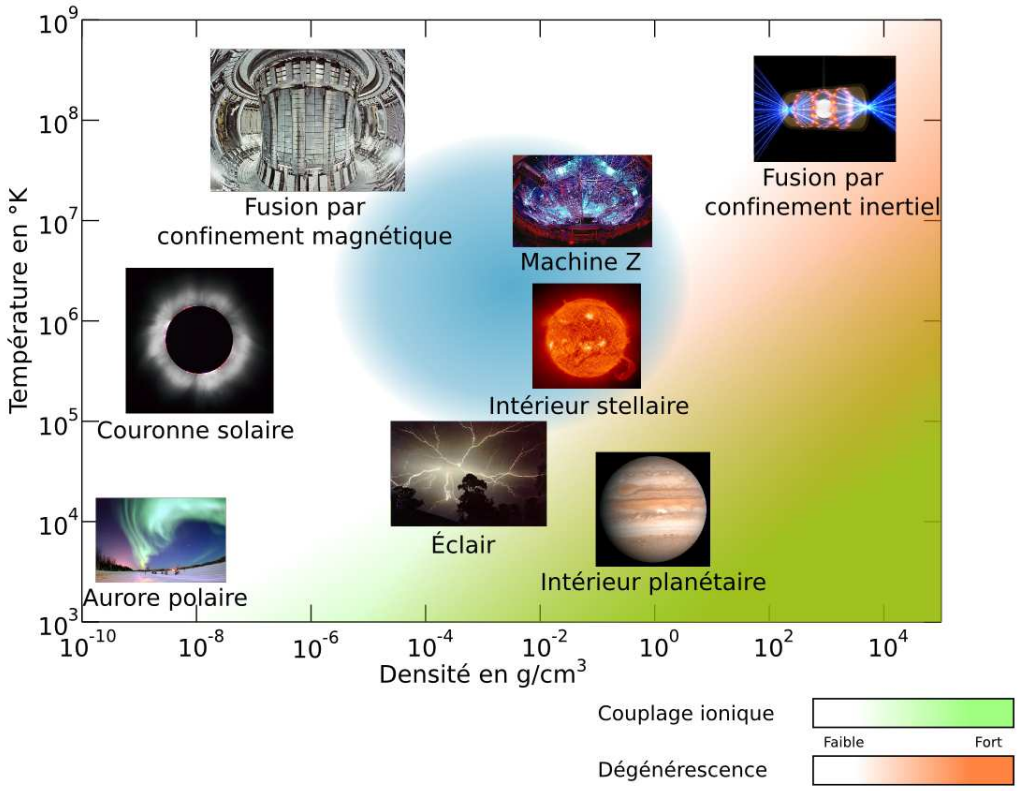


FIGURE 1.1 – Les différents types de plasmas en fonction de la température et de la densité. La zone rouge correspond à la dégénérescence du gaz d'électrons, la zone verte au couplage ionique. La zone bleue correspond approximativement au domaine d'étude de la thèse.

L'état plasma correspond à des températures et des densités très variées, de conditions rencontrées sur Terre à des états qu'on ne rencontre plus dans l'Univers actuel depuis le Big Bang [2], bien au-delà des limites latérales et supérieure de Fig. 1.1.

La densité d'un plasma peut prendre des valeurs très variées. Les plasmas interstellaires, avec quelques atomes ionisés[2] par centimètre-cube, sont 10^{19} fois moins denses que l'air à la pression du niveau de la mer, ou 10^{22} fois moins denses que l'eau liquide. Les plasmas de tokamaks sont eux aussi raréfiés, avec des densités de l'ordre de 10^{14} cm^{-3}. Les intérieurs stellaires, entre la photosphère visible et le cœur siège de réactions thermonucléaires, correspondent au domaine sur lequel nous allons travailler. La température y varie entre moins de 10^5 K et un peu plus de 10^7 K, la densité entre 10^{-5} et 10 g/cm^3, et le transport de rayonnement y est en concurrence avec la convection pour le transfert d'énergie du cœur vers la surface [3, 4]. On retrouve de telles densités lors d'expériences durant lesquelles un échantillon est soumis à une brusque décharge d'énergie sous la forme de rayonnement bref et très intense.

Mais la densité des plasmas peut être très supérieure à la celle du solide. Au centre du Soleil, elle dépasse 100 g/cm^3 ou 10^{25} ions par centimètre-cube. Dans les étoiles

[2]Même s'il est généralement convenu que l'atome se réfère à une entité électriquement neutre et l'ion une entité chargée, le mot *atome* sera utilisé quelque soit la charge quand il sera question de structure atomique.

en fin de vie et les naines blanches, la densité du plasma approche les 10^{30} ions par centimètre-cube et la matière, qualifiée de *dégénérée*, a un comportement particulier.

1.1.2 Grandeurs physiques et extension du domaine d'étude

L'*équilibre thermodynamique* caractérise l'état limite qu'atteint un plasma laissé au repos suffisamment longtemps pour que plusieurs équilibres se réalisent :

- équilibre thermique : quand la distribution d'énergie est uniforme dans le plasma, la *température* du plasma peut être définie ;
- équilibre mécanique : quand toutes les parties du plasma sont immobiles les unes par rapport aux autres, la *pression* du plasma peut être définie ;
- équilibre chimique : quand les différentes espèces présentes – ici des ions – sont en abondance uniforme dans le plasma, le *potentiel chimique* du plasma peut être défini ;
- équilibre radiatif : associé à l'équilibre thermique, il signifie que le rayonnement émis par le plasma est compensé par le rayonnement reçu du milieu extérieur.

Les grandeurs ci-dessus, température, pression et potentiel chimique, sont qualifiées d'*intensives*. La *température* est proportionnelle à la moyenne de l'énergie cinétique des particules dans le plasma. Elle est notée T et s'exprime en degrés Kelvin, mais dans la thèse, comme dans presque tous les ouvrages de physique des plasmas, l'*électron-volt*, unité d'énergie, est bien plus utilisée. La grandeur considérée, l'*énergie thermique* $k_\mathrm{B}T$, est le produit de la température par la constante de Boltzmann

$$k_\mathrm{B} = 1,38110^{-16}\ \mathrm{erg/K} = \frac{1}{11\,605}\ \mathrm{eV/K}, \tag{1.1}$$

d'où l'équivalence connue :

$$1\ \mathrm{eV} \leftrightarrow 11\,605\ \mathrm{K}. \tag{1.2}$$

Très souvent, plusieurs températures interviennent en physique des plasmas, en particulier dès que l'évolution en temps est très rapide. Ainsi, il est fréquent de distinguer la température ionique T_i de la température électronique T_e et de la température radiative T_r.

L'autre quantité de base est la *densité massique* ρ, exprimée en grammes par centimètre-cube. La densité massique est égale à la masse totale de la matière présente dans un volume donné du plasma. Cependant, une autre densité, celle du nombre d'entités d'une espèce X donnée dans un volume n_X, est fréquemment utilisée dans la littérature et dans cette thèse. Lorsqu'il s'agit de la densité électronique, en général les électrons libres, elle est notée n_e. Lorsqu'il s'agit de la densité ionique, elle est notée n_i. Ces deux dernières quantités s'expriment en nombre d'entités par centimètre-cube, ou cm^{-3}. Bien que contenant des particules chargées, le plasma est électriquement neutre dans des volumes contenant plusieurs ions, et même, comme nous verrons plus loin, dans l'espace contenant un seul ion. Le nombre d'électrons libres est donc rigoureusement égal au nombre de charges positives portées par l'ensemble des ions. L'ionisation moyenne, notée Z^* ou $\bar{Q}$, peut être vue :

- soit comme le nombre moyen d'électrons libres par ion ;

- soit comme le nombre moyen de charges porté par chaque ion, dit aussi charge moyenne.

Ces trois densités sont reliées entre elles par la masse atomique $M_A = \frac{A}{\mathcal{N}_\mathrm{A}}$, quasiment égale à la masse nucléaire et donc à la masse des ions, ainsi que par l'ionisation moyenne Z^*. La conversion de l'une à l'autre est aisée lorsque le plasma est un corps pur, ce qui est supposé tout au long de la thèse :

$$n_\mathrm{e} = Z^* n_\mathrm{i} \tag{1.3a}$$

$$n_\mathrm{i} = \frac{\mathcal{N}_\mathrm{A}}{A}\,\rho \tag{1.3b}$$

$$n_\mathrm{e} = \frac{Z^* \mathcal{N}_\mathrm{A}}{A}\,\rho. \tag{1.3c}$$

L'ionisation d'un ion est un nombre entier, et plusieurs états de charge coexistent au sein d'un même plasma. Chaque état de charge contient lui-même une multitude d'états d'excitation, comme nous le verrons Chap. 2 et 3.

Une troisième quantité, la pression P, est reliée à la température et à la densité par l'équation d'état. D'expression complexe dès que le plasma n'est pas considéré comme idéal (respecte l'équation (1.4)), son calcul requiert une modélisation de l'interaction entre les ions. Les effets de la pression ne sont pas l'objet de la thèse. Enfin, une dernière grandeur dont il sera fait un usage très limité dans la thèse est le *potentiel chimique* μ. Cette grandeur intensive intervient dans le formalisme grand-canonique, qui sera délaissé dans la thèse au profit du formalisme canonique. Nous verrons Sec. 1.2.3 que des formules mettent en relation les états de charge permettant de travailler en formalisme canonique.

Notre modèle est principalement destiné au calcul des propriétés radiatives des plasmas dont la température est de l'ordre de quelques électrons-volts (désormais écrits eV), quelques dizaines de milliers de degrés Kelvin, à plusieurs centaines d'eV, c.-à-d. plusieurs millions de degrés Kelvin. La densité des plasmas que nous étudions, quant à elle, varie d'environ 10^{-5} g/cm^3 à la densité du solide, de l'ordre de 1 à 10 g/cm^3. Imprécises, ces limites nous sont imposées par différentes approximations précisées plus bas.

À la fois évidente et très complexe, la limite inférieure en température est liée à la présence d'espèces autres que des ions atomiques. À des températures de l'ordre de quelques dizaines de milliers de Kelvin, les atomes neutres sont abondants et, pour certains éléments, tendent à former des molécules, à la structure électronique bien plus complexe que des atomes ou des ions atomiques [5]. Cependant, et à notre avantage, l'effet de la température sur la forme du spectre en opacité reste très limité pour des températures de l'ordre de quelques dizaines d'électron-volts. Nous examinons le problème de la basse température – ce qui signifie quelques eV dans notre modèle – Chap. 8. Aucune expérience de spectroscopie n'a à ce jour permis de mettre en évidence l'effet de la basse température sur l'opacité, en-dehors de l'abondance des états de charge.

À haute température – plus d'un keV ou 10^7 K – l'approche que nous développons perd de son intérêt. D'une part l'essentiel de l'absorption du plasma est due aux électrons libres, car les ions ont été dépouillés d'une grande partie de leurs électrons. De plus, les processus physiques tendent à élargir les raies à haute température, ce qui limite l'intérêt de calculs détaillés qui font l'intérêt du modèle sur lequel cette thèse

porte. De ce fait, envisager des calculs à plus de quelques centaines d'eV a un intérêt très limité pour des éléments de Z faible à modéré.

La limite inférieure en densité provient du fait que, à basse densité (10^{-5} g/cm^3 et moins), les processus de thermalisation, ou égalisation des températures, sont tellement ralentis que l'équilibre thermodynamique, même local, est difficile à atteindre.

La limite supérieure en densité se place aux environs de la densité du solide, bien qu'une température élevée (de l'ordre du keV) élargisse le domaine en densité dans lequel le plasma a un comportement idéal. La forte densité a pour conséquence un accroissement important des collisions entre ions et avec les électrons libres, et toutes les micro-fluctuations du potentiel ont pour conséquences d'élargir des raies spectrales, d'où des faisceaux non-résolus. De plus, la prise en compte de la pression pose des problèmes dans le calcul de la structure atomique.

1.1.3 Couplage entre ions

Aux densités où on travaille, les plasmas chauds peuvent être considérés comme *idéaux* en première approximation. Cela signifie que leur comportement est analogue à celui d'un gaz parfait, car les ions interagissent très peu entre eux. Alors l'équation d'état, qui relie la pression P à la densité ionique n_i et à la température $k_\mathrm{B}T$, s'écrit :

$$P = n_\mathrm{i} k_\mathrm{B} T, \tag{1.4}$$

L'interaction entre les ions se traduit par un potentiel électrostatique dont la modélisation est très complexe.

Dans un plasma, le volume moyen d'un ion est l'inverse de la densité ionique n_i. La *sphère ionique* est la sphère ayant ce volume moyen, et le *rayon ionique moyen*[3] R_i est :

$$R_\mathrm{i} = \left(\frac{3}{4\pi n_\mathrm{i}}\right)^{1/3}. \tag{1.5}$$

Ce rayon moyen est la moitié de la distance moyenne entre deux ions.

Dans un plasma dense, deux tendances sont en compétition : d'une part les ions et les électrons ont tendance à se mouvoir librement avec une énergie cinétique moyenne par définition égale à $k_\mathrm{B}T$, d'autre part l'énergie moyenne d'interaction entre deux ions de charge moyenne Z^* vaut $\frac{Z^{*2}e^2}{R_\mathrm{i}}$. La constante de *couplage ion-ion* Γ est le rapport de ces deux moyennes :

$$\Gamma = \frac{Z^{*2}e^2}{R_\mathrm{i} k_\mathrm{B} T}. \tag{1.6}$$

Si $\Gamma \ll 1$, l'énergie cinétique des ions l'emporte largement sur l'énergie d'interaction, et le plasma peut être considéré comme idéal. Les ions se déplacent en interagissant très peu les uns sur les autres, en-dehors des collisions. Si $\Gamma \gg 1$, l'énergie d'interaction entre les ions est prépondérante, et les ions sont fortement contraints dans leurs mouvements et leurs positions relatives. À l'extrême, des études ont montré qu'au-delà de $\Gamma = 172$, le plasma est un solide ionique [6].

[3] Appelé *rayon de Wigner-Seitz* dans la littérature.

1.2 Rayonnement, opacité, équilibre thermodynamique local

Nous avons vu que, dans un plasma, le rayonnement interagit avec les électrons liés aux ions et les électrons libres au travers de différents processus. Lorsque l'ensemble satisfait certaines hypothèses, l'opacité prend une forme que nous allons spécifier.

1.2.1 Processus atomiques dans les plasmas chauds

L'interaction entre le rayonnement, les ions et les électrons se fait au travers de différents processus d'excitation, ionisation et diffusion. Notre énumération se limite aux processus qui ont une influence sur la population des différents états dans lesquels peuvent se trouver les ions, ainsi que les principaux processus conduisant à l'émission ou l'absorption de photons. L'espèce est notée A_m^{Q+} où Q est son degré d'ionisation et m un des nombreux états d'excitation de l'ion dont l'énergie $E_{Q,m}$ sera définie plus précisément Chap. 2. $h\nu$ est l'énergie d'un photon émis ou absorbé dans les processus. Il convient, avant d'évoquer ces processus, de préciser la nature physique des états que peuvent prendre les électrons dans le plasma.

États liés et états libres dans les systèmes quantiques

Porteur d'une charge positive, un ion est un puits de potentiel pour les électrons, chargés négativement. La résolution de l'équation de Schrödinger pour un électron dans le potentiel V de l'ion donne deux types de solutions sous forme de fonctions d'onde :

- des états liés d'extension spatiale limitée, formant un ensemble fini ou au plus dénombrable de solutions avec des énergies discrètes ;
- des états libres, qui forment un ensemble continu de solutions s'étendant à l'infini dans l'espace, et dont les énergies sont continues.

L'ensemble des états libres est souvent appelé *continuum*. Dans notre approche, un électron est soit *lié* à un ion, soit *libre* dans le continuum.

Bremsstrahlung

La *Bremsstrahlung*, dite aussi *rayonnement continu de freinage*, est le processus par lequel un électron libre en interaction avec un ion rayonne un photon d'énergie $h\nu$ lorsqu'il est accéléré. Le processus inverse, dit *Bremsstrahlung inverse*, contribue en quasi-totalité à l'opacité libre-libre. L'équation de ce processus s'écrit :

$$e^- \rightleftharpoons e^- + h\nu.$$

Nous expliciterons une formule de calcul de la section efficace du processus inverse, qui absorbe des photons et contribue à l'opacité.

Photoionisation et recombinaison radiative

La *photoionisation* est le processus par lequel un photon « arrache » un électron à un ion, en faisant passer un de ses électrons d'un état lié dans l'ion à un état libre. Le processus inverse est appelé *recombinaison radiative* : l'interaction entre un électron et

un ion produit un photon d'énergie $h\nu$ après s'être recombiné à un ion. L'équation de ce processus s'écrit :

$$A_n^{(Q+1)+} + e^- \rightleftharpoons A_m^{Q+} + h\nu. \tag{1.7}$$

En plus de contribuer à l'absorption pour le processus inverse, les deux processus participent à l'échange entre les électrons libres et les électrons liés, et de ce fait influencent l'abondance des différents états de charge. L'énergie d'un photon ionisant un atome est au moins égale à l'énergie d'ionisation de l'atome ionisé, c.-à-d. l'énergie nécessaire pour faire passer l'électron dans le continuum. Inversement, un électron se recombinant à un ion provoque l'émission d'un photon dont l'énergie est au moins égale à l'énergie d'ionisation de l'état lié final de cet électron.

Photoexcitation et désexcitation radiative

Une *photoexcitation* est le changement d'état d'un électron lié vers un état lié d'énergie plus élevée sous l'effet de l'interaction avec un photon. Le processus inverse est nommé *désexcitation radiative*. L'électron restant dans le même ion, on peut également considérer que l'excitation concerne l'ion tout entier, qui passe effectivement de l'état A_m^{Q+} à l'état excité $A_{m'}^{Q+}$. Ce point de vue est d'ailleurs plus juste car, dans l'ion, le potentiel ionique dépend de l'ensemble des états liés occupés par les électrons. La *photoexcitation* est l'excitation causé par un photon d'énergie $h\nu$. L'équation du processus s'écrit :

$$A_m^{Q+} + h\nu \rightleftharpoons A_{m'}^{Q+}. \tag{1.8}$$

En plus de contribuer à l'absorption pour l'excitation et à l'émission pour la désexcitation, ces deux processus participent à la population des états plus ou moins excités des états de charge. La photoexcitation requiert que l'énergie du photon soit égale à la différence d'énergie entre les niveaux initial et final de l'électron, ou, du point de vue de l'ion, entre l'énergie de l'ion dans l'état $A_{m'}^{Q+}$ et l'ion dans l'état $A_{m'}^{Q+}$. De même, la désexcitation se traduit par l'émission d'un photon dont l'énergie est égale à la différence d'énergie entre le niveau excité et le niveau plus profond.

Processus impliquant des électrons

Une autre famille de processus joue un rôle déterminant dans la population des différentes espèces du plasma : les processus impliquant des électrons. Néanmoins, leur connaissance approfondie n'est pas nécessaire dans le cadre de notre travail, nous expliquerons plus loin pourquoi.

On distingue trois types de processus *collisionnels*, cités ici avec leurs inverses :

1. L'*ionisation par impact électronique* et la *recombinaison à trois corps*, d'équation

$$A_m^{Q+} + e^- \rightleftharpoons A_n^{(Q+1)+} + e^- + e^-. \tag{1.9}$$

Le taux[4] de recombinaison à trois corps peut s'écrire [7] :

$$\tau^{(3)}(Q+1 \to Q) = R^{(3)}(Q+1 \to Q)\, n_{A^{(Q+1)+}}\, n_e^2, \tag{1.10}$$

[4]Un taux est homogène à une fréquence. C'est l'inverse du temps caractéristique d'un processus.

le premier facteur étant très peu dépendant de la densité. De ce fait, la recombinaison à trois corps est fortement dépendante de la densité du plasma, et est prépondérante dans les plasmas denses.

2. L'excitation et la désexcitation par impact électronique, d'équation

$$A_m^{Q+} + e^- \rightleftharpoons A_{m'}^{Q+} + e^- \tag{1.11}$$

3. L'autoionisation et la recombinaison diélectronique, d'équation :

$$A_{m''}^{Q+} \rightleftharpoons A_0^{(Q+1)+} + e^- \tag{1.12}$$

Le taux de recombinaison diélectronique peut s'écrire [7] :

$$\tau^{(2)}(Q+1 \to Q) = R^{(2)}(Q+1 \to Q)\, n_{A_0^{(Q+1)+}}\, n_{\mathrm{e}}, \tag{1.13}$$

L'ensemble de ces processus contribue à l'échange d'entités entre les différentes espèces. L'expression de la section efficace de chacun de ces processus ne peut être simple qu'au prix de nombreuses approximations. Pour déterminer l'état d'un plasma et son évolution, il faut résoudre un système d'équations différentielles en temps prenant en compte chaque processus, chaque état initial et chaque état final. La résolution d'un tel système est extrêmement coûteuse, et même en le supposant à l'équilibre, ce modèle, appelé *modèle collisionnel-radiatif* reste coûteux en calculs. Nous allons voir Sec. 1.2.3 comment construire le résultat de l'équilibre de ces processus.

1.2.2 Opacité et transport de rayonnement

Le rayonnement est constitué de photons qui sont chacun caractérisés par leur énergie et leur direction de propagation. L'énergie d'un photon est le plus souvent exprimée par rapport à la fréquence ν, à la pulsation ω, à la longueur d'onde λ, voire au nombre d'onde σ [8, 7] :

$$E = h\nu = \hbar\omega = \frac{hc}{\lambda} = hc\,\sigma. \tag{1.14}$$

Dans la thèse, nous choisissons d'écrire cette *énergie spectrale* sous la forme $h\nu$, et certaines formules seront exprimées à l'aide de la fréquence des photons. Les différentes grandeurs qui peuvent caractériser un champ de rayonnement sont développées annexe A, et deux seront utilisées dans la thèse : la densité d'énergie radiative spectrale U_ν et l'intensité radiative spectrale I_ν. La première intervient dans la description du gaz de photons contenu dans le plasma et est associée à l'émissivité de celui-ci. La seconde est principalement utilisée dans la propagation du rayonnement à travers un milieu absorbant et fonde la notion d'opacité.

Dans un plasma, le transfert d'énergie entre zones à haute densité d'énergie et zones à moindre densité d'énergie peut se faire selon trois modes [3, 4] :

- par conduction : ce mode de transfert n'est significatif que dans les plasmas très denses, en particulier quand la matière est dégénérée (ex. naines blanches) ;
- par convection : ce mode de transfert est important dans les plasmas de densité moyenne (ex. intérieurs d'étoiles) ;

- par rayonnement : ce dernier mode, qui nous intéresse plus particulièrement, est prédominant dans les plasmas à densité faible et moyenne (ex. intérieurs d'étoiles, expériences sur Terre).

Dans les plasmas moyennement denses, convection et rayonnement sont en compétition et la prédominance de l'un ou l'autre des modes a une importance capitale dans la structure stellaire, d'où la nécessité de connaître avec précision la quantité d'énergie qui est transférée dans les conditions des intérieurs stellaires. Partant d'un point $\mathbf{r}$ à un instant t, on cherche l'intensité au point $\mathbf{r} + \mathrm{d}\mathbf{r}$ provenant de $\mathbf{r}$. Soit $\mathrm{d}l = c\,\mathrm{d}t$ la longueur parcourue par le rayonnement partant de $\mathbf{r}$ pendant le temps $\mathrm{d}t$ dans la direction $\mathbf{u}$. Il est convenu $\mathrm{d}l = |\mathrm{d}\mathbf{r}|$ et $\mathrm{d}\mathbf{r} = \mathrm{d}l\mathbf{u}$. L'équation du transport de rayonnement, qui traduit la conservation du nombre de photons, s'écrit :

$$\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial l}\right) I_\nu = -\alpha_\nu I_\nu + j_\nu. \tag{1.15}$$

j_ν est le *coefficient d'émission spontanée*, relié à la quantité d'énergie radiative émise spontanément par le milieu traversé au voisinage de la fréquence ν. Une autre grandeur est directement reliée à l'opacité, le *libre parcours moyen* :

$$l_\nu = \frac{1}{\alpha_\nu} = \frac{1}{\rho\kappa_\nu}. \tag{1.16}$$

α_ν est le *coefficient d'absorption*, et est relié à la fraction d'énergie radiative entrante $\alpha_\nu I_\nu$ absorbée par le milieu traversé. Le coefficient d'absorption peut être relié à la section efficace d'absorption σ_ν si $\sigma_\nu^3 \ll n_\mathrm{i}^2$:

$$\alpha_\nu = n_\mathrm{i}\sigma_\nu. \tag{1.17}$$

Mais les deux quantités les plus utilisées en physique des plasmas sont l'*émissivité* ϵ_ν et l'opacité κ_ν. Elles sont obtenues en divisant par la densité ρ les deux quantités précédentes :

$$j_\nu = \rho\epsilon_\nu \qquad \alpha_\nu = \rho\kappa_\nu. \tag{1.18}$$

Les conditions dans lesquelles la seconde égalité (1.18) peut être écrite sont discutées Réf. [9].

La *profondeur optique* à l'épaisseur l se note τ_ν :

$$\tau_\nu(l) = \int_0^l \alpha_\nu(l')\,\mathrm{d}l' = \rho\int_0^l \kappa_\nu(l')\,\mathrm{d}l'. \tag{1.19}$$

Si $\tau_\nu > 1$, le milieu est qualifié d'*optiquement épais*. Si $\tau_\nu < 1$, le milieu est qualifié d'*optiquement mince*.

Si l'équation (1.15) est divisée par α_ν, alors l'équation de transport de rayonnement laisse apparaître le terme-source S_ν :

$$\frac{\partial I_\nu}{\partial \tau_\nu} = -I_\nu + S_\nu, \tag{1.20}$$

avec

$$S_\nu = \frac{j_\nu}{\alpha_\nu} = \frac{\epsilon_\nu}{\kappa_\nu}. \tag{1.21}$$

Nous allons dans la suite du chapitre utiliser les notions définies plus haut, aussi bien pour définir l'équilibre thermodynamique local que pour introduire les notions fondamentales de spectroscopie et d'opacités moyennes.

1.2.3 Équilibre thermodynamique local

Définition

L'équilibre thermodynamique, dans la définition donnée Sec. 1.1.3, suppose que le plasma sur lequel on travaille est homogène et que tous ses échanges avec l'extérieur sont aussi à l'équilibre. Or cela n'est jamais vrai au *stricto sensu*. Cependant, si les processus d'évolution du plasma (hydrodynamique, rayonnement) sont beaucoup plus lents que les processus de thermalisation, l'*approximation quasistatique* revient à dire qu'à chaque instant, le plasma est, au moins localement, en équilibre thermodynamique. Le plasma est à l'*équilibre thermodynamique local* (abrégé É. T. L.) au point $\mathbf{r}$ et à l'instant t si toutes les grandeurs intensives de ses composantes sont définies et uniformes au voisinage de ce point à l'instant t. Un tel équilibre est possible lorsque les processus collisionnels dominent sur les processus radiatifs, ces derniers peuplant les niveaux excités de manière sélective, avec des taux de transition qui ne dépendent pas que de l'énergie des niveaux. Le plasma peut ainsi être thermalisé. De plus, l'émissivité et l'opacité sont liées par la loi de Kirchhoff :

$$\frac{\epsilon_\nu}{\kappa_\nu} = S_\nu = \frac{2h\nu^3}{c^2}\frac{1}{e^{h\nu/k_\mathrm{B}T}-1} = B_\nu \tag{1.22}$$

Il existe plusieurs caractérisations de l'É. T. L. dans un plasma chaud. L'une d'elles provient des taux des deux processus de recombinaison électronique [7] : la recombinaison diélectronique de taux proportionnel à $R^{(2)}(Q+1 \to Q)\, n_\mathrm{e}$ et la recombinaison à trois corps de taux proportionnel à $R^{(3)}(Q+1 \to Q)\, n_\mathrm{e}^2$. Il y a équilibre thermodynamique local lorsque

$$n_\mathrm{e} \gg \frac{R^{(2)}(Q+1 \to Q)}{R^{(3)}(Q+1 \to Q)}. \tag{1.23}$$

Lorsque le plasma est à l'É. T. L., la physique statistique [7] permet de déduire de nombreuses formules sur la distribution en énergie de rayonnement et des électrons du continuum, ainsi que l'abondance des différentes états de charge Q et des différents états d'excitation m d'un ion donné. La nature des états d'excitation sera précisée Chap. 2.

Ions

Soit X une *espèce* de charge Q, c.-à-d. un ensemble fini de g_X états quantiques. Si les g_X états sont indifférenciés, l'espèce X est *dégénérée* et sa dégénérescence est égale à g_X. Son calcul n'est pas au propos de ce chapitre et est abordé Chap. 2. Le *facteur de Boltzmann* est l'exponentielle de l'opposé de l'énergie exprimée en unités de température :

$$e^{-\beta E_{Q,m}} = e^{-\frac{E_{Q,m}}{k_\mathrm{B}T}}, \tag{1.24}$$

Formalisme	Espèce X	État de charge Q	Plasma
Canonique	$\mathcal{U}_X$	$\mathcal{U}_Q = \sum_{X \in Q} \mathcal{U}_X$	Non définie
Grand-canonique	$\mathcal{Z}_X$	$\mathcal{Z}_Q = \sum_{X \in Q} \mathcal{Z}_X$	$\mathcal{Z} = \sum_Q \mathcal{Z}_Q = \sum_X \mathcal{Z}_X$

TABLE 1.1 – Formalismes et fonctions de partition rencontrés ultérieurement.

où $\beta = \frac{1}{k_B T}$ est la *température inverse* et μ, *potentiel chimique*, est déterminé par l'électroneutralité du système [10, 11, 12]. La *fonction de partition* de l'espèce X de dégénérescence g_X et d'énergie E_X est une variable extensive qui s'écrit :

- en formalisme canonique :
$$\mathcal{U}_X = g_X e^{-\beta E_X}; \tag{1.25}$$

- en formalisme grand-canonique :
$$\mathcal{Z}_X = g_X e^{-\beta(E_X - \mu Q)}. \tag{1.26}$$

La fonction de partition, dont une formule très générale est donnée Tab. 1.1, permet de déterminer la thermodynamique du système, par exemple l'abondance des différentes espèces à l'É. T. L..

Pour comparer l'abondance des espèces ioniques, plusieurs quantités sont utilisées pendant la thèse :

- la fonction de partition $\mathcal{U}_X$ si on compare deux espèces d'un même état de charge, ou la grande fonction de partition $\mathcal{Z}_X$ si les deux espèces ne sont pas du même état de charge ;

- la *probabilité* de l'espèce X, qui peut être exprimée sous la forme :
$$\mathcal{P}(X) = \frac{\mathcal{Z}_X}{\mathcal{Z}} \; ; \tag{1.27}$$

- la *densité partielle* de l'espèce X n_X, en nombre d'entités par centimètre-cube :
$$n_X = \mathcal{P}(X)\, n_\mathrm{i} \; ; \tag{1.28}$$

- l'*abondance* de l'espèce X par rapport à une espèce de référence X_0[5] de densité partielle n_0 :
$$\mathcal{A}(X) = \frac{n_X}{n_0} = \frac{\mathcal{P}(X)}{\mathcal{P}(X_0)} = \begin{cases} \frac{\mathcal{U}_X}{\mathcal{U}_{X_0}} \text{ si } Q_X = Q_Y \\ \frac{\mathcal{Z}_X}{\mathcal{Z}_{X_0}} \text{ si } Q_X \neq Q_Y \end{cases} . \tag{1.29}$$

Les ions, caractérisés chacun par un état de charge Q et un niveau d'excitation m, ont une abondance qui est régie par deux équations. La première, connue sous le nom d'*équation de Maxwell-Boltzmann*, permet de comparer l'abondance de deux es-

[5] Par exemple fondamentale, ou première calculée.

pèces d'un même ion :

$$\frac{\mathcal{A}(A_{m'}^{Q+})}{\mathcal{A}(A_{m}^{Q+})} = \frac{g_{m'}}{g_m} e^{-\beta(E'_m - E_m)}, \tag{1.30}$$

où $\beta = \frac{1}{k_B T}$ est la température inversé du plasma. La seconde, dite *équation de Saha-Boltzmann*, permet de comparer l'abondance de deux états de charge :

$$\frac{\mathcal{A}(A^{(Q+1)+})}{\mathcal{A}(A^{Q+})} n_e = 2\frac{\mathcal{U}_{Q+1}}{\mathcal{U}_Q} \left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2}\right)^{3/2} e^{\beta\left(\varepsilon_{Q+1} - \varepsilon_Q\right)}, \tag{1.31}$$

où ε_{Q+1} et ε_Q sont les énergies d'ionisation moyennes des états de charge respectifs $Q+1$ et Q.

La comparaison d'une de ces quatre quantités de deux espèces garantit un résultat équivalent. Seulement, la détermination des trois premières nécessite de connaître la grande fonction de partition de chaque état de charge et du plasma, ou, à l'intérieur d'un même état de charge, la fonction de partition de l'état de charge. Pour comparer deux espèces avec des états de charge différents, on peut choisir entre utiliser les grandes fonctions de partition, qui prennent en compte l'état de charge des deux espèces, ou combiner les fonctions de partition avec les probabilités des états de charge données par l'équation (1.31). En général, la première option est utilisée dans les codes de calcul, mais la seconde permet d'alléger les notations et sera plus fréquemment utilisée tout au long de la thèse.

Dans l'hypothèse de l'É. T. L., les équations de Maxwell-Boltzmann et Saha-Boltzmann nous permettent, connaissant l'état du plasma et l'ensemble des espèces présentes, de déterminer complètement l'abondance de chacune d'elles. Ces formules sont complètement indépendantes des sections efficaces des différents processus, notamment électroniques, que nous avons envisagés Sec. 1.2.1. C'est pourquoi nous n'avons pas jugé nécessaire de détailler le calcul des taux de transition, qui constitue en lui-même un sujet de recherche. Les codes de calcul hors-É. T. L. utilisent des formules qui approchent les taux de transition et restent simples à programmer.

Électrons libres

À l'É. T. L., la distribution en énergie des électrons libres suit une loi de Maxwell dans un traitement complètement classique, ou une loi de Thomas-Fermi dans un traitement semi-classique. La distribution de Maxwell, valable à densité pas trop élevée, suppose que les électrons libres n'interagissent pas entre eux à distance. Soit $n_f(E)\,\mathrm{d}E$ le nombre d'électrons libres par unité de volume dont l'énergie est comprise entre E et $E + \mathrm{d}E$. La loi de Maxwell nous donne $n_f(E)$:

$$n_f(E)\,\mathrm{d}E = \frac{1}{k_B T}\, e^{-(E-\mu)/k_B T}\,\mathrm{d}E \tag{1.32}$$

L'énergie d'un électron est la somme de son énergie potentielle, due à l'interaction avec les ions et les autres électrons, et de son énergie cinétique, reliée à la vitesse relative dans le milieu. Décrire l'énergie des électrons libres à l'É. T. L. par une distribution de Maxwell fait complètement abstraction du caractère quantique de ces particules.

Les électrons sont des *fermions*, et leur spin vaut 1/2. Le principe de Pauli, qui stipule que la fonction d'onde d'un système de fermions est toujours antisymétrique,

interdit à deux électrons d'être exactement dans le même état quantique. Les conséquences de ce principe en physique atomique sont importantes, comme nous le verrons Chap. 2. En physique statistique, le principe de Pauli modifie la distribution en énergie des électrons, qui suit la loi de Fermi-Dirac :

$$n_{\mathrm{f}}(E)\,\mathrm{d}E \propto \frac{1}{1+e^{(E-\mu)/k_{\mathrm{B}}T}}. \tag{1.33}$$

La statistique de Fermi-Dirac est à la base de la théorie de Thomas-Fermi que nous verrons Sec. 4.1.1.

Rayonnement

À l'inverse des électrons qui constituent un gaz de fermions, les photons de spin nul, à l'É. T. L., constituent un gaz de bosons. Les conséquences de la statistique de Bose-Einstein sur le gaz de photons sont résumées dans la distribution du rayonnement, donnée en intensité radiative :

$$S_\nu = \frac{\epsilon_\nu}{\kappa_\nu} = B_\nu(k_{\mathrm{B}}T) = \frac{2h\nu^3}{c^2}\,\frac{1}{e^{h\nu/k_{\mathrm{B}}T}-1}, \tag{1.34}$$

et l'équation (1.20) se réécrit :

$$\frac{\partial I_\nu}{\partial \tau_\nu} = -I_\nu + B_\nu(k_{\mathrm{B}}T). \tag{1.35}$$

Dans le cas général, en particulier dans le cas d'un milieu optiquement mince, B_ν est un terme-source dit rayonnement thermique. Dans le cas d'un milieu optiquement épais, l'intensité est stationnaire donc $I_\nu = S_\nu$, et on parle de *rayonnement de corps noir*.

1.3 L'opacité des plasmas

Nous disposons à présent de tous les ingrédients pour définir la notion d'opacité et expliciter les composantes dont le calcul ne pose pas problème.

1.3.1 Contribution des processus à l'opacité

L'opacité du plasma telle que nous l'avons envisagée équation (1.18) est liée à l'absorption du rayonnement par le milieu traversé. Cette absorption se produit par l'intermédiaire des processus énumérés Sec. 1.2.1 qui font intervenir le rayonnement, qui, si le mélange de canaux [13] est négligé, sont de trois sortes [14] :

- la Bremsstrahlung inverse, qui constitue la contribution libre-libre κ_{ff} à l'opacité ;
- la photoionisation, qui constitue la contribution lié-libre κ_{bf} à l'opacité ;
- la photoexcitation, qui constitue la contribution lié-lié κ_{bb} à l'opacité.

La somme de ces trois contributions doit être multipliée par le facteur d'émission induite à l'É. T. L. $\left(1-e^{-\frac{h\nu}{k_{\mathrm{B}}T}}\right)$. À ce produit doit être ajoutée la contribution de la diffu-

sion κ_D. L'opacité totale du plasma s'écrit donc

$$\kappa(h\nu) = (\kappa_{\text{ff}} + \kappa_{\text{bf}} + \kappa_{\text{ff}}) \left(1 - e^{-\frac{h\nu}{k_{\text{B}}T}}\right) + \kappa_D \tag{1.36}$$

En supposant que les électrons ont un comportement maxwellien, la moyenne sur les vitesses donne un coefficient d'absorption proportionnel à l'inverse du cube de l'énergie spectrale [9] :

$$\kappa_{\text{ff}}(h\nu) = \frac{4}{3}\sqrt{\frac{2\pi}{3} m_{\text{e}} k_{\text{B}} T_{\text{e}}} \frac{e^6 h^2 \rho}{c(h\nu)^3} Z^{*2} g_{\text{ff}} n_{\text{i}} n_{\text{e}} \tag{1.37}$$

$$\simeq 8,79.10^{10}\ \text{g}^{-1}\text{cm}^{-3}\text{eV}^{-7/2} \left(\frac{Z^* \mathcal{N}_{\text{A}}}{A}\right)^2 \frac{\rho}{(h\nu)^3} \frac{g_{\text{ff}}}{\sqrt{k_{\text{B}}T}} \tag{1.38}$$

où g_{ff} est le *facteur de Gaunt* de l'opacité libre-libre permettant d'inclure des effets quantiques – dans notre modèle on le prend égal à 1 –. Dans cette approximation, l'opacité libre-libre est une fonction continue et régulière de l'énergie spectrale.

À la différence de l'opacité libre-libre qui peut être, sans trop d'altération, calculée sans différenciation des différents ions, les opacités lié-libre et lié-lié se calculent à partir de chaque espèce initiale et finale du processus de photoionisation. Chaque espèce X, caractérisée par une probabilité $\mathcal{P}(X)$ dans le plasma, a une grande fonction de partition $\mathcal{Z}_X$. L'opacité lié-libre de l'espèce X vers l'espèce X' s'écrit [7, 9] :

$$\kappa_{\text{bf},X}(h\nu) = \begin{cases} \kappa_{X,0} \left(\frac{h\nu_0}{h\nu}\right)^3 & \text{si } h\nu \geq h\nu_0 \\ 0 & \text{si } h\nu < h\nu_0 \end{cases}, \tag{1.39}$$

où $\kappa_{X,0}$ désigne l'opacité au seuil de photoionisation $h\nu_0$, dont des expressions peuvent être trouvées dans la littérature [15]. L'espèce X contribue à l'opacité lié-libre du milieu à hauteur de sa probabilité dans le plasma multipliée par l'expression à la droite de (1.39) :

$$\kappa_{\text{bf}}(h\nu) = \sum_X \mathcal{P}(X) \sum_{X \to X'} \kappa_{\text{bf},X\to X'}(h\nu) \tag{1.40}$$

La somme de nombreuses fonctions de la forme de l'équation (1.39) dans (1.40) fait de la contribution lié-libre une opacité de seuil : elle est globalement décroissante, mais remonte fortement au voisinage de l'ionisation d'un grand nombre d'électrons, d'où l'allure en « marches d'escalier » qu'elle prend au voisinage de nombreux seuils d'ionisation.

Une *transition* est, en calcul d'opacité, une photoexcitation de l'espèce X vers l'espèce X'. L'opacité d'une transition est égale à

$$\kappa_{\text{bb},X\to X'} = \frac{\pi e^2 h}{mc} f_{X\to X'}\, \Phi_{X\to X'}(h\nu), \tag{1.41}$$

avec $f_{X\to X'}$ la *force d'oscillateur* et $\Phi_{X\to X'}$ est le *profil* de la transition, c.-à-d. une distribution réelle positive normalisée à 1. Les définitions des forces d'oscillateur et des profils d'élargissement sont données Chap. 3 et 4. L'opacité de l'espèce X est la somme des

opacité de toutes les transitions au départ de X :

$$\kappa_{\mathrm{bb},X}(h\nu) = \sum_{X\to X'} \kappa_{\mathrm{bb},X\to X'} = \frac{\pi e^2 h}{mc} \sum_{X\to X'} f_{X\to X'}\, \Phi_{X\to X'}(h\nu). \tag{1.42}$$

Les calculs du profil et de l'intensité seront détaillés Chap. 3. L'espèce X contribue à l'opacité lié-lié du milieu à hauteur de sa probabilité dans le plasma :

$$\kappa_{\mathrm{bb}}(h\nu) = \sum_X \mathcal{P}(X)\, \kappa_{\mathrm{bb},X}(h\nu) \tag{1.43a}$$

$$= \sum_X \mathcal{P}(X)\, \frac{\pi e^2 h}{mc} \sum_{X\to X'} f_{X\to X'} \Phi_{X\to X'}(h\nu) \tag{1.43b}$$

$$= \sum_X \sum_{X\to X'} L_{X\to X'}\, \Phi_{X\to X'}(h\nu), \tag{1.43c}$$

et $L_{X\to X'}$ est l'*intensité* de la transition $X \to X'$, qui s'exprime sous la forme :

$$L_{X\to X'} = \frac{\pi e^2 h}{mc}\, \mathcal{P}(X)\, f_{X\to X'}. \tag{1.44}$$

L'intensité permet d'évaluer l'importance de la raie dans le spectre en opacité incorporant toutes les espèces du plasma.

Cependant, les profils sont généralement peu étendus en énergie spectrale autour de l'énergie moyenne de la transition. Cela confère à l'opacité lié-lié une allure très irrégulière avec, en cas de profils étroits, des variations très brutales dans la valeur de l'opacité spectrale sur de très petites variations de $h\nu$.

Deux types de zones spectrales alternent :

- les zones dans lesquelles ne se produit aucune photoexcitation, et où seuls les processus lié-libre et libre-libre contribuent à l'opacité : le spectre y est d'allure lisse et décroissant en $h\nu^{-3}$.
- les zones dans lesquelles se produisent des photoexcitations et où se trouvent des photoionisations, où les processus lié-lié contribuent principalement à l'opacité ; le spectre y est localement sujet à des variations très importantes.

La photoexcitation d'un électron d'une couche électronique nécessite toujours des énergies de photons inférieures à la photoionisation. En allant vers le bleu, on rencontre d'abord les raies et faisceaux de photoexcitation, puis on passe le seuil de photoionisation et les raies disparaissent. Ce seuil de photoionisation varie d'une configuration à l'autre, d'où cette forme d'escalier que prend la contribution lié-libre à l'opacité.

L'alternance entre zones de photoexcitation et zones de photoionisation a une importance capitale en spectroscopie d'opacité. Lisses, les zones de photoionisation sont essentiellement dépendantes de la modélisation du potentiel interatomique et du traitement des électrons libres [16]. En revanche, les transitions lié-lié dépendent principalement du potentiel atomique et des fonctions d'onde de chaque orbitale, qui déterminent l'énergie des niveaux.

Cette alternance, comme on peut le voir Fig. 1.2, sépare très bien les couches profondes, entre lesquelles les différences d'énergie sont considérables. On peut ainsi toujours distinguer les zones d'ionisation des couches K et L. En revanche, à partir de la couche N, les zones de photoexcitation des différentes couches et orbitales

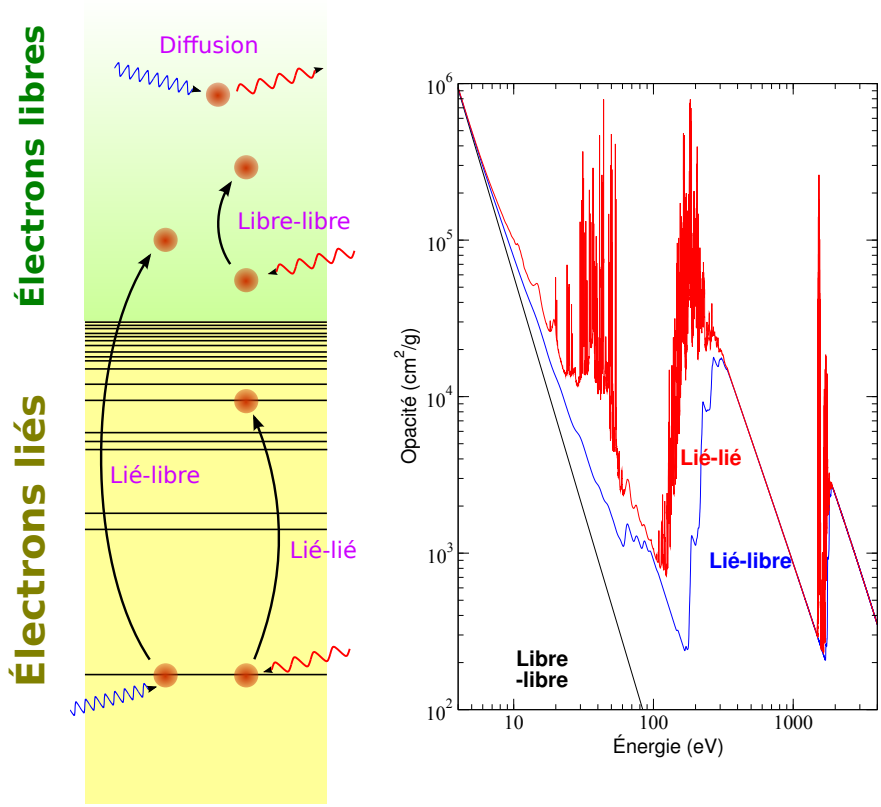


FIGURE 1.2 – Schéma des différents processus d'absorption (gauche) et opacité de l'aluminium à la température de 40 eV et 10 mg/cm^3 montrant les trois contributions : libre-libre continue mais faible, lié-libre avec ses seuils et lié-lié caractérisée par de nombreuses raise (droite).

se recouvrent, et peuvent rencontrer, dans certaines conditions, les zones d'excitation $\Delta n = 0$ des couches plus profondes, c'est ce qui se produit avec les transitions $3 \to 3$ pour les éléments de Z intermédiaire à basse et moyenne température.

1.3.2 Émissivité, transmission et opacités moyennes

La connaissance de l'opacité totale permet d'obtenir des grandeurs que l'on peut mesurer ou nécessaires à d'autres calculs. Il y a deux catégories de grandeurs utiles :

- la transmission et l'émissivité, pour l'interprétation des expériences ;
- les opacités moyennes, pour estimer le transport de rayonnement.

Nous proposerons dans la thèse des calculs de transmission.

Pour simplifier, nous réduisons le problème à une dimension en supposant une plaque très étendue et d'épaisseur l. La transmission et l'émission s'obtiennent par intégration de l'équation (1.15) sur toute l'épaisseur. En général, la transmission et l'émission sont calculées dans une fenêtre spectrale, entre deux valeurs $h\nu_n$ et $h\nu_x$, ce qui permet une sélection des processus physiques à prendre en compte pour le calcul de l'opacité. Lorsque seule l'émission est considérée, son coefficient est intégré directement :

$$I_\nu(l) = I_\nu(0) + \int_0^l j_\nu(l')\,\mathrm{d}l'. \tag{1.45}$$

La loi de Planck nous permet de déduire l'expression de l'émission à l'É. T. L. :

$$I_\nu(l) = I_\nu(0) + \int_0^l \rho(l')B_\nu(l')\kappa_\nu(l')\,\mathrm{d}l'.$$

Dans un milieu homogène, l'émission s'écrit

$$I_\nu(l) = I_\nu(0) + B_\nu\tau_\nu(l) = I_\nu(0) + \rho B_\nu\kappa_\nu l. \tag{1.46}$$

Si seule l'absorption est considérée, alors l'équation (1.15) devient une équation différentielle ordinaire dont la solution s'écrit :

$$I_\nu(l) = I_\nu(0)\,e^{-\tau_\nu(l)}. \tag{1.47}$$

où $\tau_\nu(l)$, profondeur optique, est donné équation (1.19). La transmission est la proportion d'intensité radiative entrante qui traverse le milieu. Son expression générale est :

$$T_\nu(l) = \frac{I_\nu(l)}{I_\nu(0)} = e^{-\tau_\nu(l)} = \exp\left(-\int_0^l \rho(l')\kappa_\nu(l')\mathrm{d}l'\right). \tag{1.48}$$

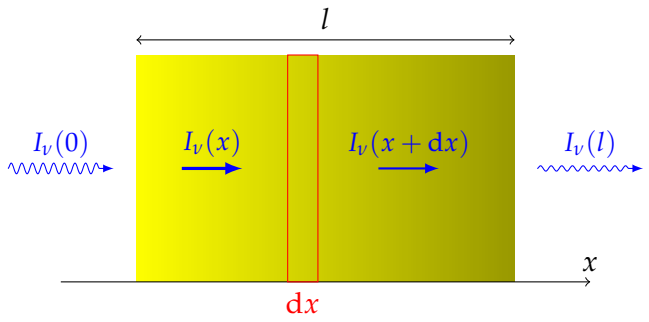


FIGURE 1.3 – Schéma de la propagation dans un milieu absorbant.

Si le milieu est homogène, alors la transmission s'écrit sous une forme dont nous ferons beaucoup usage par la suite, et qui est connue sous le nom de *loi de Beer-Lambert* :

$$T_\nu(l) = e^{-\tau_\nu(l)} = e^{-\rho l\kappa_\nu}. \tag{1.49}$$

ρl, exprimée en $\mathrm{g/cm^2}$, est appelée *masse surfacique*. Il est intéressant de noter que la transmission met en valeur les variations de l'opacité dans un domaine restreint : celui où le produit dans l'exponentielle $\rho l\kappa_\nu$ est proche de 1. Si $\tau_\nu(l) < 1$ pour tout ν, alors l'exponentielle peut être linéarisée et la transmission est une fonction affine de l'opacité. Si $\tau_\nu(l) > 1$ en général, alors l'exponentielle est très proche de 0 et la transmission *sature*. Le calcul de la transmission devient alors très sensible, dans les zones de raies lié-lié, aux variations locales de l'opacité spectrale.

En physique des plasmas, deux moyennes sur le spectre en opacité sont très importantes :

- la moyenne de Planck, arithmétique ;
- la moyenne de Rosseland, harmonique.

Lorsque le milieu est optiquement mince, le rayonnement émis par l'ensemble du plasma qui le constitue peut s'échapper vers l'extérieur sans être en grande partie réabsorbé, car le libre parcours moyen des photons est bien plus grand que l'épaisseur du milieu. Alors la puissance volumique s'écrit

$$W = 2\pi\rho \int_0^\infty \kappa_\nu B_\nu \, \mathrm{d}h\nu \tag{1.50}$$

En posant

$$\kappa_\mathrm{P} = \frac{\int_0^\infty \kappa_\nu B_\nu \, \mathrm{d}h\nu}{\int_0^\infty B_\nu \, \mathrm{d}h\nu} = \frac{15}{\pi^4} \int_0^\infty \frac{\left(\frac{h\nu}{k_\mathrm{B}T}\right)^3}{e^{\frac{h\nu}{k_\mathrm{B}T}} - 1} \kappa_\nu \, \mathrm{d}h\nu \tag{1.51}$$

l'*opacité moyenne de Planck*, on a plus simplement

$$W = \frac{30}{\pi^3} \rho \, \kappa_\mathrm{P}. \tag{1.52}$$

Si le milieu est optiquement épais et suffisamment homogène localement, alors le transport d'énergie par rayonnement peut être traité à l'aide de l'approximation locale, qui permet d'exprimer le gradient local de température par rapport au flux d'énergie radiative F_ν [17].

$$F_\nu(l) = -\frac{4\pi}{3\rho\kappa_\nu} \frac{\partial B_\nu}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial l} \tag{1.53}$$

En posant

$$\frac{1}{\kappa_\mathrm{R}} = \frac{\int_0^\infty \frac{1}{\kappa_\nu} \frac{\partial B_\nu}{\partial T} \, \mathrm{d}h\nu}{\int_0^\infty \frac{\partial B_\nu}{\partial T} \, \mathrm{d}h\nu} = \frac{15}{16\pi^3\sigma T^3} \int_0^\infty \frac{1}{\kappa_\nu} \frac{\left(\frac{h\nu}{k_\mathrm{B}T}\right)^4 e^{-\frac{h\nu}{k_\mathrm{B}T}}}{\left(e^{\frac{h\nu}{k_\mathrm{B}T}} - 1\right)^2} \, \mathrm{d}h\nu, \tag{1.54}$$

et

$$\sigma = \frac{\pi^2 k_\mathrm{B}}{60 c^2 \hbar^3} = 5,6704.10^{-5} \ \mathrm{W/cm^2/K^4} \tag{1.55}$$

constante de Stefan-Boltzmann, l'équation (1.53) donne une équation de transfert thermique après intégration sur le spectre $h\nu$:

$$F(l) = -\frac{4\pi\,\sigma T^3}{3\kappa_\mathrm{R}} \frac{\partial B_\nu}{\partial l} \frac{\partial T}{\partial l}. \tag{1.56}$$

Cela signifie que la moyenne de Rosseland est directement reliée au transport de rayonnement dans l'approximation locale. Dit autrement, dans des plasmas homogènes sur des distances bien plus grandes que le libre parcours moyen des photons, **le transfert d'énergie par rayonnement est proportionnel à la moyenne de Rosseland**. Or la moyenne de Rosseland est une moyenne harmonique, elle est donc très sensible aux petites valeurs que peut prendre localement l'opacité spectrale. **Le calcul d'opacités spectrales précises est donc essentiel à un calcul de transport de rayonnement précis.**

1.3.3 Applications aux expériences et à l'astrophysique

Le calcul d'opacité spectrale a de nombreuses applications en physique des plasmas. Comme nous l'avons vu Sec. 1.3.2, l'opacité spectrale permet de déduire des quantités que l'on peut mesurer dans des expériences, à savoir l'émissivité et la transmission.

Deux filières permettent actuellement de produire des plasmas chauds à l'É. T. L..

1. L'interaction laser-plasma, où le rayonnement intense d'une impulsion laser d'au moins plusieurs joules et durant quelques nanosecondes est déposé dans une cavité.

2. La machine Z, où un dispositif de Z-pinch produit un rayonnement X énergétique pendant quelques dizaines de nanosecondes.

Dans les deux cas, l'échantillon est porté à l'état de plasma à une température de quelques dizaines ou centaines d'eV, et à des densités de l'ordre de 10^{-5} à environ 10 g/cm^3. À une autre échelle se trouvent les lasers mégajoules, comme le NIF[6] ou le LMJ[7]. Les énergies très élevées permettront d'accéder sans difficulté à des plasmas de température supérieure à 100 eV. Dans toutes les configurations expérimentales, l'échantillon surchauffé se transforme instantanément en plasma, qui se détend et se refroidit en quelques nanosecondes. Nous confronterons nos calculs à des résultats expérimentaux Chap. 3 et 6, et surtout Chap. 9 lorsque notre modèle aura été présenté avec tous ses ingrédients.

L'opacité des plasmas chauds joue un rôle crucial en astrophysique, car les conditions dans lesquelles notre modèle est le plus pertinent correspondent à celles rencontrées dans les intérieurs d'étoiles. L'existence ou l'ampleur de certains phénomènes en leur sein dépend très fortement de l'opacité moyenne de Rosseland, via l'équation (1.53). Cette dépendance en la moyenne de Rosseland provient du fait que le plasma est homogène sur des distances très supérieures au libre parcours moyen des électrons (kilomètre vs. millimètre). Actuellement, les opacités moyennes, en particulier celle de Rosseland, jouent un rôle crucial dans deux domaines de la physique stellaire :

- la physique du Soleil, dont la structure nous est accessible via l'héliosismologie ; le projet COROT a pour objectif d'étudier la sismologie d'autres étoiles similaires au Soleil ;

- les Céphéides, dont le comportement instable est dû au transport de rayonnement et en est très dépendant.

Les étoiles de population I[8], comme le Soleil et les Céphéides, contiennent plus de 95 % d'hydrogène et d'hélium en masse. Cependant, malgré leur abondance réduite[9], les métaux ont une contribution importante dans l'opacité spectrale, car les structures d'absorption sont bien plus complexes et bien plus intenses que celles de l'hydrogène ou de l'hélium. En particulier, l'effet de la contribution du fer sur la moyenne de Rosseland dans les intérieurs stellaires est crucial.

Le Soleil est une étoile de la séquence principale, qui évolue très lentement – les changements sont significatifs sur plusieurs millions à plusieurs milliards d'années –

[6] National Ignition Facility en service à Livermore, Californie

[7] Laser Mégajoule en construction au Barp, France

[8] Les étoiles de population I ont une origine similaire à notre Soleil : la nébuleuse dont elles sont issues a été enrichie en « métaux » ($Z \geq 3$) par des étoiles plus anciennes.

[9] Autour de 1 % de carbone, autant d'oxygène et 0,2 % de fer.

et peut donc être considéré en équilibre hydrostatique. Dans les étoiles, le transfert d'énergie entre le centre à une température de plus de 1 keV et une densité de plus de 100 g/cm^3 et la surface à moins de 1 eV et 2 $\mu g/cm^3$ peut se faire par transport de rayonnement et par convection de matière. La convection se produit en cas d'instabilité convective d'une couche, autrement dit un gradient d'entropie négatif, qui se traduit par le critère de Schwarzschild [3, 4]. Toutes les étoiles ont des couches convectives, et leurs intérieurs se divisent en zones radiatives, où le transfert d'énergie se fait uniquement par le rayonnement, et zones convectives où la matière est soumise à des mouvements de convection. Dans les étoiles de la masse du Soleil ou moins massives, la zone convective est située près de la surface, tandis que dans les étoiles plus massives, c'est le cœur qui tend à être convectif. L'héliosismologie nous permet de connaître la limite de la zone convective avec une précision de l'ordre de 1 % [18, 19, 20]. Le transport de rayonnement étant proportionnel à l'opacité moyenne de Rosseland, la connaissance précise de celle-ci est primordiale pour arriver à valider les modèles de structure et d'évolution stellaires.

Les Céphéides sont des étoiles en fin de vie bien plus lumineuses que le Soleil et dont la luminosité varie sur des périodes de plusieurs jours. Cette variation d'éclat est due à une instabilité engendrée par l'opacité moyenne de Rosseland d'une des couches externes de l'étoile, appelée *mécanisme* κ [21]. En général, l'opacité moyenne d'un plasma diminue lors d'une compression adiabatique. Néanmoins, l'opacité moyenne passe par un maximum là où un grand nombre d'ions changent de charge ou d'état sous l'effet d'une petite variation en température. De ce fait, l'étoile se contracte et baisse en luminosité tant qu'elle est opaque, jusqu'à ce que l'opacité moyenne baisse sous l'effet d'une température plus élevée. Alors l'étoile gagne en luminosité et la couche est repoussée vers l'extérieur par chauffage, jusqu'à ce que son refroidissement la rende plus opaque. Une propriété remarquable des Céphéides est que la période de variation de luminosité dépend uniquement de la luminosité moyenne, et donc de la masse, ce qui fait des Céphéides des *chandelles standard*, autrement dit des étalons pour mesurer la distance d'amas et de galaxies.



STRUCTURE ATOMIQUE : PRINCIPES, MODÈLES ET PÉRIODICITÉ

Les plasmas chauds contiennent des ions qui se répartissent entre différents états de charge, qui eux-mêmes regroupent un grand nombre d'états liés différents du système composé du noyau atomique de charge Z et des $N = Z - Q$ électrons qui composent un ion de charge Q. Simple pour des ions composés d'un électron, la caractérisation des états liés se complique lorsque plusieurs électrons liés interagissent entre eux en même temps qu'avec le noyau. Les atomes et les ions sont ainsi dotés d'une structure en couches et en sous-couches dans lesquelles les électrons se répartissent.

2.1 Structure des états liés de l'atome

Les états liés de l'atome sont modélisés à l'aide de l'équation de Schrödinger, même si sa résolution exacte n'est possible que dans le cas d'un atome à un électron.

2.1.1 Notions de mécanique quantique

La théorie de la structure atomique utilise des résultats de la mécanique quantique dont trois aspects sont utilisés dans cette thèse, en plus de la différence entre états liés et états libres que nous avons évoquée Sec. 1.2.3. Pour plus de simplicité, nous décrivons un système à une particule.

1. La notion d'*amplitude de probabilité* : une fonction d'onde $\psi(\mathbf{r})$ à valeurs complexes et définie sur l'espace qui est associé au système. La *densité de probabilité* est le carré du module de l'amplitude de probabilité $|\psi(\mathbf{r})|^2$.

2. La notion de *moment cinétique quantique* : il est généralisable à des phénomènes quantiques dont l'interprétation mécanique ne fait pas forcément sens.

Ce rappel a pour but de poser quelques notations qui seront très utilisées dans le chapitre ainsi que, pour certaines, dans les chapitres suivants.

La première notion, la plus fondamentale en mécanique quantique, est associée à l'équation de Schrödinger, non-relativiste, à laquelle ψ obéit :

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi. \tag{2.1}$$

H est appelé *Hamiltonien* et V *potentiel* du système. ψ et V dépendent tous deux de l'ensemble des variables qui caractérisent le système. Si l'état du système est stationnaire, alors le premier membre de l'équation (2.1) est nul.

La seconde nécessite l'introduction de la notion d'*observable*, application linéaire sur l'espace des fonctions d'onde dont les valeurs propres sont réelles. Certaines observables sont associées à des grandeurs physiques, comme la position[1] $\mathbf{r} = \psi\,\mathbf{r}$, l'impulsion $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla\psi$, l'énergie (Hamiltonien H) ou encore le *moment cinétique* $\mathbf{L}$, dont la définition classique est :

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \wedge \mathbf{p}. \tag{2.2}$$

Les deux opérateurs considérés sont $L^2 = \mathbf{L}\cdot\mathbf{L}$ et sa projection L_z le long d'une direction choisie z, car ils forment un ensemble d'observables qui commutent et sont donc diagonalisables dans la même base $(|LM_L\rangle)$, où $|LM_L\rangle$ dénote une fonction d'amplitude de probabilité en formalisme de Dirac caractérisée par les nombres L et M_L :

$$L^2\,|LM_L\rangle = L\,(L+1)\,\hbar\,|LM_L\rangle \tag{2.3}$$

$$L_z\,|LM_L\rangle = M_L\hbar\,|LM_L\rangle\,, \quad -L \leq M_L \leq +L. \tag{2.4}$$

L'ensemble des $|LM_L\rangle$ est une base orthonormale de $|L\rangle$ l'*espace associé* au moment cinétique L. On peut démontrer [8, 22, 23, 24] que L et M_L sont tous deux entiers ou demi-entiers, avec L positif, $|L\rangle$ est donc de dimension $2L+1$. Le moment cinétique total de l'état $|LM_L\rangle$ avec $|M_L| \leq L$ est L. Comme toute projection de $\mathbf{L}$ commute avec le Hamiltonien, le système est *dégénéré* en M_L et la seule quantité qui importe est L, que l'on considère comme un état quantique avec une *dégénérescence*, ou *poids statistique* $2L+1$ qui correspond au nombre de valeurs que M_L peut prendre sachant le moment cinétique total égal à L.

Une propriété intrinsèque des systèmes quantiques, le *spin*[2], se comporte comme un moment cinétique. Souvent noté s ou S, le spin n'est pas assimilable à une rotation car, appliqué à des électrons dans un formalisme classique, il indiquerait des vitesses de rotation supraluminales à leur surface [24]. Le spin peut être entier ou demi-entier. Les protons, les neutrons et les électrons ont un spin égal à $1/2$. L'état de spin de ces particules prises séparément est donc égal à $m_s = \pm 1/2$. Les moments cinétiques orbital et de spin étant indépendants, ce sont des observables qui commutent.

En spectroscopie, les ensembles de moment cinétique orbital sont nommés selon les lettres qui leur correspondent Tab. 2.1. La notation minuscule est utilisée pour les

L	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Lettre	s	p	d	f	g	h	i	k	l	m

TABLE 2.1 – Correspondance nombre - lettre pour le moment cinétique orbital.

[1] Les vecteurs sont dénotés par l'utilisation d'une police grasse et droite, comme il est la tradition dans la littérature. Cependant, le moment cinétique orbital, vu comme vecteur, sera noté $\vec{\ell}$.

[2] Notion évoquée Sec. 1.2.3.

orbitales, et les lettres au-delà de g sont rarement utilisées. Pour les autres états de moment cinétique orbital, les lettres majuscules sont utilisées.

De manière générale, une observable dotée des mêmes propriétés qu'un moment cinétique est notée $|j\rangle$ et, si elle est dégénérée en m_j, elle est associée à un espace $|j\rangle$ de dimension $2j+1$. Les minuscules sont associées aux moments cinétiques d'une seule particule, tandis que les capitales sont associées aux moments cinétiques totaux (couplés) d'un ensemble de particules. Lorsque deux moments cinétiques j_1 et j_2 sont couplés, alors l'espace associé à leur couplage est le produit tensoriel de leurs espaces associés. Ce produit tensoriel est *isomorphe* à la somme directe de tous les espaces associés aux j tels que $\Delta(j_1, j_2, j) = 1$, où Δ est la *fonction triangle* définie par

$$\Delta(j,k,l) = \begin{cases} 1 & \text{si } |k-l| \leq j \leq k+l \text{ et } j+k+l \text{ entier,} \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \tag{2.5}$$

$$|j_1\rangle \otimes |j_2\rangle \cong \bigoplus_{\Delta(j_1,j_2,j)=1} |j\rangle \cong ||j_1 - j_2|\rangle \oplus \cdots \oplus |j_1 + j_2\rangle \,. \tag{2.6}$$

La somme directe de plusieurs espaces associés peut se noter de manière abrégée

$$(|j_k\rangle)_{k=1,n} = \{|j_1\rangle, |j_2\rangle, \ldots, |j_n\rangle\} = \bigoplus_{k=1}^{n} |j_k\rangle = |j_1\rangle \oplus |j_2\rangle \oplus \cdots \oplus |j_n\rangle \,. \tag{2.7}$$

Un changement de base est nécessaire entre la base-produit de $|J_1\rangle \otimes |J_2\rangle$ et la base de $(|J_k\rangle)_{\Delta(J_1,J_2,J_k)=1}$. La relation entre les fonctions d'onde $|J_1, M_1; J_2, M_2\rangle = |J_1, M_1\rangle\,|J_2, M_2\rangle$ du produit tensoriel $|J_1\rangle \otimes |J_2\rangle$ et les fonctions d'onde $|J_1, J_2; J, M\rangle$ de la somme directe s'écrit :

$$|j_1, j_2; j, m\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{+j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{+j_2} \delta_{m,m_1+m_2} \langle j_1, j_2; j, m | j_1, m_1; j_2, m_2\rangle\, |j_1, m_1\rangle\, |j_2, m_2\rangle \tag{2.8}$$

$$= \sum_{\substack{|m_1|\leq j_1 \\ |m_2|\leq j_2 \\ m_1+m_2=m}} \langle j_1, j_2; j, m | j_1, m_1; j_2, m_2\rangle\, |j_1, m_1\rangle\, |j_2, m_2\rangle \,, \tag{2.9}$$

où δ_{m,m_1+m_2} est le *symbole de Kronecker*, valant 1 si les deux indices sont égaux, 0 sinon. Les brakets $\langle j_1, j_2; j, m | j_1, m_1; j_2, m_2\rangle$ sont appelés *coefficients de Clebsch-Gordan*. Leur calcul dans le cas général, par récursion [22] ou itération [8], est très fastidieux et des tables sont utilisées pour les premières valeurs de j. Les coefficients de Clebsch-Gordan peuvent être exprimés sous la forme de symboles $3j$:

$$\langle j_1, j_2; j, m | j_1, m_1; j_2, m_2\rangle = \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix} . \tag{2.10}$$

Une propriété très intéressante de $\oplus$ et $\otimes$ formule (2.6) et qu'elles font de l'ensemble des espaces d'états de moment cinétique une *algèbre de Hopf* [25, 26], dont $\oplus$ est l'addition avec l'espace nul comme zéro et $\otimes$ la multiplication avec $|0\rangle$[3] comme élément unité. La dimension d'un espace de moment cinétique est un morphisme canonique entre les espaces de moments cinétiques et l'ensemble des entiers naturels.

[3] Espace du moment cinétique nul, de dimension 1.

2.1.2 Résolution exacte dans le cas hydrogénoïde

Un atome est dit *hydrogénoïde* lorsqu'il ne contient que son noyau de charge Z et un électron, comme l'atome d'hydrogène. Par exemple, les atomes He^+, Li^{2+} ou Ne^{9+} sont des ions hydrogénoïdes. Le problème à deux corps peut être réduit à un corps autour d'une masse centrale stationnaire. Vu que les nucléons ont chacun une masse près de 2000 fois supérieure à celle d'un électron, le noyau peut être supposé de masse infinie.[4]

L'équation de Schrödinger pour une fonction d'onde ψ se réécrit alors [8] :

$$H\psi = E\psi, \tag{2.11}$$

où E est une valeur propre (énergie) de l'opérateur, avec $m = m_e$ masse de l'électron :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r). \tag{2.12}$$

Radial, le potentiel électrostatique est celui d'un électron de charge $-e$ à une distance r du noyau de charge $+Ze$:

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{2Z}{(r/a_0)}. \tag{2.13}$$

En posant

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m\,e^2} = 5,291772.10^{-9}\ \text{cm}, \tag{2.14}$$

appelé *rayon de Bohr*, longueur caractéristique de la structure atomique, et $\tilde{r} = \frac{r}{a_0}$, le Hamiltonien (2.12) se réécrit

$$\tilde{H} = -\nabla^2 - \frac{2Z}{\tilde{r}}. \tag{2.15}$$

Pour simplifier les notations, r réfère désormais à $\tilde{r}$, expression du rayon en unités atomiques. La symétrie sphérique incite à exprimer le problème en coordonnées sphériques (r, θ, ϕ).

Dans ce système de coordonnées, le laplacien ∇^2 s'écrit en fonction des dérivées partielles par rapport r et de l'opérateur moment cinétique [8] :

$$\nabla^2 = -\frac{1}{r}\,\frac{\partial^2}{\partial r^2}\,r + \frac{L^2}{r^2}, \tag{2.16}$$

sachant que

$$L^2 = \frac{1}{\sin\theta}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}\,\sin\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\,\frac{\partial^2}{\partial\phi^2},$$

de sorte qu'il est possible de séparer r de θ et ϕ dans l'équation aux dérivées partielles :

$$L^2\psi = \left[r^2\,\frac{\partial^2}{\partial r^2}\,r + r^2\,V(r) + r^2\,E\right]\psi. \tag{2.17}$$

[4] La masse infinie des noyaux est une hypothèse de la quasi-totalité des modèles atomiques, et le nôtre ne fait pas exception.

La résolution de cette équation nous donne des solutions ψ dites fonctions d'onde orbitales qui sont des amplitudes de probabilité.

La *spin-orbitale* peut alors s'écrire sous la forme d'un couple fonction d'onde - spin, avec $m_s = \pm 1/2$:

$$\left(\psi_{n\ell m_\ell}(\mathbf{r}), m_s\right) = \left(\psi_{n\ell ms}(r,\theta,\phi), m_s\right) = \left(\frac{1}{r} R_{n\ell}(r)\, Y_{\ell m}(\theta,\phi), m_s\right). \tag{2.18}$$

Cette équation introduit de nombreuses variables et fonctions qui, à l'exception de $R_{n,\ell}(r)$, proviennent de la théorie des moments cinétiques [22], dont une explication très complète se trouve chapitre 2 Réf [8]. Sans présenter toute la théorie sous-jacente, chacune des variables en indice et des fonctions de l'équation (2.18) joue un rôle spécifique. Les quatre nombres en indice sont appelés *nombres quantiques* :

1. n le nombre quantique principal, toujours strictement positif ;
2. ℓ le nombre quantique orbital, avec $0 \leq \ell \leq n-1$;
3. m_ℓ le nombre quantique magnétique, avec $-\ell \leq m_\ell \leq +\ell$;
4. $m_s = \pm 1/2$ le nombre quantique de spin.

La composante orthoradiale $Y_{\ell m}(\theta,\phi)$ est une *harmonique sphérique* et dénote la distribution de la densité de probabilité sur une sphère centrée en le noyau. Une expression analytique des harmoniques sphériques peut être trouvée dans la littérature habituelle [8, 22, 23]. Soit P l'opérateur parité défini par :

$$\begin{aligned} P\psi(\mathbf{r}) &= \psi(-\mathbf{r}) \\ P\psi(r,\theta,\phi) &= \psi(r, \pi-\theta, \pi+\phi[2\pi]). \end{aligned}$$

Les harmoniques sphériques sont des fonctions propres de cet opérateur, et la *parité orbitale* d'un état est égale à $(-1)^\ell$.

Quant à la composante radiale $R_{n\ell}(r)$, elle est solution de l'équation aux valeurs propres

$$\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{\ell\,(\ell+1)}{r^2} - \frac{2Z}{r}\right] R_{n\ell}(r) = E_n\, R_{n\ell}(r), \tag{2.19}$$

avec

$$E_n = -\frac{Z^2\, e^2}{2a_0\, n^2} = -\frac{Z^2}{n^2}\,\mathrm{Ry} \tag{2.20}$$

énergie de l'électron de nombres quantiques n et ℓ, dont la solution s'écrit à l'aide des polynômes de Laguerre associés $L_{n+1}^{2\ell+1}$ [8] :

$$R_{n\ell}(r) = \sqrt{\frac{Z\,(n-\ell-1)!}{n^2\,(n+\ell)!}} \left(\frac{2Zr}{n}\right)^{\ell+1} e^{-\frac{Zr}{n}}\, L_{n+1}^{2\ell+1}\left(\frac{2ZR}{n}\right), \tag{2.21}$$

avec

$$L_n^p(x) = \frac{\mathrm{d}^p L_n(x)}{\mathrm{d}x^p} = \frac{\mathrm{d}^p}{\mathrm{d}x^p}\left[e^x\, \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\left(x^n\, e^{-x}\right)\right]$$

Ry, dite *constante de Rydberg* désigne une unité d'énergie qui s'exprime en fonction des constantes fondamentales :

$$1\,\mathrm{Ry} = \frac{m\,e^4}{2\hbar^2} = \frac{e^2}{2a_0} = 13,60580\ \mathrm{eV}. \tag{2.22}$$

C'est l'énergie de liaison de l'atome d'hydrogène dans son état fondamental (électron 1*s*). Mais l'unité la plus utilisée est le *Hartree* Ha, qui vaut 2 Ry.

La valeur en énergie obtenue signifie que l'atome d'hydrogène a une structure en couches électroniques n, et que le nombre quantique principal n caractérise l'énergie de liaison de l'électron à l'ion. Le polynôme multiplicateur équation (2.21) étant un polynôme de Laguerre associé, il admet $n-\ell-1$ racines, soit autant de valeurs de r où $R_{n\ell}(r)$ s'annule. Ces points sont appelés *nœuds* de la fonction radiale. Les points où $R_{n\ell}(r)$ est extrémale sont appelés *antinœuds*, et il y en a $n-\ell$. Une conséquence du nombre de nœuds est la répartition de la fonction d'onde en fonction de r.

Avec aucun nœud, une composante radiale correspondant à $\ell = n-1$ a tendance à se concentrer autour de son rayon moyen $\langle r\rangle$, et a une extension en r limitée, avec une densité de probabilité très faible très près du noyau. C'est l'analogue d'une orbite circulaire en mécanique classique. En revanche, une composante radiale avec plusieurs nœuds est beaucoup plus répartie en r, c'est l'analogue à une orbite très elliptique en mécanique classique. La probabilité de trouver un électron près du noyau est significative, ce qui, pour Z élevé, implique des effets relativistes importants sur les états de faible moment cinétique orbital.

Le Hamiltonien de l'équation (2.12) est non-relativiste. Pour déterminer les propriétés de l'atome relativistes, il faut résoudre l'équation de Dirac. Cependant, en structure atomique les effets relativistes peuvent être traités en supposant la « vitesse des électrons » faible, qui se traduit par l'ajout des *corrections relativistes* dans l'équation de Schrödinger :

$$-\frac{(E-V)^2}{2mc^2} - \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{2}{r}\vec{\ell}\cdot\mathbf{s}\right). \tag{2.23}$$

Le premier terme, qui compare énergie cinétique et énergie de masse de l'électron au repos, est la *masse-vélocité*. Le deuxième terme, factorisé, est le *terme de Darwin*. Le troisième, le *spin-orbite*, est le plus intéressant. Son expression dans un atome hydrogénoïde est

$$\frac{\alpha^2}{2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\,(\vec{\ell}\cdot\mathbf{s}), \tag{2.24}$$

où

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{\hbar}{mc\,a_0} = 7,297351.10^{-3} \simeq \frac{1}{137} \tag{2.25}$$

est la *constante de structure fine*. Elle présente la particularité de dépendre du produit scalaire des moments $\vec{\ell}\cdot\mathbf{s}$, ce qui peut s'écrire à l'aide du moment total de l'électron j :

$$\vec{\ell}\cdot\mathbf{s} = \frac{1}{2}\left(j^2 - \ell^2 - s^2\right).$$

Comme les moments cinétiques ℓ et s commutent, il existe une fonction propre des quatre opérateurs ℓ^2, s^2, j^2 et j_z. La valeur propre qui lui est associée est

$$X = \frac{1}{2}\left[j\left(j+1\right) - \ell\left(\ell+1\right) - s\left(s+1\right)\right] = \frac{1}{2}\left[j\left(j+1\right) - \ell\left(\ell+1\right) - \frac{3}{4}\right], \tag{2.26}$$

d'où deux composantes $R_{n\ell j}(r)$ avec le terme de spin-orbite qui se rajoute à la partie $\frac{Z}{r}$ du potentiel.

Bien que les atomes hydrogénoïdes soient simples à calculer et présentent en eux-mêmes peu d'intérêt, leur étude permet de déduire quelques comportements approximatifs par rapport à n et à Z. Ainsi, l'énergie d'un électron dans un ion hydrogénoïde vaut :

$$E = -\frac{Z^2}{n^2}\,\mathrm{Ry}, \tag{2.27}$$

et le rayon moyen de l'orbitale $n\ell$ vaut

$$\langle r\rangle = \int_0^\infty r R_{n\ell}^2(r)\,\mathrm{d}r = \frac{3n^2}{2Z}\left[1 - \frac{\ell\left(\ell+1\right)}{3n^2}\right] a_0. \tag{2.28}$$

2.1.3 Approximation des électrons indépendants et du champ central ; conséquences du principe de Pauli

Dans un ion à plusieurs électrons, le Hamiltonien s'écrit :

$$H = \sum_i \nabla_i^2 + \sum_i V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_n), \tag{2.29}$$

où $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N)$ est le potentiel atomique dont l'expression en unités atomiques, avec des énergies en Rydberg, est :

$$V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N) = \sum_i -\frac{2Z}{r_i} + \sum_{i>j}\sum \frac{2}{r_{ij}} + V_{\mathrm{so}}, \tag{2.30}$$

avec $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$. Ne dépendant que des $\mathbf{r}_i$, les corrections relativistes de masse-vélocité et de Darwin peuvent être intégrées au potentiel central. Par contre, le spin-orbite, en raison de la spécificité de sa contribution, doit être traité à part, car il fait intervenir le moment cinétique total j. Son potentiel est donné par :

$$V_{\mathrm{so}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N) = \sum_i \xi_i(r_i)\vec{\ell}_i \cdot \mathbf{s}_i \tag{2.31}$$

$$= \sum_i \frac{\alpha^2}{4}\frac{1}{r_i}\frac{dV}{dr_i}\left[(\ell(\ell+1) - s(s+1) - \frac{3}{4}\right] \tag{2.32}$$

À cause du terme à deux électrons $\frac{2}{r_{ij}}$, les atomes à plusieurs électrons ne peuvent être résolus analytiquement, à moins de tous les supposer indépendants les uns des autres. Le problème à $N+1$ corps, ou N corps dans un potentiel central en supposant le noyau infiniment lourd et immobile, est irrésoluble par des méthodes analytiques car les variables ne sont pas séparables à cause des r_{ij}. Il faut donc faire des approximations sur le terme de répulsion entre les électrons équation (2.30).

Pour simplifier, on peut soit faire un développement perturbatif du terme à deux électrons à partir d'un Hamiltonien hydrogénique, ce qui est très discutable si les électrons sont nombreux, soit utiliser l'*approximation du champ central* [8, 10, 27]. Il faut aussi prendre en compte l'échange-corrélation [28]. Cette approximation, de type champ moyen, consiste à supposer qu'un électron i « voit » le champ électrostatique du noyau et des $N-1$ électrons. Le potentiel auquel est soumis l'électron i est stationnaire en temps et à symétrie sphérique. Alors il existe quatre nombres quantiques n, ℓ, m_ℓ et m_s tels que l'amplitude de probabilité peut s'écrire comme équation (2.18) [8, 24] :

$$\varphi_{n\ell m_\ell}(r,\theta,\phi) = \frac{1}{r} R_{n,\ell}(r) Y_{\ell m_\ell}(\theta,\phi) \tag{2.33}$$

mais avec un $R_{n\ell}(r)$ au comportement différent. Nous expliquerons la détermination de $R_{n\ell}(r)$ Sec. 2.3.2. Les quatre nombres quantiques caractérisent l'ensemble des états liés de l'atome.

Cette propriété est indépendante de l'électron i, par conséquent dans un atome à symétrie sphérique, chaque électron i considéré comme indépendant se caractérise par un jeu de quatre nombres quantiques $(n_i\ell_i, m_{\ell_i}, m_{s_i})$ pour lesquels la fonction d'onde φ_i est de la même forme que équation (2.18). Dans cette approximation, la fonction d'onde de l'atome $\Psi(\mathbf{r}_1, \cdots, \mathbf{r}_N)$ doit alors s'écrire comme le produit des fonctions d'onde des électrons pris indépendamment les uns des autres. Or, les électrons liés à un atome sont des fermions et sont indiscernables les uns des autres, autrement dit les permuter ne doit pas changer la fonction d'onde. Le principe d'exclusion de Pauli que nous avons évoqué Sec. 1.2.3 a pour conséquence que la fonction d'onde de l'ensemble de ces électrons doit être antisymétrique.

Un produit peut être rendu antisymétrique par la somme alternée de tous les produits permutés des $\varphi_i(\mathbf{r}_j)$:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \cdots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_p (-1)^p \prod_{i=1}^{N} \varphi_i(\mathbf{r}_{p(i)}), \tag{2.34}$$

où p parcourt l'ensemble des permutations des N électrons, et $(-1)^p$ désigne la *signature* de p, c.-à-d. la parité du nombre de transpositions dont p est composée. La formule (2.34) est exactement celle d'un déterminant, aussi la fonction d'onde de l'atome Ψ est un *déterminant de Slater* des fonctions d'onde φ_i :

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \cdots, \mathbf{r}_n) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(\mathbf{r}_1) & \cdots & \varphi_N(\mathbf{r}_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_1(\mathbf{r}_N) & \cdots & \varphi_N(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix}. \tag{2.35}$$

Un déterminant sera nul si deux des φ_i sont identiques. **Deux électrons ne peuvent donc pas être caractérisés par le même jeu de nombres quantiques** (n, ℓ, m_ℓ, m_s)**.**

Sachant que dans le cas hydrogénoïde, l'énergie ne dépend que de n d'après l'équation (2.27) et que $R_{n\ell}(r)$ ne dépend ni de m_ℓ ni de m_s, on en déduit que le comportement d'un électron dépend principalement de son nombre quantique principal n et son nombre quantique orbital ℓ. Une *couche électronique* est l'ensemble des électrons ayant même n, et dont l'énergie est voisine. Seules les couches $n \leq 3$ sont nettement séparées. Une *sous-couche électronique* ou *orbitale* désigne l'ensemble des électrons caractérisés par un même n et un même ℓ. Étant donné que l'énergie ne dépend que de n et ℓ, les états

d'une orbitale sont dégénérés en énergie et les électrons d'une même orbitale sont indiscernables.

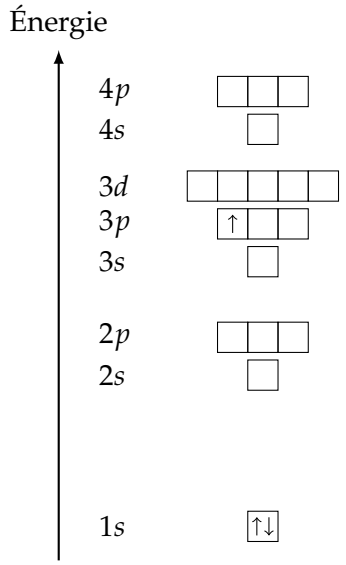


FIGURE 2.1 – Schéma de l'atome en couches : chaque couche se divise en orbitales qui se divisent en cases qui peuvent chacune contenir 2 électrons. L'énergie n'est pas à l'échelle. L'atome est un lithiumoïde avec deux électrons dans l'orbitale $1s$ et un électron avec $(m_\ell = -1, m_s = +1/2)$ dans l'orbitale $3p$.

Le principe de Pauli a pour conséquence que chaque orbitale et chaque couche peuvent accueillir un nombre limité d'électrons. Une orbitale $n\ell$ peut accueillir autant d'électrons que de couples (m_ℓ, m_s) tels que $-\ell \leq m_\ell \leq +\ell$ et $m_s = \pm 1/2$. Ce nombre est égal à $4\ell + 2$ (voir Fig. 2.1). Une couche, nommée d'après la lettre correspondant Tab. 2.2 à son nombre quantique principal n, peut contenir au plus $2n^2$ électrons. Une

n	1	2	3	4	5	6
Lettre	K	L	M	N	O	P

TABLE 2.2 – Noms des couches électroniques.

orbitale s'écrit sous la forme $n\ell$ ou n est le nombre quantique principal, tandis que ℓ est la lettre correspondante Tab. 2.2. Ainsi, l'orbitale caractérisée par les nombres quantiques $n = 3$ et $\ell = 1$ fait partie de la couche M et est écrite $3p$.

2.2 Configurations électroniques

Dans un atome à N électrons, les N électrons sont répartis entre les couches électroniques de l'atome et les orbitales qu'elles contiennent. La donnée du nombre d'électrons de chaque orbitale caractérise une configuration électronique. Mais détailler les configurations électroniques revient à briser la symétrie sphérique et nécessite le retour aux termes d'interaction électronique, au-delà du modèle de champ moyen.

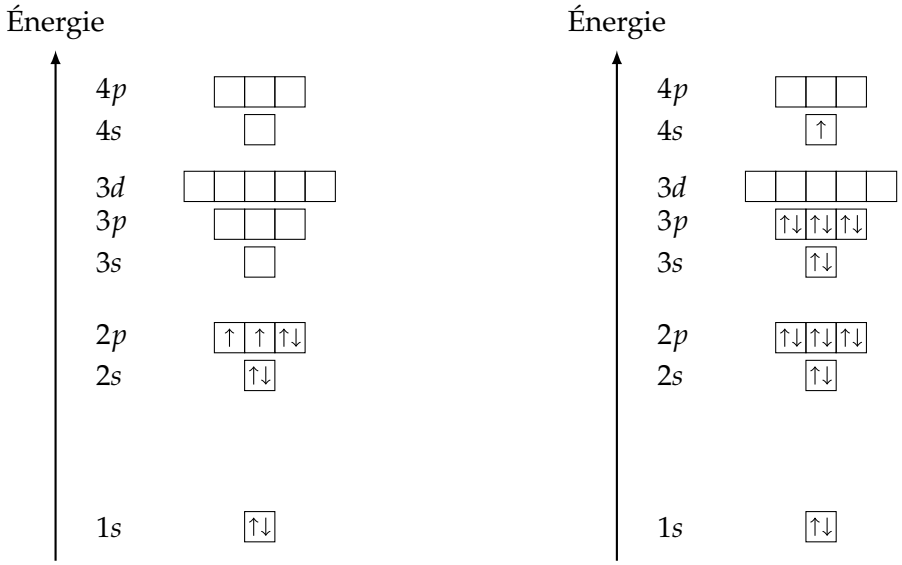


FIGURE 2.2 – Répartition des électrons dans les orbitales des ions Mg^{4+} $1s^2 2s^2 2p^4$ (gauche) et Fe^{7+} [Ar] $4s$ (droite).

2.2.1 Nature et contenu d'une configuration électronique

Dans un atome, chaque orbitale contient un nombre w d'électrons, sa *population*, qui est comprise entre 0 et$4\ell + 2$. Deux électrons d'une même orbitale sont dits *équivalents*. Si la population d'une sous-couche est 0 ou $4\ell + 2$, la sous-couche est dite *fermée* ; dans les autres cas elle est qualifiée d'*ouverte*. Une orbitale avec $4\ell + 2 - w$ électrons a une structure très similaire à une orbitale avec w électrons [8]. C'est ainsi qu'il est parfois plus pertinent de parler de *trous*, c.-à-d.d'électrons manquants dans une orbitale [29, 30] : une orbitale $n\ell$ de population w a $4\ell + 2 - w$ trous.

Une *configuration électronique* est définie par le nombre d'électrons de chaque orbitale non-vide, ainsi que de la charge nucléaire Z, donnée sous la forme de l'élément correspondant.

$$C = Z \ \left(n_k \ell_k^{w_k}\right)_{k=1,q}, \tag{2.36}$$

où q est le nombre de ses orbitales. Lorsque des électrons se lient à un atome, ce sont les orbitales les plus basses qui se remplissent en premier, car les électrons se désexcitent vers les états de plus basse énergie tant que ces dernières ont des trous. Par conséquent, les électrons « commencent » par remplir l'orbitale $1s$; une fois l'orbitale $1s$ pleine, l'orbitale $2s$ se remplit, puis l'orbitale $2p$ et ainsi de suite dans l'ordre des n et ℓ croissants. La *configuration fondamentale* est celle de plus basse énergie. Les autres configurations sont qualifiées d'*excitées*. La plupart des configurations fondamentales présentent au plus une orbitale ouverte. Par exemple, Fig. 2.2, la configuration fondamentale du magnésium ionisé 4 fois (8 électrons) est Mg^{4+} $1s^2 2s^2 2p^4$. Une configuration excitée du fer ionisé 7 fois (19 électrons) est Fe^{7+} $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s$. Une autre notation de l'ionisation Q utilisée dans la thèse est la *notation spectroscopique* : on écrit $Q + 1$ en chiffres romains. Par exemple, le fer ionisé 7 fois s'écrit Fe VIII. Le phosphore neutre s'écrit P I.

L'énumération de tous les remplissages d'une configuration est une tâche fastidieuse pour les éléments de Z modéré à élevé, et elle n'est pas pertinente car la plupart des orbitales énumérées sont pleines. L'habitude est donc de réduire l'énumération en introduisant l'ionisation Q, avec la relation $Q + N = Z$, ou en regroupant l'ensemble

Gaz	Nombre d'électrons	Configuration
Hélium	2	$[\mathrm{He}] = 1s^2$
Néon	10	$[\mathrm{Ne}] = [\mathrm{He}]\, 2s^2 2p^6$
Argon	18	$[\mathrm{Ar}] = [\mathrm{Ne}]\, 3s^2 3p^6$
Krypton	36	$[\mathrm{Kr}] = [\mathrm{Ar}]\, 3d^6 4s^2 4p^6$
Xénon	54	$[\mathrm{Xe}] = [\mathrm{Kr}]\, 4d^6 5s^2 5p^6$

TABLE 2.3 – Les configurations de gaz noble.

des orbitales pleines dans une des configurations de gaz noble Tab. 2.3. Le fer ionisé 7 fois se réécrit $\mathrm{Fe}^{7+}[\mathrm{Ar}]\, 3d$ ou, quand il n'y a pas d'ambiguïté, $\mathrm{Fe}^{7+}3d$.

Le nombre d'états, ou *dégénérescence* g_C que contient une configuration C se calcule aisément. Chaque orbitale $n\ell$ contient $4\ell + 2$ états distincts. L'orbitale $n\ell^w$ contient w électrons indiscernables qui se répartissent dans l'un de ces états, soit une dégénérescence :

$$g_{\ell^w} = C^w_{4\ell+2} = \frac{(4\ell+2)!}{(4\ell+2-w)!\, w!}. \tag{2.37}$$

Les états des différentes orbitales étant indépendants, la configuration $C = \left(n_k \ell_k^{w_k}\right)_{k=1,q}$ a pour dégénérescence le produit des dégénérescences de ses orbitales, à savoir

$$g_C = \prod_{k=1}^{q} C^{w_k}_{4\ell_k+2}. \tag{2.38}$$

Nous verrons Chap. 7 cette quantité est un très bon indicateur de la complexité de la configuration. Une configuration *simple* est une configuration avec une dégénérescence n'excédant pas quelques dizaines. Au-delà de quelques centaines, une configuration peut être qualifiée de *complexe*. Les sous-couches fermées ont toujours une dégénérescence égale à 1, elles n'ont aucun effet sur la dégénérescence de la configuration et sa complexité.

À température modérée (quelques dizaines d'électron-volt) et pour des éléments pas trop lourds, les couches sont bien séparées et les orbitales sont plus proches en énergie des autres orbitales de la même couche que de celles d'autres couches[5]. Les espèces abondantes dans le plasma ont alors une couche n_V qui est partiellement remplie, les couches plus profondes ($n < n_V$) étant pleines et les couches plus hautes ($n > n_V$) étant vides ou presque. La couche partiellement remplie est appelée *couche de valence*, les couches pleines sont appelées *couches de cœur*.

La brisure de symétrie sphérique fait apparaître des niveaux désignés sous le terme de *structure fine* dans la littérature. Cette structure fine associe deux types d'objets :

- les états de moment cinétique quantique, qui déterminent la structure en niveaux de la configuration ;
- les intégrales sur les fonctions d'onde, qui déterminent l'énergie des états.

L'ensemble permet d'obtenir les deux grandeurs qui caractérisent chaque état et chaque niveau : l'énergie et le poids statistique. Déterminer la structure fine d'une configuration revient à diagonaliser le Hamiltonien atomique de l'équation (2.29). Nous allons

[5] C'est vrai pour $n \geq 3$. Pour n plus grand, des interversions peuvent se produire, en particulier pour des atomes de Z moyen à élevé peu chargés.

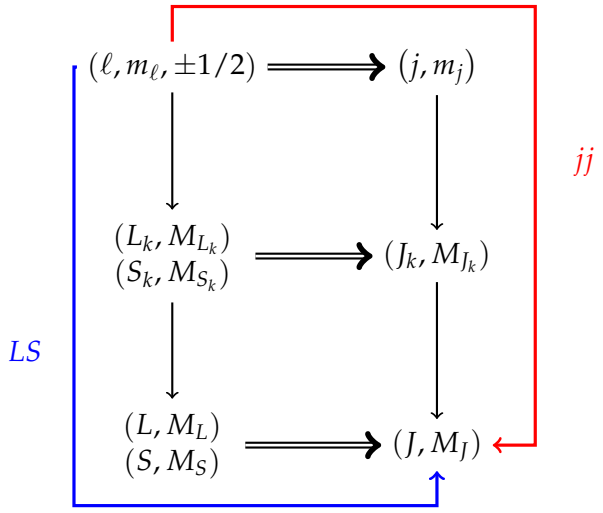


FIGURE 2.3 – Schéma de couplage des moments cinétiques envisageables entre les moments cinétiques de chaque électron (en haut) et les moments cinétiques de la configuration (en bas). La flèche bleue illustre la démarche du couplage LS, la flèche rouge illustre la démarche du couplage jj.

préciser comment les états dans lesquels on peut trouver la configuration se structurent en niveaux, et quelles quantités globales sont impliquées dans le calcul de la structure fine, opération très complexe dont nous ne donnerons que les grandes lignes.

2.2.2 Les états de moment cinétique

Le Hamiltonien atomique (2.29) conserve le moment cinétique total J de l'atome, par conséquent **sa matrice sur la base des états est diagonale par blocs associés à un moment cinétique total J, ou J-blocs.** Les états d'une configuration sont alors de la forme $|\gamma J M_J\rangle$, où γ regroupe l'ensemble des autres paramètres quantiques dont le détail n'est pas pertinent. L'énergie de l'état $|\gamma J M_J\rangle$ ne dépend pas de M_J, par conséquent le *niveau* $|\gamma J\rangle$ est dégénéré et son poids statistique est égal à $2J+1$. Dans l'optique d'une utilisation en thermodynamique, il faut connaître, pour chacun des états γJ, le moment cinétique total J, ou le poids statistique $2J+1$, et l'énergie $E_{\gamma J}$.

L'état de moment cinétique de chaque électron est caractérisé par 4 nombres : ℓ, m_ℓ et s, m_s. Étant donné que $s = 1/2$ et $m_s = \pm 1/2$, les trois nombres ℓ, m_ℓ et $m_s = \pm 1/2$ suffisent pour déterminer l'état d'un électron, et leur moment cinétique total est $\left(j = \ell \pm 1/2, m_j = m_\ell + m_s = m_\ell \pm 1/2\right)$. Les électrons d'une même sous-couche $k = n_k \ell_k$ combinent les nombres quantiques de moment cinétique qui les caractérisent pour donner les moments cinétiques orbital (L_k, M_{L_k}), spin (S_k, M_{S_k}) et total (J_k, M_{J_k}) de l'orbitale. Les trois moments cinétiques des orbitales se couplent pour donner les états de moments cinétiques de la configuration (L, M_L), (S, M_S) et (J, M_J).

Le chemin à gauche puis en bas Fig. 2.3 signifie que l'on couple séparément les moments cinétiques orbital et de spin, et que le moment cinétique total s'obtient par couplage de L et S sur la configuration. Les niveaux γJ sont alors exprimés dans une base $(|\eta L S J M_J\rangle)$ et on parle de *couplage LS*. Alors l'ensemble des $|\eta L S J\rangle$ qui ne diffèrent que par J constituent le *terme spectroscopique* ${}^{2S+1}L$, où $2S+1$ est toujours entier, pair si S est demi-entier, impair sinon, et L écrit avec l'alphabet spectroscopique Tab. 2.1. Appartenant à un terme spectroscopique, chaque niveau se met sous la forme $|\eta^{2S+1}L_J\rangle$, où η regroupe les autres nombres quantiques.

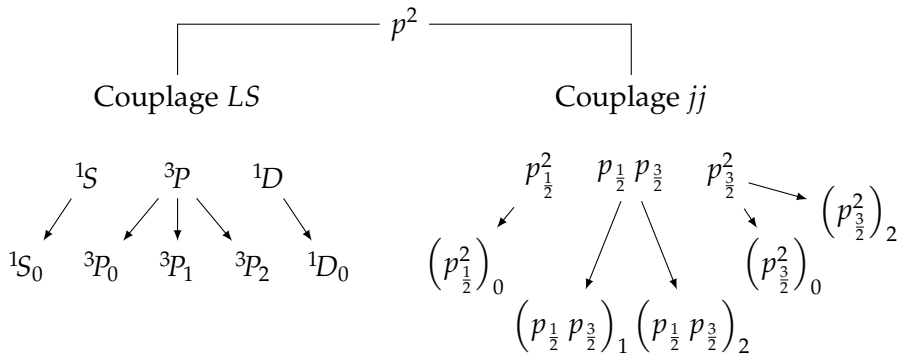


FIGURE 2.4 – Décomposition en niveaux d'énergie de la configuration p^2 suivant les couplages LS (gauche) et jj (droite).

Le chemin en haut puis à droite signifie que l'on couple d'abord ℓ et s pour chaque électron pour obtenir le moment cinétique total j. Si $\ell > 0$, l'orbitale $n\ell^w$ est partagée en deux types d'électrons : ceux pour lesquels $j = \ell + 1/2$ et ceux pour lesquels $j = \ell - 1/2$. Les j sont ensuite couplés de manière à ce qu'on obtienne le moment cinétique total J de la configuration. Les niveaux γJ sont alors exprimés dans une base $|\theta\left((\dots(J_1, J_2), \dots)J_q\right) JM_J\rangle$ et on parle de *couplage jj*.

Lorsque, dans le Hamiltonien (2.29), les effets relativistes, spin-orbite notamment, sont faibles par rapport à la répulsion réciproque des électrons, les moments cinétiques orbitaux sont relativement indépendants des moments cinétiques de spin et le couplage LS est pertinent. En couplage LS pur, l'énergie ne dépend que des termes spectroscopiques ^{2S+1}L de poids statistique $(2S+1)(2L+1)$ À l'inverse, si le spin-orbite est prédominant devant la répulsion mutuelle des électrons, alors le moment cinétique total sépare les orbitales en deux, et le couplage jj est le plus pertinent. Les configurations sont alors divisées en *sous-configurations relativistes* (SCR) définies par $n\ell j^w$, avec $j = \ell \pm 1/2$ et w compris entre 0 et $2j+1$. Si ni la répulsion coulombienne ni le spin-orbite prédominent, le couplage est dit *intermédiaire* et l'expression de chaque niveau dans une base LS ou jj fait souvent apparaître plusieurs composantes non nulles. La décomposition de la configuration p^2 par les couplages LS et jj est illustrée Fig. 2.4.

Un objectif de la thèse a été de déterminer le nombre de niveaux caractérisés par un moment cinétique J donné, que nous réutiliserons énormément Chap. 7, et le nombre de termes spectroscopiques caractérisés par un même L et un même S. La première quantité est notée $Q(J)$ et la seconde quantité $Q(L,S)$. La traduction de l'équation (2.6) de couplage des moments cinétiques permet de relier les deux distributions :

$$Q(J) = \sum_{\Delta(L,S,J)=1} Q(L,S). \tag{2.39}$$

Soit $P(M_L, M_S)$ le nombre d'états dont les moments cinétiques orbital et de spin s'expriment sous la forme $((L, M_L), (S, M_S))$, L et S quelconques, et $P(M_J)$ le nombre d'états dont le moment cinétique total s'exprime sous la forme (J, M_J), J quelconque. Le passage de $P(M_L, M_S)$ à $P(M_J)$ est assuré par la formule suivante :

$$P(M_J) = \sum_{M_L + M_S = M_J} P(M_L, M_S) \tag{2.40}$$

P et Q sont reliés grâce aux formules de Condon et Shortley [22] :

$$Q(J) = P(M_J) - P(M_J + 1) \tag{2.41a}$$

$$\begin{aligned} Q(L,S) = {} & P(M_L, M_S) - P(M_L + 1, M_S) \\ & - P(M_L, M_S + 1) + P(M_L + 1, M_S + 1). \end{aligned} \tag{2.41b}$$

À l'inverse, le passage de Q à P peut se faire par les relations suivantes :

$$P(M_J) = \sum_{J=J_\mathrm{n}}^{J} Q(J) \tag{2.42}$$

$$P(M_L, M_S) = \sum_{S=S_\mathrm{n}}^{S} \sum_{L=0}^{L} Q(L,S). \tag{2.43}$$

Le nombre d'états d'une configuration peut être retrouvé en additionnant le nombre d'états de tous les niveaux, autrement dit, vu (2.38), on a

$$g_C = \sum_{\gamma J} (2J+1) = \sum_{J} (2J+1)\, Q(J) = \sum_{L,S} (2L+1)(2S+1)\, Q(L,S) \tag{2.44}$$

2.2.3 Multiplicité des termes et niveaux de même *J*

La détermination des $Q(L,S)$ et des $Q(J)$ ou, de manière équivalente, des $P(M_L, M_S)$ et $P(M_J)$, doit se faire en deux étapes si la configuration présente plus d'une sous-couche ouverte :

1. des électrons individuels aux sous-couches, avec la contrainte d'antisymétrie posée par le principe de Pauli ;

2. des sous-couches à la configuration entière, sans contrainte sur le couplage des moments cinétiques.

L'indépendance du problème par rapport au nombre quantique principal n autorise l'omission de ce dernier dans l'énumération des termes spectroscopiques. Le principe de Pauli interdit à deux électrons équivalents d'avoir même (m_ℓ, m_s). Soit ℓ^w une orbitale ouverte ou fermée. Les distributions $P(M_L, M_S)$ et $P(M_J)$ peuvent alors être déterminées par énumération des différentes combinaisons des (m_ℓ, m_s) des w électrons. Si les w électrons sont des trous, alors seuls les signes de m_ℓ et m_s changent, ce qui n'a aucun effet sur $P(M_L, M_S)$ et $P(M_J)$ qui sont par définition des distributions paires (au sens de l'analyse). De plus, M_L ne peut prendre que des valeurs entières, tandis que M_S prend uniquement des valeurs demi-entières si w est impair, ou des valeurs entières si w est pair.

Une orbitale fermée ne peut avoir que $M_L = M_S = M_J = 0$ donc $L = S = J = 0$ et son unique terme spectroscopique est ${}^1S$. S'il y a un électron, le seul terme possible est ${}^2L$, d'où deux niveaux ${}^2L_{L-1/2}$ et ${}^2L_{L+1/2}$. S'il y a deux électrons, le principe de Pauli équivaut à ne sélectionner, sur le produit tensoriel $|\ell\, 1/2\rangle \otimes |\ell\, 1/2\rangle$, que les termes pour lesquels $L + S$ est pair [8, 22], d'où une alternance de termes singulets ${}^1L$ pour L pair et de termes triplets ${}^3L$ pour L impair. Il existe des formules encore relativement simples pour calculer les termes spectroscopiques pour trois électrons [31], mais au-delà il faut utiliser une méthode générale. La méthode traditionnelle pour déterminer les termes

spectroscopiques passe par une énumération de tous les sous-ensembles à w éléments de l'ensemble des $4\ell+2$ états (m_ℓ, m_s) dans lesquels peut se trouver au plus un électron de l'orbitale. Ce calcul fastidieux n'est plus nécessaire car des tables donnant les termes spectroscopiques ont été construites depuis longtemps [8]. De plus, bien que très rapide par rapport à d'autres étapes du calcul de la structure atomique, la complexité de cette étape est combinatoire, car $C^w_{4\ell+2}$ croît comme un polynôme de degré w si w est fixé et exponentiellement pour les sous-souches $\ell^{2\ell+1}$:

$$C^{2\ell+1}_{4\ell+2} \sim \frac{4^{2\ell+1}}{\sqrt{(2\ell+1)\,\pi}}. \tag{2.45}$$

Une méthode par récurrence [32] permet de déterminer les termes spectroscopiques de n'importe quelle orbitale en temps polynomial de degré 4, mais avec un espace mémoire polynomial de degré 4 en ℓ, à comparer à l'espace mémoire exigé par l'énumération brute, de degré 2 en ℓ.

La seconde étape consiste en un couplage des termes spectroscopiques ou des niveaux de deux sous-couches, autrement dit un produit tensoriel des espaces d'états de couple de moments cinétiques (L, S) ou de moment cinétique J. Entre deux orbitales différentes, le principe de Pauli ne s'applique pas et tous les termes issus du produit tensoriel sont permis. On suppose connues les distributions $P_i(M_L, M_S)$, $P_i(M_J)$, $Q_i(L, S)$ et $Q_i(J)$ pour les deux sous-couches ($i = 1, 2$), et on veut déterminer les distributions de termes $Q_{12}(L, S)$ et $Q_{12}(J)$ Le passage des $P_i(M_J)$ et $Q_i(J)$ à $P_{12}(M_J)$ et $Q_{12}(J)$ est similaire à celui des équations (2.40) et (2.41) :

$$P_{12}(M_J) = \sum_{M_1+M_2=M_J} P_1(M_1)P_2(M_2) \tag{2.46a}$$

$$Q_{12}(J) = \sum_{\Delta(J_1,J_2,J)=1} Q_1(J_1)Q_2(J_2). \tag{2.46b}$$

Le passage des $P_i(M_L, M_S)$ et $Q_i(L, S)$ à $P_{12}(M_L, M_S)$ et $Q_{12}(L, S)$ est nettement plus fastidieux, mais nécessaire pour accéder à la distribution $Q(L, S)$ de l'ensemble de la configuration :

$$P_{12}(M_L, M_S) = \sum_{\substack{M_{L1}+M_{L2}=M_L \\ M_{S1}+M_{S2}=M_S}} \sum P_1(M_{L1}, M_{S1})\, P_2(M_{L2}, M_{S2}) \tag{2.47a}$$

$$Q_{12}(L, S) = \sum_{\substack{\Delta(L_1,L_2,L)=1 \\ \Delta(S_1,S_2,S)=1}} \sum Q_1(L_1, S_1)\, Q_2(L_2, S_2). \tag{2.47b}$$

Les différents cheminements possibles pour obtenir $Q(L, S)$ et $Q(J)$ sont résumés Fig. 2.5.

Dans un repère (L, S), où L est entier et S entier ou demi-entier selon que le nombre d'électrons est respectivement pair ou impair, le domaine des points (L, S) qui vérifient la double inégalité (2.5) est l'intersection de deux rectangles :

- le rectangle délimité par $L = 0$ et $L = L_\mathrm{x}$, $S = S_\mathrm{n}$ et $S = S_\mathrm{x}$[6] ;
- le rectangle délimité par les droites $L + S \leq J$, $L \leq J + S$, $S \leq J + L$, ouvert vers les L et S grands.

[6] L'indice droit n dénote une valeur minimale ; l'indice droit x une valeur maximale.

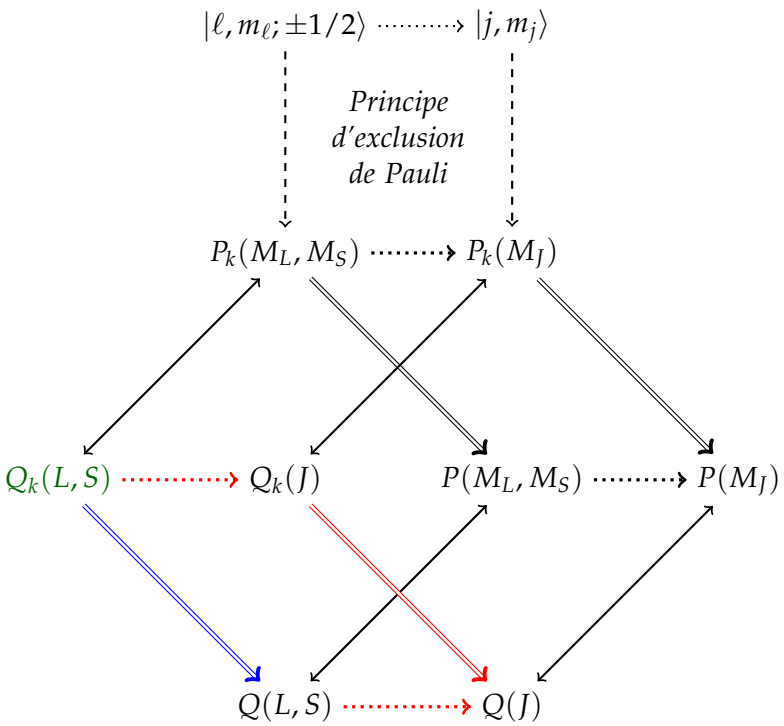


FIGURE 2.5 – Représentation des différents chemins de couplage permettant d'arriver vers $Q(L,S)$ et $Q(J)$ via les différentes distributions intermédiaires. Les flèches en pointillés représentent le passage, irréversible, d'une description par rapport à (L,S) à une description par rapport à J. Les flèches doubles indiquent le passage d'une description en états à une description en termes ou niveaux. Les flèches larges indiquent le couplage entre plusieurs orbitales. L'ensemble des flèches indiquent le sens dans lequel on peut évoluer. Les flèches rouges sont les opérations pour lesquelles la J-moissonneuse peut être utilisée ; la flèche en bleu indique l'opération fastidieuse équation (2.47) ; en vert est indiqué ce qui est tabulé Réf. [8].

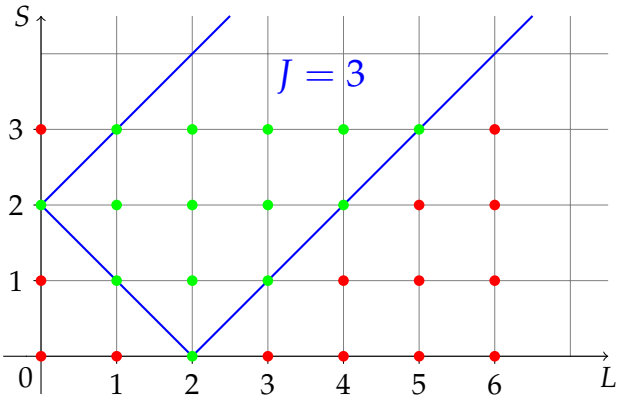


FIGURE 2.6 – Illustration de la zone (points en vert dans le rectangle bleu) dans laquelle la relation du triangle est satisfaite pour $(L_x = 6, S_x = 3)$ et $J = 2$.

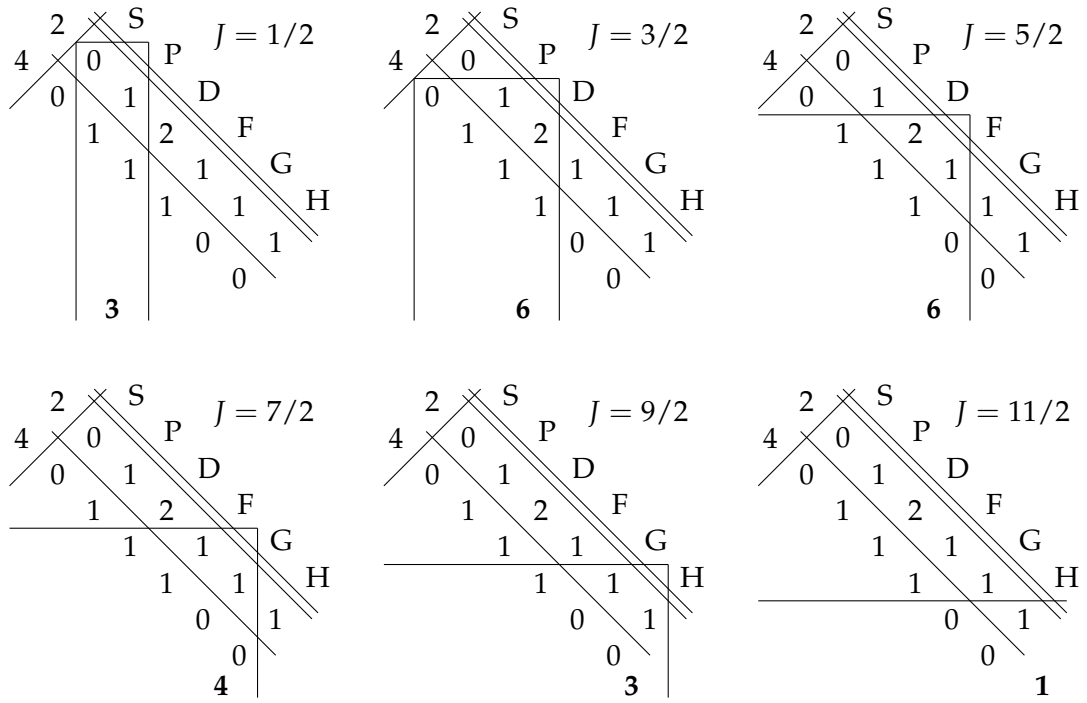


TABLE 2.4 – Exemple de J-moissonneuse sur d^3, passage de $Q(L,S)$ à $Q(J)$.

En faisant un huitième de tour, on se ramène à délimiter la zone où sommer les termes permis par le moment J à un rectangle droit. De cette manière de voir le couplage d'un ensemble de termes spectroscopiques, on en déduit une méthode praticable à la main, même pour des configurations complexes, que nous appelons « J-moissonneuse ». L'idée est d'écrire la multiplicité des termes spectroscopiques dans un tableau tourné d'un huitième de cercle ($\frac{\pi}{4}$ radians). Avec $L = 0$ et $S = 0$ au sommet (rotation de $-\frac{3\pi}{4}$), l'axe des L pointe en bas à droite et l'axe des S en bas vers la gauche. Si $S_\mathrm{n} = 1/2$ (nombre d'électrons impair), alors on trace la droite $S = 0$ et on place le nombre de termes doublets ${}^2L$ à l'aplomb des L correspondants. On trace ensuite la droite $S = 1$ puis on réitère avec les termes quadruplets, et ainsi de suite jusqu'à S_x. Le tracé de ces droites permet de poser des repères et de tenir compte de la parité du nombre d'électrons. Si $S_\mathrm{n} = 0$, alors le nombre d'électrons est pair et le nombre de termes singulets ${}^1L$ est placé à l'aplomb des L correspondants. La droite $S = 1/2$ tracée, on réitère ces deux opérations avec les termes triplets, et ainsi de suite. La « moisson » des J commence avec $J_\mathrm{n} = S_\mathrm{n}$, jusqu'à $J_\mathrm{x} \leq L_\mathrm{x} + S_\mathrm{x}$. Le domaine dans lequel sommer les niveaux J est délimité Fig. 2.6 par les droites $S - L = J$ à gauche, $L - S = J$ à droite et $L + S = J$ en haut. $Q(J)$ est alors la somme des $Q(L,S)$ dans ce domaine.

La J-moissonneuse peut être utilisée non seulement pour le passage de $Q_k(L,S)$ à $Q_k(J)$, mais aussi pour le passage des $Q_k(J)$ à $Q(J)$. La liste de niveaux J issue du couplage de deux orbitales k et l peut être obtenue en appliquant la moissonneuse au tableau des produits $Q_k(J)\,Q_l(J)$ Tab. 2.4.

La liste des termes spectroscopiques est ensuite utilisée pour diagonaliser le Hamiltonien atomique dans la base formée par ces termes. Quand le couplage LS est fort, la matrice hamiltonienne a des éléments non-diagonaux très faibles par rapport aux éléments diagonaux. En elle-même, la distribution $Q(J)$ est très utile pour calculer des quantités globales sur la configuration et les transitions en partant. Nous verrons différents exemples Chap. 3 et 7.

2.3 Énergie, intégrales radiales et fonctions d'onde des configurations électroniques

Maintenant que nous avons vu comment se décompose une configuration, le calcul de l'énergie moyenne et des fonctions d'onde permet de connaître la structure atomique d'un système à plusieurs électrons.

2.3.1 Énergie et intégrales de structure atomique

Sans forcément connaître les composantes radiales $R_{n\ell}(r)$, il est déjà possible de déterminer quelles intégrales radiales sont utiles et d'expliciter la méthode de calcul de l'énergie moyenne d'une configuration, ainsi que l'énergie de liaison de chaque électron.

L'énergie moyenne d'une configuration C s'écrit sous la forme d'une moyenne de l'énergie des niveaux pondérés par leur poids statistique [8] :

$$E_{\text{av}} = \frac{1}{g_C} \sum_{\gamma J} (2J+1)\, E_{\gamma J}, \tag{2.48}$$

car g_C telle que définie par l'équation (2.38) est le nombre d'états de la configuration. En reprenant l'expression du Hamiltonien atomique (2.29), l'énergie moyenne E_C, opposé de l'énergie de liaison moyenne totale de l'atome, se décompose en plusieurs termes, eux-mêmes sommes sur les électrons ou les paires d'électrons :

$$\begin{aligned}
E_C &= \sum_i \langle i| -\nabla^2 |i\rangle + \sum_i \left\langle i \left| -\frac{2Z}{r_1} \right| i \right\rangle \\
&\quad + \sum_{i>j}\sum \left(\left\langle ij \left| \frac{2}{r_{12}} \right| ij \right\rangle - \left\langle ij \left| \frac{2}{r_{12}} \right| ji \right\rangle \right) \\
&= \sum_i K_i + \sum_i U_i + \sum_{i\neq j}\sum E_{ij} \\
&= \sum_i \left(K_i + U_i + \frac{1}{2} \sum_{j\neq i} E_{ij} \right) \\
&= \sum_i \left(E_i - \frac{1}{2} \sum_{j\neq i} E_{ij} \right).
\end{aligned}$$

K_i est l'énergie cinétique de l'électron i, U_i l'énergie de son interaction avec le noyau et E_{ij} l'énergie d'interaction entre l'électron i et l'électron j. L'énergie de liaison de l'électron, ou plutôt son opposé, est :

$$E_i = K_i + U_i + \sum_{j\neq i} E_{ij}. \tag{2.49}$$

Le calcul de ces différentes énergies fait intervenir la notion d'*intégrale radiale*, une intégrale de la forme

$$\langle i|\mathcal{O}|j\rangle = \int_0^\infty R_i^*(r)\mathcal{O}R_j(r)\,\mathrm{d}r, \tag{2.50}$$

où $\mathcal{O}$ est un opérateur différentiel (observable) et $R_i = R_{n_i \ell_i}$. La contribution de l'énergie cinétique et du potentiel nucléaire étant des opérateurs à un électron, elles s'expriment sous forme d'intégrales radiales élémentaires :

$$K_i = \langle i| - \nabla^2 |i\rangle = \int_0^\infty R_i^*(r) \left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{\ell_i\,(\ell_i+1)}{r^2} \right] R_i(r)\,\mathrm{d}r \tag{2.51}$$

pour l'énergie cinétique, et

$$U_i = \left\langle i \left| -\frac{2Z}{r_i} \right| i \right\rangle = \int_0^\infty -\frac{2Z}{r_1} \left| R_i(r) \right|^2 \mathrm{d}r \tag{2.52}$$

pour l'énergie potentielle nucléaire.

Pour l'opérateur à deux électrons, la présence de r_{12} complique la tâche, car le terme $\frac{2}{r_{12}}$ doit être développé en fonction de r_1 de r_2 et du cosinus de l'angle ω que les deux rayons-vecteurs forment, à l'aide du théorème d'Al-Kashi et du développement en harmoniques sphériques [8]. L'élément de matrice $\left\langle ij \left| \frac{2}{r_{12}} \right| tu \right\rangle$ entre deux produits de fonctions à deux électrons s'écrit alors en fonction des *intégrales coulombiennes*[7]

$$\begin{aligned} R^k(ij,tu) &= \iint_0^\infty \frac{2r_<^k}{r_>^{k+1}} R_i^*(r_1) R_j^*(r_2) R_t(r_1) R_u(r_2)\,\mathrm{d}r_1\,\mathrm{d}r_2 \\ &= \int_0^\infty \left[\frac{2}{r_2^{k+1}} \int_0^{r_2} r_1^k R_i^* R_t\,\mathrm{d}r_1 + r_2^k \int_{r_2}^\infty \frac{2}{r_1^{k+1}} R_i^* R_t\,\mathrm{d}r_1 \right] R_j^* R_u\,\mathrm{d}r_2 \end{aligned} \tag{2.53}$$

où $r_> = \max(r_1, r_2)$ et $r_< = \min(r_1, r_2)$, et d'intégrales de produits d'harmoniques sphériques normalisées qui sont détaillés aux chapitres 5 et 6 de [8]. Les opérateurs à deux électrons portent deux contributions :

- la contribution directe $\left\langle ij \left| \frac{2}{r_{12}} \right| ij \right\rangle$;
- la contribution d'échange $-\left\langle ij \left| \frac{2}{r_{12}} \right| ji \right\rangle$.

Ces deux contributions font intervenir les *intégrales de Slater*, qui sont de deux types [8] :

- les intégrales directes

$$F^k(ij) = R^k(ij,ij) = \iint_0^\infty \frac{2r_<^k}{r_>^{k+1}} \left| R_i(r_1) \right|^2 \left| R_j(r_2) \right|^2 \mathrm{d}r_1\,\mathrm{d}r_2; \tag{2.54}$$

- les intégrales d'échange

$$G^k(ij) = R^k(ij,ji) = \iint_0^\infty \frac{2r_<^k}{r_>^{k+1}} R_i^*(r_1) R_j^*(r_2) R_j(r_1) R_i(r_2)\,\mathrm{d}r_1\,\mathrm{d}r_2. \tag{2.55}$$

Les coefficients multiplicateurs des $F^k(ij)$ et des $G^k(ij)$ sont nuls, à moins que la relation du triangle $\Delta(\ell_i, \ell_j, k) = 1$ soit vérifiée et que $\ell_i + \ell_j + k$ soit pair. Les seules intégrales de Slater qu'il soit nécessaire de connaître sont donc

[7] Comme dans Réf. [8] et beaucoup d'autres ouvrages, R^* est le conjugué de R.

- $F^k(ij), \quad k = 0, 2, \ldots, \min(2\ell_i, 2\ell_j)$;
  et
- $G^k(ij), \quad k = |\ell_i - \ell_j|, |\ell_i - \ell_j| + 2, \ldots, \ell_i + \ell_j$.

On obtient alors l'expression des E_{ij} énergie d'interaction entre deux électrons :

$$\begin{aligned} E_{ij} &= F^0(ij) - \frac{1}{2}\sum_k \begin{pmatrix} \ell_i & k & \ell_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 G^k(ij) && \text{si les électrons ne sont pas équivalents ;} \\ E_{ii} &= F^0(ii) - \frac{2\ell_i + 1}{4\ell_i + 1}\sum_{k>0} \begin{pmatrix} \ell_i & k & \ell_i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 F^k(ii) && \text{si les électrons sont équivalents.} \end{aligned} \tag{2.56}$$

En première approximation, l'énergie d'ionisation d'un électron est égale à son énergie de liaison E_i. L'intégrale de spin-orbite se déduit de la formule (2.24) :

$$\xi_i = \xi_{n_i\ell_i} = \frac{\alpha^2 a_0^2}{2} \int_0^\infty \frac{1}{r}\left(\frac{\mathrm{d}V_i}{\mathrm{d}r}\right) |R_i(r)|^2 \, \mathrm{d}r_i \tag{2.57}$$

où $V_i(r)$ est le potentiel de champ central produit par la moyenne des interactions avec les autres électrons et le noyau.

2.3.2 Calcul autocohérent

Nous avons écrit la composante radiale $R_{n\ell}(r)$ pour un atome hydrogénoïde équation (2.21). Dans le cas d'une configuration à plusieurs électrons, la répulsion entre électrons peut être traitée de manière approchée à l'aide de l'approximation du champ moyen. Le calcul de $R_{n\ell}(r)$ peut se faire selon plusieurs méthodes.

Une méthode connue, utilisée dans HULLAC [33], FAC [34] et d'autres codes de structure atomique est celle du potentiel paramétrique [35, 36, 37, 38, 39]. Le potentiel paramétrique est une combinaison linéaire de fonctions à l'expression simple. L'utilisation du principe variationnel permet de déterminer les paramètres. Une fois tous les paramètres de la combinaison linéaire obtenus, le potentiel est déterminé. Même si le potentiel paramétrique est d'une précision acceptable par rapport à ce qui serait obtenu par la méthode de Thomas-Fermi ou un calcul à l'aide d'un modèle hydrogénique écranté [9, 40, 41], la solution obtenue n'est qu'une projection de la solution exacte sur l'espace accessible avec la base de fonctions paramétrées.

La méthode de construction du potentiel atomique et des fonctions d'onde que nous avons retenue est celle utilisée dans les codes de COWAN [8] et SCO [42, 43]. Il s'agit du *potentiel autocohérent*, qui repose sur la méthode de Hartree-Fock, avec utilisation de la théorie de la fonctionnelle de densité et de l'approximation de la densité locale, rappelées plus tard par les acronymes respectifs DFT et LDA [8, 42]. La donnée initiale est celle d'une configuration C, caractérisée par sa charge nucléaire et le remplissage de ses orbitales $\left(n_i\ell_i^{w_i}\right)_{i=1,q}$. Les équations de Hartree-Fock sont le conséquence de l'application du principe variationnel à un lagrangien où les variables conjuguées des w_i sont les ϵ_i que l'on identifie aux énergies de liaison des électrons E_i. Il y a autant d'équations de Hartree-Fock à résoudre que d'orbitales. Chaque équation est une équation différentielle sur une des R_i, et les termes de l'équation différentielle dépendent d'intégrales sur les autres R_j, d'où le qualificatif d'équation intégro-différentielle.

La méthode de DFT-LDA la plus simple se base sur l'approximation du potentiel local, qui donne une équation homogène pour chaque électron – ou plutôt chaque or-

bitale – :

$$\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\frac{\ell_i\left(\ell_i+1\right)}{r^2}+V_i(r)\right]R_i(r)=\epsilon_i R_i(r). \tag{2.58}$$

Suite à la présence de corrections relativistes, le potentiel local de champ central $V_i(r)$ est différent d'une orbitale à l'autre [8]. Il peut être est défini, dans le cas le plus général, en fonction de tous les $R_j(r)$. Cette définition est cependant directe. La procédure de calcul autocohérent est une procédure numérique itérative, et chaque itération comprend trois étapes.

1. On suppose un ensemble d'*ansätze*[8] $\left(R_i^{\mathrm{e}}\right)_{i=1,q}$. Ces ansätze peuvent provenir d'itérations précédentes ou d'expressions simples (ex. fonctions hydrogénoïdes).
2. Pour tout i, le potentiel $V_i(r)$ est calculé directement.
3. L'équation (2.58) est alors résolue, ce qui donne un nouvel ensemble de $R_i^{\mathrm{s}}(r)$.
4. Pour un schéma numérique stable, les nouveaux ansätze sont souvent combinés aux anciens, par une formule du type $R_i = cR_i^{\mathrm{s}} + (1-c)R_i^{\mathrm{e}}$, avec c généralement proche de 0,5, mais qui peut varier librement entre 0 et 1.

Le choix de la forme de V_i permet de retomber sur les schémas classiques de potentiel autocohérent. SCO [43, 42] et le code de COWAN [8] font usage de la méthode de Hartree-Fock-Slater, dans laquelle le potentiel de l'orbitale i s'exprime en Rydbergs :

$$V_i(r)=-\frac{2Z}{r}+V_c(r)-\frac{3}{2}\left(\frac{24\rho(r)}{\pi}\right)^{1/3}\ \mathrm{Ry}. \tag{2.59}$$

ρ est la densité totale moyennée sur la sphère des électrons :

$$\rho(r)=\sum_{i=1}^{q}w_i\rho_i(r)=\frac{1}{4\pi r^2}\sum_{i=1}^{q}w_iR_i^2(r) \tag{2.60}$$

et

$$V_c(r)=\sum_{i=1}^{q}w_i\int_0^\infty\frac{2}{r_>}R_i^2(r_2)\,\mathrm{d}r_2-\frac{\alpha^2a_0^2}{r}\frac{\mathrm{d}V_i}{\mathrm{d}r}-\frac{(\epsilon_i-V_i)}{2mc^2} \tag{2.61}$$

l'énergie potentielle classique d'un électron-test dans le champ sphérique moyen engendré par tous les électrons de l'atome. Le potentiel est autocohérent, et il dépend de toutes les composantes radiales $R_i(r)$.

2.3.3 Périodicité et comportement en fonction de Z

Nous avons vu que les configurations avaient une énergie moyenne qui dépend du remplissage des orbitales. Les couches et les orbitales qu'elles contiennent se remplissent dans l'ordre des n croissants, puis des ℓ croissants. Cette règle de remplissage est rigoureuse à ionisation élevée, ou plutôt lorsqu'il y a peu d'électrons dans l'atome, mais pour les atomes neutres ou peu ionisés il y a, à partir de l'orbitale $3d$, des interversions et des compétitions de couches. Le remplissage des atomes neutres est bien approché par la règle d'aufbau ou règle de Klechkowski [44], qui stipule que le remplissage se fait à $n+\ell$ croissant, puis à n croissant. Ainsi, l'ordre de remplissage des

[8] Mot allemand pouvant se traduire par fonction d'essai.

atomes neutres et, dans une moindre mesure, de ceux qui sont faiblement ionisés, est identique jusqu'à $3p$ (Argon), puis se fait dans l'ordre : $4s$, $3d$ et $4p$ (Krypton), $5s$, $4d$ et $5p$ (Xénon), $6s$, $4f$, $5d$ (compétition entre les deux orbitales) et $6p$ (Radon), $7s$, $5f$, $6d$...

Si on regarde le potentiel moyen des électrons et du noyau $V(r)$ pour un atome de charge Z ayant $N = Z - Q$ électrons, on peut deviner le comportement près et loin du noyau. Près du noyau, aucun électron ne fait écran à la charge nucléaire, donc $V(r) \sim -\frac{Z}{r}$. Loin du noyau, et à l'extérieur de la zone de plus grande probabilité des électrons périphériques, tous les électrons font écran à la charge nucléaire, et $V(r) \sim -\frac{Q}{r}$. La conséquence de ces deux comportements est que les atomes avec beaucoup d'électrons ont un puits de potentiel très profond, et les fonctions d'onde à moment cinétique élevé n'ont pas ou peu de nœuds. Elles sont de fait très sensibles à leur position par rapport au « bord du puits », dans lequel, lorsque l'atome est neutre, elles « tombent » brutalement lorsque Z augmente. Ce phénomène est très bien détaillé Réf. [8].

Une propriété remarquable de l'intégrale de spin-orbite ξ_i est qu'elle croît beaucoup plus rapidement avec Z que les intégrales coulombiennes. Dans une orbitale $n\ell$, les électrons sont soumis à un champ central dont la charge nucléaire effective est $Z_{n\ell} = Z - S$, où S est une constante d'écran pratiquement indépendante de Z. De l'expression hydrogénique (2.24) et sachant que $\langle r^{-1} \rangle \propto Z$ (moyenne de r pondérée par $R_{n\ell}(r)$), on en déduit que

$$\xi_{n\ell} \propto (Z_{n\ell})^4 \tag{2.62a}$$

$$F^k \propto Z_{n\ell} \tag{2.62b}$$

$$G^k \propto Z_{n\ell}, \tag{2.62c}$$

de sorte que les configurations d'atomes à Z élevé sont proches du couplage jj pur si une orbitale profonde avec $\ell \geq 1$ est ouverte. De manière générale, l'effet de spin-orbite est élevé dans le voisinage immédiat de la charge nucléaire, et faible ailleurs. Les orbitales touchées par la séparation spin-orbite sont celles dont la composante radiale $R_{n\ell}(r)$ est significative près du noyau. Les orbitales $2p$ sont les premières à être séparées par se spin-orbite, et les autres orbitales p, dont la composante radiale est significative près du noyau, sont concernées par la séparation spin-orbite lorsque Z devient plus élevé. Les orbitales de nombre quantique secondaire plus élevé ont une composante radiale bien moins significative à proximité du noyau, et ne sont séparées par le spin-orbite que si Z est élevé.



FAISCEAUX DE TRANSITION ET OPACITÉ

Nous avons expliqué Chap. 2 en quoi consiste une configuration électronique et comment elle peut être détaillée. Maintenant, nous envisageons les transitions entre configurations et entre niveaux, ainsi que leur contribution à l'opacité. Le but est d'aboutir à un premier modèle d'opacité lié-lié détaillé, dont les résultats sont déjà utilisables dans l'interprétation d'expériences.

3.1 Faisceaux de transition

Toute espèce X présente dans le plasma contribue à l'opacité lié-lié par les faisceaux de transition $X \to X'$ qui en partent. Nous posons ici les bases du calcul de faisceaux de transition détaillés.

3.1.1 Généralités sur les transitions dipolaires électriques

Les transitions peuvent être abordées de deux points de vue : soit de celui de l'espèce de départ qui peut subir des excitations variées, soit de celui du processus, qui opère sur un ensemble d'espèces de départ.

Nous nous intéressons aux *transitions monoélectroniques dipolaires électriques*. Monoélectronique signifie qu'un seul électron change d'état, passant des nombres quantiques $|n\ell, m_\ell m_s\rangle$ à l'état $|n'\ell', m'_\ell m'_s\rangle$. Les autres nombres quantiques des électrons sont inchangés. L'ensemble des transitions ayant en commun l'orbitale de départ et celle d'arrivée est appelé *saut monoélectronique*. L'*approximation dipolaire électrique* (E1) part du principe que, quand la longueur d'onde d'un rayonnement électromagnétique est assez grande, le champ électromagnétique est à tout instant uniforme sur l'ensemble de l'atome. Les dimensions d'un atome – plus exactement du domaine de l'espace dans lequel les fonctions d'onde des orbitales non vides ne sont pas négligeables –, est de l'ordre de l'Ångström c.-à-d. 10^{-8} cm ou un peu moins de deux fois le rayon de Bohr a_0. L'approximation dipolaire électrique est donc valable dès lors que la longueur d'onde du rayonnement dépasse quelques Ångströms. Ce qui limite l'approximation dipolaire électrique à des énergies de photons, absorbés ou émis, de l'ordre de quelques keV.

Toutes les transitions envisagées pendant la thèse sont qualifiées de dipolaires électriques, et cette qualification est désormais sous-entendue.

Nous sommes pour l'instant dans le cas très général d'une espèce X, sans avoir plus de précision sur sa nature : elle peut être une configuration ou un niveau. En couplage LS pur, les termes spectroscopiques pourraient faire partie des espèces considérées, toutefois le couplage intermédiaire est le seul étudié dans la thèse. Dans une approche détaillée du calcul d'opacité, les deux espèces à considérer sont les configurations, et les niveaux qui les composent. Le détail en états prenant en compte les nombres M_J est nécessaire pour le formalisme, toutefois les champs magnétiques dans les plasmas hors d'un faisceau laser concentré restent trop faibles pour séparer les états d'un même niveau par effet Zeeman [22, 45, 46, 47], et le calcul des transitions d'état à état revient à appliquer le théorème de Wigner-Eckart [8] aux transitions de niveau à niveau.

Les transitions de niveau à niveau, ou, en couplage LS, de terme à terme, sont appelées *raies spectrales*. La raie spectrale du niveau γJ au niveau $\gamma' J'$ s'écrit $\gamma J \to \gamma' J'$. Le *faisceau de transition* de la configuration C à la configuration C', écrit $C \to C'$, est constitué de l'ensemble des raies spectrales $\gamma J \to \gamma' J'$ telles que $\gamma J \in C$ et $\gamma' J' \in C'$, comme schématisé Fig. 3.1. Mais un faisceau de transition peut aussi être vu comme l'application d'un saut monoélectronique $n\ell \to n'\ell'$ à une configuration de départ. Cette définition sera pertinente à partir de Chap. 4.

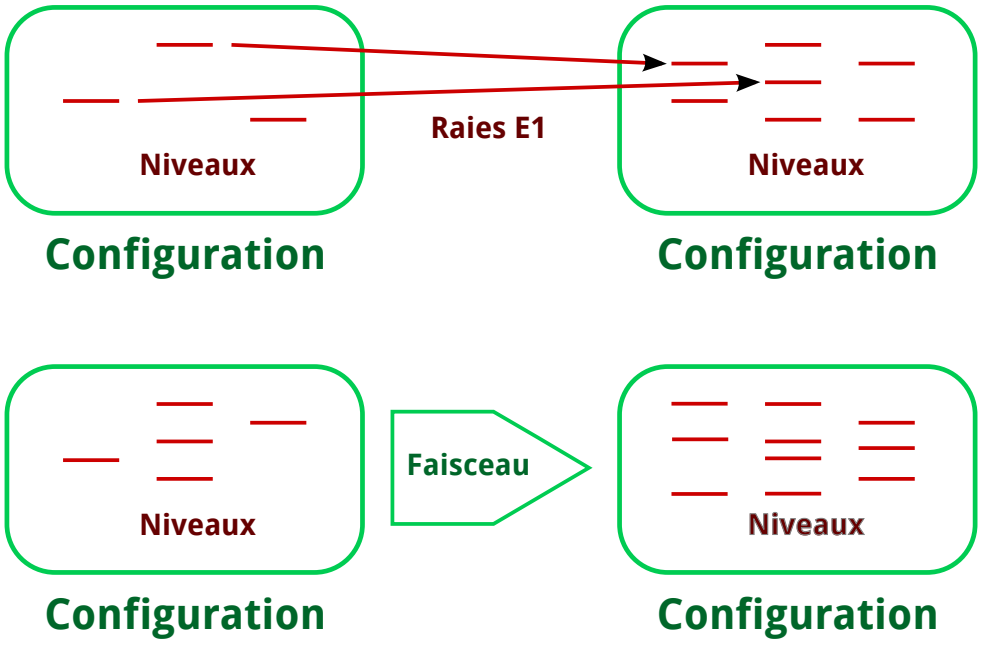


FIGURE 3.1 – Schéma des concepts de transition lié-lié utilisés dans ce chapitre.

Dans un atome, l'opérateur moment dipolaire s'écrit $\mathbf{D} = e\,\mathbf{r}$. La transition $\gamma J \to \gamma' J'$ est autorisée si, et seulement si, l'élément de la matrice des transitions dipolaires électriques $\langle \gamma J | \mathbf{r} | \gamma' J' \rangle$ est non nul, ce qui revient aux *règles de sélection* suivantes [8, 22] :

- Le nombre quantique secondaire varie de 1 :

$$\Delta\ell = \pm 1; \tag{3.1}$$

- et $\Delta(J, 1, J') = 1$ (relation du triangle), autrement dit

$$\Delta J = 0, \pm 1, \quad 0 \not\to 0. \tag{3.2}$$

La *force de raie* est le carré du module de l'élément de matrice réduit, dont le calcul non complètement analytique est détaillé Réf. [8] :

$$\mathcal{S} = \left|\langle \gamma J || \mathcal{R}^{(1)} || \gamma' J' \rangle\right|^2. \tag{3.3}$$

Entre deux configurations, des transitions dipolaires électriques sont possibles si, et seulement si, en appelant α et β les orbitales du saut monoélectronique correspondant, $\ell_\beta = \ell_\alpha \pm 1$. Le nombre de raies dipolaires électriques en couplage intermédiaire entre les deux configurations peut se calculer assez facilement à l'aide des notations de Sec. 2.2.2 :

$$\mathcal{N}_{C\to C'} = \sum_{\Delta(J,1,J')=1} Q(J)\, Q(J'). \tag{3.4}$$

En couplage LS, les règles de sélection sont plus sévères, car aux contraintes ci-dessus se rajoute :

$$\Delta S = 0, \tag{3.5}$$

d'où une contrainte sur le moment cinétique orbital :

$$\Delta L = 0, \pm 1, \quad 0 \not\to 0. \tag{3.6}$$

Là aussi, on peut utiliser la distribution des termes $Q(L, S)$ pour déterminer l'ensemble des raies en couplage LS :

$$\mathcal{N}_{LS} = \sum_{S,\Delta(L,1,L')=1} \sum Q(L, S)\, Q(L', S) \tag{3.7}$$

En couplage jj, une règle de sélection sur le moment cinétique total j de chaque électron s'ajoute à celles du couplage intermédiaire :

$$\Delta j = 0, \pm 1. \tag{3.8}$$

3.1.2 Raies dipolaires électriques, forces et coefficients d'Einstein

Plusieurs grandeurs sont utiles dans l'expression des forces de raies et des coefficients d'absorption, et permettent de relier les transitions atomiques à l'opacité. La force de raie dipolaire électrique est directement reliée à l'intégrale sur les fonctions d'onde, et c'est à partir de cette force que toutes les quantités peuvent être exprimées, en particulier les coefficients d'Einstein et la force d'oscillateur.

Soient deux espèces X et Y entre lesquelles peut se produire une transition dipolaire électrique. Tous les états de Y sont supposés d'énergie supérieure aux états de X. La probabilité de transition par émission spontanée entre Y et X pendant une unité de

temps est proportionnelle au nombre d'entités Y :

$$\frac{\mathrm{d}n_Y}{\mathrm{d}t} = -A_{YX} n_Y(t). \tag{3.9}$$

A_{XY}, est le *coefficient d'Einstein en émission spontanée*, et l'intensité de la raie spectrale correspondant à l'émission s'écrit

$$I(t) = h\nu_{XY} A_{YX} n_Y(t), \tag{3.10}$$

où $h\nu_{XY}$ est la différence d'énergie entre X et Y.

Mais pour l'opacité, les transitions les plus pertinentes sont celles induites par la présence d'un champ de rayonnement de densité d'énergie radiative spectrale $U(h\nu)$. Un champ de rayonnement peut engendrer de l'absorption, d'où le taux de transition :

$$\frac{\mathrm{d}n_X}{\mathrm{d}t} = -B_{XY} n_X(t)\, J_\nu(h\nu_{XY}), \tag{3.11}$$

ainsi que de l'émission stimulée

$$\frac{\mathrm{d}n_Y}{\mathrm{d}t} = -B_{YX} n_Y(t)\, J_\nu(h\nu_{XY}). \tag{3.12}$$

B_{XY} est le *coefficient d'Einstein d'absorption* et B_{YX} le *coefficient d'Einstein d'émission stimulée*. Ce sont ces deux coefficients qui interviennent dans le calcul d'opacité. Ces trois coefficients sont liés à l'équilibre [8] :

$$B_{XY} n_X J(h\nu_{XY}) = A_{YX} n_Y + B_{YX} n_Y J_\nu(h\nu_{XY}). \tag{3.13}$$

À l'équilibre thermodynamique local, l'expression de $J(h\nu)$ est donnée par la loi de Planck :

$$J_\nu(h\nu) = c\, U_\mathrm{P}(h\nu) = \frac{8\pi}{c^2} \frac{h\nu^3}{\left(e^{\frac{h\nu}{k_\mathrm{B}T}} - 1\right)} = 4\pi\, B_\nu(k_\mathrm{B}T), \tag{3.14}$$

et les populations n_X et n_Y peuvent être mises en relation par la loi de Maxwell-Boltzmann :

$$\frac{n_Y}{n_X} = \frac{g_Y}{g_X} \exp\left(-\frac{h\nu_{XY}}{k_\mathrm{B}T}\right). \tag{3.15}$$

En réinjectant (3.13) dans (3.14), on en déduit des relations supplémentaires entre les coefficients d'Einstein pour l'É. T. L. :

$$g_X B_{XY} = g_Y B_{YX} \tag{3.16}$$

et, par convention,

$$g_Y A_{YX} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^2} g_Y B_{YX}. \tag{3.17}$$

Dans la littérature [8, 22], l'usage est de noter gA et gB quand le contexte, émission ou absorption, sous-entend le coefficient d'émission stimulée ($g = 2J' + 1$) ou celui d'absorption ($g = 2J + 1$). La fermeture des relations entre les coefficients d'Einstein

à l'É. T. L. ne nécessite que le calcul de l'un d'entre eux. L'énergie de la transition est notée $h\nu$ sans indice pour alléger les notations. À partir de la section suivante, et pour tout le reste de la thèse, l'énergie de la transition $X \to X'$ est notée $h\nu_{X\to X'}$, tandis que $h\nu$ sans indice désigne l'énergie d'un photon quelconque – l'antécédent de la fonction opacité –.

Pour le reste du chapitre, nous nous limitons au cas des transitions entre deux niveaux puis entre des configurations détaillées. Soit $\gamma J \to \gamma' J'$ une transition[1] entre les niveaux $\gamma' J'$ et γJ. Le taux d'émission spontanée s'écrit :

$$gA = \frac{16\pi^2 h\nu^3}{3mc^3}\mathcal{S} \tag{3.18}$$

La quantité qui est la plus utilisée en calcul d'opacité est la *force d'oscillateur* d'absorption, qui s'exprime en fonction de $\mathcal{S}$:

$$f_{\gamma J\to\gamma' J'} = \frac{2h^2\nu}{3\pi e^2(2J+1)}\mathcal{S} = \frac{h\nu}{3\,\mathrm{Ry}\,(2J+1)}\mathcal{S}. \tag{3.19}$$

La force d'oscillateur d'émission, beaucoup moins utilisée, s'écrit :

$$f_{\gamma' J'\to\gamma J} = -\frac{2h^2\nu}{3\pi e^2(2J'+1)}\mathcal{S} = -\frac{h\nu}{3\,\mathrm{Ry}\,(2J'+1)}\mathcal{S}. \tag{3.20}$$

Ele est négative par convention. La *force d'oscillateur pondérée* ne dépend pas du fait que le calcul soit en émission ou en absorption :

$$gf = (2J+1)\left|f_{\gamma J\to\gamma' J'}\right| = (2J'+1)\left|f_{\gamma' J'\to\gamma J}\right| = \frac{h\nu}{3\,\mathrm{Ry}}\mathcal{S}. \tag{3.21}$$

Elle peut être reliée au coefficient d'Einstein d'émission spontanée :

$$gA = \frac{8\pi^2 e^2\nu^2}{mc^3}gf \tag{3.22}$$

ou au coefficient d'Einstein d'absorption :

$$gB = \frac{\pi e^2}{mc\,h\nu}gf. \tag{3.23}$$

3.1.3 Concept et typologie des faisceaux de transition

Un faisceau de transition regroupe l'ensemble des raies partant d'une configuration initiale C et arrivant dans une configuration finale C'. Le nombre de raies contenues dans un faisceau est donné formule (3.4). On suppose dans cette section que la probabilité des états de C ne dépend que de leur poids statistique : c'est ce qui est appelé la *SWAP* [2]. La donnée, pour chaque raie, de l'énergie et de la force d'oscillateur – ou, de manière équivalente – d'un des coefficients d'Einstein ou de la force de raie, suffit à caractéri-

[1] Pour alléger les notations et en l'absence d'ambiguïté, les indices référant à la transition $\gamma J \to \gamma' J'$ sont omis dans le reste de la section, où nous mettons en relation gA, gB, $\mathcal{S}$ et gf pour une seule transition.

[2] *Statistical weight approximation* en anglais.

ser le faisceau de transition. La contribution à l'opacité de la raie $\gamma J \rightarrow \gamma' J'$ s'écrit, en prenant en compte l'émission stimulée, à l'aide des coefficients B d'Einstein :

$$\begin{aligned}
\rho\,\kappa_{\gamma J\rightarrow\gamma' J'}(h\nu) &= h\nu\left(n_{\gamma J}B_{\gamma' J'\rightarrow\gamma J} - n_{\gamma' J'}B_{\gamma' J'\rightarrow\gamma J}\right) h\Phi_{\gamma J\rightarrow\gamma' J'}(h\nu)\\
\Rightarrow \kappa_{\gamma J\rightarrow\gamma' J'}(h\nu) &= \frac{\mathcal{N}_{\rm A}}{A}\,h\nu\,B_{\gamma J\rightarrow\gamma' J'}\left[1-\exp\left(-\frac{h\nu_{\gamma J\rightarrow\gamma' J'}}{k_{\rm B}T}\right)\right] h\Phi_{\gamma J\rightarrow\gamma' J'}(h\nu), \qquad (3.24)
\end{aligned}$$

dans l'hypothèse de l'É. T. L., où s'applique l'équation de Maxwell-Boltzmann. Le facteur $1-\exp\left(-\frac{h\nu_{\gamma J\rightarrow\gamma' J'}}{k_{\rm B}T}\right)$ regroupe les effets induits qui diminuent les opacités lié-lié et lié-libre. Ces effets induits n'ont d'importance que lorsque $h\nu \leq k_{\rm B}T$. Le fait que ce facteur dépende uniquement de l'énergie exprimée en unités de température autorise une factorisation sur l'ensemble des processus. L'opacité de la raie $\gamma J \rightarrow \gamma' J'$ peut également être exprimée en fonction de la force de raie, de la force d'oscillateur ou des coefficients d'Einstein[3] :

$$\begin{aligned}
\kappa_{\gamma J\rightarrow\gamma' J'}(h\nu) &= \frac{\mathcal{N}_{\rm A}}{A}\,\frac{2h^3\nu_{\gamma J\rightarrow\gamma' J'}}{3mc\,(2J+1)}\,\mathcal{S}_{\gamma J\rightarrow\gamma' J'}\,\Phi_{\gamma J\rightarrow\gamma' J'}(h\nu) &(3.25a)\\
&= \frac{\mathcal{N}_{\rm A}}{A}\,\frac{hc^2}{8\pi\,\nu^2_{\gamma J\rightarrow\gamma' J'}}\,A_{\gamma' J'\rightarrow\gamma J}\,\Phi_{\gamma J\rightarrow\gamma' J'}(h\nu) &(3.25b)\\
&= \frac{\mathcal{N}_{\rm A}}{A}\,h^2\nu\,B_{\gamma J\rightarrow\gamma' J'}\,\Phi_{\gamma J\rightarrow\gamma' J'}(h\nu) &(3.25c)\\
&= \frac{\mathcal{N}_{\rm A}}{A}\,\frac{\pi\,e^2h}{mc}\,f_{\gamma J\rightarrow\gamma' J'}\,\Phi_{\gamma J\rightarrow\gamma' J'}(h\nu). &(3.25d)
\end{aligned}$$

Deux expressions sont appréciables : celle en fonction du coefficient d'Einstein d'absorption, qui présente une constante très simplifiée, et celle en fonction de la force d'oscillateur, car elle n'introduit pas de facteur $h\nu$ et obéit à des règles de somme dont nous faisons usage dans les approches statistiques que nous verrons Chap. 4.

Sans effets induits, le coefficient d'absorption associé à la transition s'écrit directement en fonction des forces d'oscillateur ou des coefficients d'Einstein :

$$\begin{aligned}
\kappa_{C\rightarrow C'}(h\nu) &= \sum_{\gamma J\rightarrow\gamma' J'}\frac{\pi e^2h}{mc}\frac{g f_{\gamma J\rightarrow\gamma' J'}}{g_C}\,\Phi_{\gamma J\rightarrow\gamma' J'}(h\nu) &(3.26a)\\
&= \sum_{\gamma J\rightarrow\gamma' J'}\frac{hc^2}{8\pi\,\nu^2_{\gamma J\rightarrow\gamma' J'}}\,\frac{g A_{\gamma J\rightarrow\gamma' J'}}{g_C}\,\Phi_{\gamma J\rightarrow\gamma' J'}(h\nu) &(3.26b)\\
&= \sum_{\gamma J\rightarrow\gamma' J'}h^2\nu_{\gamma J\rightarrow\gamma' J'}\,\frac{g B_{\gamma J\rightarrow\gamma' J'}}{g_C}\,\Phi_{\gamma J\rightarrow\gamma' J'}(h\nu). &(3.26c)
\end{aligned}$$

Les gf, gA et gB dépendent des forces de raies $\mathcal{S}$, toutefois, l'ensemble du faisceau de transition, comme nous verrons Chap. 4, dépend de l'intégrale dipolaire électrique

[3] Les expressions données ne sont pas rigoureusement exactes, sauf pour l'expression avec le coefficient $B_{\gamma J\rightarrow\gamma' J'}$. Mais la largeur du domaine dans lequel une raie a un profil non négligeable est très petite devant $h\nu_{\gamma J\rightarrow\gamma' J'}$.

entre les orbitales α et β $D_{\alpha\beta}$, dont l'expression est :

$$D_{\alpha\beta} = \int_0^\infty R_\alpha(r) r R_\beta(r)\,\mathrm{d}r. \tag{3.27}$$

Le profil de raie $\Phi_{\gamma J\to\gamma' J'}(h\nu)$ traduit le fait que les photons émis ou absorbés par la raie $\gamma J \to \gamma' J'$ ont une énergie qui n'est pas rigoureusement égale à $h\nu_{\gamma J\to\gamma' J'}$, du fait de plusieurs phénomènes physiques que nous détaillerons Sec. 3.2.1. Dans un atome non perturbé, la raie, très étroite, est un pic de Dirac en $h\nu_{\gamma J\to\gamma' J'}$, $\delta(h\nu - h\nu_{\gamma J\to\gamma' J'})$.

De manière générale, un faisceau de transition de l'élément Z s'écrit sous la forme :

$$Z : (\lambda)^\omega\, n\ell^w\, n'\ell'^{w'} \to (\lambda)^\omega n\ell^{w-1} n'\ell'^{w'+1}. \tag{3.28}$$

$(\lambda)^\omega$ regroupe l'ensemble des orbitales *spectatrices*. Des orbitales spectatrices fermées n'ont aucune conséquence sur le faisceau de transition, et agissent uniquement sur les $R_i(r)$, donc la valeur des intégrales radiales. En général, quand elles sont clairement sous-entendues, les orbitales spectatrices fermées sont omises [8, 22, 48, 49]. En revanche, des orbitales spectatrices ouvertes modifient la structure du faisceau, et peuvent le rendre très complexe : elles multiplient la dégénérescence des configurations par un produit de coefficients binomiaux. (λ) est *ouverte* si au moins une des orbitales qu'elle regroupe est ouverte ; si toutes les orbitales sont fermées, (λ) est *fermée*. $n\ell$ est l'orbitale *initiale*, et $n'\ell'$ l'orbitale finale.

On distingue différents types de faisceaux selon les valeurs de w et w'.

1. Si (λ) est fermée et $w' = 0$, le faisceau de transition est de la forme $\ell^{w+1} \to \ell^w \ell'$ et est dit faisceau de *valence*, car il s'agit de l'ionisation d'une orbitale de valence. Les faisceaux de la forme $\ell^{4\ell+2}\ell'^{w'} \to \ell^{4\ell+1}\ell'^{w'+1}$ sont les complémentaires des faisceaux de valence.

2. Si (λ) ne regroupe que des sous-couches fermées sauf une, un seul électron dans l'orbitale de départ et aucun dans l'orbitale d'arrivée, le faisceau de transition est de la forme $\ell^w\ell' \to \ell^w\ell''$ et on parle de faisceau *optique*. Les faisceaux de la forme $\ell^{4\ell+2}\ell'^{4\ell'+1}\ell''^{w''} \to \ell^{4\ell+1}\ell'^{4\ell'+2}\ell''^{w''}$ sont les complémentaires des faisceaux optiques.

3. Dans le cas plus général où (λ) est fermée et $w' > 0$, le faisceau de transition, de la forme $\ell^w\ell'^{w'} \to \ell^{w-1}\ell'^{w'+1}$, est un *faisceau de Moszkowski*.

4. Si (λ) est ouverte et que $w'\,(4\ell + 2 - w) = 0$, alors on parle de faisceau optique ou de valence *à spectateur*.

5. Les autres faisceaux – (λ) ouverte et $w'\,(4\ell + 2 - w) > 0$ (idem Moszkowski) – sont qualifiés de *complexes*.

Cette distinction est utilisée Chap. 4, 7 et 8.

3.2 Élargissements des raies

Le calcul de faisceaux de transitions détaillés, ou *DTA* (Detailed Transition Array) requiert le calcul de la structure fine de chaque configuration impliquée, initiale ou finale, puis le calcul des raies dipolaires électriques. Chacune de ces raies est élargie sous l'effet de phénomènes physiques.

3.2.1 Physique des élargissements

L'*élargissement* de la raie $\gamma J \to \gamma' J'$ est une distribution $\mathcal{W}_{\gamma J \to \gamma' J'}$ telle que le profil de raie est un produit de convolution :

$$\Phi_{\gamma J \to \gamma' J'} = \mathcal{W}_{\gamma J \to \gamma' J'} * \delta(h\nu - h\nu_{\gamma J \to \gamma' J'}). \tag{3.29}$$

Plus précisément, quatre types de processus physiques contribuent à l'élargissement des raies.

1. La largeur naturelle w_n provient de l'application des relations d'indétermination de Heisenberg au temps de vie des niveaux. Elle est lorentzienne.
2. L'élargissement Doppler w_d est due aux vitesses des ions dans le plasma. Il est gaussien si distribution de ces vitesses est maxwellienne, ce qui est une approximation déjà faite dans notre approche.
3. La largeur collisionnelle w_c est due aux impacts des électrons libres sur les ions. Dans la thèse elle est approchée par une lorentzienne.
4. L'élargissement Stark w_s est du à la présence des ions voisins dont le potentiel modifie localement en temps et en espace le potentiel auquel les électrons sont soumis. Nous faisons l'approximation que les profils Stark sont gaussiens.

Les élargissements dus aux phénomènes physiques sont donc de deux sortes :

- les élargissements gaussiens, comme l'élargissement Doppler thermique ;
- les élargissements lorentziens, comme la largeur naturelle ou les collisions électroniques.

La combinaison de plusieurs élargissements gaussiens et lorentziens revient à convoluer l'ensemble des profils. Cependant, il est intéressant de noter que la convolution de plusieurs profils gaussiens et lorentziens suit des règles de somme intéressantes. En effet, la convolution de deux lorentziennes est une lorentzienne de paramètre la somme des paramètres :

$$\mathcal{L}_\gamma * \mathcal{L}_{\gamma'} = \mathcal{L}_{\gamma+\gamma'}. \tag{3.30}$$

Ainsi, en calcul d'opacité,

$$w_{\mathcal{L}} = w_c + w_n \simeq w_c. \tag{3.31}$$

Par contre, la convolution de deux gaussiennes est une gaussienne de paramètre la somme quadratique des paramètres (addition des variances) :

$$\mathcal{G}_\sigma * \mathcal{G}_{\sigma'} = \mathcal{G}_{\sqrt{\sigma^2+\sigma'^2}}. \tag{3.32}$$

Ainsi, en calcul d'opacité,

$$w_{\mathcal{G}} = \sqrt{w_i^2 + w_d^2}. \tag{3.33}$$

De ce fait, l'élargissement de chaque raie est la convolution de deux distributions :

1. la *loi normale*, ou gaussienne de paramètre σ, *écart-type* :

$$\mathcal{G}_\sigma(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\, e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}. \tag{3.34}$$

2. la *distribution de Cauchy* ou lorentzienne, de paramètre γ :

$$\mathcal{L}_\gamma(x) = \frac{\gamma}{\pi\left(\gamma^2 + x^2\right)}. \tag{3.35}$$

Le *profil de Voigt* de paramètre gaussien σ et de paramètre lorentzien γ est un produit de convolution :

$$\mathcal{V}_{\sigma,\gamma} = \mathcal{G}_\sigma * \mathcal{L}_\gamma. \tag{3.36}$$

Il n'est pas possible de l'exprimer sans utiliser des intégrales impropres :

$$\mathcal{V}_{\sigma,\gamma}(x) = \frac{\gamma}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-\frac{t^2}{2\sigma^2}}}{\gamma^2 + (x-t)^2}\,\mathrm{d}t \tag{3.37}$$

pour un profil de Voigt centré en 0. Nous faisons dans la thèse l'approximation que tous les profils de raie sont des profils de Voigt.

Une autre approximation qui est faite systématiquement est que le profil de raie ne dépend que du faisceau de transition, autrement dit $\mathcal{W}_{\gamma J\to\gamma' J'} = \mathcal{W}_{C\to C'}$. Cette hypothèse permet de factoriser les produits de convolution sur tous les faisceaux :

$$\kappa_{C\to C'}(h\nu) = \sum_{\gamma J\to\gamma' J'} h^2 \nu_{\gamma J\to\gamma' J'} g B_{\gamma J\to\gamma' J'}\, \mathcal{W}_{C\to C'} * \delta_{\gamma J\to\gamma' J'}(h\nu) \tag{3.38}$$

$$= \mathcal{W}_{C\to C'} * \left[\sum_{\gamma J\to\gamma' J'} h^2 \nu_{\gamma J\to\gamma' J'} g B_{\gamma J\to\gamma' J'}\, \delta_{\gamma J\to\gamma' J'}\right](h\nu). \tag{3.39}$$

Cette approximation a l'avantage d'accélérer le calcul du faisceau de transition, en particulier si les profils sont modélisés par des fonctions de Voigt.

3.2.2 Grandeurs relatives aux élargissements, addition et propriétés du profil de Voigt

Deux autres quantités de largeurs de profils de raies sont très utilisées en spectroscopie, car ce sont celles qui peuvent en principe être évaluées dans des spectres expérimentaux. Il s'agit de la largeur à mi-hauteur, souvent abrégée FWHM (*full width at half maximum*) et de sa moitié la HWHM (*half width at half maximum*). La FWHM est égale à la différence des deux valeurs entre lesquelles les valeurs du profil sont supérieures à la moitié du maximum global. Deux autres, la *largeur intégrale* et le *facteur de forme*, peuvent servir, notamment dans l'approximation du profil de Voigt que nous proposons plus bas [50]. Pour une distribution $\mathcal{W}$, la largeur intégrale est définie par

$$\beta = \beta_\mathcal{W} = \frac{1}{\mathcal{W}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{W}(x)\,\mathrm{d}x \tag{3.40}$$

et est l'inverse de la valeur en 0 si la distribution est normalisée. Le facteur de forme est le quotient de la FWHM par la largeur intégrale :

$$\phi = \phi_\mathcal{W} = \frac{FWHM}{\beta_\mathcal{W}}. \tag{3.41}$$

Quantité	Nom	Gaussien	Lorentzien
Paramètre	$w_{\mathcal{V}}$	$w_{\mathcal{G}}$	$w_{\mathcal{L}}$
Largeur à mi-hauteur	$2W_{\mathcal{V}}$	$2\sqrt{2\ln 2}\,w_{\mathcal{G}}$	$2w_{\mathcal{L}}$
Mi-largeur à mi-hauteur	$W_{\mathcal{V}}$	$W_{\mathcal{G}} = \sqrt{2\ln 2}\,w_{\mathcal{G}}$	$W_{\mathcal{L}} = w_{\mathcal{L}}$
Largeur intégrale	β	$\beta_{\mathcal{G}} = \sqrt{\frac{\pi}{\ln 2}}\,w_{\mathcal{G}}$	$\beta_{\mathcal{L}} = \pi\, w_{\mathcal{L}}$
Facteur de forme	ϕ	$\phi_{\mathcal{G}} = 2\sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}}$	$\phi_{\mathcal{L}} = \frac{2}{\pi}$

TABLE 3.1 – Quantités relatives aux largeurs de profil.

L'intérêt du facteur de forme est qu'il est sans unité, et qu'il peut donc être exprimé indépendamment de la HWHM ou de l'élargissement gaussien. De ce fait, il caractérise la forme intrinsèque de la distribution. La conversion des paramètres en HWHM, FWHM, largeur intégrale et facteur de forme est donnée Tab. 3.1 pour les distributions gaussienne et lorentzienne.

Les profils de Voigt sont plus complexes, car leur largeur dépend de deux paramètres : $w_{\mathcal{G}}$ et $w_{\mathcal{L}}$. Mais du point de vue des largeurs, il peut être avantageux d'utiliser un couple de variables qui reflète deux grandeurs plus intuitives dans les profils de Voigt : le *paramètre de forme*

$$k = \frac{w_{\mathcal{L}}}{w_{\mathcal{G}}\sqrt{2}} \tag{3.42}$$

et une approximation de la HWHM à l'aide de la formule (B.16) p. 214 annexe B :

$$W_{\mathcal{V}} \simeq w_{\mathcal{G}}\sqrt{2}\left[\sqrt{\ln 2 + K\,k^2} + \left(1 - \sqrt{K}\right)k\right], \tag{3.43}$$

où

$$K = \frac{(\ln(2)/\pi)^{1/4}}{\sqrt{10}} \simeq 0,2166. \tag{3.44}$$

C'est par ces deux paramètres, facteur de forme et HWHM, que des approximations des profils de Voigt par des fonctions analytiques bien paramétrées deviennent envisageables.

3.2.3 Approximation du profil de Voigt par la distribution de Pearson VII

Bien qu'étant le produit de convolution exact d'une gaussienne par une lorentzienne, il y a au moins trois raisons qui incitent à approcher les profils de raies par des distributions au calcul moins complexe mais au comportement similaire.

1. La fonction de Voigt ne peut s'exprimer à l'aide d'une formule analytique ne faisant pas appel au calcul d'intégrales impropres, même dans l'expression à l'aide de la fonction d'erreur de Fadeev [51]. Même si des algorithmes performants ont été développés, évaluer le profil de Voigt en un point reste plus coûteux que celui d'une distribution à expression analytique.

2. Les fonctions approchantes les plus performantes donnent, près de l'énergie moyenne, une erreur de l'ordre de quelques centièmes par rapport à la fonction de Voigt. Cette erreur reste faible par rapport aux approximations faites sur les profils Stark et collisionnels.

3. Le profil de Voigt a des ailes trop fortes, avec une décroissance en $\mathcal{O}(x^{-2})$, et cet effet a des conséquences importantes sur l'allure du spectre en opacité [52], et pose des problèmes de convergence de certaines intégrales.

Deux familles de fonctions ont été étudiées par les expérimentateurs [50], et nous allons reprendre leurs travaux sur la Pearson VII pour assurer une correspondance « dans le sens inverse », c.-à-d. de la théorie au spectre d'interprétation d'expériences[4]. La famille des distributions de Pearson VII a retenu notre attention, car elle est particulièrement adaptée aux élargissements à composante lorentzienne dominante. L'expression générale d'une distribution de Pearson VII est :

$$P_{w,\mu}(x) = \frac{2^{2(\mu-1)}\sqrt{2^{1/\mu}-1}\,\Gamma(\mu)^2}{\Gamma(2\mu-1)\,\pi w\,\left[\left(2^{1/\mu}-1\right)\left(\frac{x}{w}\right)^2+1\right]^{\mu}}. \tag{3.45}$$

μ est l'exposant et correspond au paramètre de forme et w est la HWHM. La correspondance entre Voigt et Pearson VII se fait sur trois égalités :

- le maxima à la moyenne, c.-à-d. le point $h\nu_{X\to X'}$;
- la HWHM ;
- le facteur de forme.

C'est la dernière égalité qui conduit à l'équation transcendante entre k et μ, dont l'expression et la résolution se trouvent en annexe B. Elle permet ainsi de substituer le calcul d'un profil de Voigt par un calcul de Pearson VII, qui est non seulement plus simple, mais aussi plus pertinent loin de la position spectrale moyenne : la convergence vers 0 plus rapide est une approximation de la « coupure » du profil de Voigt telle qu'envisagée Réf. [52].

3.3 Le calcul détaillé d'opacités : théorie et applications

Nous disposons à présent de l'ensemble des ingrédients permettant de construire une opacité lié-lié détaillée. Nous confrontons un premier modèle entièrement détaillé avec des résultats expérimentaux.

3.3.1 Opacité lié-lié détaillée ; probabilités à l'É. T. L.

L'expression la plus générale de l'opacité lié-lié est donnée formule (1.42) p. 21, comme une somme sur toutes les transitions possibles :

$$\kappa_{\mathrm{bb}}(h\nu) = \frac{\pi e^2 h}{mc} \sum_{\gamma J\to\gamma' J'} \mathcal{P}(\gamma J)\, f_{\gamma J\to\gamma' J'}\, \Phi_{\gamma J\to\gamma' J'}(h\nu), \tag{3.46}$$

$\mathcal{P}(\gamma J)$ est la probabilité du niveau γJ dans le plasma.

[4] Réf. [50], la démarche est de retrouver les paramètres gaussien et lorentzien des profils de Voigt, à partir d'une lecture graphique des profils de raies.

À l'équilibre thermodynamique local, cette probabilité peut se calculer à l'aide des grandes fonctions de partition (1.27) p. 17 :

$$\mathcal{P}(\gamma J) = \frac{\mathcal{Z}_{\gamma J}}{\mathcal{Z}} = \frac{(2J+1)\, e^{-\beta\left(E_{\gamma J} - \mu Q\right)}}{\mathcal{Z}} \tag{3.47}$$

Le calcul des grandes fonctions de partition nécessite la prise en compte de tous les niveaux présents dans le plasma. Le calcul d'opacité peut être facilité par factorisation à différentes échelles. Outre que les formules deviennent plus faciles à manipuler, la division du calcul d'opacité, qui reste une somme, permet la parallélisation d'un outil de calcul d'opacité, option qui commence à être utilisée par de plus en plus d'équipes [53].

Le premier niveau de factorisation est celui des configurations. L'interaction de configurations (entre configurations non-relativistes), qui remet en cause la division des états d'un ion en configurations, est négligée dans la thèse. Autrement dit, tout niveau γJ fait partie d'une unique configuration C, et toute raie $\gamma J \to \gamma' J'$ fait partie d'un faisceau de transition $C \to C'$. Par conséquent, l'opacité lié-lié peut se réécrire en regroupant les niveaux par configuration, et donc les raies par faisceau de transition :

$$\kappa_{\mathrm{bb}}(h\nu) = \sum_{C \to C'} \mathcal{P}(C)\, \kappa_{C \to C'}(h\nu) \tag{3.48}$$

où

$$\kappa_{C \to C'}(h\nu) = \frac{\pi e^2 h}{mc} \sum_{\substack{\gamma J \to \gamma' J' \\ \gamma J \in C,\, \gamma' J' \in C'}} \mathcal{P}_C(\gamma J)\, f_{\gamma J \to \gamma' J'}\, \Phi_{\gamma J \to \gamma' J'}(h\nu) \tag{3.49a}$$

$$= \frac{\pi e^2 h}{mc} \sum_{\substack{\gamma J \to \gamma' J' \\ \gamma J \in C, \gamma' J' \in C'}} \frac{(2J+1)\; e^{-\beta E_{\gamma J}}}{\mathcal{U}_C}\, f_{\gamma J \to \gamma' J'}\, \Phi_{\gamma J \to \gamma' J'}(h\nu) \tag{3.49b}$$

Cette factorisation par configurations a le grand avantage d'isoler le traitement des faisceaux de transition : c'est d'ailleurs la base du formalisme d'opacité hybride que nous construirons Chap. 6, avec la factorisation de la fonction de partition proposée formule (3.50). La fonction de partition de la configuration s'écrit :

$$\mathcal{U}_C = \sum_{\gamma J \in C} (2J+1)\; e^{-\beta E_{\gamma J}} \tag{3.50a}$$

$$= g_C\, e^{-\beta E_C} \sum_{\gamma J \in C} \frac{2J+1}{g_C}\, e^{-\beta\left(E_{\gamma J} - E_C\right)}. \tag{3.50b}$$

Cette factorisation à l'aide de l'énergie du centre de gravité E_C, fait apparaître une quantité intrinsèque de la configuration, indépendante de l'énergie de référence, que nous nommons *fonction de partition interne* :

$$\mathcal{I}_C = e^{\beta E_C} \mathcal{U}_C = \sum_{\gamma J} (2J+1)\; e^{-\beta\left(E_{\gamma J} - E_C\right)}. \tag{3.51}$$

Le second niveau de factorisation est celui des états de charge Q. D'un intérêt limité pour le calcul d'opacité, nous l'utilisons abondamment dans la thèse car il permet d'exprimer l'opacité d'une espèce ionique en formalisme canonique. L'opacité du plasma dans sa totalité est donnée par la somme sur l'ensemble des états de charge, dont les fonctions de partition sont données Tab. 1.1 p. 17 :

$$\kappa(h\nu) = \sum_Q \mathcal{P}(Q)\,\kappa_Q(h\nu) \tag{3.52a}$$

$$= \sum_Q \frac{\mathcal{Z}_Q}{\mathcal{Z}} \kappa_Q(h\nu). \tag{3.52b}$$

Les probabilités des états de charge $\mathcal{P}(Q)$ se calculent à l'aide de l'équation de Saha, qui nécessite cependant d'avoir déjà toutes les fonctions de partition des états de charge à disposition.

La probabilité $\mathcal{P}(C)$ s'exprime à l'aide des grandes fonctions de partition :

$$\mathcal{P}(C) = \frac{\mathcal{Z}_C}{\mathcal{Z}} = \mathcal{P}(Q)\mathcal{P}_Q(C). \tag{3.53}$$

Les probabilités à indice sont des probabilités conditionnelles :

$$\mathcal{P}_Q(C) = \begin{cases} \frac{\mathcal{Z}_C}{\mathcal{Z}_Q} = \frac{\mathcal{U}_C}{\mathcal{U}_Q} & \text{si } C \in Q \\ 0 & \text{si } C \notin Q \end{cases} \tag{3.54a}$$

$$\mathcal{P}_C(\gamma J) = \begin{cases} \frac{\mathcal{Z}_{\gamma J}}{\mathcal{Z}_C} = \frac{\mathcal{U}_{\gamma J}}{\mathcal{U}_C} & \text{si } \gamma J \in C \\ 0 & \text{si } \gamma J \notin C \end{cases}, \tag{3.54b}$$

autrement dit, si les inclusions sont vraies,

$$\mathcal{P}_Q(C) = \frac{\sum\limits_{\gamma J \in C} (2J+1)\; e^{-\beta E_{\gamma J}}}{\sum\limits_{C \in Q} \mathcal{U}_C} \tag{3.55a}$$

$$\mathcal{P}_C(\gamma J) = \frac{2J+1}{\mathcal{U}_C}\, e^{-\beta E_{\gamma J}} = \frac{2J+1}{\mathcal{I}_C}\, e^{-\beta\left(E_{\gamma J} - E_C\right)}, \tag{3.55b}$$

et

$$\kappa_Q(h\nu) = \sum_{C \in Q} \frac{\mathcal{U}_C}{\mathcal{U}_Q} \sum_{C \to C'} \kappa_{C \to C'}(h\nu) \tag{3.56a}$$

$$= \sum_{C \to C'} \left[\sum_{\gamma J \in C} \mathcal{P}_C(\gamma J) \sum_{\substack{\gamma J \to \gamma' J' \\ \gamma J \in C, \gamma' J' \in C'}} f_{\gamma J \to \gamma' J'}\, \Phi_{\gamma J \to \gamma' J'}(h\nu) \right] \tag{3.56b}$$

est l'opacité de l'état de charge Q s'il est le seul état de charge du plasma. Nous ferons Chap. 6 l'hypothèse du plasma à un seul état de charge pour utiliser le formalisme canonique, qui permet d'alléger les notations.

Nous avons donc une opacité lié-lié totale – à laquelle l'opacité lié-libre doit être ajoutée –, qui se factorise à plusieurs étages :

$$\kappa(h\nu) = \sum_Q \mathcal{P}(Q)\,\kappa_Q(h\nu) \tag{3.57a}$$

$$= \sum_Q \mathcal{P}(Q) \left\{ \sum_{C\in Q} \mathcal{P}_Q(C) \sum_{C\to C'} \kappa_{C\to C'}(h\nu) \right\} \tag{3.57b}$$

$$= \frac{\pi e^2 h}{mc} \sum_Q \mathcal{P}(Q) \left\{ \sum_{C\in Q} \mathcal{P}_Q(C) \sum_{C\to C'} \left[\sum_{\gamma J\in C} \mathcal{P}_C(\gamma J) \right.\right.$$

$$\left.\left. \sum_{\substack{\gamma J\to\gamma' J' \\ \gamma J\in C,\gamma' J'\in C'}} f_{\gamma J\to\gamma' J'}\,\Phi_{\gamma J\to\gamma' J'}(h\nu) \right] \right\} \tag{3.57c}$$

$$= \sum_Q \left\{ \sum_{C\in Q} \sum_{C\to C'} \left[\sum_{\substack{\gamma J\to\gamma' J' \\ \gamma J\in C,\gamma' J'\in C'}} L_{\gamma J\to\gamma' J'}\,\Phi_{\gamma J\to\gamma' J'}(h\nu) \right] \right\}, \tag{3.57d}$$

la dernière égalité utilisant l'intensité définie formule (1.44) p. 21.

Nous verrons Chap. 8 l'opacité d'un faisceau de transition prenant en compte la température change par rapport au même faisceau de transition calculé en SWAP. On pourrait incriminer le fait que, en prenant en compte la température,

$$\mathcal{P}_C(\gamma J, T) = \frac{2J+1}{\mathcal{U}_C}\, e^{-\beta E_{\gamma J}} \tag{3.58a}$$

$$= \frac{e^{-\beta E_{\gamma J}}}{\displaystyle\sum_{\gamma' J'\in C} \frac{2J'+1}{g_C}\, e^{-\beta E_{\gamma' J'}}}\, \mathcal{P}_C(\gamma J, T=\infty), \tag{3.58b}$$

ce qui illustre l'effet de la prise en compte de la température sur les probabilités, d'ordre 1 au numérateur, d'ordre 2 au dénominateur. Nous montrerons Chap. 8 que la température peut avoir un impact sur la forme des faisceaux.

3.3.2 Un modèle direct pour le calcul détaillé d'opacités

Nous savons à présent calculer des faisceaux de transition à partir de configurations détaillées et construire l'opacité lié-lié d'un plasma chaud à une température donnée. Il manque cependant une sélection de configurations les plus probables, parmi le très grand nombre qui peut être envisagé. Une telle sélection nécessite le parcours de l'ensemble des configurations admissibles dans le plasma, pour ne retenir que les plus abondantes. Dans ce modèle direct, le calcul de l'opacité s'appuie sur trois résultats de SCO :

- la sélection des configurations pour l'opacité lié-lié ;
- la donnée des abondances ioniques données par un calcul de SCO ;
- la donnée des spectres en opacité lié-libre et libre-libre.

Les autres composantes du calcul d'opacité, à savoir le calcul des probabilités des configurations dans leur état de charge $\mathcal{P}_Q(C)$ ainsi que le calcul complet de l'opacité de chaque faisceau de transition $\kappa_{C\to C'}$, sont entièrement gérées par notre modèle direct. La convolution des raies par un profil gaussien standard est également assurée par notre modèle.

C'est avec le code de COWAN [8, 48, 49] que le calcul des faisceaux de transition est entièrement effectué. Comme exposé Chap. 2, RCN se charge de calculer les fonctions d'onde et le potentiel atomique à l'aide des fonctions d'onde, à la fois pour les configurations de départ et celles d'arrivée. Ensuite, le programme RCG récupère les données pertinentes de RCN, à savoir la population de chaque orbitale impliquée dans le faisceau de transition, les intégrales radiales coulombiennes et de spin-orbite pertinentes dont la liste est donnée Sec. 2.3.1, et l'intégrale dipolaire électrique. Il diagonalise le Hamiltonien pour les deux configurations et calcule la totalité des raies spectrales. Les informations qu'il est nécessaire de récupérer d'un calcul RCG sont :

- la liste des raies, avec, pour chacune, la force d'oscillateur, l'énergie spectrale et l'énergie du niveau de départ ;
- la liste des niveaux avec leur poids statistique et leur énergie, ou au moins la fonction de partition intrinsèque de la configuration donnée formule (3.51).

Même si, en SWAP, les faisceaux de transition peuvent être calculés sans qu'il soit nécessaire de prendre en compte l'énergie du niveau de départ, l'énergie moyenne de la configuration suffisant, la probabilité du niveau de départ dans sa configuration $\mathcal{P}_C(\gamma J)$ dépend de la température et de l'énergie du niveau initial comme indiqué formule (3.55).

L'opacité de chaque configuration est ensuite multipliée par la probabilité de la configuration dans le plasma donnée par la formule (3.53). La somme s'exprime alors selon (3.57). Ce modèle d'opacité lié-lié a l'avantage de prendre en compte l'effet de la température, non seulement sur la distribution ionique et sur les probabilités des configurations données par l'équation de Maxwell-Boltzmann, mais aussi sur la forme des faisceaux, car la probabilité d'un niveau, donnée par la formule (3.58), dépend elle aussi du facteur de Boltzmann de l'ensemble des niveaux de la configuration. Un aspect numérique du calcul d'opacité est crucial dès lors que des faisceaux détaillés sont calculés : la *grille spectrale*, c.-à-d. l'ensemble des positions spectrales sur lesquelles l'opacité est calculée.

3.3.3 Premières interprétations de spectres expérimentaux

Nous l'illustrons au travers d'exemples d'interprétations d'expériences : le cuivre issu du tir 31 de la campagne 2008 d'expériences de spectroscopie plasma menée au LULI[5] [54, 55], et le fer issu d'une expérience Z-pinch[6] [56].

Le spectre de cuivre issu du tir 31 de la campagne 2008 est un spectre moyennement résolu de couche L d'un élément de Z intermédiaire. Les spectres théorique et expérimental Fig. 3.2 ont une assez bonne correspondance dans les zones des sauts $2p-3d$ et $2p-4d$. L'emplacement spectral et la proportion des structures d'absorption sont identiques dans les deux spectres.

Ce fait est tout particulièrement intéressant pour la structure d'absorption $2p-3d$, dont la séparation en deux est due à la valeur élevée de l'intégrale de spin-orbite ζ_{2p}.

[5] Laboratoire pour l'utilisation des lasers intenses à l'École Polytechnique, Palaiseau, France
[6] Machine Z de Sandia National Laboratories, Albuquerque, Nouveau-Mexique

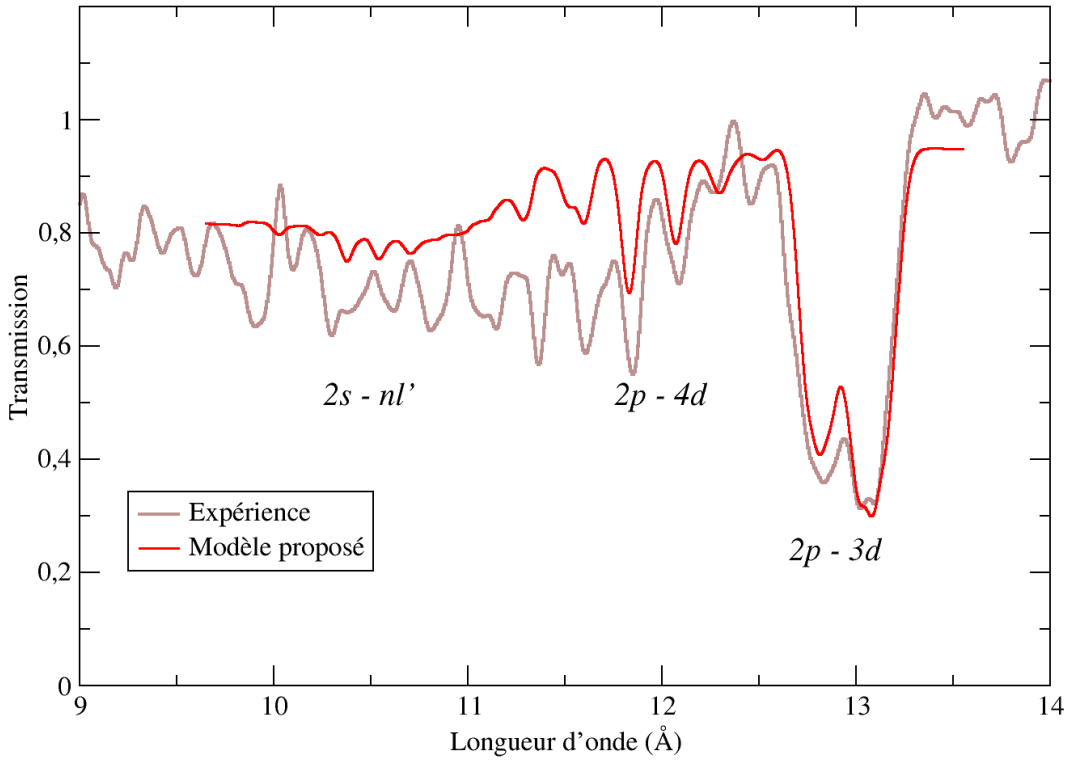


FIGURE 3.2 – Comparaison entre le spectre produit à une température de 16 eV et une densité de 5 mg/cm^3 par notre approche et un spectre expérimental en transmission à la masse surfacique de 40 μg/cm^2 [54, 55].

En effet, seuls les calculs d'opacité détaillant les faisceaux de transition sont capables de restituer la proportion des deux sous-structures d'absorption, nous expliquerons plus loin pourquoi. En revanche, le spectre calculé par cette approche directe donne une absorption trop faible dans les transitions $2p - n\ell'$ avec $n \geq 4$, par rapport aux approches utilisées par d'autres équipes pour interpréter cette expérience. La raison est numérique : la version de RCG utilisée pour ce calcul ne pouvait pas calculer les faisceaux de plus de 50 000 raies.

Le spectre de fer issu d'une expérience sur machine Z publiée en 2007 est un spectre en transmission d'une telle richesse en structures d'absorption qu'il a été qualifié de « benchmark[7] », et constitue de fait un test intéressant pour toute approche détaillée du calcul d'opacité. L'accord entre le spectre de cette approche directe et le spectre expérimental Fig. 3.3 est très bon, avec des structures d'absorption bien en place et aux bonnes proportions.

Ce premier couplage limité entre un code de calcul de structure atomique et un outil de calcul d'opacité de plasmas chauds a permis d'obtenir des spectres en transmission reproduisant bien les structures d'absorption présentes dans le spectre statistique. Une des faiblesses principales de ce modèle direct est la limitation du nombre de raies par faisceau. D'autre part, les nombreux effets sur la structure atomique détaillée causés par la densité sont modélisés par SCO, alors que RCN calcule un atome isolé. Cependant, ces effets restent faibles aux densités auxquelles ont été modélisés les deux spectres montrés dans ce chapitre.

[7] Par J. BAILEY lui-même, lors d'une intervention au CEA/DIF.

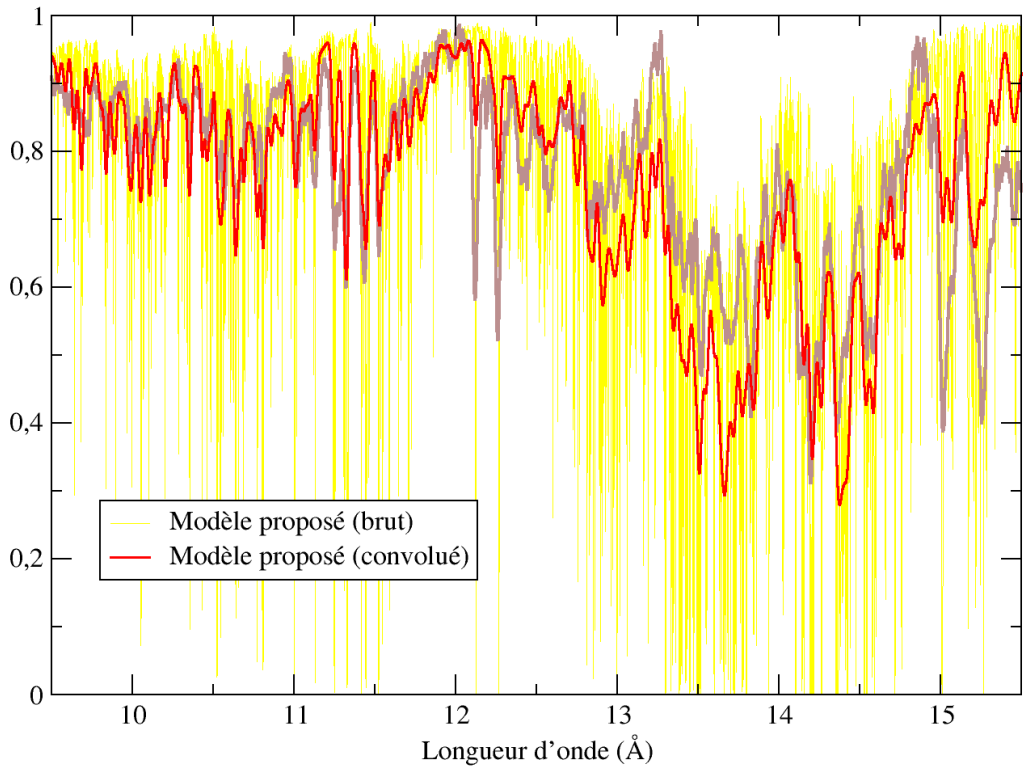


FIGURE 3.3 – Spectres en transmission du fer à 155 eV, avec une profondeur optique de 32,8 $\mu g/cm^2$.

L'autre lacune est liée au traitement des faisceaux complexes, qui posent problème dans le cas du cuivre où la sous-couche $3d$ est, en moyenne, à moitié remplie. Cela engendre des configurations initiales assez complexes, et les faisceaux de transition contiennent facilement plusieurs centaines de milliers de raies, en particulier ceux des sauts $3p - 4d$, qui ouvrent deux orbitales à la fois, augmentant d'un facteur important la complexité de la configuration finale. Nous reviendrons sur ce point Chap. 7. Il faut être capable de substituer le calcul détaillé de faisceaux trop complexes à un calcul statistique, qui fait l'objet du prochain chapitre.

II

VERS L'APPROCHE HYBRIDE



APPROCHES STATISTIQUES DU CALCUL D'OPACITÉ

La première utilité des approches statistiques de la structure atomique est que, sans connaître précisément la structure de chaque configuration, ces approches sont capables d'évaluer rapidement des moyennes et des dispersions de l'ionisation ou de la population des orbitales atomiques, ou encore du potentiel chimique. L'atome moyen « ouvre la voie » au calcul d'opacité, en permettant à l'opérateur de savoir *a priori* quelles espèces sont susceptibles d'être abondantes dans le plasma. La seconde utilité de ces approches est leur capacité, comme nous allons le voir, à simplifier ce qui est complexe, voire très complexe, et dont le détail n'est pas justifié à cause de la coalescence des structures d'absorption, que nous caractériserons plus précisément Chap. 7.

4.1 Atome moyen et modèle de Thomas-Fermi

L'atome moyen est un atome fictif dont les propriétés sont la moyenne des propriétés des atomes présents dans le plasma. Son calcul donne les propriétés thermodynamiques du plasma et permet de préparer le calcul d'opacité.

4.1.1 Modèle de Thomas-Fermi

Le modèle de Thomas-Fermi est un des premiers modèles qui a permis de calculer la structure des atomes à grand nombre d'électrons [57]. Il permet le calcul rapide d'une équation d'état approximative [58, 59].

La grandeur qui permet de savoir si l'utilisation d'une distribution de Fermi-Dirac telle que donnée formule (1.33) p. 19 est l'*énergie de Fermi* :

$$E_{\mathrm{F}} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(3\pi^2 n_{\mathrm{e}}\right)^{2/3}. \tag{4.1}$$

À température finie, la théorie de Thomas-Fermi permet de déterminer le potentiel d'un atome de charge nucléaire Z positionné à l'origine, c.-à-d. $r = 0$, considérant que l'ensemble de ses électrons, liés et libres, sont contenus dans la sphère ionique de rayon R_{i}.

Le système à résoudre a deux inconnues : le potentiel $V(\mathbf{r})$ et la densité électronique $n_\mathrm{e}(\mathbf{r})$, $\mathbf{r}$ étant un point de l'espace. En supposant l'atome, ou l'ion, à symétrie sphérique, les grandeurs ne dépendent que de la distance à l'origine r. Le potentiel $V(r)$ est la solution de l'équation de Poisson

$$\nabla^2 V = 4\pi n_\mathrm{e}(r), \tag{4.2}$$

qui satisfait deux conditions au bord :

- $V(r) = \frac{Z}{r}$ quand $r \to 0$;
- $\left.\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right|_{r=R_\mathrm{i}} = 0$.

L'intégration de la seconde équation donne une expression intégrale de V en fonction de n_e [7] :

$$V(r) = -4\pi \left[\frac{1}{r}\int_0^r n_\mathrm{e}(r')r'^2\mathrm{d}r' + \int_r^{R_\mathrm{i}} n_\mathrm{e}(r')r'\mathrm{d}r'\right] \tag{4.3}$$

La statistique de Fermi-Dirac nous permet d'écrire la densité d'électrons en fonction du potentiel :

$$n_\mathrm{e}(r) = \frac{1}{2\pi^2}\left[\frac{2m\,k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}{\hbar^2}\right]^{3/2} F_{1/2}\left(\frac{\mu - V(r)}{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}\right) \tag{4.4}$$

où μ est le *potentiel chimique* et

$$F_\alpha(x) = \int_0^\infty \frac{y^\alpha}{1+e^{x+y}}\mathrm{d}y \tag{4.5}$$

l'intégrale de Fermi-Dirac complète. Le potentiel chimique est déterminé par la neutralité électrique :

$$\int_0^{R_\mathrm{i}} 4\pi\, r^2 n_\mathrm{e}(r)\,\mathrm{d}r = Z. \tag{4.6}$$

Dans le modèle de Thomas-Fermi, les électrons libres sont définis comme ceux dont l'énergie totale, cinétique plus potentielle, est positive. Leur densité partielle n_f s'écrit :

$$n_\mathrm{f}(r) = \frac{1}{2\pi^2}\left[\frac{2m\,k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}{\hbar^2}\right]^{3/2} F_{1/2}\left(\frac{\mu - V(r)}{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}, -\frac{V(r)}{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}\right), \tag{4.7}$$

avec $F_{1/2}(x,\beta)$ l'intégrale de Fermi-Dirac incomplète :

$$F_\alpha(x,\beta) = \int_\beta^\infty \frac{y^\alpha}{1+e^{x+y}}\mathrm{d}y. \tag{4.8}$$

Le nombre total d'électrons libres dans la sphère ionique nous donne l'ionisation moyenne :

$$Z^*(k_\mathrm{B}T, n_\mathrm{i}) = \int_0^{R_\mathrm{i}} 4\pi\, r^2 n_\mathrm{f}(r)\,\mathrm{d}r. \tag{4.9}$$

Le modèle de Thomas-Fermi est semi-classique : les électrons sont traités comme des fermions, mais la structure atomique n'est pas prise en compte, car les électrons sont dans un continuum d'énergie. Mais il implique des lois d'échelle sur de nombreuses

quantités liés au plasma, tels Z^* [60], l'énergie de première ionisation [7] ou encore la compression maximale par choc [61].

Dans les outils que nous utilisons, Thomas-Fermi sert à calculer de la distribution d'énergie des électrons libres. On en déduit notamment l'énergie libre des électrons libres [9] :

$$\mathcal{F}_\mathrm{f} = \bar{Q} k_\mathrm{B} T \left(\beta\mu - \frac{2}{3} \frac{F_{3/2}(\beta\mu)}{F_{1/2}(\beta\mu)} \right). \tag{4.10}$$

De plus, il permet, pour les plasmas dans lesquels les atomes ont encore des électrons dans les couches M et N, d'approcher de manière satisfaisante l'ionisation du plasma $\bar{Q} = Z^*$.

4.1.2 L'atome moyen en couches

L'*atome moyen* est un **atome fictif dont la population de chaque sous-couche est la moyenne non-entière des populations** des sous-couches de toutes les espèces présentes dans le plasma. Dans le formalisme d'atome moyen, l'occupation des orbitales obéit à une statistique de Fermi-Dirac :

$$w_i^* = \frac{g_i}{1 + e^{\beta(\epsilon_i - \mu)}}, \tag{4.11}$$

où μ est le potentiel chimique, et ϵ_i l'énergie de l'orbitale i, c.-à-d. la valeur propre issue de la résolution de l'équation homogène

$$\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{\ell_i \left(\ell_i + 1\right)}{r^2} + V(r) \right] R_i(r) = \epsilon_i R_i(r). \tag{4.12}$$

où $V(r) = V_\mathrm{e}(r) + V_{xc}$ est la somme du potentiel électrostatique V_e et du potentiel d'échange-corrélation V_{xc}. Comme dans le modèle de Thomas-Fermi, la neutralité électrique permet de déterminer μ, sachant que la densité d'électrons liés au point $\mathbf{r}$ est

$$n_\mathrm{b}(\mathbf{r}) = \sum_i w_i \left|\psi_i(\mathbf{r})\right|^2, \tag{4.13}$$

ce qui, en intégrant dans toutes les directions, donne

$$n_\mathrm{b}(r) = \frac{1}{4\pi} \int_{\theta,\phi} n_\mathrm{b}(r,\theta,\phi) \, \sin\theta \, \mathrm{d}\theta \, \mathrm{d}\phi \tag{4.14}$$

et celle d'électrons libres donnée par Thomas-Fermi équation (4.7) :

$$n_\mathrm{f}(r) \propto F_{1/2}(\beta \left(\mu - V(r)\right), -\beta V(r)), \tag{4.15}$$

d'où l'expression de la neutralité électrique :

$$\int_0^{R_\mathrm{i}} 4\pi r^2 \left(n_\mathrm{b}(r) + n_\mathrm{f}(r)\right) \, \mathrm{d}r = Z, \tag{4.16}$$

et

$$Z^* = \int_0^{R_\mathrm{i}} 4\pi r^2 n_\mathrm{f}(r) \, \mathrm{d}r \tag{4.17}$$

Mais, de manière analogue au schéma auto-cohérent Sec. 2.3.2 et 4.1.1, l'équation de Poisson permet d'exprimer le potentiel en fonction de la densité électronique :

$$\nabla^2 V_\mathrm{e} = 4\pi \left(n_\mathrm{b}(r) + n_\mathrm{f}(r) \right). \tag{4.18}$$

Un schéma autocohérent peut être mis en route pour calculer les populations des sous-couches à l'atome moyen. Le départ nécessite un ansatz pour le potentiel $V^{(0)}(r)$, en général un potentiel coulombien de la forme $\frac{Z^*}{r}$ avec Z^* donné par Thomas-Fermi. Les composantes radiales $R_i^{(0)}(r)$ sont déduites de l'équation sur la composante radiale (2.19) p. 31. À leur tour, ces composantes radiales peuvent être utilisées pour en déduire un nouveau potentiel $V^{(1)}(r)$ via l'équation de Poisson. La boucle recommence avec le nouveau potentiel ansatz $V^{(1)}(r)$, qui peut être mélangé avec $V^{(0)}(r)$, par exemple en prenant un barycentre de $V^{(0)}$ et $V^{(1)}$.

4.1.3 Statistique sur la population des sous-couches

Le calcul à l'atome moyen nous donne les *occupations moyennes* des sous-couches

$$f_i^* = \frac{w_i^*}{g_i} = \frac{1}{1 + e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)}} \tag{4.19}$$

où μ potentiel chimique calculé à l'atome moyen traduit la neutralité électrique $\sum_i w_i^* = \sum_i g_i f_i^* = Z - Z^*$, où Z^* est l'ionisation moyenne. La variance du remplissage des orbitales v_i dépend uniquement de f_i^* dans l'approximation des électrons indépendants :

$$v_i = g_i f_i^* (1 - f_i^*). \tag{4.20}$$

L'écart-type de la population d'une orbitale à l'atome moyen $\sqrt{v_i}$ peut être utilisé pour rechercher les configurations susceptibles d'avoir une probabilité élevée. Une hypothèse sur les configurations qui ont une probabilité élevée est que les populations w_i des orbitales sont entières mais :

$$w_i^* - m\sqrt{v_i} \leq w_i \leq w_i^* + m\sqrt{v_i}. \tag{4.21}$$

O. PEYRUSSE [15] considère que m doit être compris entre 1 et 3. Quelle valeur de m est la plus pertinente ? *A priori* $1 \leq m \leq \sqrt{g_i}$, la borne supérieure étant suggérée par le fait que lorsque $f_i^* = 1/2$, $v_i = g_i/4$ et w_i peut varier entre 0 et g_i.

Le problème se pose lorsque la sous-couche i es t« presque fermée », par exemple $f_i^* \to 0$. Alors on peut calculer que les configurations avec un électron dans la couche i ne sont permises que si $w_i^* + m\sqrt{v_i} \geq 1$, ce qui nous donne une valeur minimale pour w_i^* en fonction de g_i, comme le montre Fig. 4.1.

Par exemple, pour l'orbitale $4p$ avec $g_i = 6$ et $w_i^* \leq 0,02$[1], mais d'après Fig. 4.1 $w_i^* + m\sqrt{v_i}$ est nettement en-dessous de 1. Pourtant, parmi les 200 configurations les plus abondantes, près d'une vingtaine ont un électron dans la sous-couche $4p$. La statistique des populations à l'atome moyen est donc pertinente pour remplir des orbitales de $\ell \geq 1$ dont l'occupation est proche de la moitié, mais est inadaptée aux orbitales « presque vides », avec $w_i^* \leq 0,15$.

[1] Par exemple l'aluminium à 37 eV et $0,01$ g/cm^3.

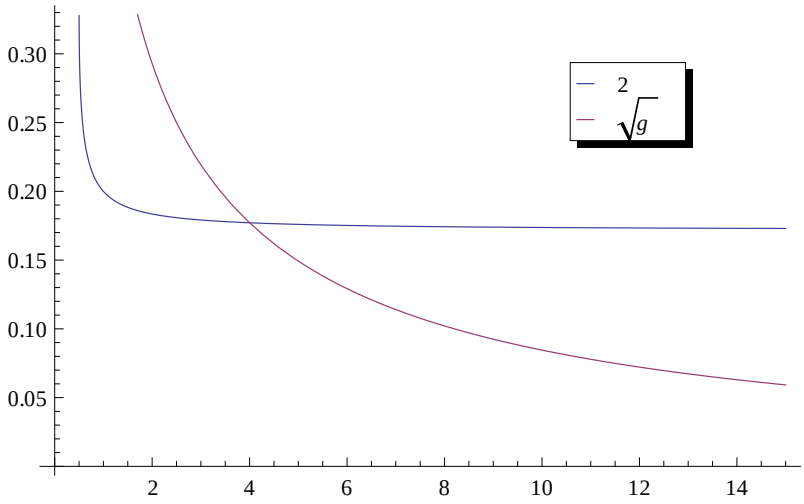


FIGURE 4.1 – w_i^* minimal (ordonnées) en fonction de g_i (abscisse) dans le cas où $m = 2$ et $m = \sqrt{g_i}$ pour que les configurations avec $w_i = 1$ puissent être incluses

4.2 Calcul statistique des faisceaux de transition

Nous avons expliqué comment effectuer le calcul détaillé de faisceaux de transition, et les formules principales sont détaillées Sec. 3.3.1. Cependant, à partir des règles de somme sur les niveaux et les forces de raies, il est possible de déterminer non seulement la moyenne, mais aussi la variance en énergie d'un faisceau de transition.

4.2.1 Traitement statistique d'une configuration

Les calculs détaillés, configurations calculées en DLA (*detailed level accounting*) ou DTA, se heurtent à des problèmes de complexité qui rendent les calculs d'opacité impossibles ou trop gourmands en ressources de calcul. En revanche, pouvoir les modéliser par une distribution statistique adéquate qui permet de reproduire de manière approchée la forme du faisceau peut donner accès au calcul de tous les faisceaux de transition. Il faut que les paramètres de la distribution soient déterminables par des méthodes moins complexes que celles nécessaires pour la construction des DTA.

Avant de rechercher les propriétés statistiques d'un faisceau de transition, il faut définir en quoi consiste le traitement statistique des niveaux d'une configuration. La modélisation d'un comportement statistique nécessite deux types de données :

- une distribution statistique continue, qui prend en argument un certain nombre de paramètres ;
- les moments de la distribution des niveaux, avec

$$\mu_0(C) = g_C \tag{4.22a}$$

$$\mu_1(C) = E_C \tag{4.22b}$$

$$\mu_n^{(c)}(C) = \frac{\sum_{\gamma J}(2J+1)\left(E_{\gamma J} - E_C\right)^n}{g_C}. \tag{4.22c}$$

La modélisation la plus courante est à l'ordre 2 : dans ce cas les valeurs à déterminer sont

- le poids statistique g_C ;
- l'énergie moyenne E_C ;
- la variance $v_c = \sigma_C^2 = \mu_2^{(c)}$.

La loi de distribution la plus facile à utiliser avec ces trois moments est la loi normale :

$$\mathcal{D}_C(E) = \mathcal{G}_{\sigma_C}(E - E_C) = \frac{g_C}{\sqrt{2\pi}\sigma_C} e^{-\frac{(E-E_C)^2}{2\sigma_C^2}}. \tag{4.23}$$

La variance v_C peut être déterminée sans diagonalisation du Hamiltonien. D'expression analytique très complexe [62], la variance se présente comme une forme quadratique dans laquelle se trouvent des produits de deux intégrales de Slater directes $F^k(n\ell, n'\ell')$ et d'échange $G^k(n\ell, n'\ell')$ et des produits de deux intégrales de spin-orbite $\xi_{n\ell}$.

La fonction de partition d'une configuration dont la structure fine n'est pas connue ne peut pas être calculée exactement. Cependant, nous verrons Chap. 8 que la connaissance des moments statistiques d'ordre 0 à 2 est suffisante pour construire de meilleures approximations des fonctions de partition détaillées que la SWAP. En première approximation, la fonction de partition d'une configuration non-détaillée peut être calculée en faisant l'approximation que son énergie est égale à $E_C = E_{C,\text{av}}$ et son poids statistique est égal à g_C. Elle s'écrit alors :

$$\mathcal{U}_C^{(\text{S})} = g_C\, e^{-\beta E_C}. \tag{4.24}$$

La grande fonction de partition et la fonction de partition interne prennent également des formes plus simples qu'en DLA :

$$\mathcal{Z}_C^{(\text{S})} = g_C\, e^{-\beta(E_C - \mu Q)} \tag{4.25}$$

Si toutes les configurations sont traitées selon des formalismes statistiques, alors la fonction de partition dans un état de charge s'écrit

$$\mathcal{U}_Q^{(\text{S})} = \sum_{C\in Q} \mathcal{U}_C^{(\text{S})} = \sum_{C\in Q} g_C\, e^{-\beta E_C}, \tag{4.26}$$

et celle de l'ensemble du plasma, grand-canonique, avec Q_C charge de la configuration C :

$$\mathcal{Z}^{(\text{S})} = \sum_C \mathcal{Z}_C = \sum_C g_C\, e^{-\beta(E_C - \mu Q_C)}. \tag{4.27}$$

La probabilité d'une configuration s'écrit :

- sous forme canonique au sein de son état d'ionisation :

$$\mathcal{P}_Q^{(\text{S})}(C) = \frac{\mathcal{U}_C^{(\text{S})}}{\mathcal{U}_Q^{(\text{S})}} = \frac{g_C\, e^{-\beta E_C}}{\sum_{C'\in Q} g_{C'}\, e^{-\beta E_{C'}}}; \tag{4.28}$$

- sous forme grand-canonique dans le plasma tout entier :

$$\mathcal{P}^{(\mathrm{S})}(C) = \frac{\mathcal{Z}_C^{(\mathrm{S})}}{\mathcal{Z}^{(\mathrm{S})}} = \frac{g_C\, e^{-\beta(E_C-\mu Q_C)}}{\sum_{C'} g_{C'}\, e^{-\beta(E_{C'}-\mu Q_{C'})}} \tag{4.29}$$

Du point de vue de la thermodynamique, le traitement d'une configuration calculée par une méthode statistique est similaire à celui d'un niveau : les deux sont connus par leur poids statistique entier et une énergie – moyenne dans le second cas –.

4.2.2 UTA (Unresolved transition array)

Les moments de la configuration déterminés précedemment permettent de modéliser statistiquement une configuration et de construire une physique statistique cohérente avec des configurations non-détaillées. Mais le but du chapitre est d'arriver à construire des faisceaux de transition statistiques qui ne nécessitent pas le calcul des raies spectrales une par une.

Dans beaucoup de faisceaux, les raies intenses ont tendance à se concentrer soit autour de l'énergie moyenne, soit, au moins, dans un intervalle spectral bien délimité à l'extérieur duquel les raies du faisceau sont très faibles. Dans l'hypothèse d'une distribution de raies ainsi concentrée, et sous des élargissements physiques bien plus importants que la largeur du faisceau, les différents profils de raies « coalescent » en une seule structure d'opacité qui peut être assez bien approchée par une distribution statistique. Nous avons exprimé formule (3.48) p. 60 l'opacité du plasma en fonction des contributions de chaque configuration du plasma $\kappa_{C\to C'}$. La formule explicite (3.49) suppose que la configuration C a sa structure fine connue. Si la structure fine – plus exactement le facteur $\frac{(2J+1)\,e^{-\beta E_{\gamma J}}}{\mathcal{U}_C}$ est modélisée par une distribution continue sur l'énergie spectrale $\mathcal{D}_{C\to C'}(h\nu)$ – alors la somme (3.49) p. 60 devient une intégrale. Plus exactement, cette intégrale est un produit de convolution entre $\mathcal{D}_{C\to C'}$ et les élargissements regroupés dans le profil $\Phi_{C\to C'}$ et s'écrit :

$$\kappa_{C\to C'}(h\nu) = \mathcal{D}_{C\to C'} * \Phi_{C\to C'}(h\nu) \tag{4.30}$$

La distribution avec laquelle il est le plus facile de modéliser la répartition des raies est la distribution gaussienne, qui prend en compte l'intensité ou la force totale du faisceau $gf_{C\to C'}$, l'énergie spectrale moyenne $h\nu_{C\to C'}$ et la variance en énergie $v_{C\to C'}$.

Désormais, on suppose que $\mathcal{D}_{C\to C'}$ obéit à une loi normale, qui a pour paramètres la force d'oscillateur totale $gf_{C\to C'}$, à l'énergie moyenne du faisceau $h\nu_{C\to C'}$ et à la variance en énergie $v_{C\to C'}$:

$$\mathcal{D}_{C\to C'}(h\nu) = \frac{\pi e^2 h}{mc}\, f_{C\to C'}\, \mathcal{G}_{\sqrt{v_{C\to C'}}}(h\nu - h\nu_{C\to C'}) \tag{4.31a}$$

$$\mathcal{D}_{C\to C'}(h\nu) = \frac{\pi e^2 h}{mc}\, f_{C\to C'}\, \frac{1}{\sqrt{2\pi\, v_{C\to C'}}}\, \exp\left(-\frac{(h\nu - h\nu_{C\to C'})^2}{2v_{C\to C'}}\right) \tag{4.31b}$$

Autrement dit, l'opacité du faisceau $C \to C'$, si l'on suppose une distribution de raies gaussienne, s'écrit

$$\kappa^{(\mathrm{S})}_{C\to C'}(h\nu) = \frac{\pi e^2 h}{mc} f_{C\to C'}\, \Phi^{(\mathrm{S})}_{C\to C'}(h\nu). \tag{4.32}$$

L'exposant (S) signifie que l'opacité est calculée en ne prenant en compte que la distribution statistique des raies spectrales. L'exposant (D) qui apparaîtra Chap. 6 signale que la grandeur considérée prend en compte l'éclatement en raies spectrales. Équation (4.32), le profil $\Phi^{(\mathrm{S})}_{C\to C'}$ est le produit de convolution de l'élargissement physique par la distribution gaussienne de raies :

$$\Phi^{(\mathrm{S})}_{C\to C'}(h\nu) = \Phi_{C\to C'} * \mathcal{G}_{\sqrt{v_{C\to C'}}}(h\nu). \tag{4.33}$$

L'idée de cette modélisation statistique est donc d'incorporer l'extension en énergie de la structure fine de la configuration dans le profil du faisceau. C'est ce qu'on appelle les *faisceaux de transition non-résolus*, souvent dénotés par l'acronyme anglais UTA (Unresolved transition array) [62]. Les UTA sont caractérisés non par leurs raies spectrales, mais par leurs moments statistiques. Le raisonnement est similaire à celui vu avec les configurations : le faisceau de transition non-résolu est une raie avec un élargissement supplémentaire : l'élargissement gaussien de la distribution de raies.

À l'ordre 0, nous pouvons choisir entre différentes grandeurs aptes à représenter l'opacité : la force de faisceau $\mathcal{S}_{C\to C'}$, la force d'oscillateur $gf_{C\to C'}$ ou les coefficients d'Einstein en émission spontanée $A_{C'\to C}$, en absorption $B_{C\to C'}$ et en émission stimulée $B_{C'\to C}$ du faisceau de transition. Elles sont proportionnelles donc équivalentes, et les formules (3.26) donnent l'opacité du faisceau de transition en fonction des coefficients d'Einstein :

$$\begin{aligned} \kappa^{\circ}_{C\to C'}(h\nu) &= \frac{hc^2}{8\pi\, \nu^2_{C'\to C}} A_{C'\to C}\, \Phi_{C\to C'}(h\nu) && (4.34)\\ &= h^2 \nu_{C\to C'}\, B_{C\to C'}\, \Phi_{C\to C'}(h\nu). && (4.35) \end{aligned}$$

À l'exception de Chap. 8 qui utilise $B_{C\to C'}$, la plupart des formules sont exprimées en fonction de la force d'oscillateur $gf_{C\to C'}$. L'expression de $gf_{C\to C'}$ s'obtient par analogie avec l'opacité détaillée de $C \to C'$ en SWAP, hypothèse primordiale des formalismes statistiques.

$$\begin{aligned} \kappa_{C\to C'} &= \frac{\pi e^2 h}{mc} \sum_{\gamma J\to\gamma' J'} \frac{2J+1}{g_C} f_{\gamma J\to\gamma' J'}\, \Phi_{\gamma J\to\gamma' J'}(h\nu) && (4.36)\\ &\simeq \frac{\pi e^2 h}{mc}\, \Phi^{(\mathrm{S})}_{C\to C'}(h\nu) \sum_{\gamma J\to\gamma' J'} \frac{2J+1}{g_C} f_{\gamma J\to\gamma' J'}, && (4.37) \end{aligned}$$

ce qui permet l'identification avec la formule (4.32) :

$$f_{C\to C'} = \sum_{\gamma J\to\gamma' J'} \frac{2J+1}{g_C} f_{\gamma J\to\gamma' J'}. \tag{4.38}$$

C'est là que l'utilisation de l'intégrale dipolaire électrique et des règles de somme [8] permet d'exprimer la force d'oscillateur du faisceau de transition indépendamment de la structure fine :

$$f_{C\to C'} = \frac{8\pi^2 m}{3h^2e^2}\, h\nu_{C\to C'}\, D^2_{\ell\ell'}\, \frac{w_\ell}{4\ell+2}\left(1-\frac{w_{\ell'}}{4\ell'+2}\right), \tag{4.39}$$

où n et n' sont omis dans les indices ℓ et ℓ' quand ça ne cause pas d'ambiguïté.

Le calcul de $h\nu_{C\to C'}$ impose de distinguer plusieurs types de faisceaux de transition et, dans un faisceau de transition, plusieurs types d'orbitales. En effet, l'énergie moyenne d'un faisceau de transition n'est pas tout à fait égale à la différence des énergies des centres de gravité des configurations initiale et finale :

$$h\nu_{C\to C'} = E_{C'} - E_C + \delta h\nu_{C\to C'}. \tag{4.40}$$

La différence $\delta h\nu_{C\to C'}$ se calcule en fonction des types de faisceaux [62, 63] évoqués Sec. 3.1.3.

1. Elle ne dépend pas des orbitales spectatrices $(\lambda)^\omega$.
2. Pour les faisceaux de transition optiques $\ell^w\ell' \to \ell^w\ell''$, $\delta h\nu_{C\to C'} = 0$.
3. Pour les faisceaux de transition de valence $\ell^{w+1} \to \ell^w\ell'$, le décalage est donné Réf. [62] :

$$\delta h\nu_{C\to C'} = w\,\frac{(2\ell+1)\,(2\ell'+1)}{4\ell+1}\left(\sum_{k>0} f_k\, F^k(\ell,\ell') + \sum_{\Delta(\ell,k,\ell')=1} g_k\, G^k(\ell,\ell')\right), \tag{4.41}$$

où

$$f_k = \begin{pmatrix}\ell & k & \ell\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\ell' & k & \ell'\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{Bmatrix}\ell & k & \ell\\ \ell' & 1 & \ell'\end{Bmatrix} \tag{4.42}$$

et

$$g_k = \begin{pmatrix}\ell & k & \ell'\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}^2\left(\frac{2}{3}\,\delta_{k,1} - \frac{1}{2\,(2\ell+1)\,(2\ell'+1)}\right) \tag{4.43}$$

s'expriment à l'aide des symboles $3j$ et $6j$ [8, 23].

4. Pour les faisceaux de transition de Moszkowski, une expression en fonction du $\delta h\nu_{C\to C'}$ de faisceaux optiques :

$$\begin{aligned}\delta h\nu_{C\to C'} \;=\; & \frac{4\ell'-w'+1}{4\ell'+1}\,\delta h\nu_{C\to C'}(\ell^{w+1}\to\ell^w\ell')\\ & +\frac{4\ell-w+1}{4\ell+1}\,\delta h\nu_{C\to C'}(\ell'^{w'+1}\to\ell'^{w'}\ell).\end{aligned} \tag{4.44}$$

Le calcul de la variance $v_{C\to C'}$ est donné Réf. [62] pour les faisceaux optiques et de valence. Analytiques mais extrêmement complexes, les formules donnant la variance des faisceaux de transition sont des sommes de deux formes quadratiques sur les intégrales de Slater des deux configurations et sur les intégrales de spin-orbite. Pour les faisceaux de Moszkowski ou avec des orbitales spectactrices ouvertes, les variances sont encore plus complexes à calculer [64, 65], à moins de supposer l'égalité des intégrales de Slater $F^k, k>0$ et G^k ainsi que celles de spin-orbite ξ [63]. Alors la variance est,

comme précédemment, la somme d'une forme quadratique sur les intégrales de Slater et d'une forme quadratique sur les intégrales de spin-orbite. La forme quadratique sur les intégrales de Slater peut s'exprimer sous la forme [43, 63] :

$$\begin{aligned} v^{(\mathrm{G})}_{C\to C'} &= \frac{(w-1)\,(4\ell+2-w)}{4\ell} v^{(\mathrm{G})}_{\ell^2\to\ell\ell'} + \frac{w'\,(4\ell+1-w)}{4\ell'} v^{(\mathrm{G})}_{\ell'^2\to\ell'\ell} \\ &+ \sum_{\ell^w\ell''\in(\lambda)^\omega} \frac{w''\,(4\ell''+3-w'')}{4\ell''+1} v^{(\mathrm{G})}_{\ell''\ell\to\ell''\ell'}, \end{aligned} \tag{4.45}$$

où $v^{(\mathrm{G})}_{\ell^2\to\ell\ell'}$, $v^{(\mathrm{G})}_{\ell'^2\to\ell'\ell}$, et les $v^{(\mathrm{G})}_{\ell''\ell\to\ell''\ell'}$ se calculent à l'aide des formules Réf. [62]. La forme quadratique sur les intégrales de spin-orbite s'écrit :

$$v^{\mathrm{so}}_{C\to C'} = \frac{1}{4}\,(\xi_1-\xi_2)\,\left[\ell(\ell+1)\xi_1 - \ell'(\ell'+1)\xi_2\right] + \frac{1}{2}\xi_1\xi_2. \tag{4.46}$$

4.2.3 Séparation spin-orbite

La concentration des raies intenses et nombreuses autour de l'énergie moyenne est un phénomène observé sur des faisceaux proches du couplage *LS*. Nous avons vu que la variance de la distribution des niveaux dans un faiceau de transition est la somme d'une forme quadratique sur les intégrales de Slater et d'une forme quadratique sur les intégrales de spin-orbite. Or, si Z augmente, les intégrales de spin-orbite, très faibles près du couplage *LS*, sont dominantes dans un calcul en couplage *jj*, à cause de leur dépendance en Z^4.

Sur une séquence isoélectronique, avec un remplissage d'orbitales constant et Z qui augmente, les intégrales de spin-orbite deviennent prépondérantes dans au moins une des orbitales, et la variance UTA en dépend principalement. Mais cette variance élevée cache le fait que le faisceau perd sa forme concentrée autour de l'énergie moyenne du faisceau. De la même manière qu'elles séparent les différentes composantes *jj* d'une configuration, les intégrales de spin-orbite séparent un faisceau de transition en plusieurs sous-faisceaux relativistes $n\ell j \to n'\ell' j'$, avec $\Delta(j,1,j') = 0$.

Le formalisme UTA est donc inadapté à des faisceaux de transition impliquant des configurations sujettes à une séparation spin-orbite importante. C'est pour cette raison que le formalisme SOSA [66] a été développé. Il est l'analogue du formalisme UTA dans l'approximation d'un couplage *jj* pur : les forces de faisceaux, les énergies spectrales moyennes et les variances sont calculables analytiquement pour certains types de sous-faisceaux relativistes [66] :

- $n\ell^w\, n'\ell'_{j'} \to n\ell^w\, n''\ell''_{j''}$;
- $n\ell^w_j\, n'\ell'_{j'} \to n\ell^w_j\, n''\ell''_{j''}$;
- $n\ell^{w+1}_j \to n\ell^w_j\, n\ell'_{j'}$.

La formule pour les sous-faisceaux de type $n\ell^w_j n'\ell' \to n\ell^w_j n''\ell''$ n'a pas été publiée. Par ailleurs, les sous-faisceaux de type Moszkowski où les deux sous-couches relativistes sont ouvertes dans les configurations de départ et d'arrivée sont calculés en supposant les intégrales de Slater égales dans les deux configurations [66]. Un des faisceaux séparés que nous rencontrons souvent dans nos calculs est le faisceau $2p^6 3d^w \to 2p^5 3d^{w+1}$, avec $Z \sim 30$. Ce faisceau ce scinde en trois sous-faisceaux relativistes qui correspondent aux transitions :

- $2p_{1/2} \rightarrow 3d_{3/2}$;
- $2p_{3/2} \rightarrow 3d_{5/2}$;
- $2p_{3/2} \rightarrow 3d_{3/2}$.

Le troisième sous-faisceau relativiste est en fait confondu avec le deuxième, car pour $Z \sim 30$ la séparation spin-orbite est importante sur l'orbitale $2p$, mais très faible sur l'orbitale $3d$. De plus, les sous-faisceaux $\Delta j = 0$, quand ils sont nettement séparés des deux autres sous-faisceaux, sont généralement beaucoup plus faibles [66]. Ils sont négligés dans l'approche que nous mettons en œuvre.

Le formalisme SOSA, dont les formules des moments sont données Réf. [43, 66], permet de calculer des faisceaux avec une séparation spin-orbite importante, mais suppose un couplage jj pur. Or la séparation spin-orbite apparaît en couplage intermédiaire, lorsque les raies les plus importantes cessent d'être concentrées autour d'une seule énergie. Les éléments non-diagonaux de la matrice Hamiltonienne sont alors suffisamment importants pour engendrer un mélange, ou *interaction des sous-configurations relativistes* (ICR), en particulier quand $\Delta n = 0$ ou 1. Ce mélange a pour effet de modifier la répartition des raies entre les différents sous-faisceaux relativistes, change les forces totales et l'énergie spectrale moyenne des différents sous-faisceaux.

4.3 Supraconfigurations et suprafaisceaux de transition

Les formalismes statistiques UTA et SOSA, utilisant une description statistique des configurations et des faisceaux de transition, permettent de décrire de manière approximative mais souvent suffisante l'opacité des plasmas d'éléments de Z intermédiaire. La complexité d'un traitement statistique adapté de chaque faisceau est très réduite par rapport à ce qu'exige un traitement DTA. De ce fait, les formalismes UTA permettent de déduire avec une faible complexité des propriétés globales de faisceaux extrêmement complexes, avec plusieurs millions voire plusieurs milliards de raies dipolaires électriques.

4.3.1 Limites de l'approche en configurations

L'approche proposée plus haut nécessite que l'opacité soit calculée pour chaque configuration. On parle de DCA [2]. Mais l'accès aux intégrales radiales et à l'énergie moyenne d'une configuration passe par le calcul des composantes radiales $R_{n\ell}(r)$, qui est autocohérent dans notre approche. Le calcul de structure atomique de la configuration finale de chaque transition est nécessaire. Le problème est que le nombre de configurations d'un état de charge devient très grand pour des plasmas de Z intermédiaires à des températures de quelques dizaines à quelques centaines d'eV.

Il n'existe pas de formule simple pour le calcul du nombre de configurations présentes dans le plasma. À densité non nulle, ce nombre est fini car la distance interionique limite la zone d'extension des fonctions d'onde des électrons. En toute rigueur, toute configuration pour laquelle il est possible de calculer un potentiel et des fonctions d'onde pour chacune des orbitales non vides doit être prise en compte. Mais, à moins d'être à forte densité – auquel cas la proximité des ions voisins limite fortement le nombre de couches électroniques –, le nombre de configurations envisageable est

[2] Détail du plasma au niveau des configurations, ou *Detailed configuration accounting*.

très élevé. Les seules informations dont on peut disposer sur une configuration avant d'avoir calculé sa structure atomique sont le poids statistique et l'énergie moyenne très approximative qu'un calcul forcément grossier permet d'obtenir. D'autre part, des faisceaux de transition correspondant au même saut monoélectronique au départ de deux configurations de même charge ionique et d'énergies proches peuvent avoir des énergies moyennes $h\nu_{C\to C'}$ proches. L'addition de ces deux faisceaux multipliés par les probabilités respectives de leur configurations de départ dans le plasma devrait donner une forme très régulière à l'opacité lié-lié résultante. S'il est possible d'approcher ces structures lié-lié par un calcul contournant le calcul de chaque faisceau de transition, alors il est possible de limiter significativement la quantité de ressources nécessaires au calcul d'opacité.

La prolifération du nombre de configurations, que nous étayerons Sec. 7.1.3, empire le problème déjà posé par la complexité du calcul détaillé de faisceaux de transition, dont la pertinence est incontestable dans certaines circonstances pour la modélisation d'un spectre. Regrouper les configurations d'énergies proches dans une seule entité sur laquelle des transitions seraient calculées permet de parer à ce problème.

4.3.2 Supraconfigurations, suprafaisceaux de transition et opacité

La méthode consiste à regrouper les orbitales d'énergies proches ou de rôle semblable dans le calcul d'opacité au sein des *supracouches*. Par rôle semblable, on entend notamment le fait que les orbitales fassent partie du cœur jamais excité par la température, ou qu'elles soient vides pour les configurations fondamentales et accueillent des électrons excités.

Une supracouche $\sigma = (n_{\sigma_\mathrm{n}}\ell_{\sigma_\mathrm{n}}, \ldots, n_{\sigma_\mathrm{x}}\ell_{\sigma_\mathrm{x}})$ regroupe toutes les orbitales dont l'énergie est comprise entre celle de l'orbitale σ_n et celle de l'orbitale σ_x. L'ensemble Σ des supracouches est une partition (au sens mathématique) de l'ensemble des orbitales. La *supraconfiguration* Ξ est définie par la charge nucléaire Z et le nombre d'électrons K_σ de chaque supracouche :

$$\Xi = \left(\sigma^{K_\sigma}\right)_{\sigma\in\Sigma} \tag{4.47}$$

Par exemple, Kr XIII : $(1s2s2p)^1 0(3s)^2(3p)^6(3d\,4s\,4p)^5$ est une supraconfiguration qui contient 12 configurations. Mais dès que les supracouches contiennent de nombreuses orbitales et sont remplies à moitié, les supraconfigurations peuvent devenir bien plus complexes, par exemple la supraconfiguration du Xénon IX, qui regroupe toutes les orbitales d'une couche

$$(1s)^2(2s\,2p)^8(3s\,3p\,3d)^{18}(4s\,4p\,4d\,4f)^{16}, \tag{4.48}$$

contient 223 configurations et près de 50 millions de niveaux. Exciter cette supraconfiguration conduit à un nombre de configurations et de niveaux encore plus élevé.

Le calcul de la structure atomique d'une supraconfiguration se fait en imposant une population K_σ dans chaque supracouche. Alors le potentiel chimique de chaque supracouche μ_σ est déterminé par l'expression de la population des orbitales de la supracouche :

$$\sum_{i\in\sigma} \frac{4\ell_i + 2}{1 + e^{\beta(\epsilon_i - \mu_\sigma)}} = K_\sigma. \tag{4.49}$$

On peut ainsi, à l'instar de l'approche DCA, obtenir des fonctions d'onde par des calculs autocohérents à l'aide des méthodes exposées Sec. 2.3.2 et 4.1.2. Le code de calcul

STA [67] a été le premier à mettre en œuvre la méthode des supraconfigurations dans un calcul d'opacité à l'É. T. L.. Cette méthode a également été utilisée dans les codes d'opacité hors-É. T. L. SCROLL [68] et AVERROES [69, 70].

Un *suprafaisceau de transition*, désormais désigné par l'acronyme anglais STA, est l'application d'un saut monoélectronique à une supraconfiguration. Un suprafaisceau est noté Ξ, $\alpha \rightarrow \beta$, où Ξ' désigne la supraconfiguration d'arrivée. Contrairement aux faisceaux de transition, il est tout à fait possible que supraconfigurations de départ et d'arrivée soient identiques, comme par exemple la transition $3d - 4p$ dans la supraconfiguration Kr XIII : $(1s2s2p)^1 0(3s)^2(3p)^6(3d\,4s\,4p)^5$ que nous avons évoquée plus haut.

L'opacité d'une supraconfiguration contient les contributions des suprafaisceaux qui en partent. La probabilité conditionnelle d'une configuration C dans une supraconfiguration Ξ peut s'écrire :

$$\mathcal{P}_\Xi(C) = \frac{\mathcal{U}_C}{\mathcal{U}_\Xi} = \frac{g_C\, e^{-\beta E_C}}{\sum_{C' \in \Xi} g_{C'}\, e^{-\beta E_{C'}}}. \tag{4.50}$$

L'opacité d'un suprafaisceau de transition peut s'écrire comme une somme des opacités de tous les faisceaux de transition qu'il contient :

$$\kappa_{\Xi,\alpha\rightarrow\beta}(h\nu) = \sum_{\substack{C\rightarrow C' \\ C\in\Xi, C'\in\Xi'}} \mathcal{P}_\Xi(C)\, \kappa_{C\rightarrow C'}(h\nu) \tag{4.51}$$

$$= \frac{\pi e^2 h}{mc} \sum_{\substack{C\rightarrow C' \\ C\in\Xi, C'\in\Xi'}} \mathcal{P}_\Xi(C) f_{C\rightarrow C'} \Phi_{C\rightarrow C'}(h\nu). \tag{4.52}$$

Si on fait l'approximation que la somme des opacités des différents faisceaux forme une seule structure qui correspond à un profil $\Phi_{\Xi,\alpha\rightarrow\beta}(h\nu)$ facilement modélisable, alors

$$\kappa_{\Xi,\alpha\rightarrow\beta}(h\nu) \simeq \frac{\pi e^2 h}{mc}\, \Phi_{\Xi,\alpha\rightarrow\beta}(h\nu) \sum_{\substack{C\rightarrow C' \\ C\in\Xi, C'\in\Xi'}} \mathcal{P}_\Xi(C) f_{C\rightarrow C'} \tag{4.53}$$

En posant

$$f_{\Xi,\alpha\rightarrow\beta} = \sum_{\substack{C\rightarrow C' \\ C\in\Xi, C'\in\Xi'}} \mathcal{P}_\Xi(C) f_{C\rightarrow C'}, \tag{4.54}$$

on en déduit que

$$\kappa_{\Xi,\alpha\rightarrow\beta} = \frac{\pi e^2 h}{m\,c} f_{\Xi,\alpha\rightarrow\beta}\, \Phi_{\Xi,\alpha\rightarrow\beta}(h\nu). \tag{4.55}$$

À l'instar de l'opacité UTA, $\Phi_{\Xi,\alpha\rightarrow\beta}$ est un profil qui convolue l'élargissement statistique et les élargissements physiques du suprafaisceau de transition. Les trois moments $f_{\Xi,\alpha\rightarrow\beta}$, moyenne $h\nu_{\Xi,\alpha\rightarrow\beta}$ et variance $v_{\Xi,\alpha\rightarrow\beta}$ peuvent être calculés de manière approximative, en utilisant les récurrences sur les fonctions de partition.

4.3.3 Récurrence sur les fonctions de partition

Soit $\Xi = \left(\sigma^{K_\sigma}\right)_{\sigma\in\Sigma}$ une supraconfiguration dans la partition en supracouches Σ de l'ensemble des orbitales.

Les fonctions de partition des supraconfigurations peuvent s'écrire comme la somme des différentes configurations, en canonique :

$$\mathcal{U}_\Xi = \sum_{C\in\Xi} g_C\, e^{-\beta E_C}, \tag{4.56}$$

et en grand-canonique :

$$\mathcal{Z}_\Xi = \sum_{C\in\Xi} g_C\, e^{-\beta(E_C+\mu K)}. \tag{4.57}$$

Mais ce qui fait tout l'intérêt des supraconfigurations est la possibilité de calculer la fonction de partition par une méthode récursive qui évite des calculs configuration par configuration. La factorisation orbitale par orbitale de la fonction de partition nécessite la linéarisation locale (à l'intérieur de chaque supraconfiguration) de l'énergie E_C de la configuration, énergie figurant dans le facteur de Boltzmann :

$$E_C \simeq \sum_i w_i^{(C)}\,\epsilon_i + E_\Xi^{(2)}, \tag{4.58}$$

où les ϵ_i sont les énergies des sous-couches déterminées pour la supraconfiguration, et

$$E_\Xi^{(2)} = \left\langle E_C - \sum_i w_i^{(C)}\epsilon_i \right\rangle_{C\in\Xi} = \sum_{C\in\Xi} \mathcal{P}_\Xi(C)\left(E_C - \sum_i w_i^{(C)}\epsilon_i\right). \tag{4.59}$$

Les populations des supracouches sont indépendantes, mais avec la contrainte du nombre d'électrons de la supraconfiguration

$$\sum_{\sigma\in\Sigma} K_\sigma = K, \tag{4.60}$$

avec $K = Z - Q$ La fonction de partition d'une supraconfiguration peut alors s'écrire comme le produit des sommes statistiques sur chaque supracouche [43, 67] :

$$\mathcal{Z}_\Xi = \prod_{\sigma\in\Sigma} \mathcal{Z}_{\sigma,K_\sigma}\left((g_i, X_i)_{i\in\sigma}\right). \tag{4.61}$$

Les sommes statistiques sur les supracouches constituent le cœur du formalisme STA. Elles permettent non seulement le calcul des fonctions de partition, mais aussi celui des moments de la distribution en énergie des supraconfigurations et des suprafaisceaux. Nous présentons ici les deux formules de récursion, dont de bonnes démonstrations sont données Réf. [43, 67]. Chaque somme statistique de supracouche est définie par

$$\mathcal{Z}_{\sigma,K_\sigma}\left((g_i, X_i)_{i\in\sigma}\right) = e^{-\beta E_\Xi^{(2)}} \underbrace{\sum_{w_{\sigma_n}=0}^{g_{\sigma_n}} \cdots \sum_{w_i=0}^{g_i} \cdots \sum_{w_{\sigma_x}=0}^{g_{\sigma_x}}}_{w_{\sigma_n}+\cdots+w_{\sigma_x}=K_\sigma} \prod_{i\in\sigma} C_{g_i}^{w_i}\, X_i^{w_i}, \tag{4.62}$$

$(g_i, X_i)_{i\in\sigma}$ regroupe deux types de quantités propres à chaque orbitale i de σ :

- g_i est la dégénérescence de la sous-couche i, mais dans la récurrence qui suit g_i peut varier entre 0 et $4\ell_i + 2$;
- $X_i = e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)}$.

Soit $\mathbf{g}$ le *vecteur des dégénérescences* :

$$\mathbf{g} = (g_1, g_2, \dots, g_i, \dots). \tag{4.63}$$

et χ_p le coefficient

$$\chi_p = -\sum_{i\in\sigma} g_i \,(-X_i)^p \,. \tag{4.64}$$

On peut démontrer [43, 67] que $\mathcal{Z}_{\sigma,K}(\mathbf{g})$ peut s'exprimer sous la forme :

$$\mathcal{Z}_{\sigma,K}(\mathbf{g}) = \frac{1}{K}\sum_{p=1}^{K} \chi_p \,\mathcal{Z}_{\sigma,K-p}(\mathbf{g}) \tag{4.65}$$

$$\mathcal{Z}_{\sigma,K}(\mathbf{g}) = \mathcal{Z}_{\sigma,K}(\mathbf{g}^j) + X_j \,\mathcal{Z}_{\sigma,K-1}(\mathbf{g}^j), \tag{4.66}$$

où $\mathbf{g}^j = (g_1, g_2, \dots, g_j - 1, \dots)$ est le vecteur des dégénérescences dans lequel la dégénérescence de l'orbitale j a été diminuée d'une unité. La récurrence est initialisée par $\mathcal{Z}_{\sigma,0}(\mathbf{g}) = 1$. La première formule de récurrence découle du développement de Taylor de la fonction génératrice

$$F(z) = \sum_{K_\sigma} z^{K_\sigma} \mathcal{Z}_{\sigma,K_\sigma}(\mathbf{g}) = \prod_{i\in\sigma} (1 + z\, X_i)^{g_i} \,, \tag{4.67}$$

où K_σ est n'importe quel remplissage permis de la supracouche. Cette première formule permet d'obtenir la fonction de partition $\mathcal{Z}_\Xi$. La seconde formule de récurrence découle de l'égalité bien connue

$$C_g^w = C_{g-1}^w + C_{g-1}^{w-1}. \tag{4.68}$$

Elle permet notamment d'accéder aux autres propriétés des supraconfigurations, tels les moments statistiques que sont l'énergie moyenne et l'extension en énergie de la supraconfiguration. Cependant, ce formalisme STA souffre de la présence de sommes alternées dans les coefficients χ_p. Ces sommes alternées peuvent poser des problèmes numériques, car la soustraction de grands nombres accroît le risque d'erreur. Cependant, un schéma numérique plus stable mais pas mis en œuvre dans notre approche a été établi par F. GILLERON et J.-C. PAIN [71]. L'ensemble des formalismes statistiques est mis en œuvre dans le code de calcul d'opacités SCO, que nous avons utilisé dans nos études.



De SCO à SCORCG

5.1 Le code SCO

Développé par F. Perrot, T. Blenski et A. Grimaldi au CEA pendant les années 1990 [42, 43], le code de calcul d'opacités SCO est un des premiers outils à appliquer le formalisme STA [67] pour le calcul d'opacité dans les plasmas chauds. Basé sur un modèle de matière semi-classique pour les électrons libres, SCO est particulièrement performant pour calculer l'opacité de plasmas d'éléments de Z intermédiaires tels que le fer ou le germanium à des températures élevées. La version utilisée pour le couplage avec RCG met en œuvre les méthodes statistiques de calcul des faisceaux de transition évoqués Chap. 4. Cette version du code SCO est également capable de sélectionner automatiquement les supraconfigurations desquelles partent les faisceaux de transition.

5.1.1 Physique mise en œuvre

Grâce à la théorie STA développée par l'équipe de Bar-Shalom [67, 72], SCO permet de faire des calculs d'opacité plus rapides que les codes DCA et plus précis que les approches à l'atome moyen. Une spécificité de SCO est le calcul autocohérent de la structure électronique de l'atome moyen puis des supraconfigurations, selon une méthode très proche de celle utilisée par Cowan dans sa routine RCN [8]. En particulier, les corrections relativistes de masse-vélocité et de Darwin sont intégrées dans le calcul autocohérent de la même manière que dans RCN [43]. Mais il y a une différence : SCO procède à un calcul autocohérent qui prend en compte l'effet de la température et de la densité sur la sphère ionique et le potentiel d'échange-corrélation [28].

L'utilisateur est libre de choisir quelles sous-couches électroniques il veut regrouper en supracouches dans son calcul. Cependant, un grand nombre de supracouches rend la sélection des supraconfigurations plus complexe, même pour des éléments de Z intermédiaire à température élevée (plusieurs centaines de eV) ou pour des éléments de Z élevé à basse température (dès 10 ou 20 eV). SCO peut construire les supracouches automatiquement, avec un critère sur la proximité en énergie des orbitales à regrouper.

Le choix des sous-couches relativistes d'où partent des SOSA est également du ressort de l'utilisateur. Les effets relativistes ne sont significatifs que pour les orbitales les plus profondes en énergie. Ils concernent essentiellement les sous-couches s et p de cœur pour les éléments de Z intermédiaire ainsi que l'orbitale $3d$ pour les éléments lourds (ex. lanthanides). Ils n'ont d'incidence que sur le traitement des faisceaux par-

tant de ou arrivant sur des orbitales relativistes : le formalisme SOSA est alors appliqué, avec omission du faisceau $\Delta j = 0$ généralement négligeable. SCO peut, sur demande, procéder à la *relaxation* de certains sauts monoélectroniques [27, 73], c.-à-d. au calcul de la structure électronique de la configuration d'arrivée. La transition d'un électron d'une orbitale à une autre modifie son interaction avec les autres électrons liés, ce qui change toutes les fonctions d'onde à un électron. Un faisceau de transition *relaxé* est un faisceau de transition dont la supraconfiguration d'arrivée est l'objet d'un nouveau calcul de structure atomique pour prendre en compte l'effet de l'altération des fonctions d'onde par la transition sur les intégrales de structure atomique, en particulier l'énergie moyenne[1].

L'élargissement des suprafaisceaux de transition a plusieurs composantes :

- la largeur statistique $\sigma = \sqrt{\mu_2^{(c)}} = \sqrt{\mu_2 - \mu_1^2}$, qui permet de modéliser à l'ordre 2 la distribution statistique des raies dans le suprafaisceau ;
- la largeur collisionnelle w_c, due aux collisions électroniques inélastiques ;
- la largeur Doppler w_d, liée à la température, en général faible si $k_B T$ est de l'ordre quelques dizaines ou centaines d'électron-Volt ;
- la largeur naturelle w_n, négligeable car extrêmement faible dans les conditions d'utilisation de SCO ;
- la largeur Stark w_i, due au champ engendré par les ions voisins.

Des détails plus précis sur le calcul de ces élargissements sont donnés annexe B, où les formules de Dimitrijević et Konjević [74] détaillées permettent d'avoir une estimation de la largeur collisionnelle et les formules de Rozsnyai [75] une estimation de la largeur Stark. Une version modifiée de ces formules est utilisée dans SCO, car :

1. Les intégrales dipolaires électriques $D_{n\ell,n'\ell'}$ sont calculées à partir des fonctions d'onde de SCO, alors que les auteurs de l'article original utilisaient des formules hydrogénoïdes.
2. L'autre modification intervient sur le facteur de Gaunt inélastique $g'(x)$ pour x grand (voir annexe B) :

$$g'(x) = \frac{\sqrt{3}}{\pi}\left[0,5 + \ln\left(\frac{2\,(Z^*+1)\,k_B T}{n^2 \Delta E_{\ell,\ell\pm1}}\right)\right], \tag{5.1}$$

où n est le nombre quantique principal pour lequel les transitions $\ell \rightarrow \ell \pm 1$ d'énergie $\Delta E_{\ell,\ell\pm1}$ sont calculées.

En approche statistique, la largeur statistique du faisceau σ doit être ajoutée à w_g, d'où un élargissement gaussien total

$$w_g^{(S)} = \sqrt{w_i^2 + w_d^2 + \mu_2^{(c)}} \tag{5.2}$$

[1] Les formules UTA et STA [62, 67] faisant l'hypothèse, dans le cas le plus général, d'une égalité entre les intégrales radiales, hors énergie moyenne, dans la configuration de départ et celle d'arrivée, la relaxation de l'ensemble des intégrales radiales est inenvisageable dans le cas général, à moins de compliquer énormément les formules de calcul des faisceaux statistiques [63].

À ces élargissements physiques peut être ajouté l'élargissement w_x lié à la mesure, soit pendant le calcul d'opacité, auquel cas w_x est ajouté à $w_g^{(\mathrm{S})}$, soit après le calcul, auquel cas les spectres sont convolués par le profil correspondant à l'élargissement gaussien w_x. Les élargissements dans SCO sont les paramètres de gaussienne et lorentzienne qui convoluent les raies et les faisceaux.

SCO calcule l'opacité à l'intérieur de la grille spectrale dite *générale* ou *statistique* $G^{(\mathrm{S})} = (E_\mathrm{n}, E_\mathrm{x}, P^{(\mathrm{S})}) = (E_\mathrm{n}, E_\mathrm{x}, \Delta)$ que l'utilisateur définit en donnant les bornes inférieure E_n et supérieure E_x ainsi que le nombre de points $P^{(\mathrm{S})}$. On a $P^{(\mathrm{S})}\Delta = E_\mathrm{x} - E_\mathrm{n}$ La résolution de $G^{(\mathrm{S})}$, de l'ordre de 0,1 eV à 1 eV, ce qui est suffisant compte tenu de la largeur moyenne des faisceaux et des sous-faisceaux, rarement en-dessous de 1 eV. En revanche, le traitement détaillé des faisceaux de transition nécessite une résolution bien plus fine, en particulier lors du calcul d'opacités moyennes.

5.1.2 Déroulement d'un calcul

Un calcul SCO se déroule en deux étapes. La première étape, ou *mode préparatoire*, est un calcul autocohérent à l'atome moyen [42, 43]. La distribution des électrons du continuum est calculée selon l'approche semi-classique de Thomas-Fermi dans la version de SCO utilisée pour le couplage avec le code RCG*. Il est tout à fait possible de calculer cette distribution quantiquement par résolution de l'équation de Schrödinger, au prix d'un calcul de structure électronique plus long. Le calcul à l'atome moyen est principalement utilisé pour obtenir le peuplement moyen des sous-couches électroniques ainsi que sa fluctuation autour de la valeur moyenne. Ces moyennes et fluctuations de population, ainsi que les limites en ionisation inférieure Q_n et supérieure Q_x, permettent de sélectionner automatiquement les supraconfigurations[2] pour le calcul d'opacité à proprement parler. Le critère de sélection automatique des supraconfigurations peut être basé :

- sur le rang en abondance : les N_x supraconfigurations les plus abondantes sont retenues ;
- sur l'abondance relative : les supraconfigurations dont la probabilité excède un seuil $\mathcal{P}_\mathrm{n}$ sont retenues.

Le seuil $\mathcal{P}_\mathrm{n}$ et le nombre N_x sont ajustables par l'utilisateur.

La seconde étape, ou *mode exécutoire* est le calcul d'opacité lui-même. Après un calcul à l'atome moyen comme à la première étape, le calcul en supraconfigurations est effectué. Calculer en supraconfigurations implique de déterminer la structure électronique de chaque supraconfiguration, en particulier les fonctions d'ondes des électrons dans chaque supracouche. La structure électronique doit être calculée non seulement pour la supraconfiguration de départ, mais aussi pour chaque supraconfiguration d'arrivée d'un suprafaisceau de transition relaxé comme expliqué Sec. 5.1.1. Le calcul autocohérent est l'étape la plus longue du calcul d'opacité pour une supraconfiguration. Le calcul de la relaxation est fait pour les supraconfigurations d'arrivée des sauts monoélectroniques choisis. Les suprafaisceaux de transition relaxés ajoutent chacun un calcul autocohérent, ce qui multiplie d'autant le temps de calcul de SCO.

Une fois les structures électroniques obtenues, le spectre lié-lié est calculé suprafaisceau par suprafaisceau. Certains de ces suprafaisceaux de transition, comme suggéré

[2] Le code SCO ne différencie pas les supracongfigurations réduites à une seule configuration des autres supraconfigurations, dites *plurielles*. De même, une supracouche peut être réduite à une seule orbitale.

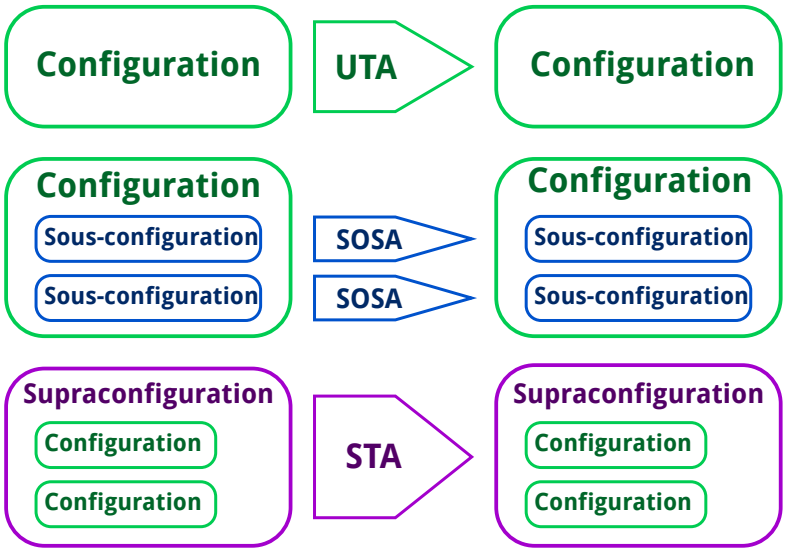


FIGURE 5.1 – Schéma des différents types de faisceaux de transition lié-lié rencontrés lors d'un calcul SCO.

Fig. 5.1, sont réduits à un faisceau de transition unique. Si l'orbitale de départ et celle d'arrivée du suprafaisceau $n\ell - n'\ell'$ sont relativistes, alors deux sous-faisceaux relativistes sont calculés : $n\ell_{\ell+\frac{1}{2}} - n'\ell'_{\ell'+\frac{1}{2}}$ et $n\ell_{\ell-\frac{1}{2}} - n'\ell'_{\ell'-\frac{1}{2}}$. La population de l'orbitale $n\ell$ est répartie entre les deux sous-couches relativistes au prorata de leur dégénérescence, à savoir 2ℓ pour $n\ell_{j=\ell-\frac{1}{2}}$ et $2\ell+2$ pour $n\ell_{j=\ell+\frac{1}{2}}$. Les moments d'ordre 0 à 2 des suprafaisceaux de transition sont calculés par des formalismes UTA, SOSA ou STA selon le type d'espèce en présence. Calculée à partir de la structure atomique, la fonction de partition $\mathcal{U}_\Xi$ de la supraconfiguration est utilisée pour calculer la probabilité de la supraconfiguration dans le plasma, ainsi que son *abondance relative*

$$\mathcal{A}_\Xi = \frac{\mathcal{P}(\Xi)}{\mathcal{P}(\Xi_0)} = \frac{\mathcal{Z}_\Xi}{\mathcal{Z}_0}, \tag{5.3}$$

où Ξ_0 est la première supraconfiguration du calcul – pas toujours la plus abondante – et $\mathcal{Z}_0 = \mathcal{Z}_{\Xi_0}$ la grande fonction de partition associée à cette supraconfiguration. L'avantage des fonctions de partition est qu'elles permettent de comparer les probabilités et les abondances de deux espèces sans avoir déterminé celles de toutes les espèces présentes dans le plasma, lorsque toutes les supraconfigurations n'ont pas encore été calculées. L'opacité totale du plasma s'exprime en fonction des contributions de chacune des supraconfigurations :

$$\kappa(h\nu) = \sum_\Xi \mathcal{P}(\Xi)\,\kappa_\Xi(h\nu) \tag{5.4}$$

$$= \frac{\sum_\Xi \mathcal{Z}_\Xi\,\kappa_\Xi(h\nu)}{\sum_\Xi \mathcal{Z}_\Xi}, \tag{5.5}$$

ce qui permet de séparer le calcul en deux sommes, avec division après la fin du calcul en supraconfigurations. Ce principe est conservé et étendu au calcul du spectre hybride dans SCORCG.

La dernière étape consiste à mettre en forme les données résultantes du calcul, à savoir les contributions des différents types de processus à l'opacité ainsi que les données calculées à partir de l'opacité. Ainsi SCO renvoie :

- les différentes contributions des processus à l'opacité : libre-libre, lié-libre et lié-lié ;
- la transmission et l'émission du plasma ;
- les opacités moyennes de Planck et Rosseland.

5.1.3 Statistique des populations

La sélection des supraconfigurations est un problème très complexe. Il est possible de partir d'un calcul d'atome moyen pour la construire, à l'aide des énergies ε_k des orbitales k à l'atome moyen. L'idée consiste à parcourir toutes les supraconfigurations possibles dans les limites d'ionisation fixées par l'utilisateur, et à ne retenir que celles qui sont les plus abondantes. Une fois l'ensemble des supraconfigurations admissibles parcouru, le calcul de l'énergie et de la fonction de partition de chaque supraconfiguration permet de déterminer leurs abondances et de ne garder que celles qui répondent au critère de sélection, qu'il soit en rang ou en probabilité. Un tel parcours peut devenir très fastidieux lorsque la température est très élevée ou le découpage en supracouches très fin. Plusieurs centaines à plusieurs milliers de supraconfigurations peuvent être nécessaires pour faire converger certains calculs d'opacité.

La statistique des populations que nous avons étudiée dans le cadre de l'atome moyen Sec. 4.1.3 conserve sa pertinence dans un calcul en supraconfigurations. Valables pour des orbitales, ces formules peuvent être étendues à des supracouches dans le formalisme STA, en utilisant l'additivité sur les orbitales i de la supracouche σ :

- des dégénérescences g_i :
$$g_\sigma = \sum_{i\in\sigma} g_i \; ; \tag{5.6}$$
- des populations moyennes $w_i^* = g_i f_i^*$:
$$w_\sigma^* = g_\sigma f_\sigma^* = \sum_{i\in\sigma} g_i f_i^* = \sum_{i\in\sigma} w_i^* \; ; \tag{5.7}$$
- des variances en population v_i :
$$v_\sigma = \sum_{i\in\sigma} g_i f_i^* (1 - f_i^*) = \sum_{i\in\sigma} v_i. \tag{5.8}$$

On peut lire dans ces formules les moments à l'ordre 0, 1 et 2 des distributions en population des orbitales.

L'approche, qui s'était avérée assez peu efficace pour un calcul en configurations, devient ici plus intéressante, car d'une part les supracouches ont des poids statistiques plus élevés, d'autre part elles contiennent, à l'atome moyen, la somme du nombre moyen d'électrons de chaque sous-couche contenue.

5.2 SCO + RCG → SCORCG

Le code SCORCG est le produit du couplage du code SCO avec le programme RCG. Le choix de coupler le code SCO avec le programme RCG de Cowan pour construire le code de calcul hybride d'opacités SCORCG provient de la très grande compatibilité des deux programmes et des possibilités qu'ils offrent. Optimisé pour que son exécution soit enchaînée après celle des autres routines de Cowan (RCN et RCN2), RCG a été partiellement réécrit. Processus maître, SCO a été également adapté à envoyer et recevoir les données calculées par RCG.

5.2.1 Choix de SCO et RCG

Bien que destinés à des objectifs différents, les codes SCO [42, 43] et RCN/RCG [8, 48, 49] ont de nombreux points communs, tant du point de vue numérique que de la physique. Du point de vue informatique, les deux codes sont écrits en Fortran 77, ce qui a simplifié la construction de l'interface SCO : RCG entre les deux programmes. Mais l'intérêt informatique ne se limite pas qu'à un langage commun.

Le code Cowan est composé de plusieurs routines pour effectuer un calcul complet de structure atomique. Les routines RCN et RCN2 effectuent le calcul autocohérent de la structure atomique et fournissent, entre-autres, l'ensemble des données nécessaires à la diagonalisation du Hamiltonien. Ces données sont récupérées par RCG, qui calcule la structure fine de chaque configuration en diagonalisant le Hamiltonien et les transitions permises entre les configurations. L'exécution de RCN et RCG peut être enchaînée très facilement, un des fichiers de sortie de l'un ayant le même format que le fichier d'entrée du suivant [48, 49]. L'intérêt d'une séparation entre plusieurs programmes fait que chacun peut être exécuté seul, ainsi RCG seul peut être utilisé pour recevoir les données de structure atomique de SCO et non de RCN. L'autre grand avantage du code Cowan est qu'il permet de mettre en pratique toute la théorie étayée et discutée Réf. [8]. Cette polyvalence fait du code Cowan un outil de choix pour introduire des calculs détaillés dans un code d'opacité statistique.

La physique modélisée dans les deux programmes, Cowan et SCO, est très similaire [43]. La méthode autocohérente utilisée par Cowan [8] pour résoudre la structure atomique a été reprise par SCO, y compris pour le traitement approché des effets relativistes : termes de masse-vélocité, de Darwin et de spin-orbite sont modélisés à l'identique dans les deux programmes. SCO effectue un calcul autocohérent pour l'atome moyen, puis chaque supraconfiguration d'où partent les faisceaux, ainsi que toutes les supraconfigurations d'arrivée de chaque transition relaxée.

Ainsi, SCO et RCG, par les possibilités qu'ils offrent et la physique sur laquelle ils reposent, sont le meilleur choix pour construire un code combinant calculs détaillés et statistiques. Néanmoins, ce choix qui a été fait très rapidement au début de la thèse s'est avéré ardu à mettre en œœuvre, en raison de la complexité de l'écriture de chacun des codes. En particulier, le programme RCG a dû être adapté à un usage intensif.

Il existe un autre code de calcul atomique qui a été couplé avec des approches statistiques. Il s'agit de FAC (Flexible Atomic Code) [34] qui a été utilisé par S. HANSEN pour construire un code de calcul mélangeant niveaux et configurations hors É. T. L. [76]. Cependant, ce code de calcul présente trois inconvénients majeurs :

- il repose sur le potentiel paramétrique, qui calcule plus vite mais bien moins précisément le potentiel atomique et les fonctions d'onde ;

- il ne permet pas le paramétrage des intégrales radiales, et n'est donc pas aussi souple que Cowan ; il nécessite de décomposer SCO, ne conservant que les routines de calcul et reprogramment intégralement le déroulé du calcul.

5.2.2 Adaptation de RCG

Le couplage de SCO et RCG et l'appel automatique de RCG au sein de SCO nécessitent la réécriture de RCG en tant que routine de SCORCG, désormais appelée RCG*. L'entrée de RCG est un fichier qui contient toutes les données nécessaires à un calcul de faisceau de transition. Mais ce fichier doit être écrit selon un format particulièrement complexe et contraignant pour les besoins d'un couplage avec un autre code. De plus, la lecture et l'écriture sur disque dur sont plus coûteuses que les mêmes opérations sur mémoire vive (RAM).

Dans RCG*, les principales adaptations ont été faites au niveau de l'interface ainsi qu'au niveau du calcul du spectre. Ce qui concerne l'interface est abordé plus bas. En ce qui concerne le spectre, les tailles de tableaux de la version « longue » ont été augmentées aussi loin que possible[3]. Le code de Cowan avait été écrit à l'époque où la mémoire vive disponible dans un gros calculateur se comptait en mégaoctets, alors qu'en 2011 celle disponible dans le moindre ordinateur de bureau se compte en gigaoctets .

Les matrices Hamiltoniennes ainsi que les raies sont enregistrées dans des tableaux dont les tailles ne sont pas indépendantes des tailles des autres tableaux du code [49]. En particulier, la taille maximale `kMx` d'un bloc de matrice J a été portée de 500 à 4000, et la taille maximale `kLAM` des tableaux de raies spectrales a été augmentée de 50 000 à 800 000. La taille de la liste de termes spectroscopiques `kLSi` peut atteindre 1000.

Version	`kLSi`	`kMx`	`kLAM`
11	47	300	50 000
11 long	119	900	50 000
`RCG*`	1000	4000	800 000

TABLE 5.1 – Évolution des tailles des différents tableaux dans les versions utilisées du code Cowan.

Augmenter plus encore la taille des tableaux ou permettre une allocation dynamique de mémoire nécessiterait de telles modifications dans le code qu'il serait moins coûteux d'écrire un nouveau code de structure atomique, ou d'en utiliser un autre tel FAC.

Une variable de température a été ajoutée à RCG* afin de pouvoir calculer des faisceaux de transition à l'É. T. L. hors SWAP. Dans la routine de calcul de la structure fine des configurations, le calcul de la fonction de partition interne de la configuration a été ajouté :

$$\mathcal{U}_C = \sum_{\gamma J} (2J+1)\, e^{-\beta(E_{\gamma J} - E_C)} \tag{5.9}$$

où E_C est, rappelons-le, l'énergie du centre de gravité de la configuration.Ainsi, la température peut être prise en compte dans le calcul des faisceaux de transition. Au choix

[3]En Fortran 77, tous les tableaux sont statiques : leur taille est fixée avant le démarrage de l'instance d'une routine. Les tableaux de taille variable, comme celui qui stocke les raies d'un faisceau de transition, ont en fait une taille fixe supposée suffisamment élevée pour pouvoir stocker les résultats des calculs. La taille « effective » du tableau est indiquée par un entier.

de l'utilisateur, la routine RCG* peut renvoyer soit l'intensité SWAP des raies gf, soit l'intensité pondérée par le facteur de Boltzmann $gfe^{-\beta(E_{\gamma J}-E_C}$.

Le calcul des raies spectrales a été la partie la plus remaniée de RCG*. La routine de Cowan a un système de tri de raies qui est utile pour présenter un faisceau de transition, pas pour transmettre des raies spectrales à un code d'opacités. Ce tri des raies est une des étapes de RCG la plus consommatrice en temps de calcul, il a donc été supprimé. Quel que soit l'algorithme, la complexité du tri des raies spectrales en fonction de leur énergie est de l'ordre du carré du nombre de raies dans le « pire des cas ».

A été ajoutée la pondération par le facteur de Boltzmann $g_{\gamma J}e^{-\beta(E_{\gamma J}-E_C)}$, alors que RCG calcule les faisceaux de transition sans prise en compte de la température dans le peuplement des états d'une configuration (SWAP). Une autre méthode de calcul des raies d'un faisceau a été ajoutée : elle consiste à ne plus stocker les raies une par une avec leurs énergies, mais à accumuler les raies dont l'énergie correspond au même point de la grille spectrale de SCORCG. Enfin, le calcul des moments de faisceaux de transition d'ordre supérieur à 2 est possible dans la version adaptée du code de Cowan, avec et sans prise en compte de la température et du facteur de Boltzmann sur le remplissage des niveaux.

5.2.3 Interface SCO : RCG*

Le couplage SCO avec RCG* est construit de manière à garantir la cohérence entre les calculs détaillés et les calculs statistiques. Pour cela, il faut que la routine de RCG modifiée prenne en entrée toutes les données que SCO peut fournir pour le calcul d'un faisceau de transition.

Nous rappelons que le calcul d'un faisceau de transition requiert plusieurs informations sur la structure des configurations de départ et d'arrivée, à savoir :

- les sous-couches ouvertes dans l'une ou l'autre configuration sous la forme $\ell_i^{w_i}$;
- l'énergie du centre de gravité de chaque configuration, l'important étant la différence entre les deux énergies ;
- les intégrales radiales, coulombiennes et de spin-orbite, en respectant l'ordre de lecture de RCG, à savoir :
  1. les intégrales de Slater directes $F^k(ii), k = 0, 2, \ldots, 2\ell_i$,
  2. les intégrales de spin-orbite $\xi(i)$,
  3. les intégrales de Slater directes $F^k(ij), k = 0, 2, \ldots, \min(2\ell_i, 2\ell_j)$,
  4. les intégrales de Slater d'échange $G^k(ij), k = \left|\ell_i - \ell_j\right|, \left|\ell_i - \ell_j\right| + 2, \ldots, \ell_i + \ell_j$,

  et pour chaque type d'intégrale dans l'ordre des i puis des j puis des k croissants ;
- la nature de la transition électronique (toujours dipolaire électrique) ainsi que l'intégrale dipolaire électrique.

Ces informations sont déjà utilisées par SCO pour le calcul statistique des faisceaux, et leur passage à RCG est géré par des routines d'interface qui se chargent d'établir la correspondance entre les tableaux de RCG et ceux de SCO.

En retour, RCG fournit à SCO le faisceau de transition détaillé sous deux formes possibles :

- énergie et force exactes de chaque raie ;
- somme des forces des raies dont l'énergie spectrale correspond à un point de la grille détaillée.

La première option, la plus naturelle à concevoir, requiert le calcul du profil de chaque raie, ce qui peut revenir au calcul de myriades de profils pour chaque faisceau. La seconde option consiste à regrouper dans une même « case » en énergie les raies dont l'énergie peut être approchée sur la grille détaillée de sorte que cette multitude de raies $\gamma J \rightarrow \gamma' J'$ très proches soient traitées comme une seule super-raie Λ, d'énergie E_Λ et d'intensité

$$gf_\Lambda = \sum_{\gamma J \rightarrow \gamma' J' \in \Lambda} g_{\gamma J} f_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'}. \tag{5.10}$$

L'élargissement de la super-raie Λ est identique à celui de chacune des raies du faisceau de transition.

La routine RCG* calcule également d'autres quantités auxquelles seul un calcul détaillé permet d'accéder. Les moments statistiques des faisceaux peuvent être calculés à des ordres supérieurs à 2. Ils peuvent prendre en compte ou non la température, via la pondération par le facteur de Boltzmann. Enfin, RCG* renvoie la fonction de partition interne de la configuration de départ qui s'écrit :

$$U_C = \sum_{\gamma J \in C} (2J+1)\, e^{-\beta(E_{\gamma J} - E_{C,\mathrm{av}})} \tag{5.11}$$

et permet de construire une fonction de partition hybride. Le fonctionnement d'un calcul de faisceau de transition dans SCORCG est synthétisé Fig. 5.2.

La réalisation de l'interface SCO : RCG* est compliquée par le fait que RCG* demande des données d'entrée bien précises et en quantité variable selon le faisceau à détailler. Différents systèmes d'unités sont utilisés par les deux programmes :

- eV, Ha (Hartree) et température (kT) pour SCO ;
- eV et surtout kK (kilokayser, 1 K $=$ 1 cm^{-1}) pour RCG*.

5.3 Possibilités du code SCORCG

Sans prétendre être un manuel du code SCORCG, cette section énumère toutes les possibilités du code SCORCG pour des calculs d'opacités à l'équilibre thermodynamique local.

5.3.1 Physique ajustable

Il est possible de choisir les modèles physiques utilisés dans SCORCG de manière assez similaire à ce qui peut être fait dans SCO. Tous les paramètres gérant la physique dans SCO peuvent être réglés de manière semblable dans SCORCG. Les unités des paramètres de physique ajustables sont en eV pour la température et l'énergie spectrale et en CGS pour les autres grandeurs. Les autres paramètres gérant la physique sont des drapeaux activant la modélisation de certains phénomènes dans le calcul.

Le code SCORCG utilise trois grilles spectrales pour ses calculs.

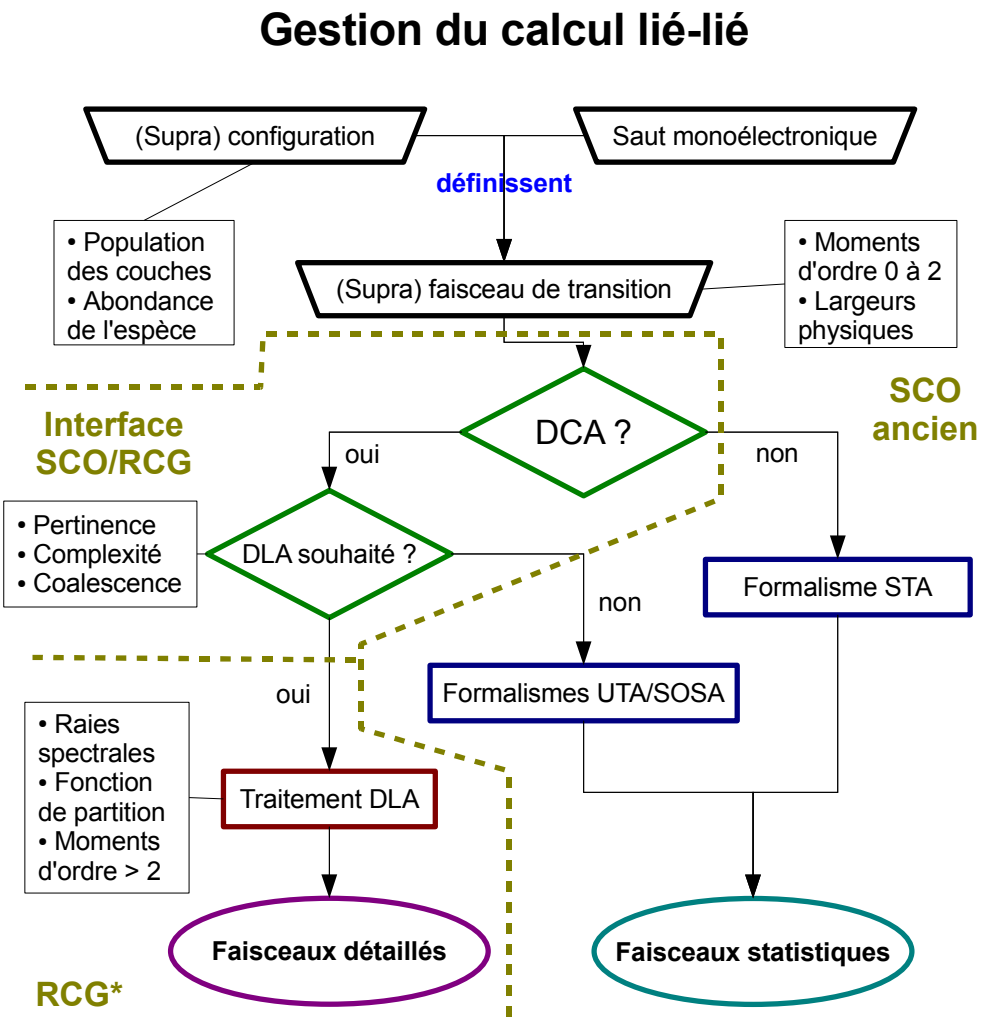


FIGURE 5.2 – Schéma de fonctionnement de l'approche hybride dans SCORCG.

1. La *grille générale* $G^{(\mathrm{S})} = G(E_\mathrm{n}, E_\mathrm{x}, N^{(\mathrm{S})})$ définie Sec. 5.1.1 est la grille dans laquelle SCO calcule son opacité, aussi bien lié-lié que lié-libre ou libre-libre. Cette grille contient 20000 points au maximum. Les opacités moyennes sont calculées si, et seulement si, la borne inférieure de cette grille est 0 eV.

2. La *grille détaillée* $G^{(\mathrm{D})} = G(e_\mathrm{n}, e_\mathrm{x}, N^{(\mathrm{D})})$ est la grille réservée au stockage des résultats des calculs détaillés. L'intervalle de cette grille est toujours compris dans l'intervalle de la grille principale : $e_\mathrm{n} \geq E_\mathrm{n}$ et $e_\mathrm{x} \leq E_\mathrm{x}$. Elle peut contenir jusqu'à un million de points et permet une résolution spectrale bien plus fine que la grille principale.

3. La *grille de sortie* est la grille dans laquelle la transmission et l'émissivité du plasma sont calculées. Son intervalle peut être partiellement ou totalement recouvert par celui de la grille détaillée, les routines de convolution assurent un raccord cohérent aux limites entre les domaines détaillés et statistiques.

Il y a donc deux grilles spectrales dans un calcul SCORCG, à laquelle une troisième permet de choisir la résolution pour l'exploitation des spectres.

À l'instar de celle de SCO, la grille générale du code hybride est limitée à 20 000 points et entrée en unités de température. Cette grille est largement suffisante pour les calculs de faisceaux statistiques. La grille détaillée peut contenir jusqu'à un million de points. Elle permet d'avoir un calcul d'opacité spectrale bien plus résolu, en particulier dans la zone en énergie où de nombreux faisceaux doivent être détaillés, sans rendre pour autant le calcul trop consommateur en ressources. Les calculs à haute résolution sont indispensables à basse densité (moins de 10^{-3} g/cm^3) pour un calcul de moyenne de Rosseland ou des calculs de transmission semi-saturée dans lesquels ce sont les creux de l'opacité qui jouent un rôle majeur.

1. La résolution spectrale du spectre expérimental est variable, en partie parce que le spectre expérimental est donné en fonction de la longueur d'onde du rayonnement, et la longueur d'onde est proportionnelle à l'inverse de l'énergie. Elle reste cependant la moins fine, avec environ 3 à 4 points par eV dans la fenêtre spectrale

2. La résolution spectrale de la grille statistique est de $0,2$ eV.

3. La résolution spectrale de la grille détaillée est de 5.10^{-3} eV. La grille détaillée est 40 fois plus fine que la grille statistique.

4. La résolution spectrale de la grille de sortie est de $0,04$ eV. La grille de sortie est 5 fois plus fine que la grille statistique.

Les différentes grilles utilisées dans le calcul sont illustrées Fig. 5.3 à travers un détail de spectre en transmission de l'aluminium à 20 eV et $0,01$ g/cm^3. Nous avons fait un calcul d'opacité avec trois pas différents dans la grille détaillée : *fin* 1.10^{-3} eV, *moyen* 5.10^{-3} eV et *large* 2.10^{-2} eV. La représentation d'un spectre avec des variations sur des intervalles spectraux de l'ordre de 10^{-3} à 10^{-2} eV est illisible, nous avons adopté une représentation graphique de chaque opacité en trois courbes :

- la moyenne glissante sur δ, calculée sur la largeur δ : il s'agit, pour chaque énergie spectrale x, de la moyenne de l'opacité sur l'intervalle $[x, x+\delta]$;
- l'enveloppe supérieure sur δ, calculée sur la largeur δ : il s'agit, pour chaque énergie spectrale x, du maximum de l'opacité sur l'intervalle $[x, x+\delta]$;
- l'enveloppe inférieure sur δ, calculée sur la largeur δ : il s'agit, pour chaque énergie spectrale x, du minimum de l'opacité sur l'intervalle $[x, x+\delta]$.

On obtient ainsi une allure de la zone dans laquelle les spectres en opacité varient.

Un bon exemple nous est donné par l'opacité de la couche M du cuivre aux alentours de 20 eV et 10^{-3} g/cm^3, calculée ici avec les 200 supraconfigurations les plus abondantes.

Le choix d'une résolution plus ou moins fine dans le calcul de l'opacité d'un plasma à faible densité, avec des élargissements faibles et des faisceaux très poreux, a des conséquences sur son exactitude comme le montre Fig. 5.4. Cette opacité a été calculée sur deux grilles spectrales : l'une avec un pas de 10^{-3} eV ou un pas de 5.10^{-3} eV change peu la forme globale du spectre. Les moyennes glissantes sont très proches, ainsi que les minima et maxima matérialisés par les enveloppes à $0,1$ eV. Si les moyennes glissantes sont très proches, l'enveloppe du calcul grossier est d'amplitude réduite par rapport

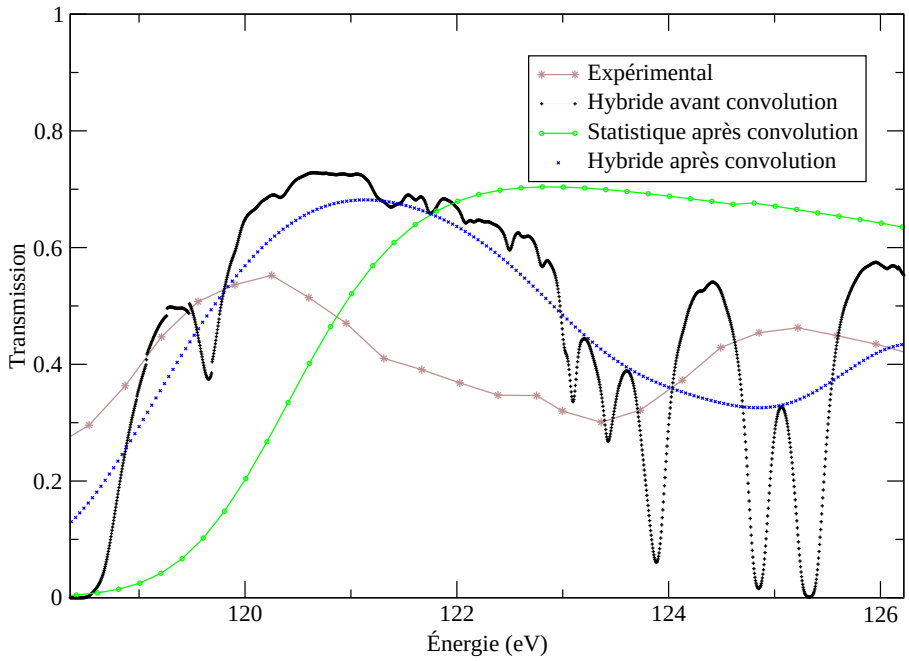


FIGURE 5.3 – Détail d'un spectre en transmission mettant en évidence les différentes grilles dans un calcul en transmission.

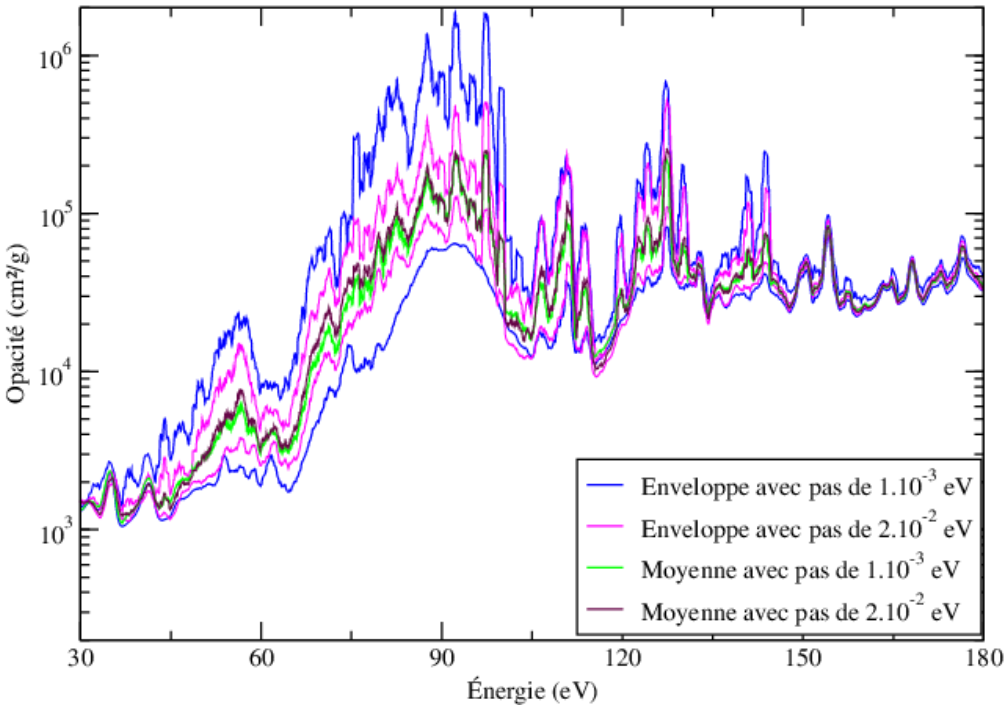


FIGURE 5.4 – Enveloppes et moyennes glissantes du spectre en opacité de la couche M du cuivre, avec $\delta = 0,1$ eV.

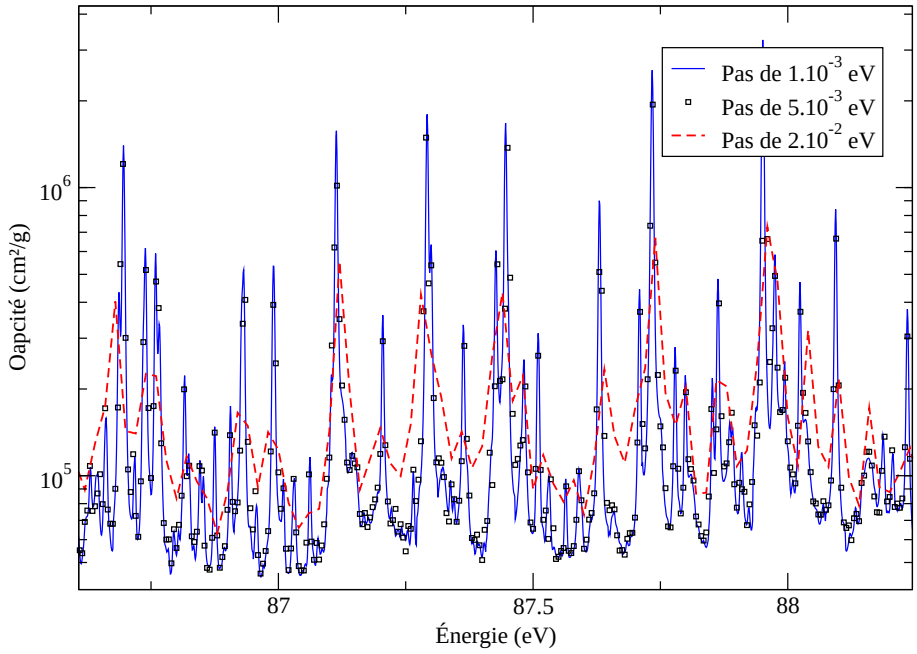


FIGURE 5.5 – Détail de l'opacité autour de 87 eV montrant l'effet de la résolution de la grille sur la forme du spectre.

à celle du calcul fin. Pour des énergies de photon de l'ordre de quelques $k_B T$, cette moindre amplitude a des conséquences sur la moyenne de Rosseland.

Un agrandissement sur une fraction du spectre en opacité entre 87 et 88 eV Fig. 5.5, montre l'effet d'une résolution plus ou moins grossière sur un détail du spectre en opacité. Les structures larges restent apparentes, mais les plus petites coalescent et de nombreux trous sont plus ou moins comblés. Or, dans un spectre très poreux, ce sont ces trous qui contribuent le plus à la moyenne de Rosseland. Pour évaluer la résolution adéquate pour un calcul d'opacité, il faut estimer quel élargissement de raie doit être précisément restitué. Vouloir restituer l'ensemble des élargissements du spectre revient à choisir une résolution très fine, d'où des convolutions de raies très coûteuses. Une bonne solution peut être de calculer la moyenne harmonique des FWHM de tous les faisceaux de transition, avec pour pondération le produit de la force de faisceau par l'abondance de la supraconfiguration.

Le programme doit être en mesure de décider automatiquement quel faisceau de transition détailler et quel autre calculer en UTA. Il utilise pour cela différents critères lui permettant de décider de la pertinence ou non d'un calcul détaillé, en tenant compte des limites imposées par le programmeur, de phénomènes physiques et de considérations algorithmiques. De tels critères sont ajustables en fonction des souhaits de l'utilisateur. On peut notamment choisir :

- la dégénérescence maximale d'une configuration, y compris excitée, à détailler en structure fine ;

- le nombre de raies maximal d'un faisceau de transition à détailler ;
- le nombre de raies minimal d'un faisceau de transition à ne pas détailler ;
- des critères qui anticipent l'aspect rugueux ou lisse d'un faisceau de transition à détailler sur lesquels nous reviendrons Sec. 7.3.

Pour un calcul rapide permettant de connaître la position en énergie des grandes structures, un calcul laissant une grande place au statistique, voire complètement statistique, peut être exécuté en quelques minutes sur une station de bureau typique de 2010. Mais un calcul beaucoup plus détaillé peut être fait avec SCORCG, sur des configurations et des faisceaux relativement complexes. Selon la complexité du spectre à calculer, l'exécution du code peut prendre de quelques minutes à quelques heures.

5.3.2 Gestion de la structure électronique

SCORCG hérite de la manière dont SCO gère la structure électronique sur laquelle se basent les calculs. On peut en particulier entrer la liste des sous-couches et supracouches sur lesquelles les calculs doivent être faits, décider quelles orbitales sont relativistes et définir les sauts monoélectroniques à relaxer. Le nombre de supraconfigurations ou la probabilité minimale d'une supraconfiguration « sélectionnée » doit être indiqué, afin de donner une limite au calcul d'opacité.

Le générateur automatique de SCO tel que décrit Sec. 5.1 a été maintenu tel quel dans SCORCG. Néanmoins, le calcul hybride impose quelques contraintes supplémentaires :

1. Le calcul de faisceaux détaillés n'est possible qu'au départ d'une configuration unique, avec un remplissage électronique connu exactement pour chaque sous-couche. Par conséquent, aucun calcul détaillé n'est possible dès lors qu'une supraconfiguration contient plus d'une configuration.
2. Les supracouches doivent être entièrement définies par l'utilisateur pour une opacité hybride.

Introduire des calculs détaillés dans une supraconfiguration nécessite l'extraction des configurations à détailler à l'intérieur de cette supraconfiguration. Les sous-couches électroniques n, ℓ d'une configuration doivent donc être individualisées dans l'exécution d'un calcul hybride. Cependant, rien n'empêche d'introduire des supracouches pour regrouper les orbitales extérieures. Les supraconfigurations ayant au moins un électron dans une des supracouches extérieures sont traitées par SCORCG comme elles étaient traitées dans SCO. Le formalisme STA s'applique pour le calcul des suprafaisceaux de transition issus de ces supraconfigurations.

Un calcul hybride avec SCORCG requiert que la plupart des orbitales susceptibles de contenir des électrons, et la totalité des orbitales en contenant « sûrement », soient individualisées. Pour éviter l'apparition d'un trop grand nombre de supraconfigurations, il est souhaitable que les orbitales les plus externes soient regroupées dans une ou plusieurs supracouches. À la limite, les sous-couches en-deçà de la sous-couche limite sont individualisées, les sous-couches au-delà sont regroupées dans une unique *supracouche-chapeau*. Les sous-couches doivent être individualisées au moins jusqu'à la limite supérieure de la couche de valence, car la population de chaque orbitale a une faible probabilité d'être nulle. Pour un calcul plus détaillé, il est possible et même souhaitable de détacher les sous-couches d'une à deux couches au-delà de la couche de valence.

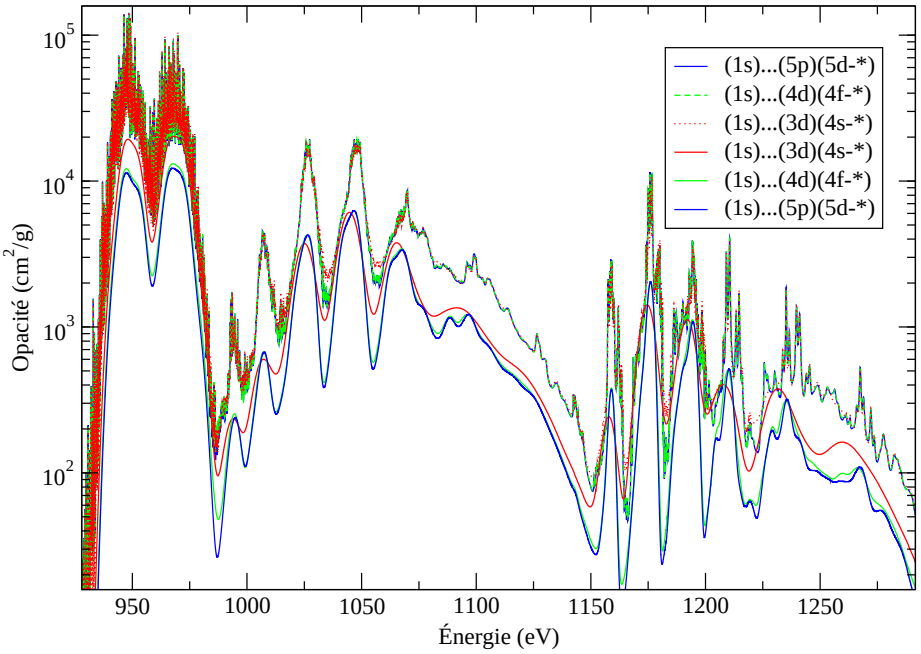


FIGURE 5.6 – Comparaisons des contributions détaillée et statistique en fonction de la supracouche-chapeau.

Cependant, individualiser trop de sous-couches a deux inconvénients :

- le temps de calcul peut considérablement augmenter, car le nombre et la complexité de faisceaux à détailler croît fortement ;
- le sélecteur de configurations tel que programmé dans SCO est limité dans le nombre de sous-couches qu'il peut réellement prendre en compte.

À travers un calcul de l'opacité de la couche L sur un plasma de cuivre à 20 eV et une densité de 1 mg/cm^3, l'effet de la supracouche-chapeau sur le spectre en opacité peut être mis en évidence. Nous avons étudié trois cas :

1. La supracouche-chapeau commence à $5d$: les supracouches sont de la forme $(1s)\cdots(3s)(3p)(3d)(4s)(4p)(4d)(4f)(5s)(5p)(5d-\dots)$.
2. La supracouche-chapeau commence à $4f$: les supracouches sont de la forme $(1s)\cdots(3s)(3p)(3d)(4s)(4p)(4d)(4f-\dots)$.
3. La supracouche-chapeau commence à $4s$: les supracouches sont de la forme $(1s)\cdots(3s)(3p)(3d)(4s-\dots)$.

On a imposé au calcul, dans chaque cas, de sélectionner les 200 supraconfigurations les plus abondantes telles qu'obtenues à partir des conditions thermodynamiques. Les trois listes de supraconfigurations obtenues sont indépendantes.

Les contributions détaillée et statistique dans un calcul hybride en fonction de la supracouche-chapeau sont comparées Fig. 5.6. Que cette supracouche ne commence

qu'à l'orbitale $5d$ ou à l'orbitale $4f$ change très peu les contributions. En revanche, si la supracouche-chapeau commence à la sous-couche $4s$, on constate que la contribution statistique est beaucoup plus « lisse » et domine les autres contributions d'un facteur 2. Ce facteur n'est pas plus élevé, en dépit de l'absence de détail de la couche N,car d'une bonne partie des configurations excitées, même si elles sont individualisées, les faisceaux qui en partent sont trop complexes. La contribution réduite des faisceaux détaillés explique que la contribution statistique reste importante malgré le détail de la couche N.

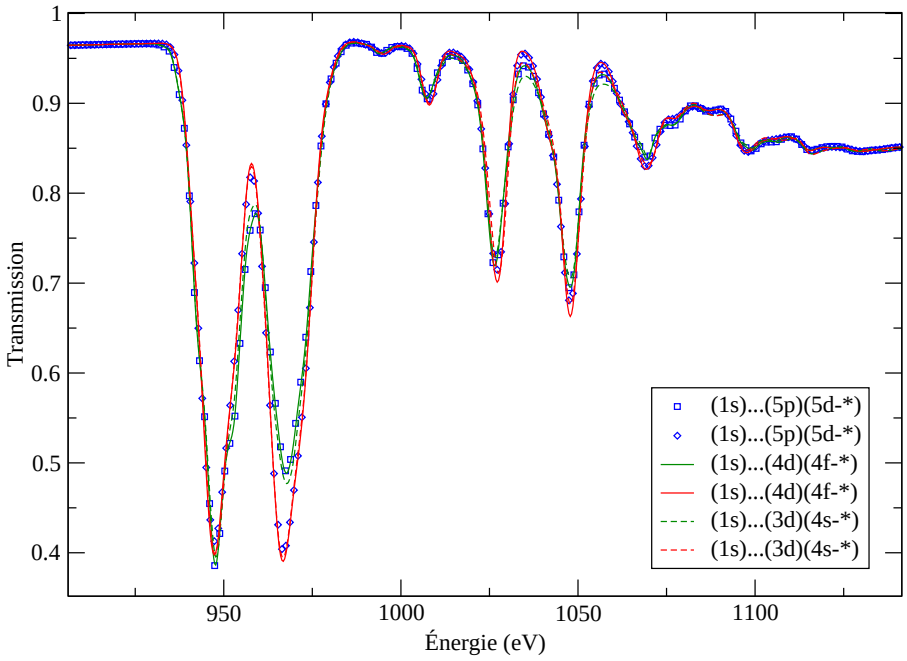


FIGURE 5.7 – Comparaison de transmissions à travers un milieu optiquement mince en fonction de la supracouche-chapeau. Les courbes plus ou moins discontinues au-dessus indiquent l'opacité lié-lié totale, les courbes continues dessous indiquent la contribution statistique au lié-lié.

Les transmissions calculées Fig. 5.7 avec des orbitales individualisées jusqu'à $4d$ et $5p$ sont quasi-superposées. Si la supracouche-chapeau commence en $4s$, alors la transmission hybride est très légèrement altérée, au profit de la transmission statistique dans la structure d'absorption $2p-3d$ vers 960 eV, vers un évasement des structures d'absorption $2p-4d$ vers 1040 eV. On peut en conclure que reculer la supracouche-chapeau au-delà d'une orbitale apporte peu de précision sur le spectre :

- si cette orbitale n'appartient pas à la couche de valence des ions les moins chargés, pour des calculs en émission ou en transmission avec faible absorption ;
- si cette orbitale n'est pas dans la couche immédiatement au-dessus de la couche de valence pour tous les autres types de calcul d'opacité.

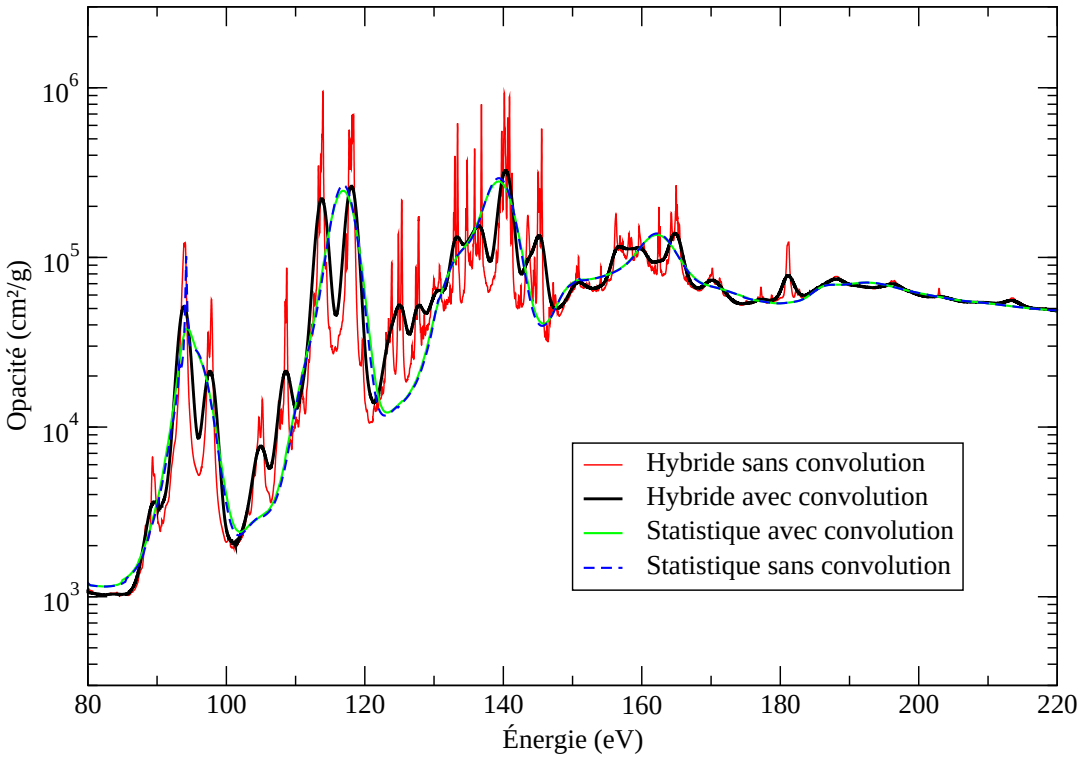


FIGURE 5.8 – Comparaison de l'opacité en couche L de l'aluminium à 20 eV et 10 mg/cm^3 avec ou sans convolution des faisceaux et des raies par un élargissement expérimental de paramètre 0,7 eV.

5.3.3 Spectres calculés par SCORCG

Les spectres sont calculés dans l'approche complètement statistique (SCO) et dans l'approche hybride (SCORCG). La convolution par un élargissement instrumental permet de confronter le résultat d'un calcul à un spectre expérimental, tenant ainsi compte des erreurs de mesure. L'élargissement instrumental, toujours modélisé comme gaussien, peut être pris en compte de deux manières dans le calcul :

- soit il est ajouté aux élargissements physiques lors de la convolution des faisceaux de transition, l'opacité est dite *convoluée avant* ; cette méthode n'a aucun sens physique mais peut faciliter la représentation de certains spectres très détaillés ;
- soit il est ajouté lors de la convolution de la transmission, de l'émission et éventuellement de l'opacité, l'opacité est dite *convoluée après* ;

La convolution avant permet une économie de ressources, à plus forte raison si un critère de coalescence permet le calcul statistique des faisceaux de transition peu poreux. La convolution avant change très peu l'opacité entièrement statistique Fig. 5.8, et « lisse » le spectre hybride aux structures bien plus résolues.

En calcul détaillé ou hybride, utiliser la convolution avant peut être intéressant pour faire apparaître l'allure d'un spectre détaillé, illisible si les raies sont nombreuses et fines. En revanche, utiliser la convolution avant pour un calcul en transmission ou en Rosseland est dangereux, ainsi que le prouve le spectre en transmission déduit de ce spectre en opacité.

La convolution avant et la convolution après ont un effet presque identique sur le spectre en transmission statistique Fig. 5.9. Mais les deux méthodes de convolution

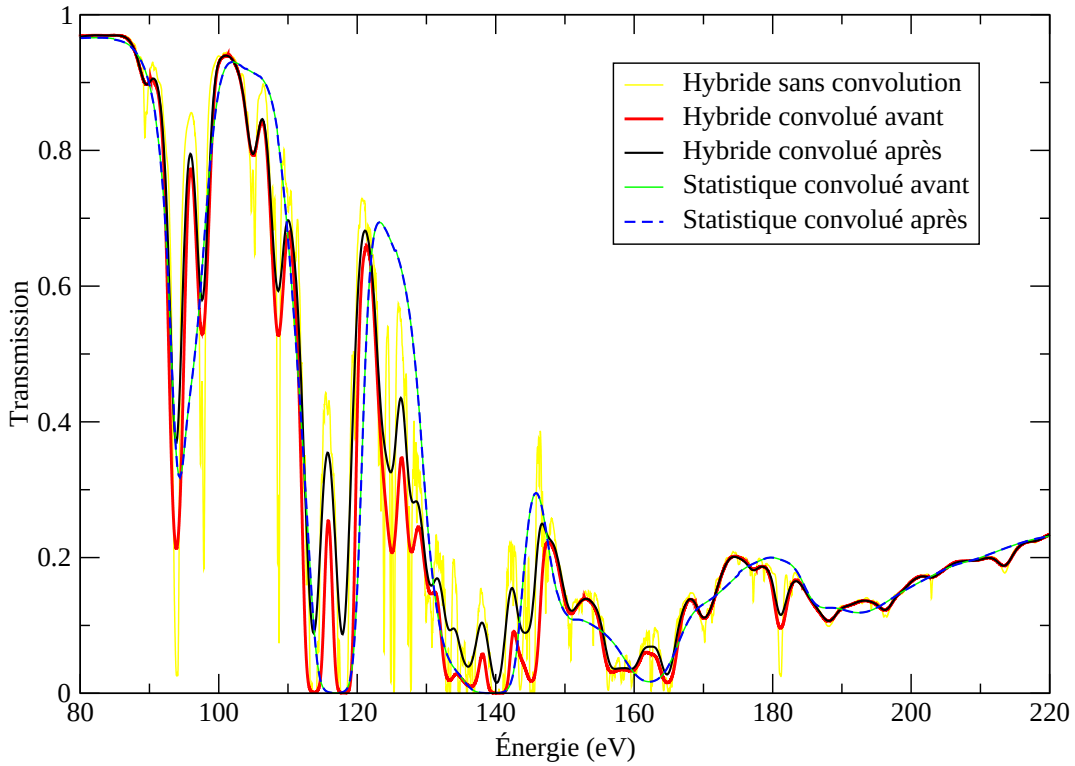


FIGURE 5.9 – Comparaison des spectres en transmission détaillés et statistiques obtenus par les deux méthodes de prise en compte de l'élargissement expérimental.

ont des effets différents sur le spectre détaillé. Dans la zone non-saturée comprise en-dessous de 130 eV, on constate des différences non négligeables entre les spectres produits par l'une ou l'autre des méthodes. Dans la zone saturée comprise entre 130 et 170 eV, ainsi qu'entre 110 et 120 eV, les deux spectres deviennent très différents. Le spectre issu de la convolution avant a tendance à saturer bien plus que le spectre issu de la convolution après. La convolution avant « gomme » tous les petits minima locaux de l'opacité spectrale, or ce sont ces petits minima locaux du spectre en opacité qui deviennent les maxima locaux du spectre en transmission et qui, en moyenne, augmentent la transmission.

La convolution avant, qui peut faire gagner du temps dans le calcul d'opacité, n'a peu d'incidence sur la transmission que si la transmission reste élevée en presque tout point du spectre, autrement dit si le produit de la masse surfacique par l'opacité reste globalement inférieur à l'unité :

$$\rho l \kappa(h\nu) \leq 1. \tag{5.12}$$

L'outil de mise en œuvre présenté, nous allons examiner le formalisme et les limites de notre approche.



VALIDATION, APPORTS ET LIMITES DE SCORCG

Le code SCORCG est le premier outil automatique à mettre en œuvre une approche cohérente du calcul d'opacité lié-lié mêlant calculs détaillés et statistiques à l'É. T. L., approche dont les formules sont précisées dans ce chapitre. L'approche hybride est ensuite testée dans différentes conditions, y compris celles qui peuvent être rencontrées dans les expériences. Enfin, les limites physiques et numériques de SCORCG sont précisées.

6.1 Calcul hybride de l'opacité lié-lié

Un objectif de notre approche hybride est de garantir le maximum de cohérence dans le calcul des fonctions de partition et de l'abondance des différentes espèces. Mélanger niveaux, configurations et supraconfigurations pose un problème de cohérence dès lors que la température est prise en compte dans le peuplement des différents niveaux d'une configuration. Pour plus de simplification, nous considérons un seul état d'ionisation Q, ce qui nous permet d'utiliser les fonctions de partition sans s'encombrer d'un facteur contenant le potentiel chimique. L'approche hybride se généralise à des plasmas contenant plusieurs états de charge Q à l'aide de l'équation de Saha-Boltzmann (1.31) p. 18. Cette dernière équation n'a aucune conséquence sur la validité du formalisme que nous présentons ici.

6.1.1 Expression de l'opacité hybride

L'opacité lié-lié totale étant la somme des contributions à l'opacité de chaque processus, son calcul se ramène au calcul de l'opacité de chaque transition, qu'elle soit un suprafaisceau, un faisceau ou une raie, avant pondération par la probabilité de l'espèce de départ. Un calcul hybride d'opacité s'effectue sur un plasma contenant des supraconfigurations Ξ non-réduites à une configuration, des configurations C et des niveaux d'énergie γJ. Comme le mélange de configurations est négligé, chaque niveau fait partie d'une configuration.

Il y a donc deux types de configurations : celles d'où ne part aucun DTA, qui constituent l'ensemble (S), et celles, regroupées sous l'ensemble (D), d'où part au moins un DTA et dont la structure fine est connue. L'opacité lié-lié contient donc :

- des STA au départ des supraconfigurations ;
- des UTA au départ des configurations ;
- des raies spectrales, rassemblées en DTA.

Cependant, l'approche hybride ne doit pas exclure la possibilité que des faisceaux statistiques et d'autres détaillés puissent partir d'une même configuration. Hors de la plage en énergie spectrale où les faisceaux peuvent être détaillés, aucun calcul détaillé de faisceau de transition ne peut être effectué. Par conséquent, l'ensemble des configurations qui font l'objet d'un calcul DTA pour les faisceaux dont l'énergie est à l'intérieur de la grille détaillée peuvent faire l'objet de calculs UTA pour les autres faisceaux de transition.

L'opacité lié-lié hybride de l'état d'ionisation Q, notée $\kappa_Q^{(\mathrm{H})}$, est la somme de deux opacités :

$$\kappa_Q^{(\mathrm{H})}(h\nu) = \kappa_Q^{(\mathrm{S})}(h\nu) + \kappa_Q^{(\mathrm{D})}(h\nu). \tag{6.1}$$

$\kappa_Q^{(\mathrm{S})}$ est l'opacité des transitions traitées selon des approches statistiques :

$$\kappa_Q^{(\mathrm{S})}(h\nu) = \sum_{\Xi} \mathcal{P}_Q(\Xi) \sum_{\Xi,\, \alpha\to\beta} \kappa_{\Xi,\,\alpha\to\beta}(h\nu) + \sum_{C\in(\mathrm{D})\cup(\mathrm{S})} \mathcal{P}_Q(C) \sum_{\substack{C',\, C\to C' \\ \text{statistique}}} \kappa_{C\to C'}(h\nu). \tag{6.2}$$

$\kappa_Q^{(\mathrm{D})}$ est l'opacité des faisceaux de transition traités raie par raie :

$$\kappa_Q^{(\mathrm{D})}(h\nu) = \sum_{C\in(\mathrm{D})} \mathcal{P}_Q(C) \sum_{\substack{C',\, C\to C' \\ \text{détaillé}}} \underbrace{\sum_{\gamma J\in C} \mathcal{P}_C(\gamma J) \sum_{\substack{\gamma J\to\gamma' J' \\ \gamma J\in C,\, \gamma' J'\in C'}} \kappa_{\gamma J\to\gamma' J'}(h\nu)}_{\text{Faisceau détaillé : expression (3.49)}} \tag{6.3a}$$

$$= \sum_{C\in(\mathrm{D})} \sum_{\substack{C',\, C\to C' \\ \text{détaillé}}} \sum_{\gamma J\in C} \mathcal{P}_Q(\gamma J) \sum_{\substack{\gamma J\to\gamma' J' \\ \gamma J\in C,\, \gamma' J'\in C'}} \kappa_{\gamma J\to\gamma' J'}(h\nu). \tag{6.3b}$$

La somme (6.2) sur les configurations ne se limite pas à (S), car des faisceaux calculés selon des approches statistiques peuvent partir de configurations objets de calculs DLA pour d'autres faisceaux de transition. Il est en revanche évident qu'un faisceau de transition détaillé ne peut partir d'une configuration non-détaillée, d'où la limitation à (D) de la somme (6.3).

Les probabilités figurant dans les équations précédentes peuvent être exprimées à l'aide des fonctions de partition que nous avons construites Chap. 1, 2 et 4. Ainsi, la probabilité conditionnelle d'un niveau dans une configuration s'écrit

$$\mathcal{P}_C(\gamma J) = \frac{\mathcal{U}_{\gamma J}}{\mathcal{U}_C}, \tag{6.4}$$

la probabilité conditionnelle d'une configuration dans l'état d'ionisation Q s'écrit

$$\mathcal{P}_Q(C) = \frac{\mathcal{U}_C}{\mathcal{U}_Q} \tag{6.5}$$

et la probabilité conditionnelle d'une supraconfiguration dans l'état d'ionisation Q s'écrit

$$\mathcal{P}_Q(\Xi) = \frac{\mathcal{U}_\Xi}{\mathcal{U}_Q}. \tag{6.6}$$

Le passage de l'état d'ionisation Q à l'ensemble du plasma nécessite l'introduction de la grande fonction de partition $\mathcal{Z}_Q$. Celle-ci s'obtient en incorporant le potentiel chimique :

$$\mathcal{Z}_Q = \mathcal{U}_Q\, e^{\beta\mu Q} \tag{6.7}$$

et

$$\mathcal{P}(Q) = \frac{\mathcal{Z}_Q}{\mathcal{Z}} = \frac{\mathcal{U}_Q\, e^{\beta\mu Q}}{\sum_{Q'} \mathcal{U}_{Q'}\, e^{\beta\mu Q'}}. \tag{6.8}$$

Les fonctions de partition $\mathcal{U}_Q$ doivent toutes être exprimées par rapport à la même énergie de référence. Ainsi, l'opacité lié-lié totale s'écrit comme formule (3.57) p. 62 :

$$\kappa_{\mathrm{bb}}^{(\mathrm{H})}(h\nu) = \sum_Q \mathcal{P}(Q) \left(\kappa_Q^{(\mathrm{S})}(h\nu) + \kappa_Q^{(\mathrm{D})}(h\nu) \right) \tag{6.9a}$$

$$= \sum_Q \mathcal{P}(Q) \kappa_Q^{(\mathrm{S})}(h\nu) + \sum_Q \mathcal{P}(Q) \kappa_Q^{(\mathrm{D})}(h\nu). \tag{6.9b}$$

Cette séparation de l'opacité en une partie détaillée et une partie statistique va être exploitée par la suite. Ce sont justement les expressions des fonctions de partition qui sont à l'origine d'un conflit entre fonctions de partition pour lequel un arbitrage est nécessaire.

6.1.2 Fonctions de partitions détaillées et statistiques

Nous avons établi Chap. 3 l'expression des fonctions de partition $\mathcal{U}_{\gamma J}$, $\mathcal{U}_C$ et $\mathcal{U}_Q$ et des probabilités conditionnelles $\mathcal{P}_Q(C)$ et $\mathcal{P}_C(\gamma J)$ dans l'hypothèse où tous les faisceaux de transition sont détaillés. L'indexation (D) fait référence au fait qu'une partie au moins du calcul a été faite en DLA. Les mêmes fonctions de partition et probabilités conditionnelles ont été établies Chap. 4 dans l'hypothèse où tous les faisceaux de transition sont calculés selon une approche statistique. L'indexation (S) fait référence au fait que la totalité du calcul n'a pas fait usage du DLA.

La probabilité ne peut être obtenue qu'une fois que toutes les supraconfigurations ont été calculées. L'usage de l'abondance est plus pratique lors d'un calcul d'opacité supraconfiguration après supraconfiguration comme dans SCORCG ou même en parallèle :

$$\mathcal{A}(X) = \frac{\mathcal{U}_X}{\mathcal{U}_0} \tag{6.10}$$

pour toute espèce X. Cette abondance permet de remédier à des problèmes numériques éventuels liés à l'évaluation des sommes statistiques, en rapprochant de l'unité les quantités associées à chaque supraconfiguration. Nous rappelons qu'il est équivalent

Quantité	Statistique / SWAP	Détaillé / Hybride
$\mathcal{U}_{\gamma J}$	$\mathcal{U}_{\gamma J}^{(\mathrm{S})} = (2J+1)\ e^{-\beta E_C 1}$	$\mathcal{U}_{\gamma J}^{(\mathrm{D})} = (2J+1)\ e^{-\beta E_{\gamma J}}$
$\mathcal{U}_C, \quad C \in (\mathrm{D})$	$\mathcal{U}_C^{(\mathrm{S})} = g_C\, e^{-\beta E_C}$	$\mathcal{U}_C^{(\mathrm{D})} = \mathcal{I}_C\, e^{-\beta E_C}, \quad C \in (\mathrm{D})$
$\mathcal{U}_C, \quad C \in (\mathrm{S})$	$\mathcal{U}_C^{(\mathrm{S})} = g_C\, e^{-\beta E_C}$	Non définie
$\mathcal{U}_Q$	$\mathcal{U}_Q^{(\mathrm{S})} = \sum_C \mathcal{U}_C^{(\mathrm{S})} = \sum_C g_C\, e^{-\beta E_C}$	$\mathcal{U}_Q^{(\mathrm{D})} = \sum_{C\in(\mathrm{S})} \mathcal{U}_C^{(\mathrm{S})} + \sum_{C\in(\mathrm{D})} \mathcal{U}_C^{(\mathrm{D})} = \sum_{C\in(\mathrm{S})} g_C\, e^{-\beta E_C} + \sum_{C\in(\mathrm{D})} \mathcal{I}_C\, e^{-\beta E_C}$
$\mathcal{P}_C(\gamma J)$	$\mathcal{P}_C^{(\mathrm{S})}(\gamma J) = \dfrac{2J+1}{g_C}$	$\mathcal{P}_C^{(\mathrm{D})}(\gamma J) = \dfrac{(2J+1)\ e^{-\beta\left(E_{\gamma J}-E_C\right)}}{\mathcal{I}_C}$
$\mathcal{P}_Q(C)$	$\mathcal{P}_Q^{(\mathrm{S})}(C) = \dfrac{\mathcal{U}_C^{(\mathrm{S})}}{\sum_{C'} \mathcal{U}_{C'}}$	$\mathcal{P}_Q^{(\mathrm{D})}(C) = \dfrac{\mathcal{U}_C}{\sum_{C'\in(\mathrm{S})} \mathcal{U}_{C'}^{(\mathrm{S})} + \sum_{C'\in(\mathrm{D})} \mathcal{U}_{C'}^{(\mathrm{D})}}$

TABLE 6.1 – Récapitulatif de l'expression des fonctions de partition et des probabilités utilisées dans l'approche hybride.

de comparer les fonctions de partition, les abondances ou les probabilités de deux supraconfigurations.

Les fonctions de partition et probabilités utilisées dans l'approche hybride à l'état de charge Q sont regroupées Tab. 6.1. Il réutilise notamment la fonction de partition interne $\mathcal{I}_C$ définie formule (3.51) p. 60. En particulier, la fonction de partition hybride $\mathcal{U}_Q^{(\mathrm{D})}$ est définie comme la somme des fonctions de partition statistiques $\mathcal{U}_C^{(\mathrm{S})}$ des configurations non-détaillées et les fonctions de partition $\mathcal{U}_C^{(\mathrm{D})}$ des configurations détaillées.

Pour une configuration C à l'origine d'au moins un DTA, l'inégalité de Jensen [77, 78] peut être appliquée à la fonction exponentielle dans $\mathcal{I}_C$:

$$\mathcal{I}_C = g_C \sum_{\gamma J\in C} \frac{2J+1}{g_C}\, e^{-\beta\left(E_{\gamma J}-E_C\right)} \tag{6.11a}$$

$$= g_C \left\langle e^{-\beta\left(E_{\gamma J}-E_C\right)} \right\rangle_{\gamma J\in C} \tag{6.11b}$$

$$\mathcal{I}_C \geq g_C\, e^{-\beta\left\langle E_{\gamma J}-E_C\right\rangle_{\gamma J\in C}}. \tag{6.11c}$$

Autrement dit, nous avons l'inégalité $\mathcal{I}_C \geq g_C$ qui entraîne l'inégalité sur les fonctions de partition détaillées au moins une fois :

$$\mathcal{U}_C^{(\mathrm{D})} \geq \mathcal{U}_C^{(\mathrm{S})}. \tag{6.12}$$

Nous avons donc deux *jeux* de fonctions de partition qui peuvent être utilisés pour déterminer l'abondance de chaque supraconfiguration, configuration et niveau.

Si, pour toutes les supraconfigurations, y compris les configurations détaillées au moins une fois, la fonction de partition statistique $\mathcal{U}_C^{(\mathrm{S})}$ est utilisée, alors la fonction de

partition totale s'écrit[2] :

$$\mathcal{U}_Q^{(\mathrm{S})} = \sum_{\Xi} \mathcal{U}_\Xi + \sum_{C\in(\mathrm{S})} \mathcal{U}_C + \sum_{C\in(\mathrm{D})} \mathcal{U}_C^{(\mathrm{S})}. \tag{6.13}$$

Les probabilités des configurations, qu'elles soient détaillées ou statistiques, s'écrivent alors :

$$\mathcal{P}_Q(C) = \mathcal{P}_Q^{(\mathrm{S})}(C) = \frac{\mathcal{U}_C^{(\mathrm{S})}}{\mathcal{U}_Q^{(\mathrm{S})}} = \frac{g_C\, e^{-\beta E_C}}{\sum_{\Xi} \mathcal{U}_\Xi + \sum_{C\in(\mathrm{S})} \mathcal{U}_C + \sum_{C\in(\mathrm{D})} \mathcal{U}_C^{(\mathrm{S})}}. \tag{6.14}$$

Les abondances relatives et probabilités des supraconfigurations sont inchangées par rapport à un calcul purement statistique. Ce jeu de fonctions de partition et de probabilités est appelé *jeu statistique*.

Il est tout à fait possible de construire une fonction de partition prenant en compte le fait qu'une partie des configurations sont détaillées. Pour ces dernières, la fonction de partition $\mathcal{U}_C^{(\mathrm{D})}$ est considérée. Alors la fonction de partition totale s'écrit :

$$\mathcal{U}_Q^{(\mathrm{D})} = \sum_{\Xi} \mathcal{U}_\Xi + \sum_{C\in(\mathrm{S})} \mathcal{U}_C + \sum_{C\in(\mathrm{D})} \mathcal{U}_C^{(\mathrm{D})}. \tag{6.15}$$

Alors les probabilités des configurations s'écrivent différemment selon que la configuration est détaillée ou non :

$$\mathcal{P}_Q(C) = \mathcal{P}_Q^{(\mathrm{D})}(C) \tag{6.16a}$$

$$\mathcal{P}_Q(X) = \begin{cases} \dfrac{\sum_{\gamma J\in C}(2J+1)\, e^{-\beta E_{\gamma J}}}{\mathcal{U}_Q^{(\mathrm{D})}} & \text{si } X = C \text{ configuration détaillée} \\ \dfrac{g_C\, e^{-\beta E_C}}{\mathcal{U}_Q^{(\mathrm{D})}} & \text{si } X = C \text{ configuration statistique} \\ \dfrac{\mathcal{U}_\Xi}{\mathcal{U}_Q^{(\mathrm{D})}} & \text{si } X = \Xi \text{ supraconfiguration non triviale.} \end{cases} \tag{6.16b}$$

Ce jeu de fonctions de partition et de probabilités est appelé *jeu détaillé*.

Les configurations détaillées au moins une fois sont caractérisables par deux fonctions de partition, l'une détaillée, l'autre statistique. Cela se répercute dans l'expression des fonctions de partition des états d'ionisation, et nous devons choisir entre deux jeux de fonctions de partition, *a priori* aussi pertinents l'un que l'autre. Nous allons voir que, quelle que soit la manière dont ces deux jeux sont utilisés, il est impossible de garantir l'ensemble des égalités qui sont considérées commes nécessaires dans un calcul d'opacité. Un « arbitrage » est donc nécessaire.

[2] Pour les configurations jamais détaillées (ensemble (S)), une seule fonction de partition est définie, et la notation $\mathcal{U}_C$ dénote $\mathcal{U}_C^{(\mathrm{S})}$ sans ambiguïté.

6.1.3 Utilisation des jeux détaillés et statistiques

Face au problème causé par l'existence de deux fonctions de partition dans un calcul d'opacité hybride, des compromis sont nécessaires et leurs conséquences doivent être étudiées.

Approche SWAP

L'approche SWAP contourne le problème en calculant en SWAP tous les faisceaux de transition, DTA compris. Le problème du choix des jeux de fonctions de partition ne se pose plus, car seule la fonction de partition statistique $\mathcal{U}_C^{(S)}$ est calculée. La température n'est pas du tout prise en compte dans le calcul des DTA (faisceaux détaillés). En négligeant la largeur des configurations de départ devant la température, ce qui est raisonnable lorsque la température est élevée (au-delà de 50 à 100 eV pour des configurations à dégénérescence élevée), on peut supposer que le facteur de Boltzmann est fixe à l'intérieur de chaque configuration. Pour toutes les configurations, y compris détaillées, la fonction de partition utilisée est $\mathcal{U}_C^{(S)}$ et les fonctions de partition s'écrivent :

$$\mathcal{U}_{\gamma J} = \mathcal{U}_{\gamma J}^{(S)} = (2J+1)\ e^{-\beta E_C} \tag{6.17a}$$

$$\mathcal{U}_C = \mathcal{U}_C^{(S)} = g_C\, e^{-\beta E_C} \tag{6.17b}$$

$$\mathcal{U}_Q = \mathcal{U}_Q^{(S)} = \sum_{\Xi} \mathcal{U}_{\Xi} + \sum_{C} g_C\, e^{-\beta E_C}. \tag{6.17c}$$

Les probabilités conditionnelles s'expriment alors :

$$\mathcal{P}_C(\gamma J) = \mathcal{P}_C^{(S)}(\gamma J) = \frac{2J+1}{g_C} \tag{6.18a}$$

$$\mathcal{P}_Q(C) = \mathcal{P}_Q^{(S)}(C) = \frac{g_C\, e^{-\beta E_C}}{\mathcal{U}_Q^{(S)}} \tag{6.18b}$$

$$\mathcal{P}_Q(\gamma J) = \mathcal{P}_Q^{(S)}(C)\, \mathcal{P}_C^{(S)}(\gamma J) = \frac{(2J+1)\ e^{-\beta E_C}}{\mathcal{U}_Q^{(S)}}. \tag{6.18c}$$

Cette approche contourne le problème des probabilités en supposant que ni la forme ni la position spectrale des faisceaux sont affectées par la température finie. De ce fait, elle ne donne de résultats cohérents qu'à température élevée, si $k_B T \gg \sigma_C$.

Jeu statistique

Pour prendre en compte la température dans la forme des faisceaux détaillés, il faut introduire le facteur de Boltzmann dans le calcul des probabilités des niveaux dans les configurations. Si l'on souhaite conserver les probabilités des configurations telles que données par SCO en prenant en compte l'effet de la température sur la probabilité des

niveaux dans une configuration, les probabilités s'écrivent :

$$\mathcal{P}_C(\gamma J) = \mathcal{P}_C^{(\mathrm{D})}(\gamma J) = \frac{2J+1}{\mathcal{I}_C} = \frac{(2J+1)\, e^{-\beta\left(E_{\gamma J}-E_C\right)}}{\sum\limits_{\gamma J\in C}(2J+1)\, e^{-\beta(E_{\gamma J}-E_C)}} \tag{6.19a}$$

$$\mathcal{P}_Q(C) = \mathcal{P}_Q^{(\mathrm{S})}(C) = \frac{\mathcal{U}_C^{(\mathrm{S})}}{\mathcal{U}_Q^{(\mathrm{S})}} = \frac{g_C\, e^{-\beta E_C}}{\sum_\Xi \mathcal{U}_\Xi + \sum\limits_C g_C\, e^{-\beta E_C}} \tag{6.19b}$$

$$\mathcal{P}_Q(\gamma J) = \mathcal{P}_C^{(\mathrm{D})}(\gamma J)\, \mathcal{P}_Q^{(\mathrm{S})}(C) = \frac{(2J+1)\, e^{-\beta E_{\gamma J}}}{\sum\limits_\Xi \mathcal{U}_\Xi + \sum\limits_C g_C\, e^{-\beta E_C}}. \tag{6.19c}$$

Cette approche, dite *à jeu statistique* permet de prendre en compte l'effet de la température sur la forme des faisceaux de transition détaillés sans modifier la probabilité des configurations dans le plasma. Cependant, elle diminue l'intensité des faisceaux de transition détaillés par rapport aux faisceaux statistiques partant de la même configuration, car la contribution de la configuration de départ à la fonction de partition de l'ion est sous-estimée dans un calcul détaillé. La loi de Maxwell-Boltzmann (1.30) p. 18 n'est pas respectée entre des niveaux de configurations différentes, ainsi qu'entre un niveau et une configuration non-détaillée dont ce niveau ne fait pas partie. En effet, soient $\gamma J \in C$ et $\gamma' J' \in C'$. Le rapport des probabilités s'écrit :

$$\frac{\mathcal{P}_Q(\gamma' J')}{\mathcal{P}_Q(\gamma J)} = \frac{2J'+1}{2J+1}\, \frac{e^{-\beta E_{\gamma' J'}}}{e^{-\beta E_{\gamma J}}}\, \frac{\mathcal{U}_C^{(\mathrm{D})}}{\mathcal{U}_C^{(\mathrm{S})}}\, \frac{\mathcal{U}_{C'}^{(\mathrm{S})}}{\mathcal{U}_{C'}^{(\mathrm{D})}} \tag{6.20a}$$

$$\frac{\mathcal{P}_Q(\gamma J)}{\mathcal{P}_Q(C')} = \frac{2J+1}{g_{C'}}\, e^{-\beta(E_{\gamma J}-E_{C'})}\, \frac{\mathcal{U}_C^{(\mathrm{S})}}{\mathcal{U}_C^{(\mathrm{D})}} \tag{6.20b}$$

et les deux quotients $\frac{\mathcal{U}_C^{(\mathrm{D})}}{\mathcal{U}_C^{(\mathrm{S})}}$ et $\frac{\mathcal{U}_{C'}^{(\mathrm{S})}}{\mathcal{U}_{C'}^{(\mathrm{D})}}$ ne sont pas égaux à 1.

Jeu détaillé

L'équation de Maxwell-Boltzmann peut être totalement satisfaite à condition de modifier la fonction de partition du plasma en remplaçant les fonctions de partition statistiques des configurations détaillées $\mathcal{U}_C^{(\mathrm{S})}$ par les fonctions de partition détaillées $\mathcal{U}_C^{(\mathrm{D})}$. La fonction de partition du plasma s'écrit alors :

$$\begin{aligned}\mathcal{U}_Q = \mathcal{U}_Q^{(\mathrm{D})} &= \sum_\Xi \mathcal{U}_\Xi + \sum_{C\in(\mathrm{S})} \mathcal{U}_C^{(\mathrm{S})} + \sum_{C\in(\mathrm{D})} \mathcal{U}_C^{(\mathrm{D})} \\ &= \sum_\Xi \mathcal{U}_\Xi + \sum_{C\in(\mathrm{S})} \mathcal{U}_C^{(\mathrm{S})} + \sum_{C\in(\mathrm{D})} \mathcal{U}_C^{(\mathrm{S})}\, \frac{\mathcal{I}_C}{g_C}.\end{aligned} \tag{6.21}$$

Les probabilités de toutes les espèces sont changées par rapport aux approches précédentes :

$$\mathcal{P}_C(\gamma J) = \frac{(2J+1)\, e^{-\beta E_{\gamma J}}}{\mathcal{U}_C^{(\mathrm{D})}} \tag{6.22a}$$

$$\mathcal{P}_Q(C \in (\mathrm{D})) = \mathcal{P}_Q^{(\mathrm{D})}(C) = \frac{\mathcal{U}_C^{(\mathrm{D})}}{\mathcal{U}_Q^{(\mathrm{D})}} = \frac{\sum\limits_{\gamma' J' \in C} (2J'+1)\, e^{-\beta E_{\gamma J}}}{\mathcal{U}_Q^{(\mathrm{D})}} \tag{6.22b}$$

$$\mathcal{P}_Q(C \in (\mathrm{S})) = \mathcal{P}_Q^{(\mathrm{D})}(C) = \frac{\mathcal{U}_C^{(\mathrm{S})}}{\mathcal{U}_Q^{(\mathrm{D})}} = \frac{g_C\, e^{-\beta E_C}}{\mathcal{U}_Q^{(\mathrm{D})}} \tag{6.22c}$$

Dans cette approche, dite *à jeu détaillé*, la probabilité des configurations non-détaillées et des supraconfigurations est diminuée à cause de l'inégalité (6.11). Les faisceaux UTA, SOSA et STA qui en partent sont moins intenses que dans l'approche à jeu statistique. Nous proposons Chap. 8 un calcul qui prend en compte la correction à l'ordre 2 par rapport à la température inverse β des fonctions de partition, des probabilités des configurations ainsi que des forces de faisceaux de transition. L'approche à jeu détaillé est physiquement la plus naturelle dans la plage spectrale où les faisceaux de transition sont détaillés. Mais elle entraîne la diminution des probabilités des configurations non-détaillées et construit, pour les configurations détaillées, des faisceaux statistiques plus intenses que dans l'approche statistique pure.

Approche des opacités statistique et détaillée indépendantes

La dernière approche que nous proposons est celle avec laquelle tous les calculs SCORCG présentés dans cette thèse ont été faits. Nous avons écrit à l'équation (6.1) l'opacité hybride $\kappa_Q^{(\mathrm{H})}$ comme la somme de l'opacité lié-lié due aux faisceaux statistiques $\kappa_Q^{(\mathrm{S})}$ avec l'opacité engendrée par les faisceaux détaillés $\kappa_Q^{(\mathrm{D})}$. Le calcul de ces deux opacités peut être mené indépendamment, et une contrainte à laquelle nous nous sommes pliés dans les approches précédentes est d'assurer, dans les deux parties de l'opacité hybride, l'utilisation des mêmes fonctions de partition pour que les configurations aient la même probabilité. Nous avons vu que le jeu statistique altère les intensités relatives des faisceaux détaillés les uns par rapport aux autres, et que le jeu détaillé altère les rapports d'intensité des faisceaux statistiques les uns par rapport aux autres. Ce problème peut être contourné en utilisant le jeu détaillé pour la partie détaillée de l'opacité hybride, et le jeu statistique pour la partie statistique de l'opacité hybride, y compris les faisceaux de transition traités de manière statistique et partant de configurations qui ont été détaillées pour des calculs DTA sur d'autres faisceaux. Ainsi, hors de la grille des calculs détaillés, la partie statistique est identique à celle calculée lors d'un calcul entièrement statistique, tandis que la partie détaillée satisfait, avec son jeu détaillé, l'équation de Maxwell-Boltzmann.

Discussion

Nous avons vu que chaque approche proposée ne peut pas satisfaire toutes les contraintes qu'un calcul d'opacité requiert sur l'ensemble des faisceaux de transition. Ces contraintes sont :

1. La normalisation des probabilités implique $\sum_{\Xi} \mathcal{P}(\Xi) + \sum_{C} \mathcal{P}(C) = 1$.
2. L'effet de la température sur la population des niveaux d'une configuration et donc sur la forme des faisceaux détaillés doit être pris en compte dès lors que la température est peu élevée.
3. La loi de Maxwell-Boltzmann devrait être satisfaite entre deux espèces quelconques.
4. Afin de simplifier les comparaisons, nous imposons que l'opacité hybride composée uniquement de faisceaux statistiques soit égale à l'opacité purement statistique ; ce cas se produit en-dehors de la grille où des faisceaux détaillés sont calculés.
5. Les probabilités des configurations et des niveaux, quel que soit le calcul de faisceau, doivent être identiques.

Étant donné qu'il est impossible de satisfaire chacune de ces cinq contraintes à température finie et en présence de faisceaux détaillés, il est nécessaire de « sacrifier » une contrainte. Ainsi, l'approche SWAP enfreint la contrainte 2, le jeu statistique enfreint la contrainte 3, le jeu détaillé enfreint la contrainte 4 et l'approche des opacités indépendantes enfreint la contrainte 5. C'est ce dernier choix que nous avons retenu pour nos calculs.

6.2 Apports et comparaisons

Nous allons montrer comment notre approche hybride permet une transition entre des calculs statistiques et des calculs détaillés, en comparant nos calculs avec ceux obtenus par des codes détaillés et ceux obtenus par des codes statistiques, ainsi que les deux spectres expérimentaux que nous avons étudiés Sec. 3.3.2.

6.2.1 Par rapport aux approches détaillées

Les approches détaillées permettent des calculs de spectres suffisamment précis pour les opacités de plasmas chauds. Mais elles peinent, voire échouent à calculer complètement l'opacité de plasmas pour des éléments Z intermédiaires, à cause de l'ouverture de la couche d qui accroît considérablement le nombre et la complexité des configurations. Les approches détaillées suscitent un intérêt grandissant au XXIè siècle grâce à l'augmentation de la puissance des outils de calcul. Des codes atomiques tels FAC et HULLAC [33, 34] peuvent être automatisés pour faire des calculs d'opacités avec des faisceaux de transition détaillés.

Si SCORCG n'est pas conçu au départ pour effectuer uniquement des calculs détaillés, il peut néanmoins s'approcher très fortement du résultat que peut obtenir un code de calcul détaillé. Pour des plasmas contenant des configurations pas trop complexes et en paramétrant le calcul DTA d'un maximum de faisceaux de transition, SCORCG peut ne calculer que des faisceaux de transition détaillés. SCORCG a plusieurs atouts que n'ont pas tous les codes détaillés.

1. La structure atomique est donnée par un calcul autocohérent qui assure une prise en compte approximative de l'environnement plasma et de la température. Il est possible, en reprenant d'autres développements de SCO, d'ajouter un traitement quantique des électrons libres.

2. Le calcul de tous les faisceaux de transition est possible et effectué. S'il n'est pas possible ou souhaitable de faire un calcul détaillé sur un faisceau, alors le faisceau est traité par les méthodes statistiques UTA ou SOSA. Ce point rend SCORCG particulièrement performant dans le calcul d'opacité de plasmas où se trouvent des configurations de complexité très variable, par exemple une couche M ouverte à partir de quelques dizaines d'électron-volts.

3. Les configurations à traiter sont sélectionnées automatiquement, sans qu'il soit nécessaire d'établir une liste de configurations à part. Rien n'empêche cependant d'entrer une liste de configurations sélectionnées autrement.

4. Le nombre de configurations à calculer peut être contrôlé à l'aide des supracouches, qui permettent de prendre en compte des couches de Rydberg peu peuplées.

En résumé, SCORCG a toutes les capacités d'un code détaillé, tout en limitant automatiquement la complexité du calcul et d'autres erreurs éventuelles par le calcul des faisceaux qui ne peuvent être détaillés avec les méthodes UTA ou SOSA. L'effet de la supracouche-chapeau, qui force des calculs statistiques, est de faire reposer le spectre détaillé sur un « substrat » statistique contenant les faisceaux de transition non détaillés, ce qui est comparable en apparence, mais pas dans les principes, à la méthode MUTA utilisée par d'autres équipes [79].

Le phénomène de substrat statistique s'observe très bien sur des plasmas d'éléments légers, tel ce calcul d'opacité de couche K de l'aluminium dans les conditions de l'expérience de Davidson [80], à savoir 10^{-2} g/cc et 37 eV, sur les 200 supraconfigurations les plus abondantes. En détaillant les faisceaux ayant jusqu'à 200 000 raies, on obtient un spectre dans lequel la contribution de l'opacité détaillée repose sur un substrat statistique – le graphe en haut de Fig. 6.1 est semi-logarithmique –. Ce substrat est principalement constitué des suprafaisceaux de transition calculés au départ des supraconfigurations.

La comparaison des contributions détaillée et statistique au lié-lié au milieu de Fig. 6.1 montre que les calculs détaillés dominent largement dans l'opacité de ce plasma d'aluminium. Le calcul a été fait en autorisant jusqu'à 200 000 raies par faisceau détaillé, mais l'opacité obtenue en acceptant jusqu'à 10 000 raies par faisceau est quasiment identique à la précédente. L'explication est donnée en bas de Fig. 6.1, où on voit que très peu de faisceaux de transition excèdent 10 000 raies.

Lorsque les faisceaux sont plus complexes, ou lorsque le nombre maximum de raies par faisceau est plus faible, le substrat statistique prend de l'ampleur jusqu'à égaler en moyenne voire dépasser la partie détaillée. C'est le cas pour la couche L du germanium à 43 eV et 25 mg/cm^3. En dépit de la possibilité de calculer des faisceaux détaillés ayant jusqu'à 200 000 raies, l'opacité lié-lié Fig. 6.2 est dominée par les calculs statistiques. La contribution statistique est plusieurs fois supérieure à la contribution détaillée Fig. 6.3. Cependant, une différence notable est à observer entre la structure correspondant à la transition $2p - 3d$ à gauche et les structures correspondant aux transitions $2p - n\ell$ où $\ell = s, d$ et $n \geq 4$. Pour la transition $2p - 3d$, ainsi que $2p - 4s$, la contribution statistique est environ deux fois supérieure à la contribution détaillée. Pour les transitions vers des sous-couches plus hautes, la contribution statistique est en moyenne 5 fois plus importante que la contribution détaillée. Ce phénomène peut s'expliquer par la plus grande complexité des faisceaux $2p - nd$ avec $n \geq 4$ par rapport à la complexité des faisceaux $2p - 3d$. Les derniers n'ouvrent pas de sous-couche supplémentaire, et l'ajout

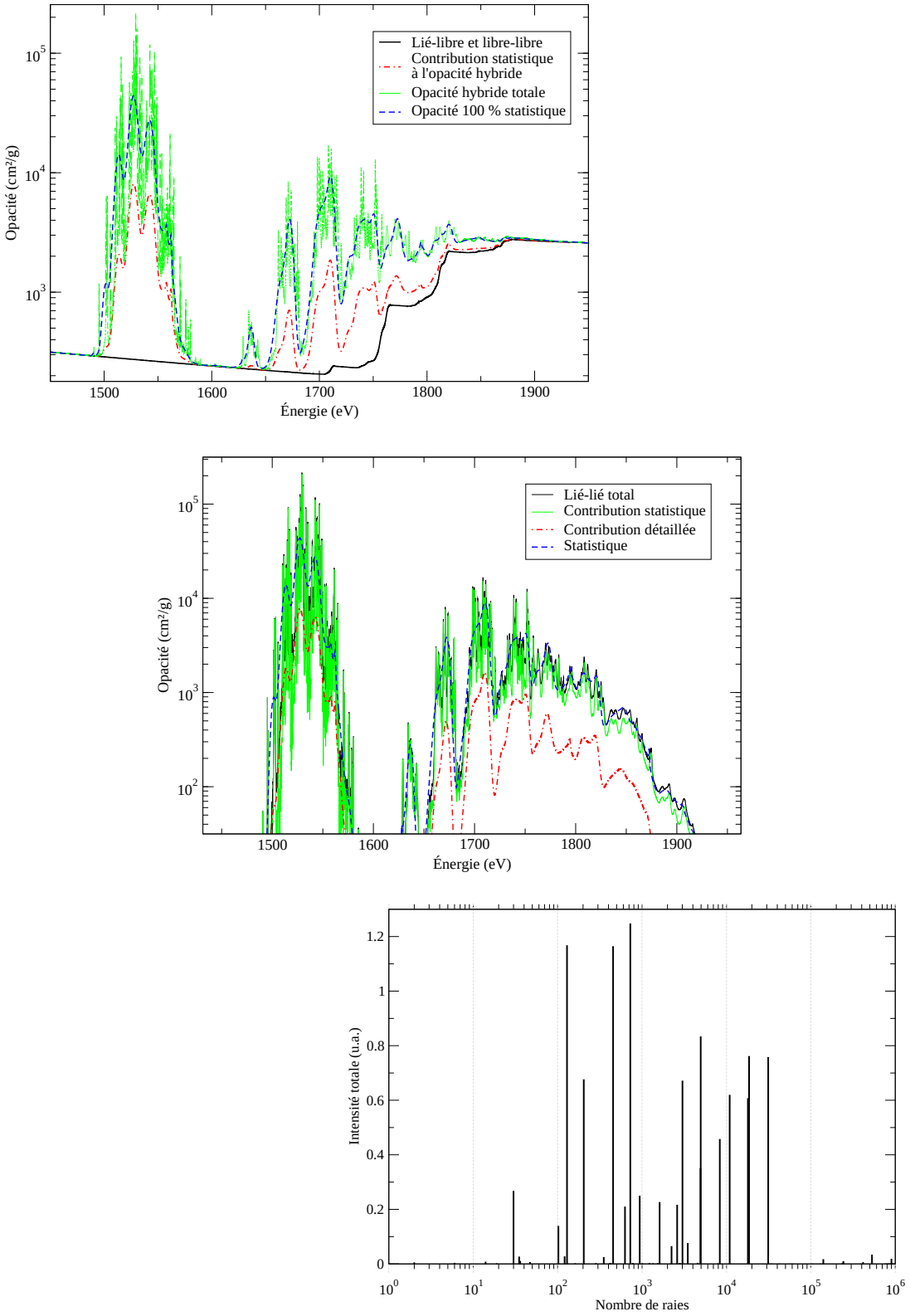


FIGURE 6.1 –
Haut : spectre en opacité de l'aluminium à 10^{-2} g/cm^3 et 37 eV avec 200 supraconfigurations.
Milieu : composantes de l'opacité lié-lié hybride comparées avec l'opacité statistique.
Bas : intensité totale des faisceaux ayant tel nombre de raies.

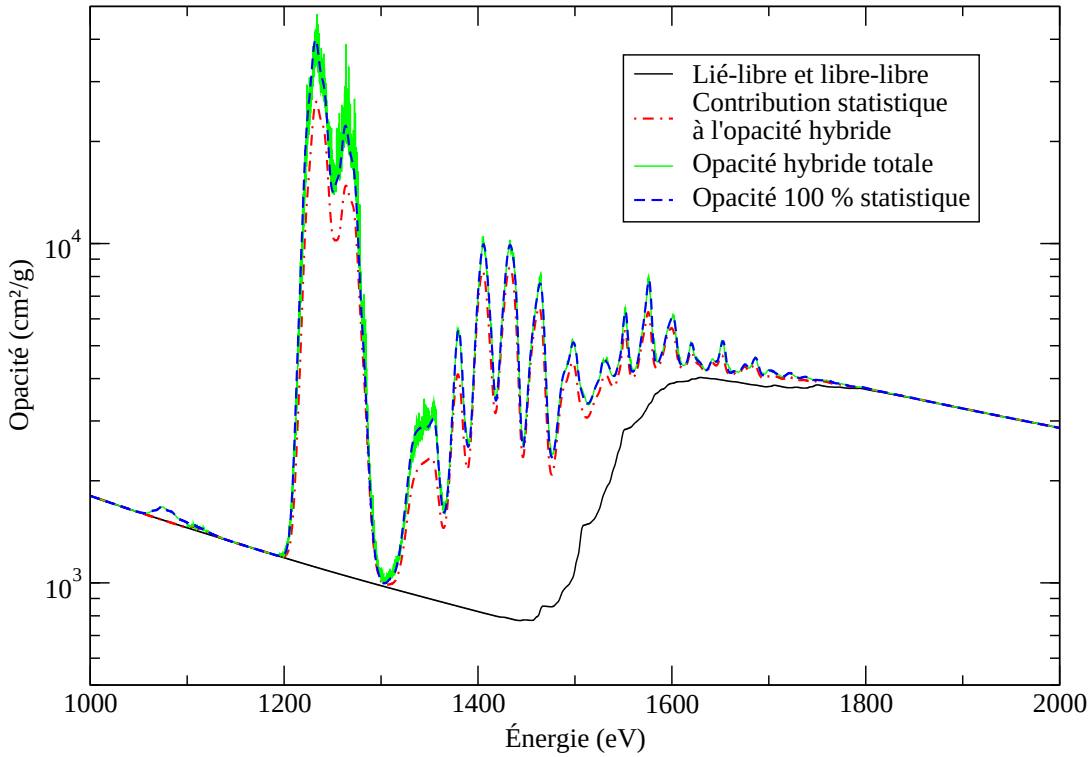


FIGURE 6.2 – Spectre en opacité du germanium à 43 eV et 25 mg/cm^3, avec 200 000 raies par faisceau.

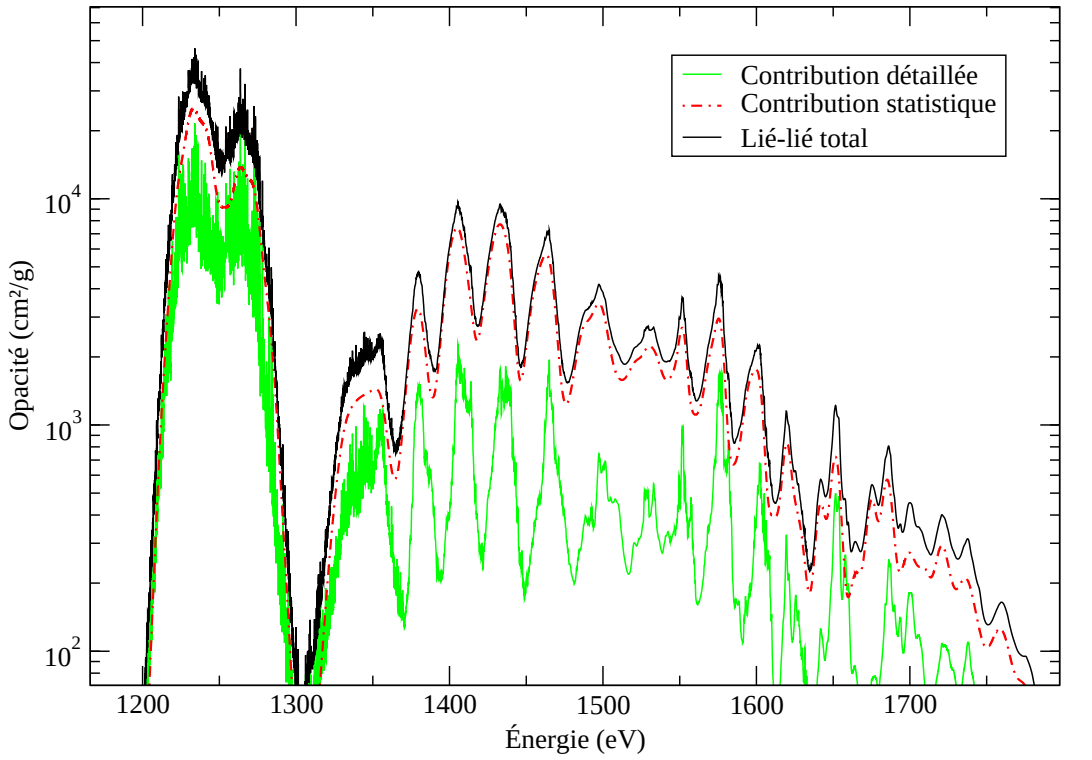


FIGURE 6.3 – Comparaison des contibutions détaillée et statistique à l'opacité dans les mêmes conditions que Fig. 6.2.

d'un électron dans une couche ouverte augmente bien moins la dégénérescence de la configuration d'arrivée.

6.2.2 Par rapport aux approches statistiques

Les approches statistiques ont été très utilisées à la fin du XXè siècle pour le calcul intensif des opacités de plasmas chauds. La rapidité de calcul que ces approches permettent est généralement suffisante pour la spectroscopie, mais les moyennes, en particulier celle de Rosseland, sont erronées.

Plusieurs spectres expérimentaux, comme celui produit sur l'installation Sandia [56] que nous avons vu Sec. 3.3.2 montrent des structures incalculables par les approches statistiques mais très bien restituées par les approches détaillées.

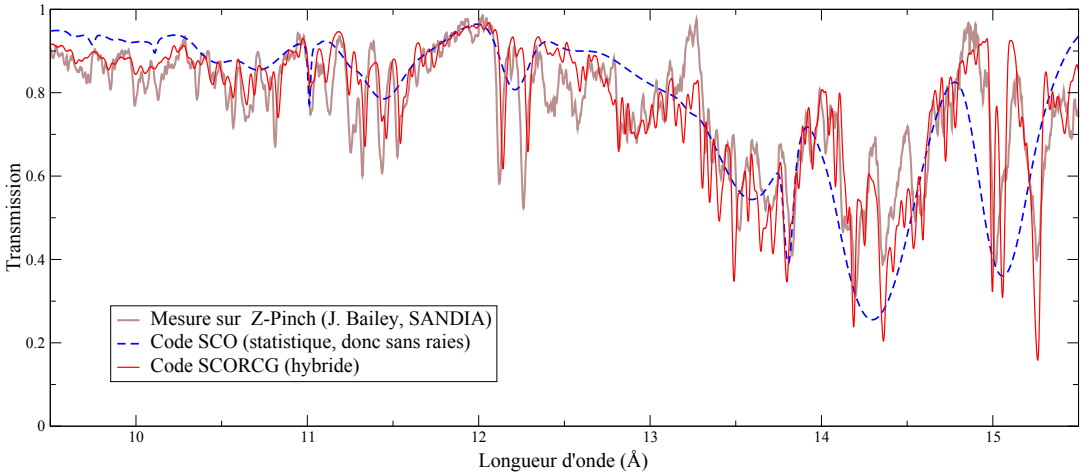


FIGURE 6.4 – Transmission du fer à 150 eV et 58 mg/cm^3.

SCORCG peut ne faire que des calculs statistiques, et l'opacité est rigoureusement égale à celle calculée par SCO, sauf si on se place dans l'approche à jeu détaillé qui modifie le jeu de probabilités dans laquelle les faisceaux statistiques sont calculés. Mais par rapport à un code entièrement statistique, il est possible de détailler le calcul d'une partie plus ou moins importante des faisceaux de transition. On peut ainsi valider, préciser ou corriger le spectre lié-lié statistique par des faisceaux de transition détaillés.

Une approche hybride peut être aussi rapide qu'une approche statistique, mais peut apporter un complément d'information très important : en détaillant les faisceaux de transition les plus abondants et les moins complexes, elle peut mettre en évidence la nécessité de détailler des faisceaux, ou de changer une des approximations utilisées dans le calcul statistique des faisceaux de transition.

Le spectre en opacité de couche L obtenu pour un plasma contenant 300 configurations de cuivre à 35 eV et 4 mg/cm^3 nous donne un bon exemple de ce que SCORCG révèle avec au plus 20 000 raies par faisceau. La contribution détaillée Fig. 6.5, bien que faible avec au plus 20 000 raies par faisceau, change significativement la forme de la structure $2p - 3d$.

En revanche, le germanium à 70 eV dans l'expérience de Foster [81] est un spectre en transmission dans lequel calcul hybride et statistique donnent un résultat identique.

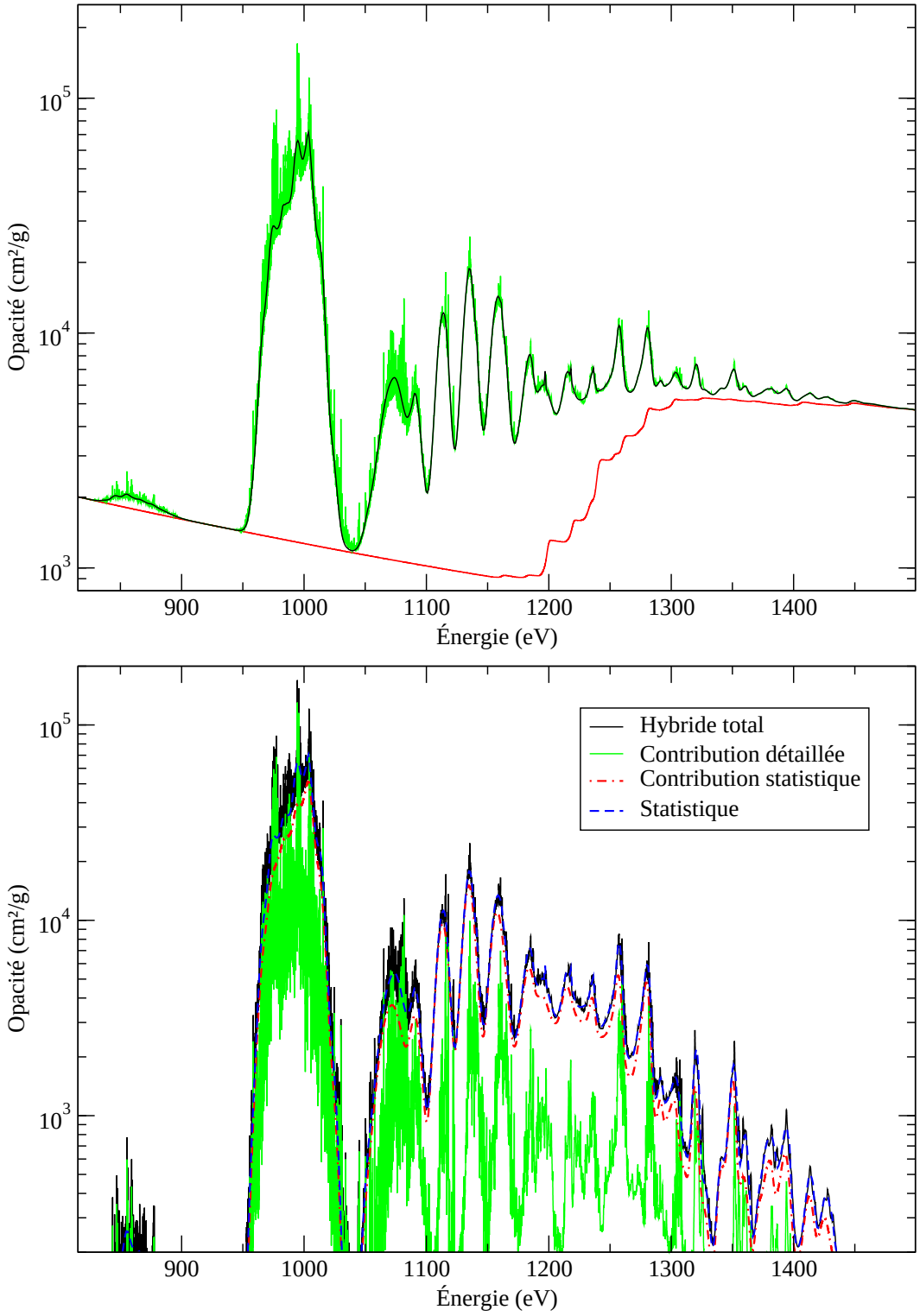


FIGURE 6.5 – Opacité et contributions du cuivre à 35 eV et 4 mg/cm^3.

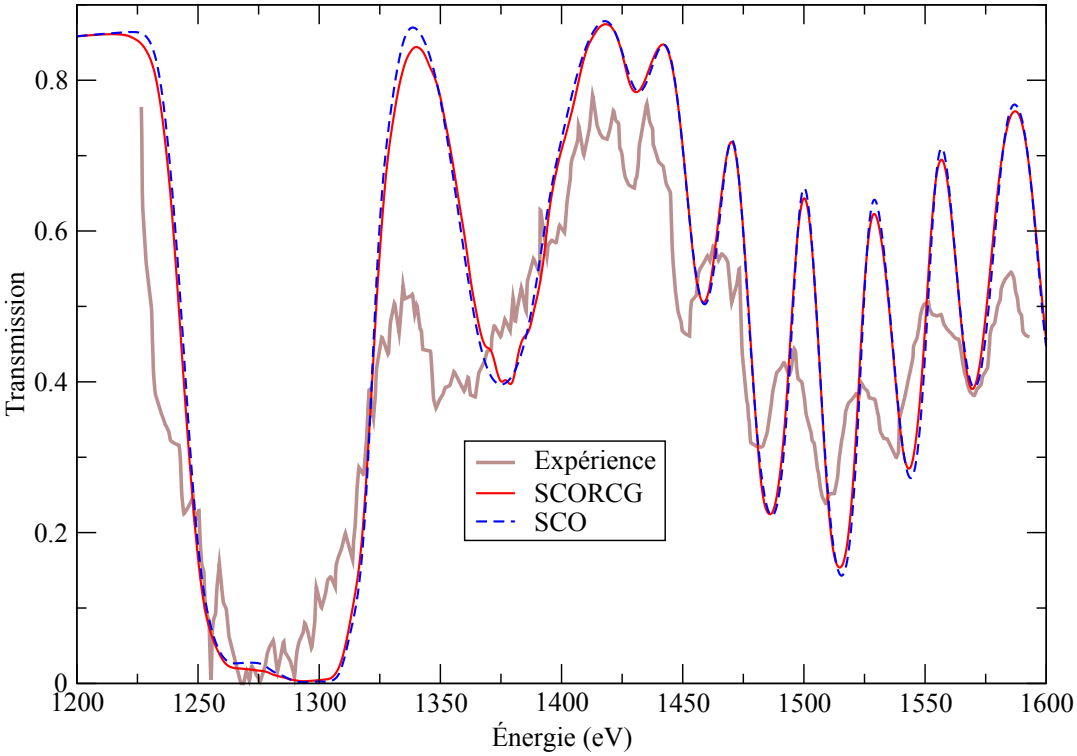


FIGURE 6.6 – Transmission de la couche L du germanium à 70 eV et 50 mg/cm^3.

Sans forcément conduire au remplacement de faisceaux détaillés par des faisceaux statistiques dans le spectre en opacité, SCORCG a l'avantage de permettre l'utilisation de méthodes statistiques plus élaborées que l'UTA, soit par la prise en compte du facteur de Boltzmann hors SWAP, soit par la prise en compte des moments d'ordre 3 et 4, qui permettent de construire des faisceaux asymétriques. Ces deux derniers points seront approfondis Chap. 8.

Pour des faisceaux assez coalescents, SCORCG est l'outil idéal pour mettre à l'épreuve les différentes approximations et simplifications utilisées par les codes statistiques, comme l'interaction de sous-configurations relativistes.

6.3 Limites de SCORCG

6.3.1 Calculs détaillés complexes

En théorie, tout faisceau de transition partant d'une configuration simple peut être détaillé. En pratique, les faisceaux partant de ou arrivant sur des configurations complexes, c. à d. à dégénérescence élevée, sont très longs à calculer, et mobilisent une grande quantité de ressources de calcul. SCORCG peut calculer des faisceaux complexes, toutefois la capacité à traiter des faisceaux très complexes est limitée par la version modifiée de RCG que nous utilisons. RCG* tel qu'utilisé dans SCORCG peut calculer des faisceaux de transition avec des limites de Tab. 5.1 p. 91 qui sont larges, mais cependant restrictives pour certains calculs.

Le nombre d'orbitales impliquées est limité à 8. Par *sous-couche impliquée* il faut entendre une sous-couche ouverte dans au moins une des deux configurations, soit de départ, soit d'arrivée. En réalité, 8 orbitales impliquées signifie que la configuration

de départ est extrêmement excitée, au moins 5 ou 6 fois, et que chaque électron excité l'est dans une sous-couche différente. Une telle situation n'est jamais survenue lors de l'exécution de SCORCG, en partie parce que 5 ou 6 orbitales ouvertes correspondent à une excitation très difficile à obtenir avec le sélecteur de SCO, et on peut douter de sa pertinence physique vu qu'une configuration ainsi excitée s'autoionise ou se désexcite rapidement. Dans les faits, cette limite n'est jamais atteinte, et elle est bien plus faible que les limites suivantes. Le nombre de paramètres de structure atomique (intégrales radiales) est limité à 2200, ce qui est aussi très élevé et n'est en pratique jamais atteint.

La taille maximale des blocs J est limitée à 4000. Cette limite supérieure est large mais plus contraignante que les précédentes. L'effet de cette limitation peut se faire sentir sur les faisceaux dans lesquels la configuration d'arrivée a deux couches ouvertes de plus que la configuration de départ. C'est dans ces circonstances que la complexité d'une configuration et la taille des blocs J augmente le plus rapidement, comme nous le verrons Sec. 7.1.3.

La limitation la plus forte de SCORCG pour les calculs détaillés est la taille maximale du tableau de raies spectrales, qui limite de fait le nombre de raies par faisceau de transition à 800 000. Dans le code hybride, cette limitation arbitraire du nombre de raies par faisceau a un effet variable sur la qualité de la modélisation de l'opacité. Néanmoins, l'exécution de SCORCG avec 800 000 raies par faisceau peut être encore très consommatrice en ressources, aussi il est possible de limiter le nombre de raies par faisceau à bien moins de 800 000.

Liées à l'écriture du code de calcul, ces limitations de tailles de tableaux jouent le rôle d'un garde-fou dans la gestion des ressources. Tout faisceau refusé au calcul détaillé par les critères ci-dessus est calculé selon la méthode UTA ou SOSA utilisée dans SCO. Poussé au maximum des limites de SCORCG, un calcul hybride peut être extrêmement lent car la complexité de calcul des faisceaux de transition augmente beaucoup plus vite que le nombre de raies. Nous développons une approche quantitative de la complexité des faisceaux de transition Sec. 7.1.

6.3.2 Thermodynamique et structure atomique

La cohérence du point de vue de la thermodynamique est issue du couplage de SCO avec RCG*. La totalité de la structure atomique est calculée par SCO, selon une méthode autocohérente expliquée Sec. 2.3.2. À partir des fonctions d'onde, les intégrales de structure atomique sont calculées et celles qui sont pertinentes sont passées à RCG*. Un faisceau de transition est donc calculé avec la même structure atomique qu'il soit détaillé ou statistique.

Cette cohérence dans la structure atomique a des avantages. Les faisceaux de transition détaillés sont calculés à partir d'une structure atomique qui prend en compte, de manière très approximative, l'écrantage des ions par le plasma. L'effet des ions voisins est ainsi pris en compte dans la position et la forme des faisceaux de transition, ce qui permet d'utiliser SCO et, par héritage, SCORCG, à une densité de l'ordre de celle de l'état solide ou au-delà. C'est une des principales différences entre SCORCG et le code Cowan, qui ne calcule que des ions isolés.

La densité a plusieurs effets sur la structure atomique. Leur modélisation est extrêmement complexe et plusieurs modèles sont utilisés pour les décrire ; SCO et SCORCG utilisent le modèle de sphère ionique, que nous avons étudié Chap. 1 et 4. Nous rappe-

lons le rayon ionique moyen :

$$R_{\mathrm{i}} = \left(\frac{3}{4\pi n_i} \right)^{1/3}. \tag{6.23}$$

C'est à l'intérieur de la sphère ionique $\mathcal{S}_0(R_{\mathrm{i}})$ que sont calculées les fonctions d'onde, avec plusieurs hypothèses :

1. La sphère est électriquement neutre, en prenant en compte les électrons liés et libres à l'intérieur de la sphère :

$$\int_0^{R_{\mathrm{i}}} 4\pi\, r^2 (n_{\mathrm{b}}(r) + n_{\mathrm{f}}(r))\, \mathrm{d}r = Z,$$

   en reprenant les notations de Chap. 4.

2. Les fonctions d'onde et leurs dérivées sont nulles en R_{i}.

Le modèle de sphère ionique a l'avantage de simplifier grandement les calculs autocohérents et d'assurer une convergence quasi-systématique. Il est en revanche inadapté au traitement de plasmas fortement couplés (voir Sec. 1.1.3).

Si l'utilisateur le demande, SCO peut prendre en compte l'énergie d'interaction entre les électrons libres E_{ff} ainsi qu'entre électrons liés et libres E_{bf}. L'énergie libre totale $\mathcal{F}$ d'une configuration s'écrit :

$$\mathcal{F}_C = \sum_{i\in(\mathrm{b})} w_i I_i + \sum_{i<j\in(\mathrm{b})} w_i (w_j - \delta_{i,j})\, V_{i,j} + E_{\mathrm{bf}} + \mathcal{F}_{\mathrm{ff}} + \mathcal{F}_{\mathrm{xc}} \tag{6.24}$$

où

$$E_{\mathrm{bf}} = e^2 \sum_{k\in(\mathrm{b})} \frac{g_k}{1 + e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)}} \iint_{r,r'=0}^{R_{\mathrm{i}}} \frac{|\psi_k(\mathbf{r})|^2\, n_{\mathrm{f}}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}\, \mathrm{d}\mathbf{r}\, \mathrm{d}\mathbf{r}', \tag{6.25}$$

$\mathcal{F}_{\mathrm{ff}}$ donnée par la formule (4.10) dans le modèle de Thomas-Fermi Sec. 4.1.1, et $\mathcal{F}_{\mathrm{xc}}$ donnée Réf. [28].

Le choix d'utiliser le modèle semi-classique de Thomas-Fermi pour décrire la distribution en énergie des électrons libres implique une discontinuité dans la densité électronique lorsqu'une sous-couche passe dans le continuum [60]. Cette discontinuité a deux conséquences importantes dans le déroulement d'un calcul d'opacité :

- les variables d'état du plasma sont discontinues ;
- le calcul autocohérent peut ne pas converger.

Si la discontinuité dans les variables d'état a peu d'impact sur le calcul d'opacité, la divergence d'un calcul autocohérent « interdit » le calcul de faisceaux de transition au départ de certaines configurations.

Le traitement quantique des électrons libres permet de mettre en évidence des *résonances* dans la densité d'états libres : ces résonances sont les « fantômes » des sous-couches disparues sous l'effet d'une trop grande proximité des ions voisins. Cependant, les effets de l'ionisation par la pression se manifestent sur des plasmas si denses que les élargissements élevés rendent tout calcul détaillé inutile. C'est pourquoi un traitement approximatif des effets de densité suffit largement dans le domaine d'application du modèle hybride.

6.3.3 Synthèse et limites des approximations utilisées

Les approximations utilisées dans notre approche hybride SCORCG sont nombreuses, et presque toutes héritées de SCO. Elles sont associées aux processus physiques dans le plasma et à leur prise en compte, et concernent la structure atomique, l'interaction ou mélange de configurations, le calcul de l'opacité avec des électrons libres ou encore les élargissements physiques. Nous allons préciser comment ces approximations nous limitent dans le calcul d'opacité.

Les processus physiques pris en compte dans l'opacité reposent sur des ions isolés, comme Réf. [8], mais avec une prise en compte des ions voisins via le modèle de la sphère ionique, comme évoqué Sec. 6.3.2. Le modèle de sphère ionique sous-estime l'opacité lié-libre et libre-libre, mais influe peu sur la force, ni sur la position des raies, ni même sur l'abondance des configurations dans le plasma à densité moyenne [16]. Cette sous-estimation peut avoir un impact sur l'opacité moyenne d'un plasma assez dense d'élément léger, ce qui n'est pas dans le domaine de SCORCG. En revanche, à une densité de l'ordre de ou supérieure à la densité du solide et basse température (quelques eV), les plasmas sont fortement couplés. À ces densités, le modèle d'échange-corrélation et le modèle de sphère ionique donnent des resultats de moins en moins proches car les potentiels dans lesquels sont calculés les états liés sont de plus en plus différents [16]. De telles densités ne présentent guère d'intérêt pour des calculs d'opacité détaillés : ces plasmas sont optiquement très épais et l'opacité est très lissée par des élargissements physiques très élevés.

Le traitement des effets de densité est efficace à densité faible et moyenne, toutefois l'ionisation par la pression n'est pas gérée correctement. Il n'est pas rare, à densité un peu élevée comme dans l'expérience de HOARTY *et coll.* [82], qu'une bonne partie des calculs autocohérents ne convergent pas car des sous-couches peuvent alternativement apparaître parmi les états liés puis disparaître dans le continuum. Nous avons vu Sec. 2.1.2 que le nombre de nœuds de la fonction d'onde associée à une orbitale $n\ell$ est égal à $n - \ell - 1$. Or les fonctions d'onde autocohérentes ne le vérifient pas toujours après une itération. À moins que la température soit très élevée (de l'ordre du keV), SCORCG n'est pas adapté pour des calculs d'opacité de plasmas dont la densité dépasse celle du solide.

Pour chaque supraconfiguration comme pour l'atome moyen, la structure électronique utilisée pour le calcul d'opacité est une moyenne. Le calcul de la structure moyenne utilise un potentiel autocohérent, ce qui garantit, en cas de convergence, un calcul précis des fonctions d'onde. L'ensemble de la théorie sur la structure atomique est basée sur l'approximation du champ central, qui est très faible par rapport aux autres approximations faites dans notre approche. Cependant, si un faisceau de transition est relaxé, seule l'énergie moyenne de la configuration d'arrivée est relaxée, car les formules de calcul des moments UTA font l'hypothèse d'égalité des intégrales radiales [62]. Les effets relativistes sont, eux, approchés au premier ordre. Ce traitement est très satisfaisant pour les électrons de cœur si Z est compris entre 10 et 30 [8], mais reste une correction à l'ordre 1 des effets relativistes. Tout comme SCO, SCORCG est non-relativiste : c'est l'équation de Schrödinger qui est résolue. La division des orbitales en sous-couches relativistes n'intervient que lors du calcul des sous-faisceaux relativistes, et le sous-faisceau $\Delta j = 0$, souvent très faible par rapport aux autres composantes, n'est pas calculé.

Les fluctuations de la structure atomique sous l'effet de l'environnement plasma, qui ont des conséquences sur le spectre en opacité, sont prises en compte au premier ordre via les effets Stark ionique et électronique. Néanmoins, les approximations sur

les profils de raies Stark et collisionnels faites dans SCO et SCORCG, à l'instar de nombreux autres codes d'opacité, ssont très fortes. Dans SCO et SCORCG les profils Stark et collisionnels sont considérés comme étant respectivement gaussiens et lorentziens, et les largeurs elles-mêmes sont approchées par les formules de Dimitrijević et Konjević (1987), avec une petite correction sur le facteur de Gaunt inélastique. Ces formules de calcul des élargissements Stark et collisionnels sont un des points les plus discutables de notre approche hybride. Elles sont destinées à l'étude des atmosphères stellaires aux caractéristiques bien différentes des plasmas chauds pour lesquels SCORCG est adapté. En particulier, Dimitrijević et Konjević limitent la validité de leurs formules à des atomes ionisés au plus trois fois, avec un écart pouvant aller jusqu'à 40 % [74]. Destinées à la spectroscopie stellaire, ces formules sont adaptées aux éléments de Z intermédiaire pour lesquels un calcul complet de profil Stark [83, 84] avec des outils comme PPP [85] est déjà coûteux.

Une comparaison des profils obtenus avec les formules programmées dans SCO avec des profils obtenus par des approches plus précises est nécessaire. Le passage d'un calcul purement statistique à un calcul détaillé montrant des structures bien plus résolues nécessite un calcul de profils de raies qui, sans être exact, est bien plus précis que les approximations actuellement utilisées. Le calcul correct des profils de raies, en particulier du Stark ionique, est l'un des plus gros problèmes qui vont se poser aux approches détaillées ou hybrides développées ou en cours de développement. Le profil de raie choisi pour le calcul d'opacité a surtout des conséquences sur la moyenne de Rosseland de l'opacité, qui dépend plus des minima que des maxima locaux.

Enfin, l'interaction de configuration n'est que prise en compte partiellement. Fondamentalement non-relativiste, SCORCG utilise les corrections relativistes pour le calcul de la structure électronique. Ainsi, les principaux effets relativistes comme la séparation spin-orbite sont très bien restitués par SCORCG. La différence principale entre SCO et SCORCG réside dans le fait que le formalisme SOSA calcule des sous-faisceaux relativistes, tandis qu'un calcul détaillé au départ d'une configuration non-relativiste calcule un unique faisceau de transition avec une répartition des raies en plusieurs sous-faisceaux. Ainsi, les faisceaux détaillés de SCORCG calculent exactement l'effet de l'interaction de sous-configurations relativistes (ICR). Cet effet a un impact important sur la forme de certains faisceaux de transition, notamment les transitions avec $\Delta n = 1$. L'effet le plus flagrant de l'ICR est de modifier le rapport d'intensité entre les deux sous-faisceaux, comme nous l'avons vu Chap. 3, et reverrons Chap. 9. L'interaction de configuration non-relativiste, quant à elle, n'a pas été intégrée à SCORCG dans sa version 1. Théoriquement [48, 49], le code Cowan permet de gérer l'interaction de configuration si le mélange de configurations n'est pas trop complexe à calculer. En pratique, un profond remaniement de SCORCG est nécessaire pour intégrer de l'interaction de configuration : le calcul en configurations et supraconfigurations dans SCO doit être totalement repensé.

III

OPTIMISATION ET EXPLOITATION



RÉDUCTION DU TRAITEMENT DES FAISCEAUX DE TRANSITION

Dans l'élaboration d'une approche hybride du calcul d'opacité, la maîtrise du temps de calcul est un enjeu majeur. Nombreuses sont les configurations à considérer dans un calcul d'opacité, et nombreuses peuvent être les raies que contient chaque faisceau de transition.

Le but de ce chapitre est de proposer un modèle d'estimation de la complexité[1] des calculs DTA, ainsi que des méthodes de simplification du traitement des raies.

7.1 Complexité des calculs de transitions lié-lié

Nous commençons par étudier la complexité du calcul détaillé d'un seul faisceau de transition au départ d'une configuration, dans le but d'établir son estimation *a priori*. Dans un calcul hybride, une telle estimation permet de construire un critère dans le choix détaillé/statistique, et évite le calcul de DTA trop complexes.

7.1.1 Calcul statistique de la distribution des états de moment cinétique dans une configuration

Soit C une configuration, donnée par sa structure électronique $\left(n_k \ell_k^{w_k}\right)_{k=1,q}$. Au sein de C, il est possible, par un calcul peu coûteux, de déterminer le nombre de niveaux correspondant à un état de moment cinétique J donné. En reprenant les notations de Sec. 2.2.1, le nombre de niveaux correspondant au moment cinétique total J dans la configuration C est noté $Q(J)$ qui, rappelons-le, est l'opposé de la différence finie $\Delta P(M)$ du nombre des états caractérisés par une projection du moment cinétique M égale à J :

$$Q(J) = -\,\Delta P(M)\big|_J = P(J) - P(J+1). \tag{7.1}$$

La complexité de décomposition en structure fine de C dépend directement de $Q\,(J)$, quantité qui peut être calculée exactement à l'aide de la méthode proposée Sec. 2.2.1.

[1] En algorithmique, la *complexité* est une modélisation du nombre d'opérations à effectuer pour un algorithme, ainsi que l'estimation de la quantité de mémoire requise pour réaliser l'algorithme.

La seule formule simple qui peut être déduite d'un calcul exact de $Q(J)$ est la règle de somme sur les niveaux entre J_n la valeur de J minimale, 0 ou $1/2$, et J_x valeur maximale de J :

$$g_C = \sum_{\gamma J \in C} 2J+1 = \sum_{J=J_\mathrm{n}}^{J_\mathrm{x}} (2J+1)\, Q(J).$$

Outre qu'elle peut elle-même poser des problèmes de complexité, la méthode utilisée pour une décomposition exacte en structure fine permet difficilement d'obtenir des formules exploitables. En revanche, l'approche statistique à l'ordre 4 pair de $P\,(M)$ et $Q\,(J)$ tel que développé par BAUCHE [86] est efficace, non seulement pour approcher $Q\,(J)$, mais surtout pour calculer analytiquement des quantités issues de ces $Q\,(J)$, telles le nombre de raies dipolaires électriques d'un faisceau de transition ou la taille totale des matrices à stocker.

La distribution $P(M)$ est paire et positive. Les trois premières valeurs paires de p sont 0, 2 et 4, et à ces trois premières valeurs paires de p sont associées trois *moments*, définis sous formes discrète (somme statistique) et continue (intégrale de distribution) Tab. 7.1. Les moments d'ordre impair (ex. 1 et 3) sont nuls. Par analogie avec l'annexe C, nous présentons à la fois les formes discrètes et continues, les moments s'écrivant comme une somme dans la première et comme intégrale dans la seconde forme.

Moment	Ordre	Forme discrète	Forme continue
Aire	0	$S = \sum_{M=-J_\mathrm{x}}^{+J_\mathrm{x}} P(M)$	$S = \int_{-\infty}^{+\infty} P\,(X)\,\mathrm{d}X$
Variance	2	$V = \frac{1}{S} \sum_{M=-J_\mathrm{x}}^{+J_\mathrm{x}} M^2 P(M)$	$V = \frac{1}{S} \int_{-\infty}^{+\infty} X^2 P(X) \mathrm{d}X$
$\mu_4^{(\mathrm{c})}$	4	$\mu_4^{(\mathrm{c})} = \frac{1}{S} \sum_{M=-J_\mathrm{x}}^{+J_\mathrm{x}} M^4 P(M)$	$\mu_4^{(\mathrm{c})} = \frac{1}{S} \int_{-\infty}^{+\infty} X^4 P(X) \mathrm{d}X$
Kurtosis	4	$K = \frac{1}{SV^2} \sum_{M=-J_\mathrm{x}}^{+J_\mathrm{x}} M^4 P(M)$	$K = \frac{1}{SV^2} \int_{-\infty}^{+\infty} X^4 P(X) \mathrm{d}X$

TABLE 7.1 – Définition des moments d'ordre 0, 2 et 4 sous forme discrète et continue.

On remarque que $K = \frac{\mu_4}{V^2}$, ce qui est la vraie définition du kurtosis. Les trois moments pairs peuvent être exprimés par des formules analytiques [86], et ce quelle que soit la configuration. À l'ordre 0, on a bien évidemment

$$S = g_C = \prod_{k=1}^{q} C_{4\ell_k+2}^{w_k}. \tag{7.2}$$

À l'ordre 2, l'expression de la variance pour une sous-couche ℓ^w s'écrit

$$V(\ell^w) = \frac{4\ell^2+4\ell+3}{12} \cdot \frac{w\,(4\ell+2-w)}{4\ell+1} \tag{7.3}$$

et, pour la configuration $C = \left(\ell_k^{w_k}\right)_{k=1,q}$, la variance est égale à

$$V(C) = \sum_{k=1}^{q} V\left(\ell_k^{w_k}\right). \tag{7.4}$$

À l'ordre 4, c'est le moment d'ordre 4 centré $\mu_4^{(c)}$ qui est d'abord calculé. Le kurtosis K est obtenu en divisant par V^2. Pour une orbitale ℓ^w, ce moment s'écrit

$$\mu_4^{(c)}(\ell^w) = w\,(4\ell + 2 - w)\left[x\,(\ell)\,w\,(4\ell + 2 - w) + y\,(\ell)\,\right], \tag{7.5}$$

où

$$x(\ell) = \frac{2\ell - 1}{240\,(16\ell^2 - 1)}\left(40\ell^3 + 84\ell^2 + 110\ell + 51\right) \tag{7.6a}$$

$$y(\ell) = \frac{2\ell + 1}{60\,(16\ell^2 - 1)}\left(-16\ell^4 - 24\ell^3 - 8\ell^2 + 24\ell + 9\right) \tag{7.6b}$$

et, pour la configuration C, $\mu_4^{(c)}$ vaut

$$\mu_4^{(c)}(C) = \sum_{k=1}^{q} \mu_4\left(\ell_k^{w_k}\right) + 6\sum\sum_{i<j} V\left(\ell_i^{w_i}\right) V\left(\ell_j^{w_j}\right). \tag{7.7}$$

Le kurtosis K s'obtient par division de $\mu_4^{(c)}$ par V^2. La présence du facteur $w(4\ell + 2 - w)$ implique que seules les orbitales ouvertes ont des contributions non nulles aux moments d'ordre pair. Ce qui réduit les sommes (7.2), (7.4) et (7.7) à un très petit nombre de termes.

$P\,(M)$ a d'abord été modélisé par une distribution de Gram-Charlier à l'ordre 4, avec $S = g_C$ [86] :

$$P_{\mathrm{GC}}\,(M) = \frac{g_C}{\sqrt{2\pi V}} \exp\left(-\frac{M^2}{2V}\right)\left[1 + \frac{K-3}{24}\left(3 - 6\,\frac{M^2}{V} + \frac{M^4}{V^2}\right)\right]. \tag{7.8}$$

Cette formule analytique approche bien $Q\,(J)$ avec une erreur de l'ordre de grandeur de quelques centièmes pour des configurations complexes. La valeur de $Q\,(J)$ est obtenue par analogie avec l'équation (2.41) :

$$\begin{aligned} Q_{\mathrm{GC}}\,(J) &= -\left.\frac{\mathrm{d}P_{\mathrm{GC}}}{\mathrm{d}M}\right|_{M=J} \\ &= \frac{g_C}{V\sqrt{8\pi V}}\left[[J] + \frac{K-3}{24}\left(15[J] - 10\,\frac{[J]^3}{4V} + \frac{[J]^5}{16V^2}\right)\right] \exp\left(-\frac{[J]^2}{8V}\right) \end{aligned} \tag{7.9}$$

avec $[J] = 2J + 1$.

Cependant, elle présente deux faiblesses que des travaux ultérieurs ont partiellement corrigées. La première est l'« oscillation » des valeurs de $Q(J)$ en fonction de la parité de J quand celui-ci est entier[2]. La qualité de l'évaluation statistique est forte-

[2] J entier correspond à un nombre d'électrons N pair.

ment améliorée pour les configurations moyennement complexes[3] [87]. La seconde est la répartition autour de $M = 0$ de la distribution $P(M)$. Comme $P(M)$ est toujours platykurtique[4], la distribution de Gram-Charlier est inadaptée car elle possède une partie négative si $\alpha_4 < 3$. Remplacer la distribution de Gram-Charlier à l'ordre 4 par une distribution gaussienne généralisée (GG) améliore nettement la modélisation des distributions platykurtiques [32] :

$$P_{\mathrm{GG}}(M) = \frac{g_C}{2\lambda\sigma\,\Gamma\left(1+\frac{1}{n}\right)} \exp\left(-\left|\frac{M}{\lambda\sigma}\right|^n\right), \tag{7.10}$$

avec λ et n liées à K via les formules (C.25) et (C.26) de Sec. C.2. Par rapport à la distribution de Gram-Charlier d'ordre 4, la distribution gaussienne généralisée est mieux adaptée à la description des distributions $P(M)$. D'une part elle décrit bien les $P(M)$ les plus platykurtiques dont la forme se rapproche d'un créneau[5]. D'autre part, son calcul reste presque complètement analytique, comme nous le montrons en annexe C, et permet des calculs plus généraux pour l'estimation de la complexité des faisceaux de transition. C'est pour ces deux raisons que nous utilisons désormais la gaussienne généralisée dans nos calculs.

De l'expression de P_{GG} dans l'équation (C.24), on en déduit

$$Q_{\mathrm{GG}}(J) = -\left.\frac{\mathrm{d}P_{\mathrm{GG}}}{\mathrm{d}M}\right|_{M=J+1/2} \tag{7.11a}$$

$$= \frac{n\,g_C}{2\left(\lambda\sigma\right)^2\Gamma\left(1+1/n\right)} j^{n-1}e^{-j^n} \tag{7.11b}$$

; où $j = \frac{2J+1}{2\lambda\sigma}$ et $S = g_C$. Nous proposons une comparaison entre les trois approches, exacte, Gram-Charlier, et gaussienne généralisée, qui reprend les travaux publiés Réf. [32, 86].

Les formules statistiques comme l'équation (7.11) approchent avec une grande fiabilité les formules exactes de calcul de $Q(J)$. Analytiques, ces formules relativement simples permettent d'estimer la complexité d'un calcul de faisceau de transition.

7.1.2 Calcul d'un faisceau de transition détaillé

Le calcul d'un faisceau de transition détaillé par RCG* se décompose en plusieurs étapes, comme nous l'avons vu Sec. 2.2 et 3.1. La matrice Hamiltonienne de chaque configuration s'écrit sous la forme de blocs diagonaux regroupant les niveaux de même J, ou J-blocs. La taille des J-blocs peut être calculée exactement ou approchée analytiquement à l'aide des formules (7.9) et (7.11). Nous rappelons qu'un calcul RCG* se décompose en trois étapes principales :

1. calcul de la structure fine de la configuration de départ C ;
2. calcul de la structure fine de la configuration d'arrivée C' ;
3. calcul des raies dipolaires électriques.

[3] Configurations dont le poids statistique g_C de l'ordre de quelques centaines.
[4] Le kurtosis est toujours inférieur à 3, kurtosis de la distribution gaussienne. Voir annexe C.
[5] Cas des configurations presque fermées, avec un ou deux électrons ou trous.

Nous allons d'abord donner une estimation de la complexité des opérations effectuées par RCG* pour une configuration

$$C = \left(n_k \ell_k^{w_k}\right)_{k=1,q}.$$

Pour cela, un calcul préliminaire de sommes sur $Q(J)$ est nécessaire.

La complexité du calcul d'un faisceau de transition par la méthode de Racah [8, 29, 30, 88, 89] est polynomiale par rapport à l'ensemble des $Q(J)$, et, avec les formules statistiques, le calcul des sommes polynomiales sur les $Q(J)$ est analytique moyennant quelques approximations. En effet, l'expression discrète d'un terme de degré p peut s'exprimer comme une intégrale :

$$\sum_{J=J_{\min}}^{J_x} Q(J)^p = \int_{J=0}^{\infty} Q_{GG}(J)^p \, \mathrm{d}J + \varepsilon(J_n) = I_p^{(GG)} + \varepsilon(J_n). \tag{7.12}$$

$\varepsilon(J_{\min})$ regroupe l'ensemble des erreurs que les différentes approximations entraînent, ainsi que le fait que la somme puisse commencer à 0 ou 1/2 selon la parité de la configuration. Cette quantité peut toujours être négligée dans un développement asymptotique tels ceux propres aux calculs de complexité.

$$I_p^{(GG)} = \int_{J=0}^{\infty} Q_{GG}(J)^p \, \mathrm{d}J = \left(\frac{n}{\lambda\sigma}\right)^{2p-1} \left(\frac{g_C}{2\Gamma(1/n)}\right)^p p^{-p+\frac{p-1}{n}} \Gamma\left(p + \frac{1-p}{n}\right). \tag{7.13}$$

p est fixé, λ et n varient peu par rapport à K (voir annexe C), $I_p^{GG}(C)$ dépend principalement de g_C et $\sigma = \sqrt{V}$. Tab. 7.2 résume les variations de ces deux variables. Si $w = 1$, alors $g_C = 4\ell + 2$ et la variance s'écrit :

$$V(\ell^1) = \frac{4\ell^2 + 4\ell + 3}{12}. \tag{7.14}$$

Si $w = 2\ell + 1$, alors $g_C = \frac{(4\ell+2)!}{(2\ell+1)!^2}$ et

$$V(\ell^{2\ell+1}) = \frac{(2\ell+1)^4 + 2(2\ell+1)^2}{12(4\ell+1)}. \tag{7.15}$$

ℓ	$w = 1$		$w = 2\ell + 1$	
	g	V	g	V
0	2	1/4	2	1/4
1	6	11/12	20	33/20
2	10	9/4	252	25/4
3	14	17/4	3432	833/52

TABLE 7.2 – Comparaison des variances et des dégénérescences des orbitales ℓ^w.

On peut montrer à l'aide des équations (7.3) et (7.6) que $V(\ell^w) = \mathcal{O}(\ell^2)$ pour $w = 1$ et $V(\ell^w) = \mathcal{O}(\ell^3)$ pour $w = 2\ell + 1$. Dans le cas $\ell^{2\ell+1}$, la dégénérescence, égale

à $C_{4\ell+2}^{2\ell+1}$ croît exponentiellement avec ℓ. En calcul d'opacité, on rencontre deux sortes de configurations complexes :

1. celles qui ont une orbitale d ou f remplie à moitié ou presque (ex. d^4, d^5, f^6, f^9) ;
2. celles qui ont au moins 4 orbitales ouvertes, ce qui peut être le cas des configurations d'arrivée des faisceaux de transition dont la configuration initiale est déjà excitée.

Dans le premier cas, c'est à cause de l'orbitale complexe que la configuration a un poids statistique élevé ; dans le second cas, on a d'un côté les variances des sous-couches ouvertes qui s'additionnent d'après la formule (7.4), tandis que leurs dégénérescences se multiplient d'après la formule (7.2). Cela signifie que l'intégrale (7.13) dépend presque uniquement de g_C, dégénérescence de la configuration. En résumé, pour des configurations suffisamment complexes[6], la somme (7.12) p. 129 s'approche par

$$\sum_{J=J_n}^{J_x} Q(J)^p = \mathcal{O}\left(g_C^p\right) \tag{7.16}$$

pour p positif.

La première étape, la construction de la matrice Hamiltonienne, consiste à remplir ses J-blocs des coefficients dont le calcul a été évoqué Sec. 2.2. La complexité des étapes préliminaires ainsi que du calcul de chaque coefficient est faible, et surtout très peu dépendante de la taille des J-blocs. On peut donc la supposer en $\mathcal{O}(1)$. Par expérience, on constate que le remplissage des J-blocs est le plus gros consommateur en ressources lors de la construction de la matrice Hamiltonienne. Chaque J-bloc contenant $Q(J)^2$ coefficients, la complexité est donnée approximativement formule (7.13) avec $p = 2$:

$$\sum_{J=J_n}^{J_x} Q(J)^2 = \mathcal{O}\left(g_C^2\right). \tag{7.17}$$

La seconde étape, la diagonalisation, consiste à diagonaliser la matrice Hamiltonienne J-bloc par J-bloc. Sa complexité est en $\mathcal{O}\left(n^3\right)$ si n est la taille de la matrice – ou du bloc – à diagonaliser[7]. La complexité de la diagonalisation est donc égale à la somme de la complexité sur chaque J-bloc, autrement dit,

$$\sum_{J=J_n}^{J_x} Q(J)^3 = \mathcal{O}\left(g_C^3\right). \tag{7.18}$$

C'est donc principalement la diagonalisation des matrices Hamiltoniennes qui ralentit le calcul de la structure fine d'une configuration. La même opération est effectuée pour C'. Il est cependant intéressant de noter qu'en général, C', excitée, est presque toujours plus complexe que g_C, comme nous l'avons montré en Sec. 7.1.3. De ce fait, c'est le calcul de la configuration d'arrivée qui est de loin le plus lent, car la dégénérescence de C' est de 1 à plus de 100 fois supérieure à celle de C.

Une fois les deux configurations détaillées en niveaux, le calcul des raies dipolaires électriques d'un niveau γJ à un niveau $\gamma' J'$ est en $\mathcal{O}(1)$ pour chaque raie. Par consé-

[6] g_C de l'ordre de quelques centaines.

[7] L'algorithme de diagonalisation utilisé par COWAN et conservé dans RCG* provient de *Numerical Recipes*. Voir le chapitre 11 de Réf. [90].

quent, la complexité du calcul de l'ensemble des raies E1 entre C et C' est proportionnelle au nombre de raies.

La complexité du calcul des faisceaux détaillés a deux conséquences sur le calcul hybride. La première est liée au traitement des raies spectrales. Chaque raie d'un faisceau de transition détaillé doit être convoluée par un profil de Voigt, qui s'étend à l'infini. En pratique, cette convolution se fait sur un intervalle limité, à l'instar de ce que nous avons montré Sec. 3.2.2. Une telle convolution raie par raie est fastidieuse et, dans les premières versions de SCORCG, était le processus qui prenait le plus de temps, même pour les configurations les plus complexes. Les méthodes que nous allons détailler Sec. 7.2 ont permis de réduire ce temps de calcul par plus d'un ordre de grandeur, de sorte que la complexité du calcul d'opacités a deux régimes :

1. Lorsque le nombre de raies moyen par faisceau est de quelques centaines à quelques milliers (ex. fer à haute température, aluminium), la convolution des raies spectrales est l'étape la plus longue.

2. Lorsque le nombre de raies moyen par faisceau est de l'ordre de 100000 ou plus, c'est de loin la diagonalisation du Hamiltonien qui est la plus coûteuse.

Il faut donc chercher à simplifier au maximum le traitement des raies si le nombre moyen de raies, calculable sans qu'il soit nécessaire d'être en DLA, est au plus quelques dizaines de milliers. En revanche, la performance d'un calcul d'opacité avec des faisceaux très complexes (ex. Germanium à plus de 60 eV) est peu altérée par le traitement des raies.

7.1.3 Les configurations excitées

Adapté à des calculs en supraconfigurations, l'utilisation de SCORCG en DCA avec supracouche-chapeau se heurte au problème du grand nombre de configurations possible, sachant que, dès que la température devient suffisamment élevée, l'abondance d'une configuration ne décroît pas forcément avec l'excitation.

La raison provient de l'expression de la fonction de partition de la configuration

$$\mathcal{U}_C = g_C e^{-\beta E_C}. \tag{7.19}$$

Soit C' une configuration obtenue par excitation de C. L'abondance relative de C' par rapport à C nous est donnée par l'équation de Maxwell-Boltzmann :

$$\frac{\mathcal{U}_{C'}}{\mathcal{U}_C} = \frac{g_{C'}}{g_C} e^{-\beta(E_{C'} - E_C)} \tag{7.20}$$

Il y a décroissance de l'abondance par rapport à l'excitation $C \to C'$ si, et seulement si,

$$\frac{g_{C'}}{g_C} e^{-\beta(E_{C'} - E_C)} \leq 1, \tag{7.21}$$

autrement dit

$$E_{C'} - E_C \geq k_B T \ln \frac{g_{C'}}{g_C}. \tag{7.22}$$

La température $k_B T_i$ à laquelle les deux configurations sont aussi abondantes est appelée *température d'inversion*. Elle est donc définie comme étant égale à

$$k_B T_i = \frac{E_{C'} - E_C}{\ln g_{C'} - \ln g_C} \tag{7.23}$$

Intéressons-nous au cas d'une excitation unique à partir d'une configuration à une seule couche ℓ^w ouverte, avec $w(4l + 2 - w) > 0$. Il y a trois sortes d'excitations possibles :

1. l'excitation depuis la sous-couche ouverte $\ell^w \rightarrow \ell^{w-1}\ell'$;
2. l'excitation depuis une sous-couche de cœur vers la sous-couche ouverte $\ell'^{4l'+2}\ell^w \rightarrow \ell'^{4l'+1}\ell^{w+1}$;
3. l'excitation depuis une sous-couche de cœur vers une sous-couche vide $\ell'^{4l'+2}\ell^w \rightarrow \ell'^{4l'+1}\ell^w\ell''$.

Le rapport $g_{C'}/g_C$ est la *dégénérescence relative* de l'excitation $C \rightarrow C'$, et ces rapports sont explicités dans différents cas Tab. 7.3.

Excitation	Cas général	$w = 1$	$w = 4l + 1$
$\ell^w \rightarrow \ell^{w-1}\ell'$	$\frac{(4\ell'+2)\,w}{4\ell+3-w} g_C$	$\frac{4\ell'+2}{4\ell+1} g_C$	$\frac{(4\ell'+2)(4\ell+1)}{2} g_C$
$\ell'^{4l'+2}\ell^w \rightarrow \ell'^{4l'+1}\ell^{w+1}$	$\frac{(4\ell'+2)(4\ell+2-w)}{w+1} g_C$	$\frac{(4\ell'+2)(4\ell+1)}{2} g_C$	$\frac{4\ell'+2}{4\ell+1} g_C$
$\ell'^{4l'+2}\ell^w \rightarrow \ell'^{4l'+1}\ell^w\ell''$	$(4\ell+2)\,(4\ell''+2)\, g_C$	$(4\ell+2)\,(4\ell''+2)\, g_C$	$(4\ell+2)\,(4\ell''+2)\, g_C$

TABLE 7.3 – Effet multiplicateur des excitations sur le poids statistique $g_{C'}$ de la configuration finale.

On peut, en faisant une moyenne très grossière, considérer que les expressions $4\ell + 1$ et $4\ell + 2$ sont de l'ordre de 10. C'est très pertinent pour les éléments de Z intermédiaire avec une couche d ouverte. Pour les configurations sans couche d ouverte ($Z \leq 20$) on peut prendre plutôt 4 ou 5 pour ces facteurs. Cela signifie que les deux premiers types d'excitation multiplient la dégénérescence de la configuration par un facteur 1 à 100, tandis que le troisième type d'excitation la multiplie – sauf dans le cas d'une excitation $s \rightarrow p$ ou $p \rightarrow s$ – par un facteur de l'ordre de 100.

Avec le code Cowan, nous pouvons illustrer ce phénomène sur deux ions souvent rencontrés dans nos calculs : le fer et l'aluminium ionisés 5 fois. À partir de 65 à 70 eV, les configurations simplement excitées[8] à partir de la couche de valence deviennent plus abondantes que la configuration fondamentale, car leur dégénérescence relative l'emporte sur leur température dans les cas de Tab. 7.4.

Les températures d'inversion sont plutôt de l'ordre de 20 à 50 eV pour des configurations excitées à partir de la couche de valence Tab. 7.5. Ceci peut s'expliquer par la présence de la sous-couche $3d$.

Pour chaque sous-couche, ils existe deux régimes avec un passage continu de l'un à l'autre. Si la température du plasma est plus d'un ordre de grandeur inférieure à la différence d'énergie entre deux sous-couches, alors la configuration fondamentale domine largement. Si la température du plasma est de l'ordre ou supérieure à cette

[8] $[\mathrm{Ar}]\, 3p^{-1}$ se lit $1s^2 2s^2 2p^6 3^2 3p^5$.

Configuration	$E_{C'} - E_C$	$g_{C'}/g_C$	$k_B T_i$
[He] $2s^2 2p^4$	0	1	0
[He] $2s^2 2p^3 3p$	126,2	8	60,7
[He] $2s 2p^5$	42,94	0,8	Inex.
[He] $2s 2p^4 3p$	164,7	12	66,27
$1s 2s^2 2p^4 3p$	1637	12	658,8

TABLE 7.4 – Dégénéresences relatives de configurations excitées de l'aluminium VI. Les énergies et températures sont en eV. Inex. signifie que la température d'inversion est inexistante car $g_{C'} < g_C$.

Configuration	$E_{C'} - E_C$	$g_{C'}/g_C$	$k_B T_i$
[Ar] $3d^3$	0	1	0
[Ar] $3d^2 4s$	31,26	0,75	Inex.
[Ar] $3d^2 4d$	55,50	3,75	41,99
[Ar] $3p^{-1} 3d^4$	58,06	12	23,36
[Ar] $3p^{-1} 3d^3 4d$	112,9	60	27,58
[Ar] $2p^{-1} 3d^3 4f$	793,14	84	179,0

TABLE 7.5 – Dégénéresences relatives de configurations excitées du fer VI. Les énergies et températures sont en eV.

différence d'énergie, alors les configurations excitées dominent, ce qui accroît fortement le nombre de configurations à prendre en compte ainsi que la complexité du calcul. De ce fait, le calcul détaillé n'est pas tellement adapté à des températures élevées, au-delà de 100 eV. Le raisonnement mené pour une configuration fondamentale peut être étendu au cas d'une configuration déjà excitée. Dans ce cas, une nouvelle excitation accroît en général la dégénérescence, mais l'augmentation n'est importante que si une nouvelle sous-couche est ouverte.

La présence de configurations excitées augmente considérablement la complexité du calcul, de par le fait que chaque excitation multiplie la dégénérescence de la configuration de départ par un facteur allant de quelques unités à plus de 100. Pour évaluer la complexité, notamment dans le cas des plasmas d'éléments de Z intermédiaire (proche de 30) dont la température est de quelques dizaines d'eV, on utilise le fait que l'ajout d'une excitation engendre en moyenne 5 configurations excitées et que le poids statistique des configurations excitées est, le plus souvent, entre un et deux ordres de grandeur au-dessus de la dégénérescence de la configuration fondamentale. Le degré d'excitation n est donc plusieurs centaines de fois plus complexe que le degré d'excitation $n-1$. Si un calcul comprend toutes les configurations une à deux fois excitées, la complexité totale des configurations est de quatre à six ordres de grandeur supérieure à celle d'un calcul qui ne comprend que les configurations fondamentales. Et encore, cette estimation très grossière ne tient pas compte du fait que la complexité de calcul de la structure fine d'une configuration est polynomiale au troisième degré.

Néanmoins, le facteur $e^{-\mu Q}$ dans l'expression de la grande fonction de partition limite le nombre et la complexité des configurations excitées, en réduisant fortement l'abondance des espèces les moins ionisées. Étant donné un corps pur de poids atomique Z, la dépendance de la complexité du calcul en fonction de la température est pour l'essentiel due à la structure électronique moyenne et son évolution en fonc-

tion de la température. Lorsqu'une orbitale complexe (ex. $3d$, $4d$, $4f$) est en moyenne à moitié remplie, les configurations sont beaucoup plus complexes que lorsque le nombre moyen d'électrons par ion correspond, à l'état fondamental, à la fermeture d'une couche.

7.2 Gestion des raies spectrales

Une fois les faisceaux de transition calculés, le très grand nombre de raies spectrales obtenues – de plusieurs millions à plusieurs milliards – doit être convolué par les élargissements instrumentaux. La convolution de chaque raie par un profil de Voigt est une opération extrêmement fastidieuse, et c'était la partie de SCORCG la plus consommatrice en temps. Nous allons passer en revue l'ensemble des méthodes de gestion efficace des raies que nous avons mises en œuvre dans notre outil, envisageant leurs avantages, leurs limites et les conséquences sur le calcul d'opacité.

7.2.1 Réduction numérique du nombre de raies traitées dans un faisceau

Nous avons vu que le nombre de raies par faisceau de transition peut être très élevé : avec une configuration de départ avec couche d ouverte 2 fois excitée ou une couche f ouverte et un électron excité, le nombre de raies par faisceau dépasse facilement la centaine de milliers. De tels faisceaux sont très fastidieux à calculer si chacune de leurs raies doit être convoluée par un profil de Voigt.

Par ailleurs, le résultat du calcul des DTA est, dans un premier temps, écrit sur la grille détaillée, dont la résolution δ n'est généralement pas plus fine que 10^{-3} eV. Une autre hypothèse simplificatrice est que le profil d'une raie ne dépend que du faisceau de transition auquel elle appartient. Cette approximation permet d'utiliser les formules d'élargissements Stark ionique et collisionnel telles que mises en œuvre dans SCO et SCORCG. Par conséquent, regrouper, au sein d'un faisceau, les raies d'énergies très proches, ne change pas significativement la forme du spectre détaillé. L'opacité du faisceau de transition détaillé de C à C' s'exprime en fonction de l'opacité de chaque raie, selon la formule (1.42) p. 21

$$\kappa_{C\to C'}\left(h\nu\right) = \frac{\pi e^2 h}{mc} \sum_{\gamma J\in C} \sum_{\gamma J\to\gamma' J'} \left(2J+1\right) f_{\gamma J\to\gamma' J'} e^{-\beta E_{\gamma J}} \Phi_{\gamma J\to\gamma' J'}\left(h\nu\right), \tag{7.24}$$

où K regroupe les autres facteurs de l'opacité.

Le traitement d'un grand nombre de raies spectrales est facilité par le formalisme des super-raies. L'idée est d'utiliser la grille détaillée $G^{(\mathrm{D})} = G\left(h\nu_{\mathrm{n}}, h\nu_{\mathrm{x}}, \delta\right) = G\left(h\nu_{\mathrm{n}}, h\nu_{\mathrm{x}}, N^{(\mathrm{D})}\right)$ définie par ses bornes inférieure $h\nu_{\mathrm{n}}$ et supérieure $h\nu_{\mathrm{x}}$, ainsi que son pas $\delta = \frac{h\nu_{\mathrm{x}} - h\nu_{\mathrm{n}}}{N^{(\mathrm{D})}}$ où $N^{(\mathrm{D})}$ est le nombre de points de la grille détaillée. On rappelle qu'une grille est un ensemble fini de nombres réels séparés par des intervalles égaux. Une *super-raie* $\Lambda\left(h\nu_\Lambda, f_\Lambda, \Phi_\Lambda\right)$ sur la grille détaillée $G^{(\mathrm{D})}$ est un ensemble de raies dont l'énergie est très proche de $h\nu_\Lambda$. Cet ensemble de raies est traité comme une raie unique d'énergie $h\nu_\Lambda \in G^{(\mathrm{D})}$, d'intensité f_Λ et de profil Φ_Λ. Dans notre approche simplificatrice, la p-ième super-raie Λ_p d'énergie $h\nu_p = h\nu_{\mathrm{n}} + p\delta$ a pour force la somme des forces

de raies dont l'énergie est dans l'intervalle $i_p = \left]h\nu_p - \delta, h\nu_p\right]$:

$$f_p = \sum_{\gamma J \to \gamma' J' \in \Lambda_p} (2J+1)\, f_{\gamma J \to \gamma' J'} \tag{7.25}$$

et la contribution de la super-raie à l'opacité s'écrit[9] :

$$\kappa_\Lambda(h\nu) = \frac{\mathcal{N}_\mathrm{A}}{A}\frac{\pi e^2 h}{mc} \sum_{\gamma J \to \gamma' J' \in \Lambda} f_\Lambda \Phi_\Lambda(h\nu)\,. \tag{7.26}$$

Dans l'hypothèse de SCORCG où les profils de raies d'un même faisceau sont identiques et centrés en la même énergie $h\nu_p$, $\Phi_{\gamma J \to \gamma' J'}(h\nu) = \Phi_\Lambda(h\nu)$ peut se factoriser et la convolution est effectuée sur les super-raies au lieu d'être effectuée sur les raies.

L'utilisation des super-raies « tronque » le nombre effectif de raies à convoluer. Les faisceaux les plus complexes qui peuvent avoir plusieurs centaines de milliers de raies ont rarement plus de 10000 super-raies, d'où un gain en temps sur le traitement des raies d'un facteur de quelques unités à deux ordres de grandeur, même pour des grilles détaillées fines (typiquement $\delta \simeq 10^{-3}$ eV). Dans le contexte de SCORCG, une autre simplification est rendue possible de par le fait que les positions spectrales des super-raies sont toutes égales à une des $h\nu_p$: le profil de Voigt peut être tabulé au début de la convolution des raies d'un faisceau, divisant à nouveau le temps de calcul par près d'un ordre de grandeur. Malgré ce gain de temps considérable, un calcul d'opacité peut, dans certains cas complexes, toujours avoir à gérer des millions, voire des dizaines de millions de super-raies, en raison du grand nombre de configurations, de faisceaux de transition à détailler – en particulier dans le domaine XUV – et de raies par faisceau.

7.2.2 Réduction à l'aide d'un ou deux élargissements moyens

Le traitement des raies peut encore être très consommateur en temps, en particulier si les hypothèses faites Sec. 7.2.1 ne sont pas valables. Par exemple, dans le cas d'un profil de raie collisionnel, toutes les raies d'un faisceau de transition n'ont pas le même profil et le profil de Voigt prolongé trop loin « comble » trop les trous dans le spectre en opacité, affectant de manière significative la moyenne de Rosseland [52]. Dans l'optique de limiter le temps de calcul, deux méthodes ont été conçues en utilisant les super-raies qui regroupent l'ensemble des raies spectrales de l'intervalle $i_p = \left]e_p - \delta, e_p\right]$, en moyennant les élargissements des différentes raies. Développées pour des raies à élargissement purement lorentzien, ces méthodes ont été adaptées à SCORCG qui calcule des profils de Voigt, en remplaçant le paramètre lorentzien par la HWHM et en prenant en compte le paramètre de Voigt k_p de Sec. 3.2.2. Chaque super-raie Λ_p a pour intensité L_p la somme des intensités $L_{\gamma J}$ des raies qu'elle regroupe :

$$L_p = \sum_{E_{\gamma J \to \gamma' J'} \in \Lambda_p} L_{\gamma J \to \gamma' J'} \tag{7.27a}$$

$$= \sum_{E_{\gamma J \to \gamma' J'} \in \Lambda_p} \mathcal{P}(\gamma J)\, f_{\gamma J \to \gamma' J'}. \tag{7.27b}$$

[9] L'indice p est sous-entendu.

La première méthode utilise, par intervalle i_p, une seule HWHM moyenne w_p et un seul paramètre de Voigt k_p :

$$L_p w_p = \sum_{\gamma J \to \gamma' J' \in \Lambda_p} L_{\gamma J \to \gamma' J'} \, w_{\gamma J \to \gamma' J'} \tag{7.28a}$$

$$L_p k_p = \sum_{\gamma J \to \gamma' J' \in \Lambda_p} L_{\gamma J \to \gamma' J'} \, k_{\gamma J \to \gamma' J'}. \tag{7.28b}$$

La division par L_p à la fin du calcul des raies permet d'obtenir w_p et k_p pour chaque super-raie du spectre. Cette approximation peut sembler très grossière au premier abord, mais le spectre obtenu garde les structures d'absorption associées aux raies intenses ou à un paquet de raies moins intenses mais proches. Rassembler toutes les raies dont l'énergie est comprise dans un intervalle i_p est donc un excellent choix dès lors que la position des raies mineures et les minima en opacité du spectre influent peu sur le calcul. C'est le cas pour des calculs de moyenne de Planck, d'émissivité ou même de transmission si la profondeur optique est faible. En revanche, cette méthode change légèrement l'opacité moyenne de Rosseland et peut avoir un effet sur la transmission en cas de saturation. Nous avons adapté cette méthode à SCORCG où les profils de raies ont à la fois une composante gaussienne et une composante lorentzienne.

La seconde méthode, dite méthode Abdallah II, considère deux super-raies par intervalle i_p, l'une Λ_p^+ « large » contenant les raies avec des grands élargissements, l'autre Λ_p^- « étroite » contenant les raies avec des petits élargissements. Λ_p^+ et Λ_p^- sont chacune dotées de leur propre intensité et élargissement. Le calcul, sur chaque intervalle i_p, se déroule en deux étapes. Lors de la première étape, les moyennes artihmétique et harmonique des élargissements de l'ensemble des raies dont l'énergie est dans i_p sont calculées. La moyenne arithmétique $w_{\mathrm{A},p}$ est calculée de la même manière que dans l'équation (7.28) :

$$L_p w_{\mathrm{A},p} = \sum_{\gamma J \to \gamma' J' \in \Lambda_p} L_{\gamma J \to \gamma' J'} \, w_{\gamma J \to \gamma' J'}, \tag{7.29}$$

tandis que la moyenne harmonique $w_{\mathrm{H},p}$ est calculée selon la formule :

$$L_p w_{\mathrm{H},p}^{-1} = \sum_{\gamma J \to \gamma' J' \in \Lambda_p} L_{\gamma J \to \gamma' J'} \, w_{\gamma J \to \gamma' J'}^{-1}, \tag{7.30}$$

suivie d'une division par L_p puis d'une inversion. Les deux moyennes sont alors utilisées pour définir l'élargissement discriminant $w_{0,p}$ entre les raies larges et les raies étroites :

$$w_{0.p} = \frac{w_{\mathrm{A},p} + w_{\mathrm{H},p}}{2}. \tag{7.31}$$

$w_{0,p}$, plus proche de la moyenne géométrique, sépare plus judicieusement que $w_{\mathrm{A},p}$ raies larges et raies étroites [91].

Une fois les élargissements calculés, la seconde étape construit les super-raies Λ_p^+ et Λ_p^- dans chaque intervalle. Les raies spectrales sont alors classées en fonction de leur largeur lorentzienne dans l'une des super-raies ainsi définies, et chaque super-raie large

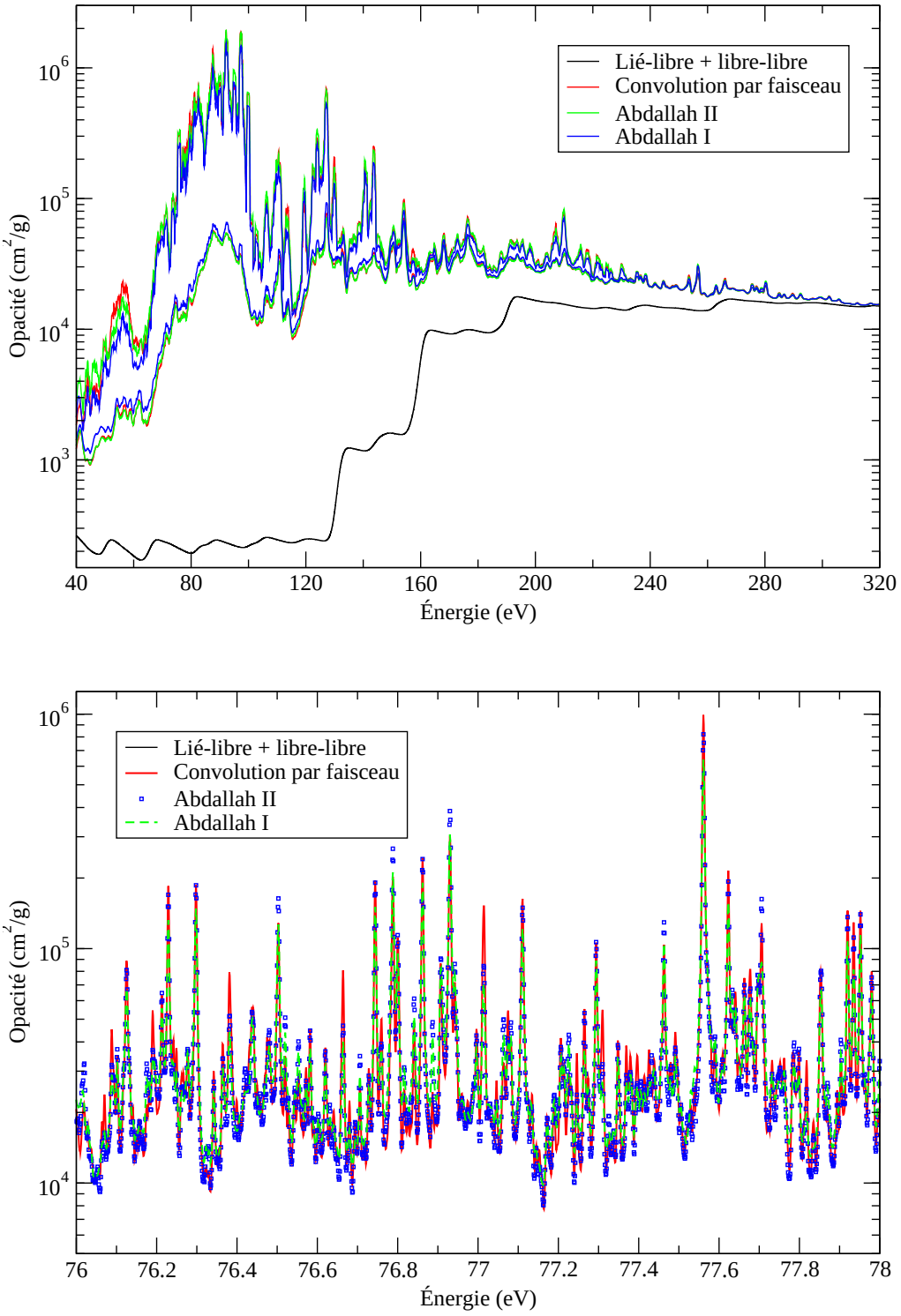


FIGURE 7.1 – Enveloppe (haut) et détail (bas) d'un spectre de cuivre à 10^{-3} g/cm^3 et 20 eV calculé selon les trois méthodes de gestion des raies.

Λ_p^+ a :

$$L_p^+ = \sum_{\gamma J \to \gamma' J' \in \Lambda_p^+} L_{\gamma J \to \gamma' J'} \tag{7.32a}$$

$$w_p^+ = \frac{1}{L_p^+} \sum_{\gamma J \to \gamma' J' \in \Lambda_p^+} L_{\gamma J \to \gamma' J'}\, w_{\gamma J \to \gamma' J'} \tag{7.32b}$$

$$k_p^+ = \frac{1}{L_p^+} \sum_{\gamma J \to \gamma' J' \in \Lambda_p^+} L_{\gamma J \to \gamma' J'}\, k_{\gamma J \to \gamma' J'}, \tag{7.32c}$$

tandis que chaque super-raie étroite Λ_p^- a :

$$L_p^- = \sum_{\gamma J \to \gamma' J' \in \Lambda_p^-} L_{\gamma J \to \gamma' J'} \tag{7.33a}$$

$$w_p^- = \frac{1}{L_p^-} \sum_{\gamma J \to \gamma' J' \in \Lambda_p^-} L_{\gamma J \to \gamma' J'} w_{\gamma J \to \gamma' J'} \tag{7.33b}$$

$$k_p^- = \frac{1}{L_p^-} \sum_{\gamma J \to \gamma' J' \in \Lambda_p^-} L_{\gamma J \to \gamma' J'}\, k_{\gamma J \to \gamma' J'}. \tag{7.33c}$$

On obtient ainsi, du point de vue de la convolution, l'équivalent de deux raies spectrales.

Parmi les spectres Fig. 7.1, celui obtenu par la méthode Abdallah II est très peu différencié du spectre avec des super-raies à l'intérieur d'un seul faisceau de transition, tandis que celui obtenu par la méthode Abdallah I lisse nettement les structures étroites. Par rapport à l'exemple montré Réf. [91], les résultats d'Abdallah II sont moins fidèles au spectre exact car le spectre est bien plus complexe : un plasma de cuivre pas très dense avec une couche *d* ouverte contient bien plus de raies par intervalle et de détails dans son spectre que le plasma d'oxygène simulé Réf. [91].

Le regroupement des raies en super-raies dans chaque faisceau permet un gain important en temps de calcul. Malgré la réduction du calcul aux super-raies, la convolution des raies reste la partie la plus coûteuse d'un calcul d'opacité. La mise au point des méthodes Abdallah I et II permet une réduction d'un ordre de grandeur du coût de la convolution des raies spectrales regroupées en super-raies. Le temps de convolution des raies devient, pour des calcul avec des configurations nombreuses et complexes, négligeable par rapport au temps de calcul des faisceaux de transition détaillés.

Cependant, la tabulation du profil de Voigt pour les super-raies à l'intérieur de chaque faisceau est possible car les énergies des super-raies sont séparées par le même pas. Cette tabulation permet de réduire d'un ordre de grandeur le temps total nécessaire pour la convolution des raies dans le calcul d'opacité, et est de ce fait équivalente Abdallah I et Abdallah II. En cas de configurations complexes, elle est même plus rapide qu'Abdallah II qui doit calculer deux fois les faisceaux de transition détaillés. Cependant, les méthodes d'Abdallah I et II ont deux intérêts :

- leur complexité dépend assez peu du nombre total de faisceaux de transition détaillés, par conséquent lorsque ce nombre devient très élevé le gain de temps par rapport à un profil de Voigt tabulé pour un faisceau s'accroît ;

- Abdallah I et II s'affranchissent du fait que l'élargissement des raies ne dépend que du faisceau dont elles font partie, hypothèse de base des super-raies dans un faisceau.

7.2.3 Les limites de MUTA

Mise au point par MAZEVET et ABDALLAH [79], la méthode MUTA (*Mixed Unresolved Transition Array* en anglais) de réduction des raies spectrales a rencontré un certain succès parmi les développeurs de codes d'opacités. Elle a notamment été adoptée par KLAPISCH et BUSQUET [92] dans leurs dernières versions de HULLAC [93]. L'idée de la méthode MUTA est de ne détailler que les raies « fortes » d'un faisceau et de regrouper les raies « faibles » dans un faisceau statistique, car seules les raies les plus fortes contribuent à la forme d'un faisceau de transition.

La partie détaillée du calcul MUTA est calculée comme un spectre DLA, avec chaque raie convoluée par son profil. La partie statistique du calcul MUTA, dite *UTA résiduel* est calculée par construction des trois premiers moments de la distribution des raies d'énergie $E_{\gamma J\to\gamma' J'}$ et d'intensité $L_{\gamma J\to\gamma' J'}$:

1. l'intensité :
$$L_{\text{res}} = \sum_{\gamma J\to\gamma' J'/L<L_{\min}} L_{\gamma J\to\gamma' J'} \tag{7.34}$$

2. l'énergie moyenne :
$$E_{\text{res}} = \frac{1}{L_{\text{res}}} \sum_{\gamma J\to\gamma' J'/L<L_{\min}} L_{\gamma J\to\gamma' J'} E_{\gamma J\to\gamma' J'} \tag{7.35}$$

3. la variance :
$$V_{\text{res}} = \frac{1}{L_{\text{res}}} \sum_{\gamma J\to\gamma' J'/L<L_{\min}} L_{\gamma J\to\gamma' J'} \left(E_{\gamma J\to\gamma' J'} - E_{\text{res}}\right)^2 \tag{7.36}$$

Il est évident que la méthode MUTA est très prometteuse, à condition que le seuil au-delà duquel il est nécessaire de garder des raies individuelles puisse être prédit convenablement avant calcul complet du faisceau de transition. Or un tel critère n'a pas encore été trouvé, d'autant plus que l'approche MUTA échoue à gagner un temps important sur plusieurs types de faisceaux. Nous avons retenu, pour les faisceaux ayant quelques milliers de raies, de choisir pour seuil la force de raie moyenne, un MUTA *à la moyenne*. Les faisceaux dont au moins une configuration a une intégrale de spin-orbite de l'ordre de ou supérieure aux plus grandes intégrales d'interaction électron-électron (G^1) sont très mal modélisés par un MUTA, comme le montre l'exemple Fig. 7.2.

Plus précisément, le spin-orbite va réduire jusqu'à 0 le seuil au-delà duquel les raies doivent être traitées individuellement pour avoir un spectre peu différent au spectre issu d'un calcul complètement détaillé. Le même problème se pose lorsque les élargissements sont réduits, car l'opacité entre les raies passe par des minima de plus en plus bas. C'est le cas, illustré Fig. 7.3, du faisceau $Cu^{8+}3d^6 - 3d^5 4f$ pour un MUTA à la moyenne. Enfin, certains faisceaux de forme assez irrégulière sans spin-orbite important sont très mal modélisés par MUTA, y compris à des élargissements importants comme on peut le voir Fig. 7.4.

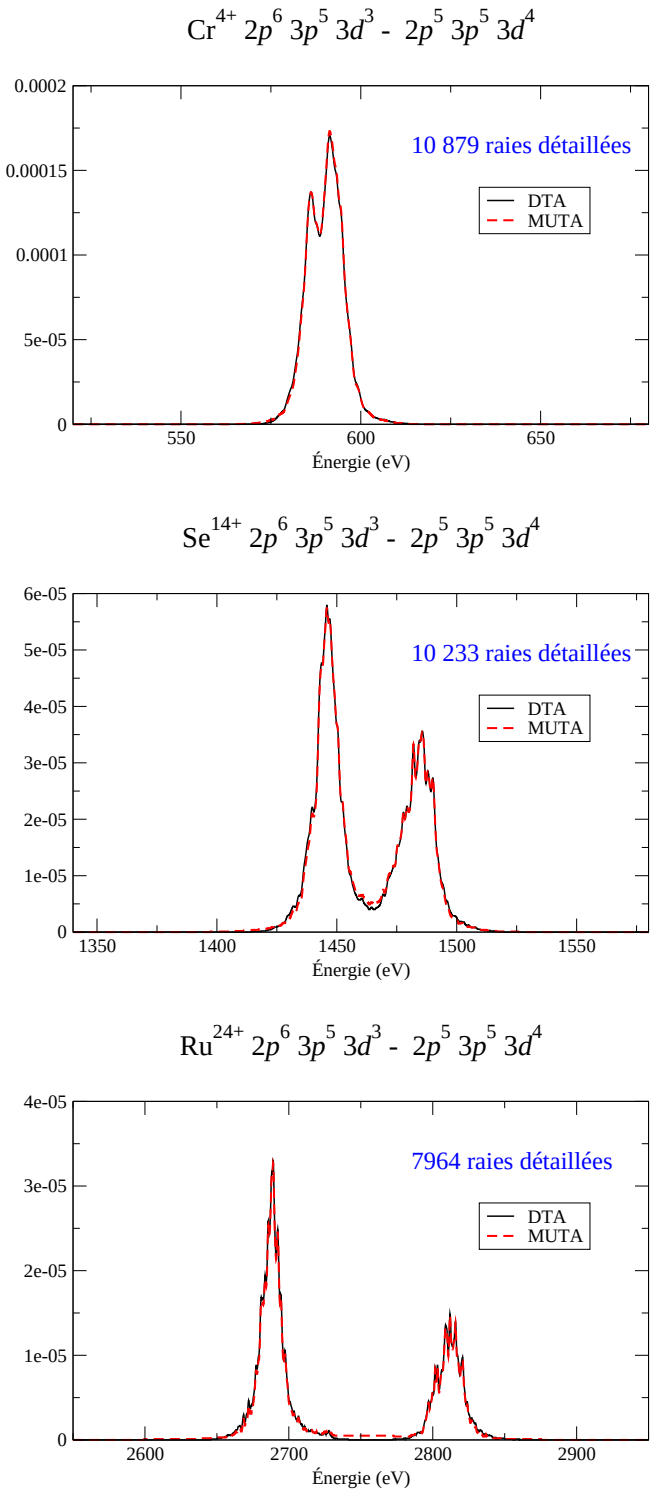


FIGURE 7.2 – Effet du spin-orbite sur la modélisation par MUTA pour une séquence isoélectronique (même remplissage, Z variable) sur $[\mathrm{Ar}]\,3p^6 3d^2 4s - 3p^5 3d^2 4s 4d$ (51 878 raies) pour $Z = 29$, 39 et 49. L'elargissement gaussien est de 0,5 eV, et le seuil est la force de raie moyenne.

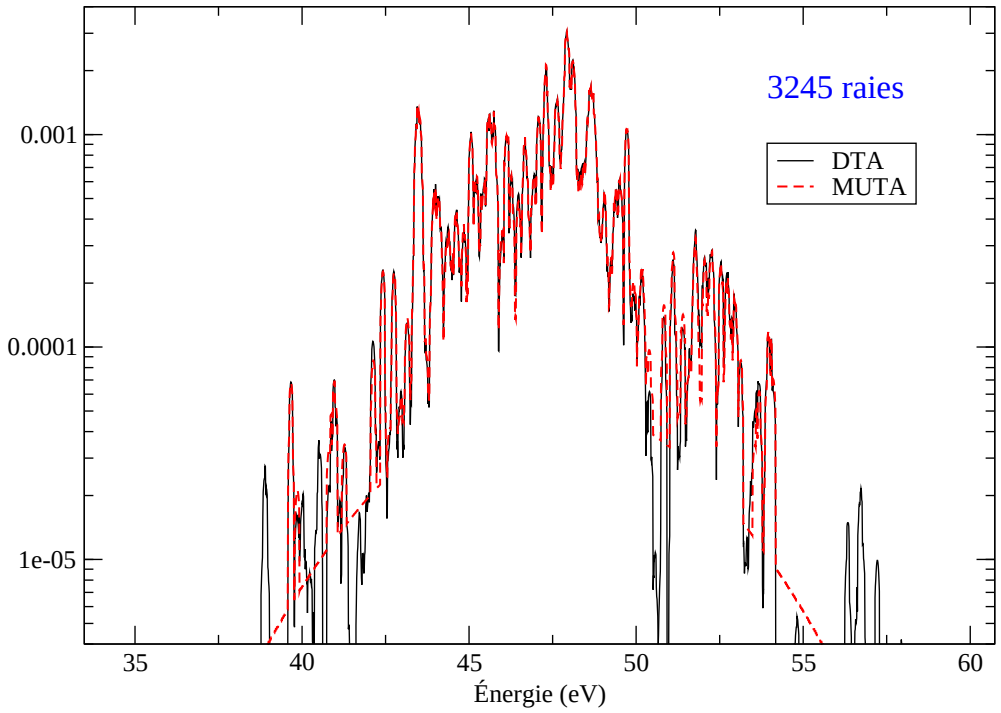


FIGURE 7.3 – Diagramme semi-logarithmique du faisceau de transition $Cu^{8+}3d^6 - 3d^5 4f$ calculé raie par raie et en MUTA à la moyenne, avec un élargissement gaussien de 2.10^{-2} eV.

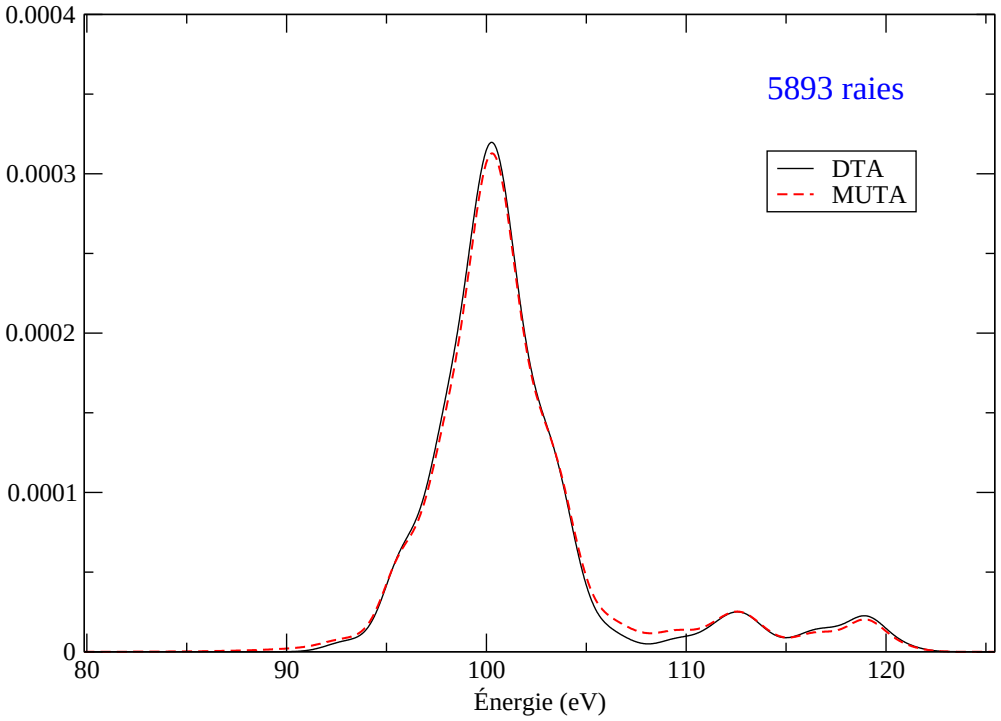


FIGURE 7.4 – Comparaison d'un calcul de faiseau $Cu^{8+}3p^6 3d^2 4s - 3p^5 3d^3 4s4d$ en détaillant toutes les rais et avec un MUTA à la moyenne.

L'approche MUTA n'est donc compatible qu'avec des faisceaux *connexes*, c'est à dire des faisceaux dont l'opacité ne devient pas très faible entre plusieurs raies ou groupes de raies dans le faisceau. Plus généralement, MUTA donne une opacité spectrale très correcte pour les maxima mais avec des minima qui sont un peu « comblés ». Ceci est acceptable pour le calcul de la moyenne de Planck ou de la transmission avec une faible épaisseur optique (partie linéaire de l'exponentielle), mais pas dans un calcul en transmission plus épais ou une moyenne de Rosseland, à cause de la forte dépendance aux minima. De plus, établir un critère sur le seuil de raies à détailler est extrêmement ardu compte tenu de la diversité de formes que peuvent prendre les faisceaux de transition. L'approche MUTA a été généralisée aux sous-faisceaux relativistes dans les dernières versions de HULLAC [93].

7.3 Coalescence des faisceaux de transition sous l'effet des élargissements

Pour un calcul d'opacité efficace, il n'est pas pertinent de détailler les faisceaux de transition lorsque les largeurs de raies sont très élevées et font que l'ensemble des raies d'un faisceau *coalesce* complètement en une seule grosse structure qui est très bien approchée par des calculs statistiques. La *coalescence* d'un faisceau de transition par rapport à une approche statistique désigne le fait que les faisceaux de transition DTA et UTA (ou SOSA) ont des opacités très « proches[10] ». Nous allons présenter deux approches de la coalescence : l'une, qui se veut descriptive, permet de quantifier la qualité de l'approximation d'une approche statistique sur un faisceau de transition détaillé ; l'autre, prédictive, propose une approche non seulement basée sur la forme du faisceau convolué, mais aussi sur sa contribution à l'opacité. À partir de la première méthode, nous déduisons un critère rudimentaire utilisable dans un code d'opacité hybride.

7.3.1 Indicateur de forme

Élargi par des processus physiques, un faisceau de transition prend deux types de formes à l'extrême.

1. Si l'élargissement est élevé, le faisceau n'est pas résolu et son profil est très bien approché par celui d'une raie dont l'énergie est l'énergie moyenne du faisceau, et l'intensité l'intensité totale du faisceau, somme des intensités des raies spectrales. Un calcul statistique est parfaitement adapté à ce type de faisceau, qualifié de *complètement coalescent* ou *lisse*.

2. Si l'élargissement est faible, les groupes de raies fortes à l'intérieur du faisceau sont résolus. Le seul moyen de reproduire les structures des raies de ce type de faisceau, qualifié de *poreux* ou *non-coalescent*, est d'effectuer un calcul détaillé du faisceau de transition.

Le passage de l'un à l'autre de ces cas extrêmes est continu. Du faisceau complètement coalescent au faisceau poreux, il y a une transition pendant laquelle le profil prend une forme de plus en plus complexe et irrégulière, avec de plus en plus de structures du spectre détaillé résolues. Le cas intermédiaire est celui d'un faisceau de transition en apparence lissemais mal modélisé par un faisceau statistique.

[10] La proximité s'exprime par rapport à une métrique dont nous donnerons un exemple plus loin.

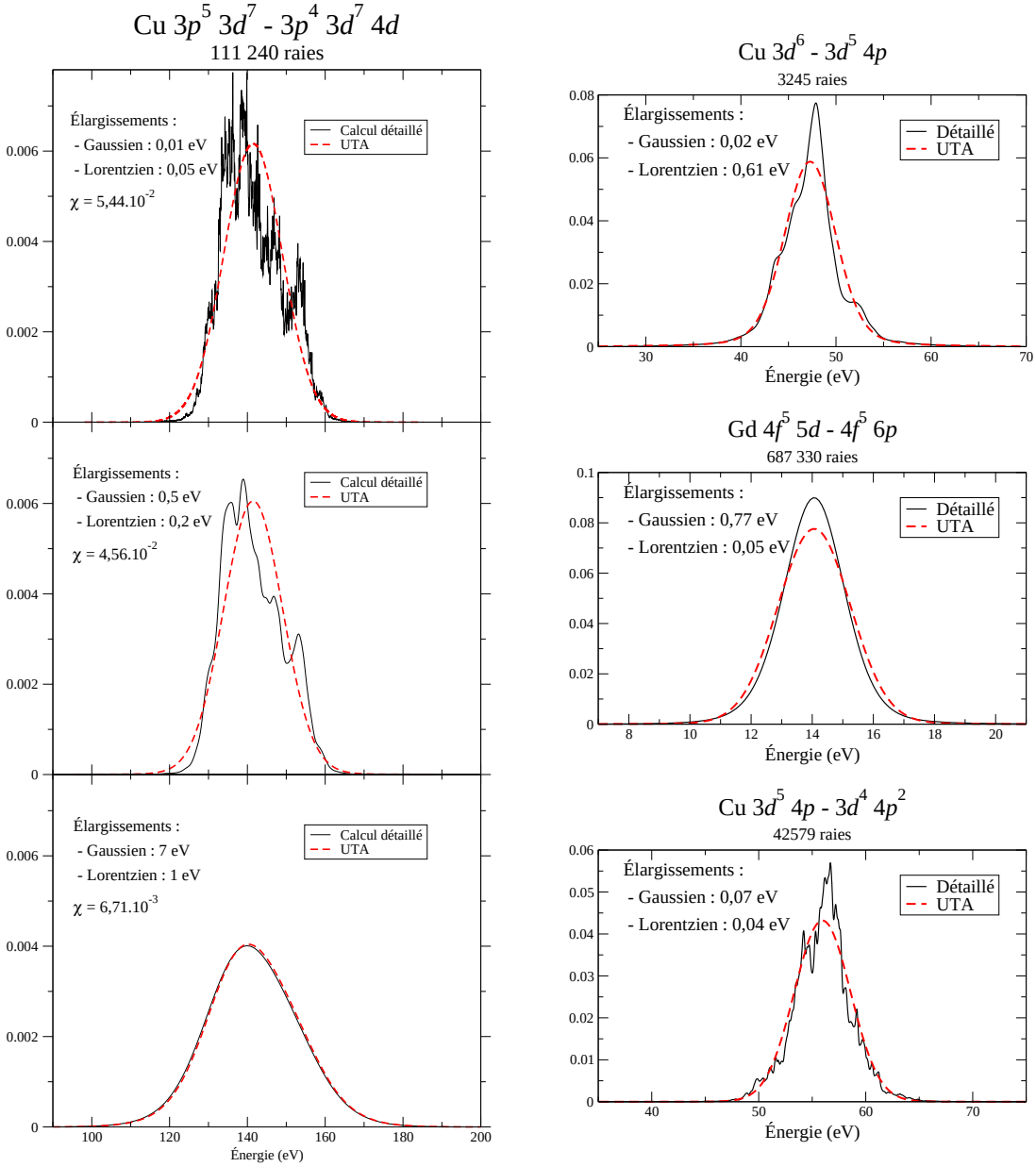


FIGURE 7.5 – À gauche : un faisceau de transition avec des élargissements de plus en plus élevés en descendant.
À droite : trois faisceaux de transition pour lesquels $\chi \simeq 0,02$, de formes variées.

La notion de coalescence est liée à la distribution avec laquelle les faisceaux statistiques sont modélisés. Les formalismes statistiques donnent des formules pour le calcul des moments d'ordre 0 à 2. Dans les approches statistiques que nous avons utilisées jusqu'à maintenant, le faisceau statistique est modélisé par une gaussienne. La coalescence telle que nous la présentons dans cette section est ainsi appelée *coalescence gaussienne* ou encore *coalescence à l'ordre 2*. En nous fondant sur des constatations empiriques qui se sont vérifiées dans tous les cas que nous avons envisagés, nous faisons l'hypothèse que la coalescence d'un faisceau de transition dépend presque uniquement du plus grand ordre auquel il est modélisé par une distribution statistique.

Étant donné un faisceau de transition $C - C'$ de largeur statistique w_s contenant N raies $\gamma J \rightarrow \gamma' J'$ élargi par un élargissement (w_g, w_l), on cherche à estimer la proximité de l'opacité statistique par rapport à l'opacité détaillée. Il existe un grand nombre d'indicateurs permettant d'estimer l'exactitude de tel calcul par rapport à tel autre. L'indicateur

$$\chi^2_{(\mathrm{MUTA})} = \int \frac{\left(\kappa^{\mathrm{MUTA}}_{C\rightarrow C'}(h\nu) - \kappa^{(\mathrm{D})}_{C\rightarrow C'}(h\nu)\right)^2}{\kappa^{(\mathrm{D})}_{C\rightarrow C'}(h\nu)^2}\,\mathrm{d}h\nu \tag{7.37}$$

a été utilisé pour évaluer la justesse de la méthode MUTA [79]. Cet indicateur a cependant un gros inconvénient si $\kappa^{(\mathrm{MUTA})}$ est remplacée par l'opacité statistique $\kappa^{(\mathrm{S})}$: le résultat diverge si le faisceau est assez poreux pour que l'opacité détaillée soit localement beaucoup plus faible que l'opacité statistique.

Pour éviter ce problème lors de la comparaison de faisceaux détaillés et statistiques, nous avons choisi l'indicateur suivant :

$$\chi = \int \frac{\left(f^{(\mathrm{S})}(h\nu) - f^{(\mathrm{D})}(h\nu)\right)^2}{f^{(\mathrm{S})}(h\nu) + f^{(\mathrm{D})}(h\nu)}\,\mathrm{d}h\nu, \tag{7.38}$$

où

$$f^{(\mathrm{S})}_{C\rightarrow C'}(h\nu) = \frac{mc}{\pi e^2 h}\frac{A}{\mathcal{N}_{\mathrm{A}}}\kappa^{(\mathrm{S})}(h\nu) = f_{C\rightarrow C'}\Phi_{C\rightarrow C'}(h\nu) \tag{7.39a}$$

$$f^{(\mathrm{D})}_{C\rightarrow C'}(h\nu) = \frac{mc}{\pi e^2 h}\frac{A}{\mathcal{N}_{\mathrm{A}}}\kappa^{(\mathrm{D})}(h\nu) = \sum_{\substack{\gamma J\rightarrow\gamma' J' \\ \gamma J\in C,\ \gamma' J'\in C'}} f_{\gamma J\rightarrow\gamma' J'}\,\Phi_{\gamma J\rightarrow\gamma' J'}(h\nu), \tag{7.39b}$$

ce qui permet d'avoir des expressions sans unité. L'addition de deux opacités permet encore de mettre en évidence des différences importantes entre les deux opacités mais évite d'avoir un résultat qui diverge dans le cas d'un faisceau détaillé très poreux ou de différences non négligeables à proximité des ailes. Nous avons déterminé empiriquement que le faisceau pouvait être considéré comme *lisse* lorsque $\chi \leq 0,02$. Selon les exigences du calcul, cette limite peut être rehaussée à 0,05, mais le lissage est alors beaucoup plus grossier.

L'indicateur ainsi choisi est assez fiable, et prend en compte non seulement ce qui est le plus évident à l'œil, près du maximum en opacité du faisceau, mais aussi ce qui est moins évident, dans les ailes du faisceau de transition. La quantification par notre χ sur différents faisceaux de transition d'un plasma de cuivre ($Z = 29$) ou de gadolinium ($Z = 64$) est mise en évidence Fig. 7.5 :

- $3d^2 - 3d4f$: 81 raies ;

- $3d^5 4p - 3d^5 5d$: 30969 raies ;
- $3d^3 4p - 3d^2 4p^2$: 5920 raies.

Le premier faisceau contient peu de raies et les configurations de départ et d'arrivée sont très simples, par conséquent le problème de coalescence ne se pose guère. On constate qu'il faut un élargissement élevé pour faire converger ce faisceau. Le second faisceau a des raies nombreuses partant de et arrivant sur des configurations complexes. La coalescence est relativement lente, cependant on constate que le faisceau présente une forme très régulière même à faible élargissement physique, mais cette forme n'est pas celle d'une gaussienne. Elle semble beaucoup plus piquée au centre. Nous verrons au chapitre suivant que ce type de faisceau qui coalesce mal si on l'approche par une gaussienne coalesce bien mieux avec certaines distributions de raies non-gaussiennes. Le troisième faisceau semble mettre en défaut le critère sur χ. Lorsque celui-ci est proche de 0,02, les opacités détaillée et statistique semblent avoir des formes très différentes au sommet. En revanche, le calcul statistique restitue très bien les ailes du faisceau de transition.

Un faisceau de transition étant considéré comme lisse ou fortement coalescent lorsque le χ entre le faisceau détaillé et le faisceau statistique est plus petit que 0,02, nous avons déterminé, pour plusieurs faisceaux de transition, l'élargissement gaussien au-dessus duquel ces faisceaux sont coalescents.

7.3.2 Critère de coalescence complète

Plusieurs tendances apparaissent selon le type et la complexité des faisceaux de transition Tab. 7.6.

1. Les faisceaux sont coalescents lorsque l'élargissement physique est un peu inférieur à l'élargissement statistique. Les exceptions à cette règle sont rares et de deux sortes :

   - les faisceaux simples avec très peu de raies ;
   - les faisceaux de type O ou $\ell^w \ell' \rightarrow \ell^w \ell''$, sur lesquels nous reviendrons Chap. 8.

   Un critère de coalescence sommaire est $w_g \geq w_s$ voire $w_g \geq w_s/2$ pour les faisceaux de transition de plus de quelques centaines de raies et de type autre que V.

2. La coalescence dépend peu de la complexité du faisceau de transition. Il n'y a que pour les faisceaux les plus complexes ($N_{\text{raies}} \geq 10^5$) que l'élargissement relatif $\frac{w_g}{w_s}$ pour lequel $\chi \simeq 0,02$ est plus petit que 0,3. Mais la dépendance par rapport au nombre de raies est bien plus faible que ce que d'autres études suggèrent [94].

À cause de ses ailes très fortes, le profil lorentzien fait coalescer les faisceaux de transition avec une largeur plus faible que le profil gaussien, aux ailes tendant vers 0 très rapidement. De manière empirique, nous avons déterminé que le profil lorentzien est 40 à 50 % plus fort que le profil gaussien – en comparant les paramètres, non les HWHM –. L'effet des profils lorentzien et gaussien sur la coalescence peut être visualisé sur un faisceau à travers un graphe de surface, comme Fig. 7.6. Ces graphes de surface, en échelle semi-logarithmique, permettent de se faire une idée de la coalescence : complète dans la zone verte, partielle dans la zone jaune-orangé alors que dans la zone rouge, le faisceau est poreux et doit être détaillé s'il peut l'être.

Z	Transition	Type	N_{raies}	w_s	$\frac{w_g}{w_s}$	$\frac{w_l}{w_s}$
13	$2p^4$ - $2p^3 3d$	V	97	3,47 eV	0,455	0,378
	$2p^4 3d$ - $2p^3 3d^2$	M	2190	3,63 eV	0,413	0,286
	$2p^4 3p$ - $2p^3 3s 3p$	S	778	4,32 eV	0,459	0,282
	$2p^3 3p$ - $2p^3 3d$	O	630	1,28 eV	0,885	0,691
	$2p^3 3s 3p$ - $2p^2 3s^2 3p$	S	778	4,36 eV	0,428	0,234
29	$3d^2$ - $3d\,4f$	V	81	1,82 eV	0,860	0,676
	$3d^3 4p$ - $3d^2 4p^2$	M	5920	2,60 eV	0,381	0,223
	$3d^3 4s 4p$ - $3d^2 4s 4p^2$	C	22481	3,38 eV	0,180	0,118
	$3d^4$ - $3d^3 4f$	V	2825	2,70 eV	0,467	0,293
	$3d^5 4p$ - $3d^5 5d$	O	30969	0,883 eV	1,023	0,702
	$3d^5 4p$ - $3d^4 4p^2$	M	42579	2,46 eV	0,059	0,026
	$3d^6$ - $3d^5 4p$	V	3245	2,46 eV	0,401	0,255
	$3p^5 3d^7$ - $3p^4 3d^7 4d$	S	111240	7,64 eV	0,394	0,198
	$3p^5 3d^2 4f$ - $3p^4 3d^3 4f$	C	536978	6,74 eV	0,415	0,365
	$3d^3 4d$ - $3d^3 5f$	O	14355	1,65 eV	0,921	0,649
	$3d^7 4d$ - $3d^6 4d\,5f$	S	202749	2,81 eV	0,270	0,074
35	$3d^7 4s$ - $3d^7 5p$	O	2082	0,601 eV	0,632	0,283
	$3d^9$ - $3d^8\,4f$	V	81	2,47 eV	0,812	0,629
	$3d^7\,4s\,4p$ - $3d^6\,4s\,4p^2$	C	85357	4,66 eV	0,012	$< 10^{-2}$
	$3d^8\,4s\,4p$ - $3d^8\,4s\,5d$	S	32329	3,21 eV	0,935	0,806
64	$4f^3 5d 6s$ - $4f^2 5d^2 6s$	C	241533	1,99 eV	0,331	0,110
	$4f^4$ - $4f^3 6d$	V	14087	2,70 eV	0,167	0,078
	$4f^4 5d$ - $4f^3 5d^2$	M	524362	2,20 eV	0,173	0,030
	$4f^3 5d$ - $4f^2 5d 6d$	S	134127	2,46 eV	0,370	0,134
	$4f^5 5d$ - $4f^5 6p$	O	687330	0,903 eV	0,852	0,530

TABLE 7.6 – Élargissements relatifs $\frac{w_g}{w_s}$ et $\frac{w_l}{w_s}$ pour lesquels on a $\chi = 0,02$, sur différents faisceaux de transition.

Lettre	Nom	Type
V	Valence	$\ell^{w+1} \to \ell^w \ell'$
O	Optique	$\ell^w \ell' \to \ell^w \ell''$
M	Moszkowski	$\ell^w \ell'^{w'} \to \ell^{w-1} \ell'^{w'+1}$
S	Spectateur	$(\lambda)^\omega \ell^{w+1} \to (\lambda)^\omega \ell^w \ell'$ $(\lambda)^\omega \ell^w \ell' \to (\lambda)^\omega \ell^w \ell''$
C	Complexe	$(\lambda)^\omega \ell^w \ell'^{w'} \to (\lambda)^\omega \ell^{w-1} \ell'^{w'+1}$

TABLE 7.7 – Légende des types de faisceaux, d'après la nomenclature de Chap. 2.

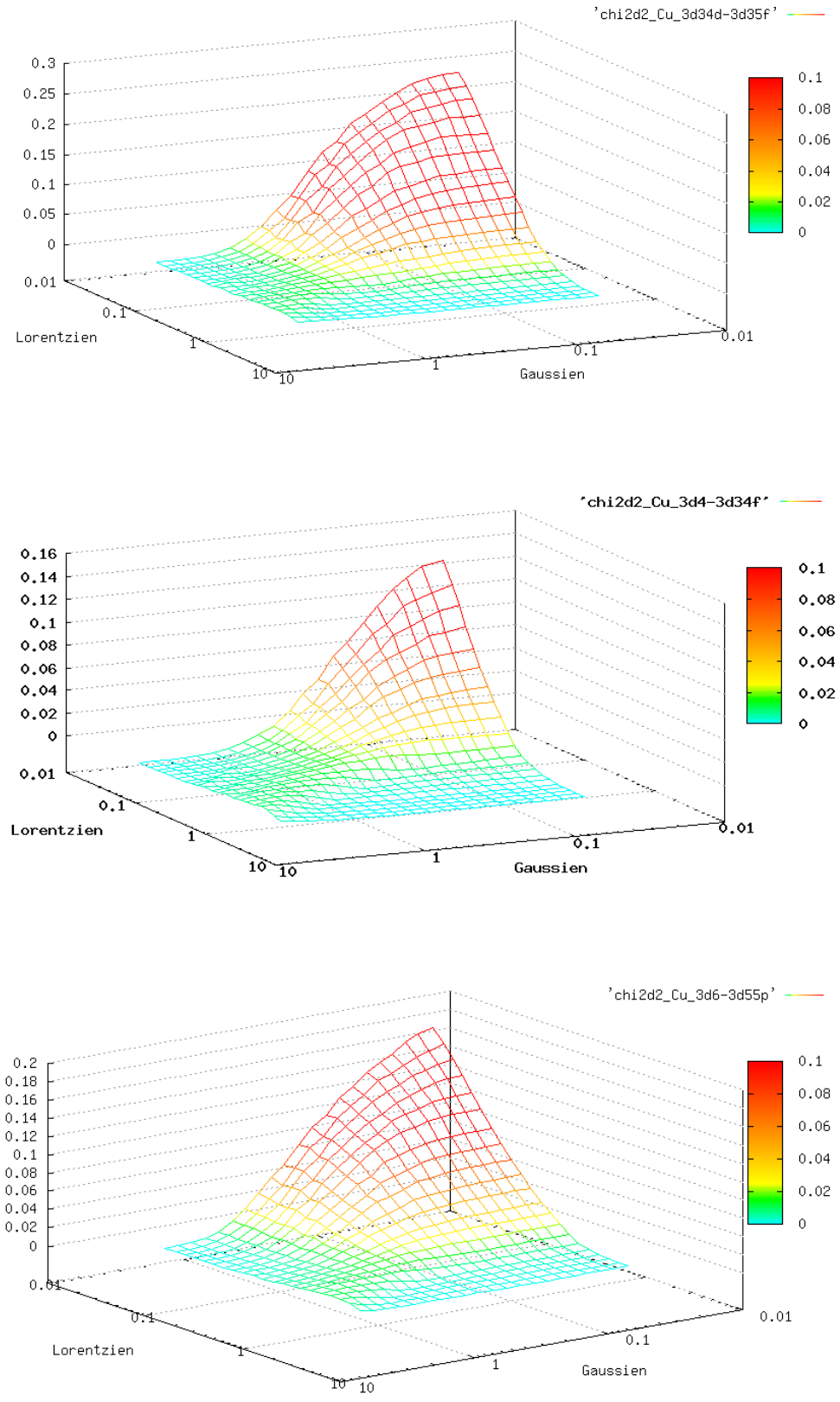


FIGURE 7.6 – Graphes de surface représentant l'indicateur de forme χ en fonction des élargissements gaussien et lorentzien en eV, pour, du haut vers le bas, les faisceaux de transition $Cu^{7+}3d^3 4p - 3d^3 5d$, $Cu^{7+}3d^4 - 3d^3 4f$ et $Cu^{5+}3d^6 - 3d^5 5p$.

Les courbes de χ égal se rapprochent de droites que la représentation logarithmique déforme sur les graphes de surface. Cela signifie que, du point de vue de la coalescence, élargissements gaussien et lorentzien s'additionnent. Étant donné que la coalescence est équivalente pour un paramètre gaussien 50% plus fort qu'un paramètre lorentzien, on en déduit le critère de coalescence complète suivant :

$$2w_g + 3w_l \geq \Pi w_s, \tag{7.40}$$

où Π est la *permissivité*, dont la valeur n'excède pas 2. Un critère sévère qui ne garde que les faisceaux dont la forme est vraiment bien approchée par les approches statistiques correspond à $\Pi \simeq 2$. Un critère plus permissif correspond à $\Pi < 1$. Plus Π est faible, plus le calcul est rapide car plus de faisceaux sont statistiques. Plus Π est élevé, plus le calcul est lent car plus de faisceaux sont détaillés.

7.3.3 Porosité et force de raie : intérêt et limites

Le problème de la coalescence des faisceaux de transition se pose en particulier lorsqu'on veut calculer des moyennes de Rosseland, qui sont très dépendantes des minima en opacité. Un critère basé sur deux paramètres a été proposé [94] :

- le *paramètre de résolution de raies*, ou *porosité* :

$$P = \sqrt{2\ln 2}\,\mathrm{erf}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\frac{\sigma_\phi}{\sigma_E}, \tag{7.41}$$

  où $\sigma_E = \sqrt{\mu_2^{(c)}}$

- le *paramètre de force de raie* :

$$\Gamma = \frac{\kappa_0}{\mu_1\left(1 - e^{-\beta\mu_1}\right)\mathcal{S}_x} \tag{7.42}$$

$\mathcal{S}_{\max}$ est la force de la raie la plus forte. Les variables κ_0 et σ_ϕ sont « arbitraires ». κ_0 correspond au « socle » constitué par les opacités lié-libre et libre-libre, au comportement suffisamment régulier pour que leur somme soit considérée comme constante sur l'intervalle d'énergie du faisceau de transition. σ_ϕ est la séparation moyenne des raies spectrales dans le faisceau.

Compte tenu de ce que nous avons constaté plus haut et des indications données dans Réf. [94], la quantité la plus utile est sans doute le paramètre de force de raie $\Gamma_{C-C'}$ défini ainsi :

$$\Gamma_{C-C'} = \frac{\kappa_0}{\mu_1\left(1 - e^{-\beta\mu_1}\right)\mathcal{S}_x\mathcal{A}_C}. \tag{7.43}$$

Ce paramètre de force présente l'intérêt d'être fiable car, s'il est plus grand que l'unité, il garantit un calcul correct des opacités moyennes. De plus, il est prédicable sans qu'un calcul détaillé soit nécessaire, car $\mathcal{S}_x$, la force de raie maximale d'un faisceau de transition, peut être estimée de manière statistique sans que les raies du faisceau de transition soient connues. Nous le mettons en œuvre dans notre approche hybride.

Soit $\mathcal{D}(a)\,\mathrm{d}a$ le nombre de raies dont l'amplitude est comprise entre a et $a + \mathrm{d}a$. Porter et Thomas [95] ont démontré qu'au sein d'un paquet $J - J'$, la distribution des

amplitudes de raies a obéit à une loi gaussienne :

$$\mathcal{D}(a) = \frac{\mathcal{N}}{\sqrt{2\pi v_a}}\, e^{-\frac{a^2}{2v_a}}. \tag{7.44}$$

Il est évident que l'intégrale de cette distribution sur l'ensemble des amplitudes vaut $\mathcal{N}$ nombre de raies spectrales du faisceau. La force de raie $\mathcal{S}$ étant définie comme étant le carré de l'amplitude, on a

$$\mathcal{D}(\mathcal{S})\mathrm{d}\mathcal{S} = 2a\,\mathcal{D}(a)\mathrm{d}a, \tag{7.45}$$

d'où à l'intérieur de chaque faisceau $J - J'$, l'égalité

$$\mathcal{D}(\mathcal{S}) = \frac{\mathcal{N}}{\sqrt{2\pi v_a \mathcal{S}}}\, e^{\frac{-\mathcal{S}}{2v_a}}. \tag{7.46}$$

Par définition de $\mathcal{S}_{\text{moy}}$ et v_a, on a $v_a = \mathcal{S}_{\text{moy}}$ Cependant l'égalité 7.46, vraie à l'intérieur d'un paquet $J - J'$, n'est pas vérifiée sur l'ensemble d'un faisceau de transition. BAUCHE *et coll.* [96] ont montré que, pour la plupart des faisceaux de transition, la distribution des amplitudes de raies se rapproche d'une distribution de Laplace :

$$\mathcal{D}(a) = \frac{\mathcal{N}\lambda}{2}\, e^{-\lambda|a|}, \tag{7.47}$$

où $\lambda > 0$ vérifie $\lambda^2 v_a = 2$. Une autre expression de $\mathcal{S}_{\text{moy}}$ est :

$$\begin{aligned}\mathcal{S}_{\text{moy}} &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{S}\mathcal{D}(a)\,\mathrm{d}a \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} a^2\mathcal{D}(a)\,\mathrm{d}a \\ &= \frac{2\mathcal{N}}{\lambda^2}.\end{aligned}$$

Avec S_{tot}, on retrouve que la variance en amplitude est égale à la force moyenne du faisceau $\mathcal{S}_{\text{moy}}$.

$$v_a = \frac{\mathcal{S}_{\text{tot}}}{\mathcal{N}} = \mathcal{S}_{\text{moy}}. \tag{7.48}$$

La distribution des forces s'obtient par le même raisonnement que pour la distribution (7.46) :

$$\mathcal{D}(\mathcal{S}) = \frac{\mathcal{N}\lambda}{2\sqrt{\mathcal{S}}}\, e^{-\lambda\sqrt{\mathcal{S}_{\text{x}}}}. \tag{7.49}$$

La loi des extrêmes de Kendall et Stuart [97] nous dit que le nombre de raies ayant une force supérieure à $\mathcal{S}_{\text{max}}$ est égal à $1/2$.

$$\frac{1}{2} = \int_{\mathcal{S}_{\text{x}}}^{\infty} \mathcal{D}(\mathcal{S})\mathrm{d}\mathcal{S} = \mathcal{N}e^{-\lambda\sqrt{\mathcal{S}_{\text{x}}}}, \tag{7.50}$$

d'où

$$\mathcal{S}_{\text{x}} = \frac{v_a}{2}\ln\left(2\mathcal{N}\right)^2 = \frac{\mathcal{S}_{\text{tot}}}{\mathcal{N}}\ln\left(2\mathcal{N}\right)^2. \tag{7.51}$$

Cette formule qui permet d'approcher par des considérations statistiques la force maximale d'une raie dans un faisceau de transition a l'avantage d'être totalement applicable sans diagonalisation du Hamiltonien. Nous avons vu Chap. 3 que les méthodes qui permettent d'extraire le nombre de raies d'un faisceau ou la force totale sont de complexité bien inférieure à celles qui permettent de diagonaliser le Hamiltonien.

Ajoutons que Gaffney a étudié des faisceaux isolés, sans prendre en compte l'abondance des configurations de départ. Détailler ou pas un faisceau partant d'une configuration rare a bien moins d'effet sur l'opacité lié-lié que détailler ou pas un faisceau partant d'une configuration abondante. La *permissivité* Π du critère (7.40) peut tout à fait varier en fonction de la valeur du paramètre de force de raie Γ défini formule (7.43). Plus $\Gamma_{C-C'}$ est élevé, plus le lié-libre et le libre-libre dominent et moins les faisceaux ont besoin d'être détaillés. Le critère de coalescence peut être très permissif, avec $\Pi \leq 0,8$ sans risque important d'altérer l'opacité pour $\Gamma \geq 1$. À l'inverse, un faisceau pour lequel $\Gamma \leq 0,1$ est un faisceau qui a un fort impact sur l'opacité, en particulier sur la moyenne de Rosseland. Mieux vaut alors que le critère de coalescence soit sévère pour ces faisceaux, avec $\Pi \leq 2$.

Ainsi, $\Pi_{C-C'}$ est défini dans l'équation (7.52) sur trois domaines, et est dépendant du faisceau de transition :

$$\Pi_{C-C'} = \begin{cases} 0,8 & \text{si } \Gamma_{C-C'} \geq 1 \\ 0,8\Gamma_{C-C'}^{-\log(5/2)} & \text{si } 0,1 \leq \Gamma_{C-C'} \leq 1 \\ 2 & \text{si } \Gamma_{C-C'} \leq 0,1 \end{cases} , \tag{7.52}$$

avec $\log(5/2)$ le logarithme décimal de $5/2$, qui est très proche de $2/5$. Précisons que cette définition garantit la continuité en 1 et 0,1 :

$$(0,1)^{\log(5/2)} = 10^{-\log(5/2)} \simeq 2/5. \tag{7.53}$$

Ce critère de coalescence sommaire permet de gagner un temps considérable lorsque des faisceaux complexes sont calculés. Cependant, la coalescence à l'ordre 2 souffre d'une trop faible et trop aléatoire dépendance au nombre de raies, alors que la plupart des faisceaux de transition complexes présentent un comportement régulier, mais non gaussien. L'objectif du chapitre suivant est de montrer comment d'autres modélisations statistiques peuvent remédier au manque de souplesse de la modélisation gaussienne.



AMÉLIORATION DE LA MODÉLISATION STATISTIQUE DES FAISCEAUX DE TRANSITION

Dans SCO et SCORCG, les trois formalismes, UTA [62, 63], SOSA [66] et STA [67], permettent de calculer des faisceaux de transition statistiques en les modélisant par trois paramètres. Cependant, ces formalismes ont leurs limites : ils modélisent les faisceaux de transition par une gaussienne, ce qui n'est valable que si les élargissements physiques sont nettement supérieurs à la distribution statistique des plus fortes raies du faisceau de transition.De plus, ils ne prennent pas en compte l'effet de la température sur les moments des faisceaux de transition. Les résultats issus de ces études de formes de faisceaux n'ont pas encore été mis en œuvre dans notre code hybride, mais des pistes pour une implémentation sont envisagées.

8.1 Au-delà de l'ordre 2

Dans les faisceaux de transition, la distribution de raies n'est en général pas gaussienne, et deux propriétés peuvent être visualisées sur un graphique du faisceau de transition : l'asymétrie et le kurtosis.

8.1.1 Limites de la modélisation statistique à l'ordre 2

Certains faisceaux de transition complexes, sont asymétrique et plus piqués au centre que la gaussienne qui les modélise. Sur le graphe linéaire de Fig. 8.1, la gaussienne est incapable de restituer le caractère très asymétrique et piqué du faisceau de transition. Le graphe semi-logarithmique montre que la gaussienne modélise mal le comportement du faisceau, même convolué, sur ses ailes : d'un coté l'intensité du faisceau est surestimée par la distribution gaussienne, de l'autre elle est sous-estimée par cette même distribution.

Les graphes de Fig. 8.2 illustrent un exemple de faisceau de transition plus symétrique, mais dont la répartition de l'intensité entre les ailes et l'énergie spectrale

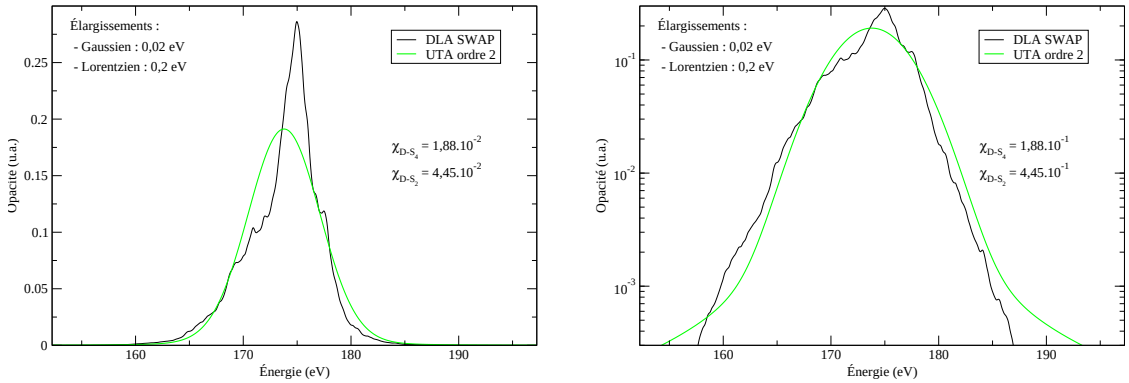


FIGURE 8.1 – Faisceau de Germanium X $3d^4 4p - 3d^3 4p 4f$, tracé sur un graphe linéaire (gauche) et semi-logarithmique (droite). Le faisceau a 88 492 raies dipolaires électriques.

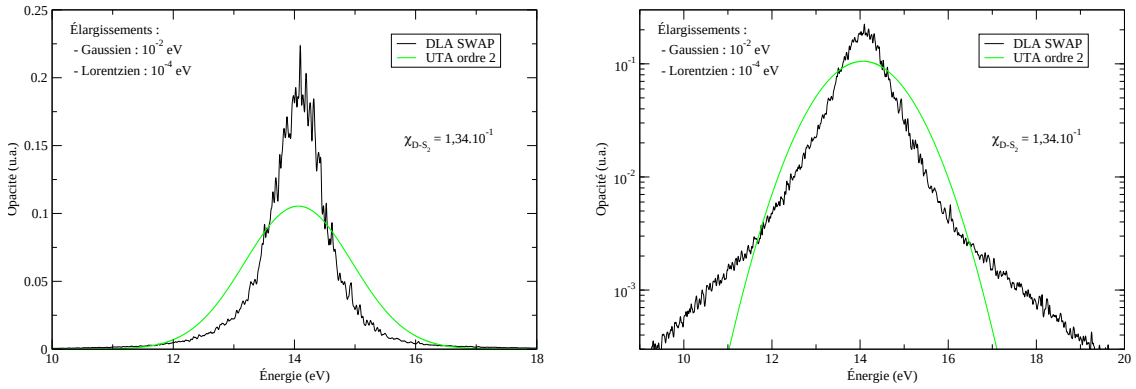


FIGURE 8.2 – Faisceau de Gadolinium V $4f^5 5d - 4f^5 6p$, graphes comme Fig. 8.1.

moyenne est très différente de celle d'une gaussienne. Avec 687 537 raies dipolaires électriques, le calcul de ce faisceau nécessite plus d'une minute de calcul sur un processeur de station de travail en 2010. Tous les faisceaux optiques, de type $\ell^w\ell' - \ell^w\ell''$, tendent à avoir des ailes très fortes. Les modéliser par une gaussienne expose donc à des erreurs importantes, car les ailes ont un rôle primordial dans les moyennes de Rosseland [52].

Nous voyons donc que modéliser les faisceaux à l'ordre 2 décrit de manière incomplète les faisceaux de transition, en particulier quand les élargissements physiques sont de l'ordre de l'élargissement statistique du faisceau. Le *moment centré réduit* d'ordre n de la distribution $\left(h\nu_{\gamma J\to\gamma' J'}, S_{\gamma J\to\gamma' J'}\right)_{\gamma J\in C,\,\gamma' J'\in C'}$ est défini en fonction des raies du faisceau $C \to C'$ formule (C.12) p. 221 :

$$\alpha_n^{(\mathrm{c})}(C\to C') = \frac{1}{\left(\mu_2^{(\mathrm{c})}\right)^{n/2}} \sum_{\gamma J\to\gamma' J'} \left(h\nu_{\gamma J\to\gamma' J'} - h\nu_{C\to C'}\right)^n \mathcal{S}_{\gamma J\to\gamma' J'}, \tag{8.1}$$

où μ_0 est la force totale du faisceau de transition et $\mu_2^{(\mathrm{c})} = v_{C\to C'}$ la variance de la dstribution des raies. Deux moments particuliers nous intéressent : l'asymétrie et le kurtosis. L'*asymétrie* est le moment centré réduit d'ordre 3 :

$$\alpha_3 = \frac{1}{v_C^{3/2}} \sum_{\gamma J\to\gamma' J'} \left(h\nu_{\gamma J\to\gamma' J'} - h\nu_{C\to C'}\right)^3 \mathcal{S}_{\gamma J\to\gamma' J'} \tag{8.2}$$

$$= \frac{1}{\sigma_C^3} \sum_{\gamma J\to\gamma' J'} \left(h\nu_{\gamma J\to\gamma' J'} - h\nu_{C\to C'}\right)^3 \mathcal{S}_{\gamma J\to\gamma' J'}. \tag{8.3}$$

Graphiquement, l'asymétrie indique que le maximum d'opacité du faisceau de transition se trouve d'un côté de la moyenne $h\nu_{C\to C'}$. Ce côté est appelé *tête*, et le côté opposé, où l'opacité décroît plus lentement, est appelé *queue*. Le *kurtosis* est le moment centré réduit d'ordre 4 :

$$\alpha_4 = \frac{1}{v_C^2} \sum_{\gamma J\to\gamma' J'} \left(h\nu_{\gamma J\to\gamma' J'} - h\nu_{C\to C'}\right)^4 \mathcal{S}_{\gamma J\to\gamma' J'} \tag{8.4}$$

$$= \frac{1}{\sigma_C^4} \sum_{\gamma J\to\gamma' J'} \left(h\nu_{\gamma J\to\gamma' J'} - h\nu_{C\to C'}\right)^4 \mathcal{S}_{\gamma J\to\gamma' J'}. \tag{8.5}$$

Graphiquement, le kurtosis reflète la répartition de la distribution des raies entre le centre et les *ailes*. Un kurtosis petit signifie que la distribution a un centre large et des ailes faibles. Un kurtosis élevé signifie que la distribution a un centre très « piqué » et des ailes fortes.

8.1.2 Moments d'ordre 3 et 4 sur un calcul d'opacité

SCORCG extrait les moments d'ordre 3 et 4 SWAP de tous les faisceaux de transition qui sont détaillés. Il devient ainsi possible de « cartographier » la distribution de ces moments dans un calcul détaillé. Nous avons étudié trois exemples : l'aluminium à 40 eV et 10 mg/cm^3, le cobalt à 30 eV et 10 mg/cm^3 le cuivre à 35 eV et 4 mg/cm^3. Une température de quelques dizaines d'eV permet de s'affranchir de l'effet de la basse température sur les moments des faisceaux, sans dépeupler la couche de valence, la seule dans laquelle le spin-orbite est assez faible pour que les faisceaux ne soient pas

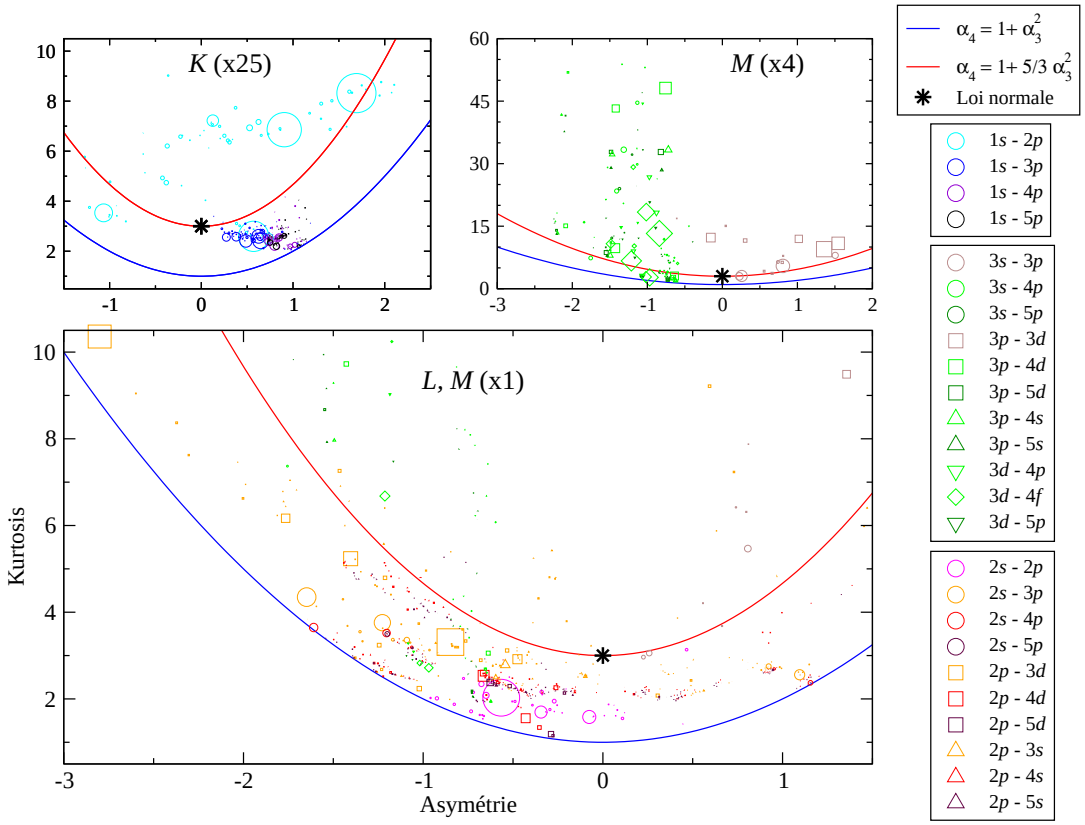


FIGURE 8.3 – Cartographie de l'asymétrie (abscisses) et du kurtosis (ordonnées) des faisceaux de transition de l'aluminium à 40 eV et 10 mg/cm^3. L'intensité des faisceaux est proportionnelle à l'aire contenue dans chaque cercle, triangle et carré ; la couleur dénote les couches initiale et finale tandis que la forme dénote les ℓ initial et final. Les intensités ont été multipliées pour les couches K et M. La parabole bleue minore en α_4 le domaine dans lequel asymétrie et kurtosis peuvent prendre leurs valeurs pour toute distribution positive ; la parabole rouge minore en α_4 le domaine dans lequel la NIG (voir Sec. C.2 dans les annexes.) est calculable.

formés de plusieurs structures d'absorption. L'énergie spectrale est limitée à quelques centaines d'eV. À des énergies spectrales plus élevées et pour des éléments de Z intermédiaire, les faisceaux de transition partent de couches de cœur caractérisées par un fort spin-orbite qui rend tout traitement de type UTA inopérant. Nous avons choisi la distribution NIG, ou gaussienne normale inverse[1], qui est facile à calculer et prend en charge un domaine assez étendu en asymétrie et en kurtosis, que nous précisons en annexe C.

Les faisceaux de transition de l'aluminium à 40 eV et 10 mg/cm^3, représentés sur des cartes en asymétrie et en kurtosis Fig. 8.3, peuvent prendre des formes très variées. Une grande partie des faisceaux, en particulier les plus intenses, ont des kurtosis proches de 3, compris entre 1,5 et 4. En revanche, la plupart des faisceaux, y compris les plus intenses, tendent à être franchement asymétriques. Dans le cas de l'aluminium, un plus grand nombre de faisceaux présentent une asymétrie négative que positive. Cette prépondérance des faisceaux asymétriques est systématique dans tous les calculs d'opacité.

[1]Normal Inverse Gaussian en anglais.

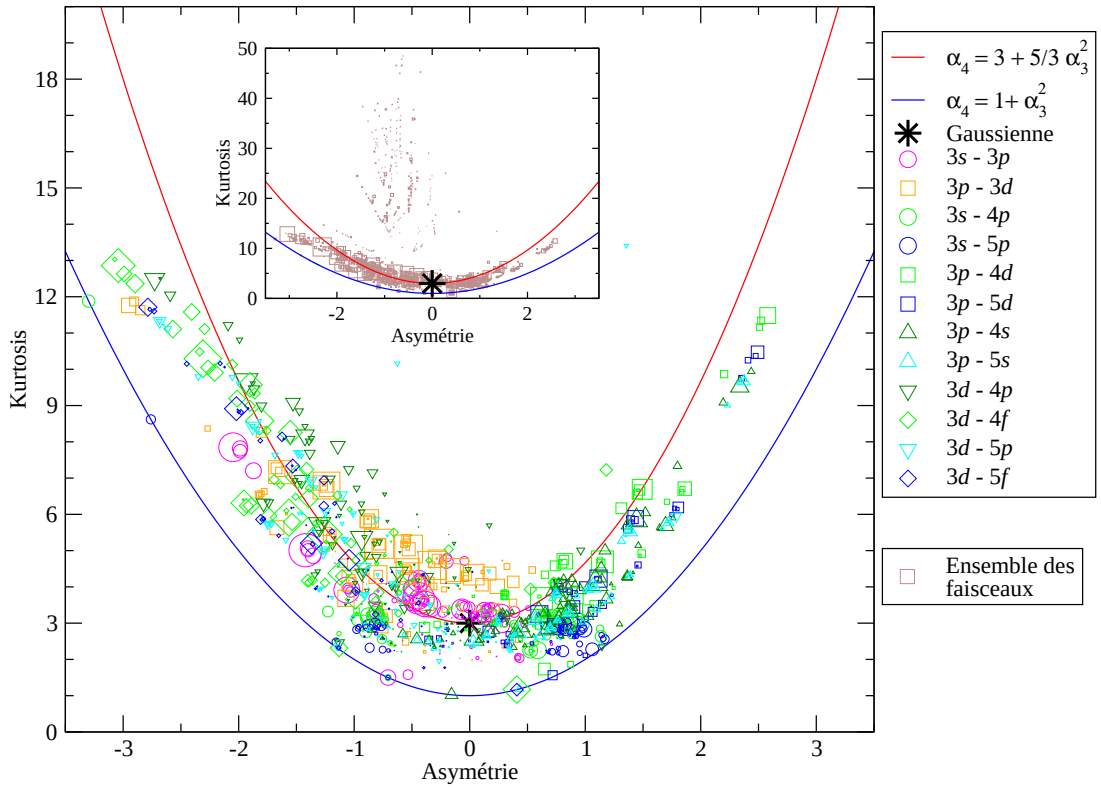


FIGURE 8.4 – Cartographie des moments d'ordre 3 et 4 des faisceaux de transition du cuivre à 35 eV et 4 mg/cm^3, l'aire enclose étant proportionnelle à l'intensité du faisceau. Le médaillon montre la totalité des faisceaux de transition sur une plage plus large.

Les faisceaux de la couche K sont nettement moins intenses que les faisceaux de la couche L, largement prédominants. Les faisceaux de la couche M, qui proviennent de configurations déjà relativement excitées, ont une intensité intermédiaire. Deux tendances expliquent de telles différences : les intégrales dipolaires électriques, faibles pour les faisceaux de la couche K, d'importance équivalente pour les faisceaux des couches L et M, et l'abondance des configurations, sachant que la couche M de l'aluminium à 40 eV ne contient que des électrons excités. Les faisceaux des couches K et L sont plutôt platykurtiques et fortement asymétriques.

Néanmoins, très peu de faisceaux ont un kurtosis inférieur à 1,8 (fonction créneau) et un calcul Cowan sur Al VI $2s^2 2p^4$ nous donne $F^2(2p, 2p) = 19{,}2$ eV tandis que $\zeta_{2p} = 0{,}312$ eV. Cette platykurtie s'explique par le fait que certains faisceaux, en particulier ceux qui ont peu de raies, ont tendance a être platykurtiques, indépendamment de l'intégrale de spin-orbite. Les faisceaux de la couche M sont, au contraire, plutôt leptokurtiques. Étant donné que, dans les configurations initiales, la plupart des électrons de la couche M sont seuls sur leur orbitale, les faisceaux correspondant à leur excitation sont des faisceaux optiques avec une ou plusieurs sous-couches ouvertes spectatrices. Il se trouve que ce type de faisceaux est très leptokurtique, et ce caractère propre aux faisceaux optiques à spectateur est dû à la structure des configurations de départ et d'arrivée. Chaque configuration est relativement étendue et tend à avoir des faisceaux qui se répartissent assez également dans l'intervalle spectral où le faisceau a l'ensemble

de ses raies. De plus, les transitions vers des niveaux similaires sont les plus intenses, et ces niveaux similaires sont rangés de la même façon dans les deux configurations.

Une dispersion égale à celle observée sur les faisceaux de l'aluminium dans le calcul d'opacité du cuivre apparaît sur les cartes de Fig. 8.4. De manière similaire à l'aluminium, on remarque que les faisceaux de la couche M, de valence ou complexes, ont tendance à être fortement asymétriques, et souvent trop pour que la NIG les modélise correctement. Mais, dans l'ensemble, les faisceaux sont moins platykurtiques que ceux de l'aluminium. Sur les couches M et N, le spin-orbite est bien plus faible que les intégrales coulombiennes, de l'ordre de 1 eV pour l'orbitale $3p$, 0, 1 eV pour les autres, soit au moins un ordre de grandeur en-dessous des intégrales F^2 et G^1 impliquées dans la structure des configurations. On remarque cependant une branche de faisceaux à haut kurtosis, tous d'asymétrie faiblement négative comme dans le calcul sur l'aluminium. Ces faisceaux correspondent à des transitions optiques à spectateur, au départ de la couche N.

La relation entre le nombre de raies et les moments d'ordre 3 et 4 peut être étudiée à l'aide de Fig. 8.5. On peut voir que de nombreux faisceaux à grand nombre de raies sont hors du domaine de validité de la NIG dans les faisceaux de transition le la couche M du cobalt. Beaucoup de faisceaux ont un kurtosis légèrement inférieur à 3, et beaucoup

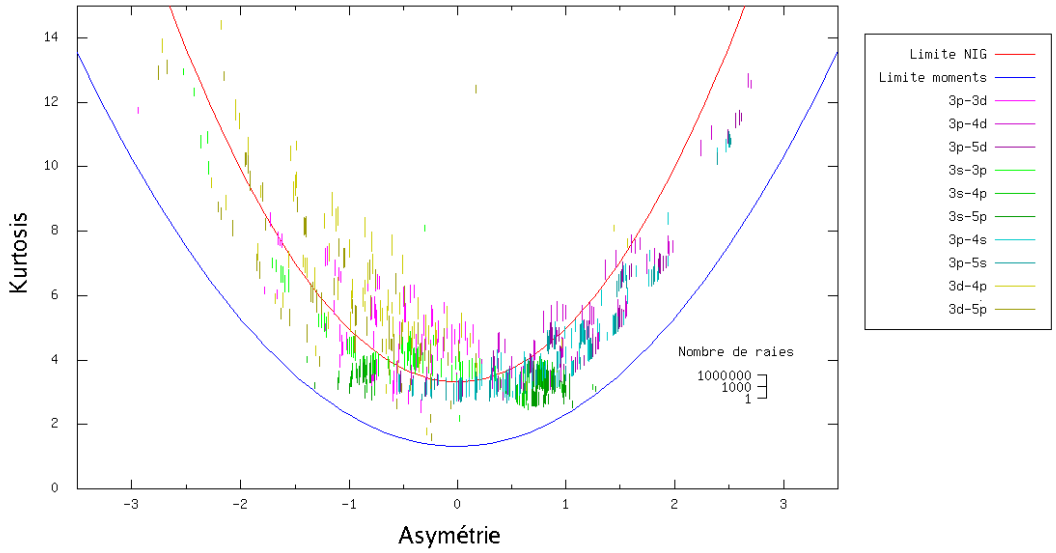


FIGURE 8.5 – Cartographie du nombre de raies des faisceaux du cobalt en fonction de l'asymétrie et du kurtosis des faisceaux.

d'autres ont un kurtosis bien plus élevé mais sont trop asymétriques pour être modélisables par une NIG, dont le domaine de validité est délimité par la parabole rouge. De nombreux autres peuvent aussi être pris en compte par la NIG. De plus, la plupart des faisceaux à grand nombre de raies ont un kurtosis proche de 3 ou une asymétrie élevée.

En cartographiant les faisceaux de transition par famille $n\ell - n'\ell'$ avec seul n' variable et tous les autres nombres fixés, l'asymétrie change de signe entre les faisceaux $\Delta n = 0$ et $\Delta n \geq 1$. Ce fait est presque général aux cas que nous avons observé, et s'observe quel que soit n, ℓ et $\ell' > \ell$. Seules les transitions $2s - np$ ne présentent pas ce comportement. La cartographie Fig. 8.6 met en évidence ce phénomène sur les transi-

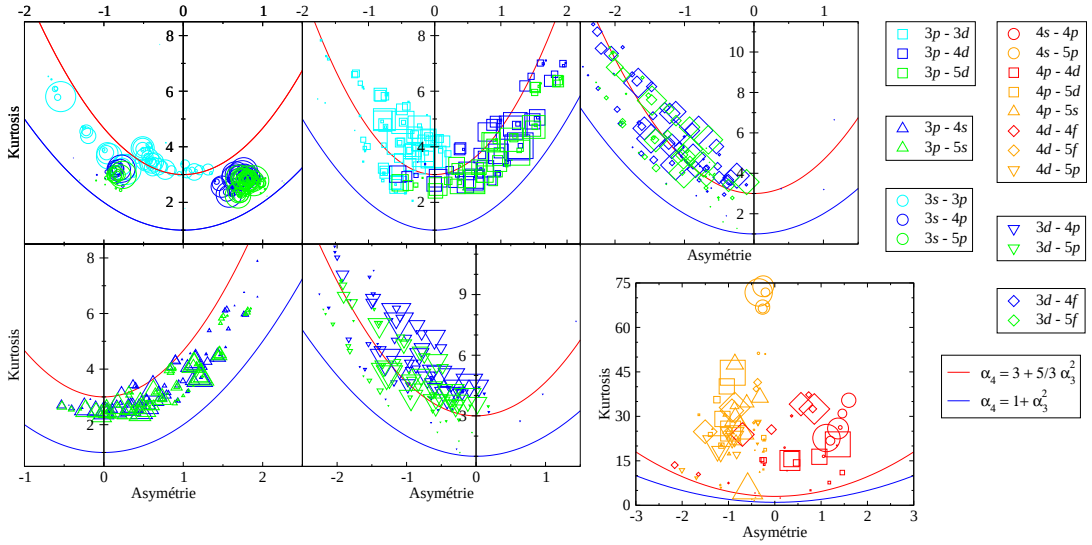


FIGURE 8.6 – Cartographie du nombre de raies (proportionnel à l'aire) des faisceaux du cobalt en fonction de l'asymétrie et du kurtosis des faisceaux.

tions $3-3$ et $4-4$. Cependant, ces faisceaux $\Delta n = 0$ sont sujets à une forte interaction de configurations [8] qui peut remettre en cause ces résultats.

La cartographie des nombres de raies des faisceaux du cobalt Fig. 8.5 met en évidence le fait que les faisceaux avec un nombre de raies important se trouvent loin de la parabole limite $\alpha_4 = 1 + \alpha_3^2$ qui correspond aux valeurs possibles pour des distributions consistant en deux points.

8.1.3 Coalescence à l'ordre 4

Lorsqu'un faisceau détaillé est comparé à un faisceau statistique prenant en compte l'ordre 4 de la distribution des raies, l'indicateur de forme χ que nous avons défini équation (7.38) p. 144 est toujours aussi pertinent pour quantifier la coalescence d'un faisceau.

Nous reprenons les exemples de Sec. 8.1.1 en comparant DTA, UTA traditionnel et modélisation de la distribution des faisceaux par une NIG qui prend en compte les moments d'ordre 3 et 4 Tab. 8.1.

	Faisceau	Nb. raies	Kurtosis	Asymétrie	Asym. visuelle
Ge	$3d^4 4p$ - $3d^3 4p\,4f$	88 492	4,18	0,63	0,123
Gd	$4f^5 5d$ - $4f^5 6p$	687 330	17,1	0,59	0,022

TABLE 8.1 – Moments d'ordre 3 et 4 des deux faisceaux de transition.

Fig. 8.7, la NIG améliore légèrement la modélisation du faisceau au voisinage de la moyenne (intensité maximale). Quant aux ailes bien mises en évidence sur le graphe semi-logarithmique, elles sont bien mieux restituées par la NIG que par la gaussienne. Pour une HWHM d'élargissements physiques à peine supérieure à 0,2 eV, c.-à-d. 20 fois inférieure à l'élargissement statistique du faisceau, l'ordre coalesce moyennement, mais la coalescence est très avancée à l'ordre 4.

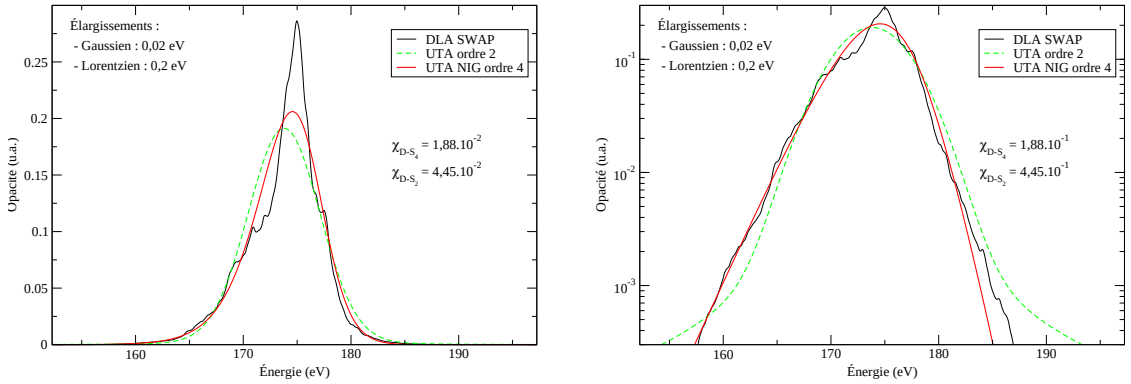


FIGURE 8.7 – Faisceau de Germanium X $3d^4 4p - 3d^3 4p 4f$, tracé sur un graphe linéaire (gauche) et semi-logarithmique (droite).

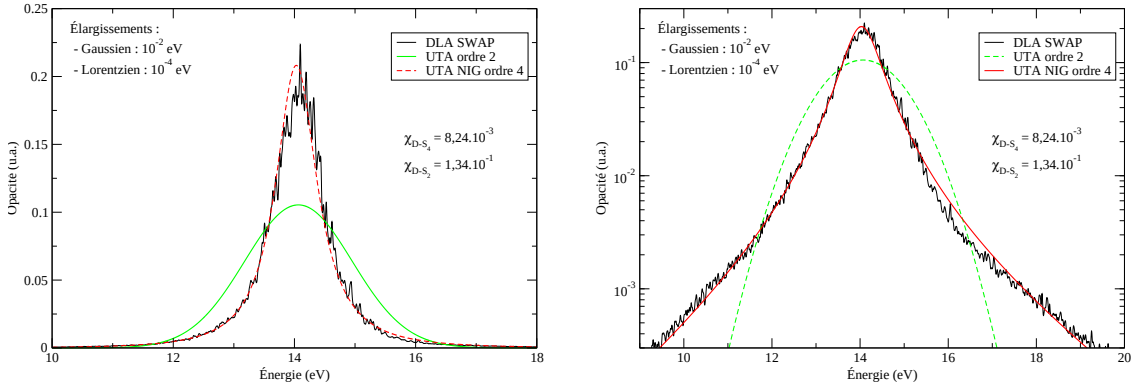


FIGURE 8.8 – Faisceau de Gadolinium V $4f^5 5d - 4f^5 6p$, graphes comme Fig. 8.7.

L'effet de la prise en compte de l'ordre 4 pour des faisceaux complexes fortement leptokurtiques est très apparent sur le faisceau de gadolinium Fig. 8.8. À élargissement faible, le faisceau présente une distribution des raies relativement régulière, et la NIG modélise suffisamment bien cette distribution pour qu'une coalescence complète à l'ordre 4 soit observée avec une HWHM de l'ordre de 10^{-2} eV. En revanche, la coalescence à l'ordre 2 est très insuffisante, et ne devient complète que pour des HWHM de l'ordre de 1 eV. En reprenant la liste de Tab. 7.6 p. 146 avec la coalescence à l'ordre 4 pour les faisceaux qui peuvent être modélisés par une NIG, c.-à-d. des faisceaux dont l'asymétrie et le kurtosis satisfont (C.29), nous avons une idée de l'effet des moments d'ordre 3 et 4 sur la coalescence.

À la lecture de Tab. 8.2 et de Fig. 8.9, la coalescence à l'ordre 4 est généralement plus rapide qu'à l'ordre 2, mais l'effet est très variable d'un faisceau à l'autre. Les tendances que nous avons observées Sec. 8.1.2 se retrouvent dans le tableau. On note en particulier que :

1. Les faisceaux optiques à spectateur (type O) présentent des kurtosis élevés et sont faiblement asymétriques. La plupart des distributions que nous avons évoquées sont donc utilisables, à l'exception de Gram-Charlier.

2. Les faisceaux de valence (type V) sont franchement asymétriques. Bien que très souvent proches de la frontière des domaines en (α_3, α_4), ils restent en général accessibles aux distributions telles la NIG.

Z	Transition	Type	$\mathcal{N}$	α_3	α_4	w_s	$\frac{w_g}{w_s}$	$\frac{w_l}{w_s}$
13	$2p^3 3p$ - $2p^3 3d$	O	630	0,63	13,72	1,28 eV	0,469	0,328
29	$3d^2$ - $3d\,4f$	V	81	-1,48	7,07	1,82 eV	0,641	0,516
	$3d^3 4p$ - $3d^2 4p^2$	M	5920	-0,52	4,63	2,60 eV	0,219	0,123
	$3d^3 4s 4p$ - $3d^2 4s 4p^2$	C	22481	0,05	3,47	3,38 eV	0,169	0,092
	$3d^4$ - $3d^3 4f$	V	2825	-0,55	3,88	2,70 eV	0,319	0,211
	$3d^5 4p$ - $3d^5 5d$	O	30969	0,70	21,77	0,883 eV	0,063	0,028
	$3d^5 4p$ - $3d^4 4p^2$	M	42579	$< 10^{-2}$	3,88	2,46 eV	0,024	0,012
	$3d^6$ - $3d^5 4p$	V	3245	0,20	3,96	2,46 eV	0,341	0,207
	$3p^5 3d^2 4f$ - $3p^4 3d^3 4f$	C	536978	-0,66	5,06	6,74 eV	0,112	0,046
	$3d^3 4d$ - $3d^3 5f$	O	14355	-1,39	8,67	1,65 eV	0,473	0,285
	$3d^7 4d$ - $3d^6 4d\,5f$	S	202749	0,34	3,46	2,81 eV	0,039	0,015
35	$3d^7 4s$ - $3d^7 5p$	O	2082	0,11	37,36	0,601 eV	0,715	0,482
	$3d^9$ - $3d^8\,4f$	V	81	0,54	5,57	2,47 eV	0,777	0,631
	$3d^7\,4s\,4p$ - $3d^6\,4s\,4p^2$	C	85357	0,30	3,46	4,66 eV	$< 10^{-2}$	$< 10^{-2}$
64	$4f^3 5d 6s$ - $4f^2 5d^2 6s$	C	241533	-0,60	4,98	1,99 eV	$< 10^{-2}$	$< 10^{-2}$
	$4f^4$ - $4f^3 6d$	V	14087	-0,48	3,72	2,70 eV	0,042	0,021
	$4f^4 5d$ - $4f^3 5d^2$	M	524362	-0,40	4,56	2,20 eV	$< 10^{-2}$	$< 10^{-2}$
	$4f^3 5d$ - $4f^2 5d 6d$	S	134127	-0,62	5,08	2,46 eV	$< 10^{-2}$	$< 10^{-2}$
	$4f^5 5d$ - $4f^5 6p$	O	687330	0,59	17,07	0,903 eV	$< 10^{-2}$	$< 10^{-2}$

TABLE 8.2 – Élargissements relatifs $\frac{w_g}{w_s}$ et $\frac{w_l}{w_s}$ pour lesquels on a $\chi = 0,02$ entre le DTA et l'UTA NIG d'ordre 4, sur des faisceaux de transition dont les moments réduits α_3 et α_4 sont dans le domaine accessible à la NIG.

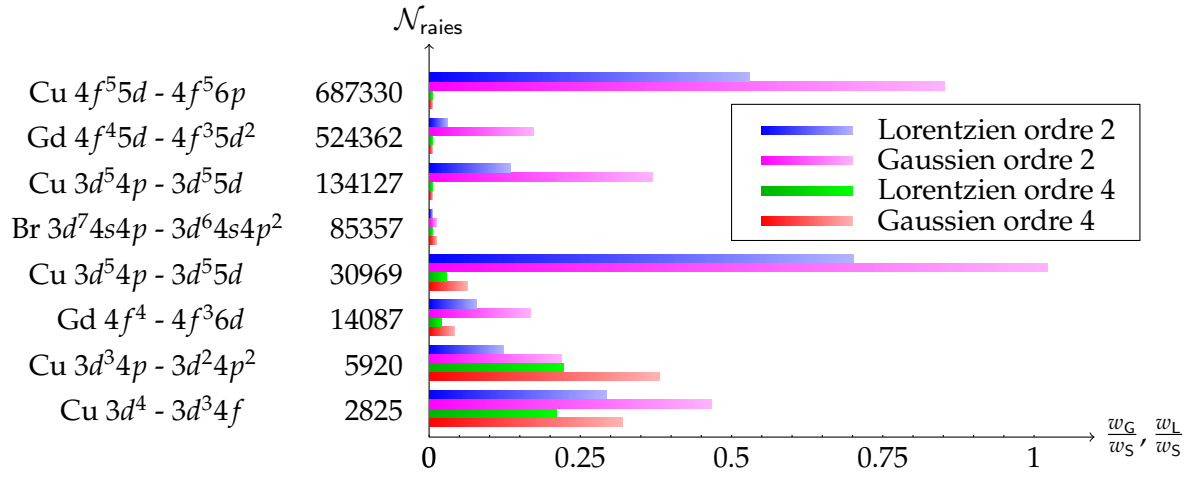


FIGURE 8.9 – Histogramme comparant les élargissements à la limite de la coalescence $\chi = 0,02$.

3. Les autres faisceaux, qu'ils soient de Moszkowski ou à spectateur, ou même complexes, ne permettent pas de conclusion quant à leur accessibilité avec des distributions comme la NIG. On peut cependant noter qu'en couplage *LS* presque pur, comme c'est le cas de l'aluminium, de nombreux faisceaux, y compris de valence, sont platykurtiques. Les faisceaux complexes (type *C*) sont en général faiblement leptokurtiques et fortement asymétriques, parfois trop pour être correctement modélisés par une NIG.

En revanche, la prise en compte de l'ordre 3 et 4 par l'utilisation d'une NIG permet d'approcher les DTA avec des élargissements physiques bien moindres que l'UTA gaussien. L'effet le plus flagrant concerne les faisceaux optiques, dont la coalescence faible à l'ordre 2 pose problème. Il y a d'autres faisceaux pour lesquels la coalescence complète est peu modifiée par la modélisation NIG. En général, ces faisceaux présentent une bonne coalescence à l'ordre 2. Cependant, deux faisceaux de Tab. 8.2 présentent une coalescence meilleure à l'ordre 2 qu'à l'ordre 4.

Mais l'effet le plus spectaculaire de la modélisation à l'ordre 4 est que les rapports $\frac{w_g}{w_s}$ et $\frac{w_l}{w_s}$ semblent être inversement proportionnels à une puissance du nombre de raies, cette puissance étant très probablement proche de $1/3$, avec cependant une forte dispersion. Cette loi de puissance est beaucoup plus faible si on tente de la déterminer sur les largeurs de coalescence complète à l'ordre 2, et avec une dispersion encore plus importante, notamment du fait des faisceaux optiques.

Si l'on compare les indicateurs de forme aux ordres 2 et 4, l'ordre 4 est toujours au-dessous de l'ordre 2, et ceux quels que soient les élargissements, comme on peut voir sur les graphes de surface Fig. 8.10. Il existe cependant quelques exceptions, par exemple le faisceau $Br^{9+}3d^7 4s 3d^7 5p$, qui présente un kurtosis énorme mais semble mieux modélisé par une gaussienne que par une NIG.

Cette étude a permis de discuter l'intérêt d'une modélisation statistique à l'ordre 4 des faisceaux de transition, en particulier pour les faisceaux optiques à spectateur, au kurtosis très élevé. Modéliser à l'ordre 4 un faisceau de transition requiert que l'on soit en couplage *LS* fort, et est donc réservé aux éléments légers ou aux couches extérieures. La modélisation à l'ordre 4 des faisceaux de transition peut être particulièrement utile pour traiter des plasmas d'éléments de Z intermédiaire voire elevé à des températures de quelques dizaines d'eV où la couche de valence est remplie au moins partiellement d'électrons. Dans l'état actuel de la théorie statistique – et qui explique pourquoi le calcul statistique à l'ordre 4 n'a pas été mis en place dans SCORCG –, les moments d'ordre 3 et 4 ne sont accessibles dans le cas général qu'après calcul du DTA. Cependant, il existe des formules permettant d'accéder aux moments d'ordre 3 et 4 par des considérations statistiques [64, 65], mais, dans le cas genéral, l'algorithme, complexe, ne fait gagner du temps que si le faisceau a un très grand nombre de raies. Nous avons vu que les faisceaux optiques, qui restent relativement simples, sont bien plus précisément modélisés par des distributions à l'ordre 4 prenant en compte le kurtosis, tandis que les faisceaux complexes ne sont pas toujours accessibles aux distributions proposées.

Pour s'affranchir de la séparation spin-orbite, des moments d'ordre 3 et 4 pour les SOSA sont aussi envisageables, mais là une autre difficulté survient : l'interaction de sous-configuration relativiste, très présente pour les transitions $\Delta n \leq 1$ [98] modifie la position et l'intensité des composantes du SOSA. Une autre solution, s'il est possible de calculer des moments d'ordre 3 et 4 en dépit d'un fort spin-orbite, est d'utiliser la distribution de Pearson I, dont le comportement près de la limite $\alpha_4 = \alpha_3^2 + 1$ est celui d'une fonction concave dont les bornes font offices d'asymptotes ($-1 < m_1, m_2 < 0$ avec les notations de Sec. C.3).

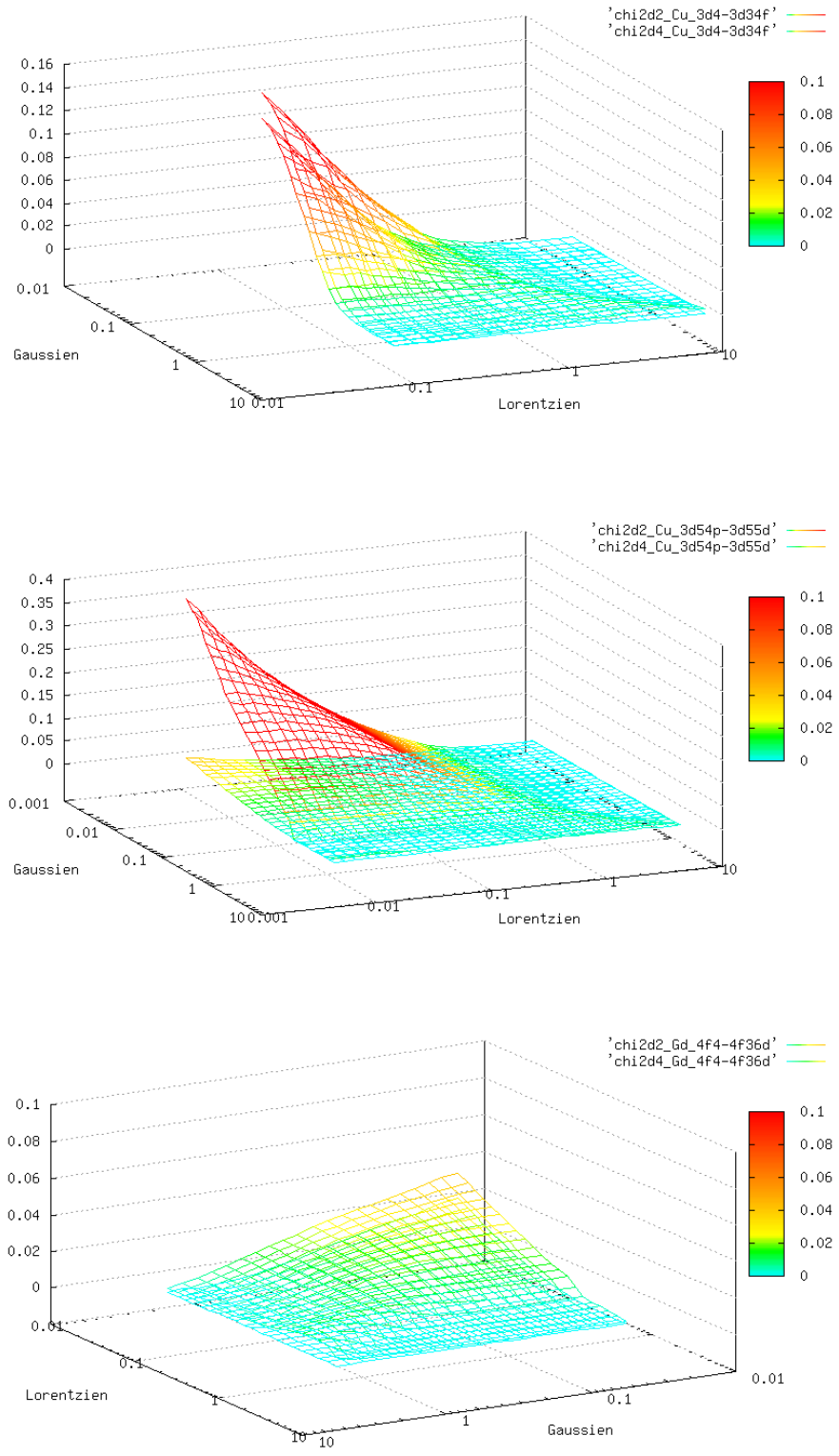


FIGURE 8.10 – Graphes de surface des indicateurs de forme à l'ordre 2 (légende `chi2d2`) et à l'ordre 4 (légende `chi2d4`), pour les faisceaux $Cu^{7+}3d^4 - 3d^3 4f$ (en haut), $Cu^{7+}3d^5 4p - 3d^5 5d$ (au milieu) et $Gd^{6+}4f^4 4f^3 6d$ (en bas).

8.2 Effet de la température sur les moments d'ordre 0 à 2

En introduisant le facteur de Boltzmann dans la probabilité des niveaux dans une configuration, la température modifie la forme des faisceaux de transition et les trois premiers moments statistiques.

8.2.1 Exemples de faisceaux modifiés par la température

Comme nous l'avons vu Chap. 3 et 6, la température finie altère la forme d'un faisceau de transition détaillé. Le faisceau de transition du chrome II $3d^4 4s - 3d^3 4s4f$, composé de 10870 raies, est représenté Fig. 8.11 à différentes températures : 10 eV, 5 eV, 2 eV, et 1 eV, et est comparé au faisceau SWAP, qui correspond à une température infinie. L'effet de la température sur la forme du faisceau de transition est sensible lorsque la température est de l'ordre de quelques électron-volts, c. à d. de l'ordre de $\sigma_C = 2,341$ eV.

Lorsque la température diminue, on constate trois effets :

- l'aile rouge (basse énergie) du faisceau de transition s'efface lorsque la température diminue : les raies rouges partent des niveaux d'énergies les plus élevées, vides à basse température ;
- la quasi-totalité du faisceau de transition tend à se concentrer du côté bleu (haute énergie) du faisceau ;
- l'aile bleue se renforce très inégalement : des structures présentes - qui correspondent aux zones d'excitation des niveaux les plus bas, mais peu significatives dans le faisceau SWAP se renforcent et restent les seules présentes à très basse température.

La deuxième remarque est la seule qui ne soit pas vraie pour tous les faisceaux de transition. Le décalage vers le bleu avec la baisse de la température est dû au fait que la partie rouge du faisceau de transition regroupe principalement des raies partant des niveaux d'énergie élevée dans la configuration de départ, et arrivant sur des niveaux d'énergie basse ou moyenne dans la configuration d'arrivée. De même, les niveaux de basse énergie d'où partent la plupart des raies ont une probabilité qui augmente avec la baisse de la température.

Lorsque les configurations sont plus simples, le faisceau de transition tend vers une structure beaucoup plus piquée que le faisceau initial, avec plusieurs pics en opacité qui correspondent à des raies partant du niveau fondamental. Plus la configuration est simple, plus se retrouve cette tendance à former des pics, comme on peut le voir sur les deux exemples Fig. 8.12.

À basse température, les trois premiers moments des faisceaux de transition varient différemment. En général, l'intensité totale d'un faisceau de transition diminue avec la température vers la limite en 0 qui dépend de l'intensité des raies partant du niveau dont l'énergie est la plus basse. L'énergie moyenne de la configuration de départ diminuant, l'énergie moyenne du faisceau de transition ne peut qu'augmenter. Bien qu'elle diminue lorsque la température tend vers 0, la variance en énergie du faisceau tend vers une valeur positive ou nulle. L'exemple du fer XIII $(3p3d)^4$ Fig. 8.13 nous montre des tendances dont certaines peuvent être vérifiées par calcul.

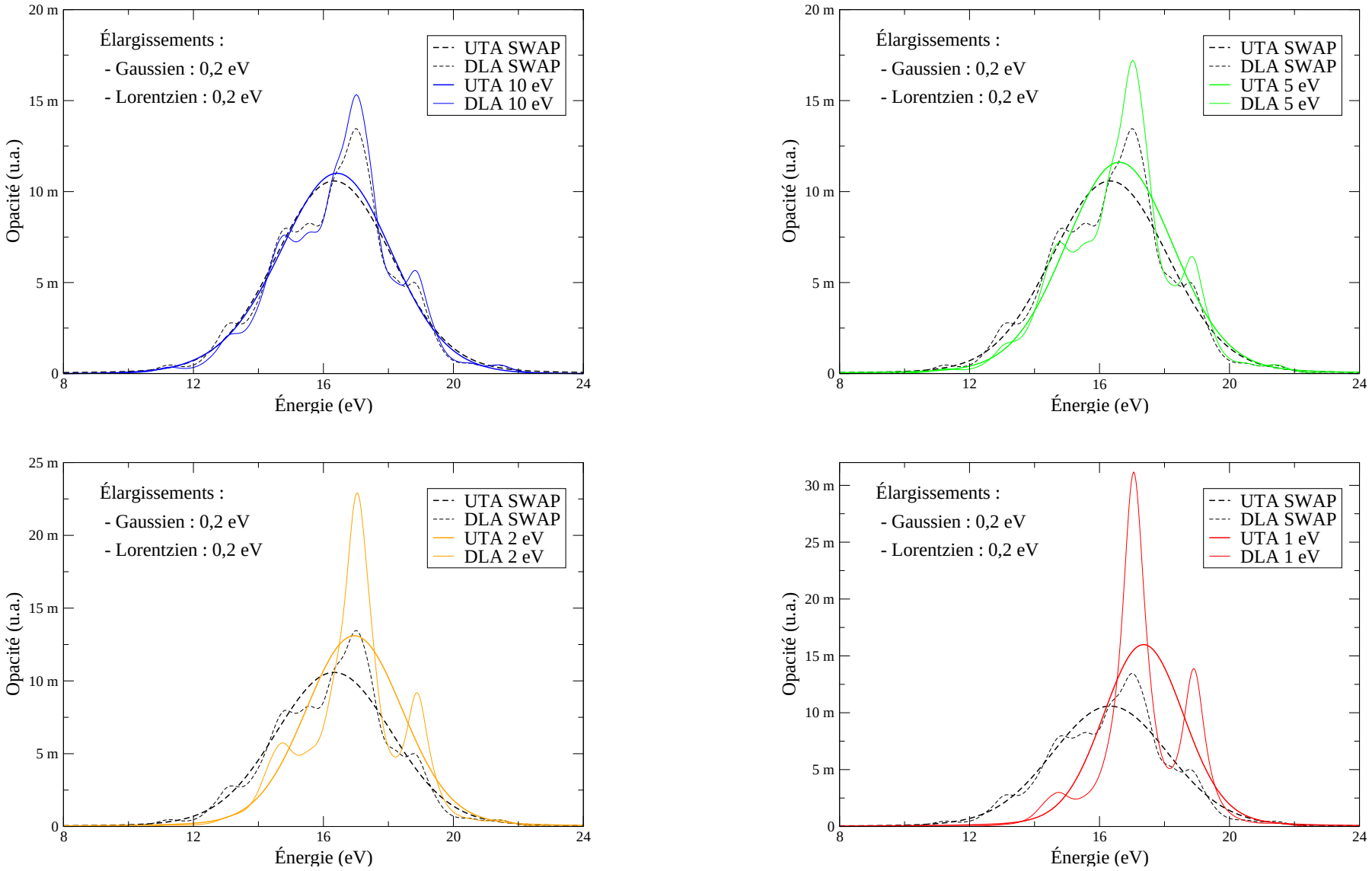


FIGURE 8.11 – Faisceaux de transition du chrome II $3d^4 4s - 3d^3 4s 4f$: comparaison des formes SWAP et à 4 températures différentes.

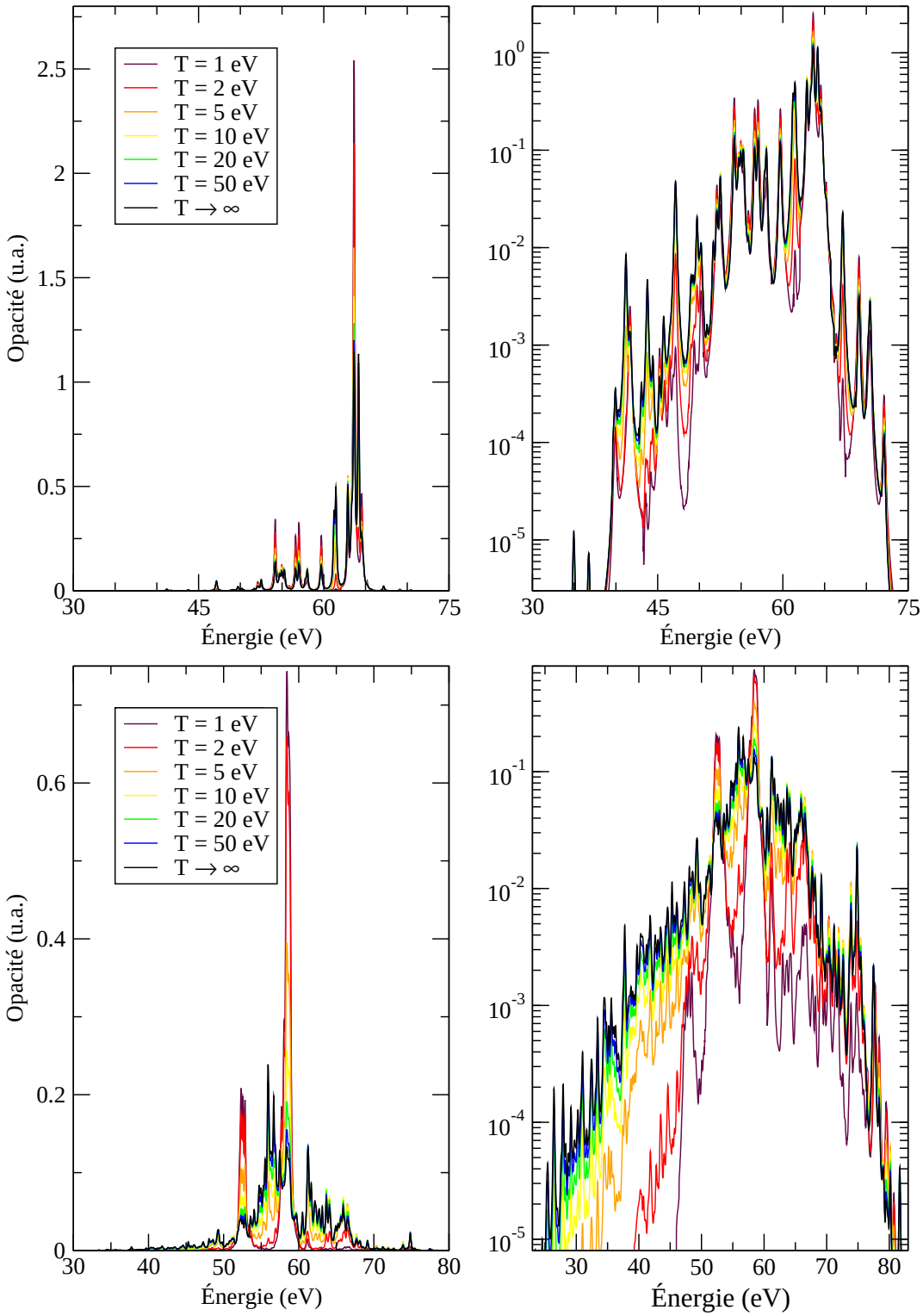


FIGURE 8.12 – Faisceaux de transition du fer XIII, $3p^4 - 3p^3 3d$ en haut, $3p^3 3d - 3p^2 3d^2$ en bas. Graphes linéaires à gauche, semi-logarithmiques à droite.

8.2.2 Effet de la température sur les probabilités des niveaux

La probabilité d'un niveau dans sa configuration s'écrit :

$$\mathcal{P}_C^{(\mathrm{D})}(\gamma J) = \frac{\mathcal{U}_{\gamma J}}{\mathcal{U}_C^{(\mathrm{D})}} = \frac{(2J+1)\, e^{-\beta\left(E_{\gamma J}-E_C\right)}}{\sum\limits_{\gamma' J' \in C} (2J'+1)\, e^{-\beta\left(E_{\gamma' J'}-E_C\right)}}. \tag{8.6}$$

Les exponentielles sont les facteurs de Boltzmann, et sont les seuls facteurs à dépendre de la température $k_{\mathrm{B}}T = 1/\beta$. La température est ici comparée à l'extension en énergie des niveaux de la configuration, caractérisée par $\sigma_C = \sqrt{v_C}$, où v_C est la variance de C telle que définie à l'équation (8.12).

À haute température, ou $k_{\mathrm{B}}T \gg v_C$, $\beta \to 0$ et les probabilités des différents niveaux tendent vers leurs valeurs SWAP :

$$\lim_{k_{\mathrm{B}}T\to\infty} \mathcal{P}_C^{(\mathrm{D})}(\gamma J) = \lim_{\beta\to 0} \mathcal{P}_C^{(\mathrm{D})}(\gamma J) = \frac{2J+1}{\sum\limits_{\gamma J \in C} 2J+1} = \frac{2J+1}{g_C}. \tag{8.7}$$

À très basse température, ou $k_{\mathrm{B}}T \ll v_C$, $\mathcal{U}_{\gamma J} \sim (2J+1)\, e^{-\beta\left(E_{\gamma J}-E_C\right)}$ alors que $\mathcal{U}_C^{(\mathrm{D})} \sim (2J_0+1)\, e^{-\beta\left(E_{\gamma J_0}-E_C\right)}$, où γJ_0 est le niveau de plus basse énergie dans C. Alors la probabilité de niveau γJ dans la configuration C suit un comportement asymptotique quand $k_{\mathrm{B}}T \to 0 \Longleftrightarrow \beta \to \infty$:

$$\mathcal{P}_C^{(\mathrm{D})}(\gamma J) \sim \begin{cases} 1 & \text{si } \gamma J = \gamma J_0 \\ e^{-\beta\left(E_{\gamma J}-E_{\gamma J_0}\right)} & \text{si } \gamma J \neq \gamma J_0 \end{cases}. \tag{8.8}$$

Si les limites sont bien établies, l'évolution des probabilités des niveaux en fonction de la température, en-dehors de celui de plus basse énergie et de celui de plus haute énergie, est complexe et pas toujours monotone. Ce phénomène, peut se voir sur des cas assez simples, comme celui du phosphore II, dont la configuration fondamentale est $[\mathrm{Ar}]\, 3s^2 3p^2$ ($\sigma_C = 0,884$ eV) et une configuration excitée $3s^2 3p 3d$ ($\sigma_C = 0,615$ eV).

La diagonalisation du Hamiltonien faite par RCG nous donne la liste des niveaux pour ces deux configurations. Dans chacun des graphes de Fig. 8.14, 3 régimes apparaissent clairement.

1. À haute température ($\beta \to 0$), la probabilité de chaque niveau tend vers sa valeur SWAP et en reste très proche. On parle de régime SWAP. Un tel régime se caractérise par
$$\beta\sigma_C = \frac{\sigma_C}{k_{\mathrm{B}}T} \ll 1.$$
La probabilité des niveaux dans la configuration est proportionnelle à $2J+1$.

2. À température modérée, avec $k_{\mathrm{B}}T$ plus grand de moins d'un ordre de grandeur que σ_C, les niveaux de J égal se séparent, en proportion de la valeur de leur énergie. C'est une forme de régime qu'on peut qualifier de *linéaire*.

3. Lorsque $\beta\sigma_C \geq 1$ de moins d'un ordre de grandeur (basse température $k_{\mathrm{B}}T \leq \sigma_C$), seuls les niveaux d'énergies les plus basses conservent une probabilité importante, les niveaux d'énergie élevée ayant disparu.

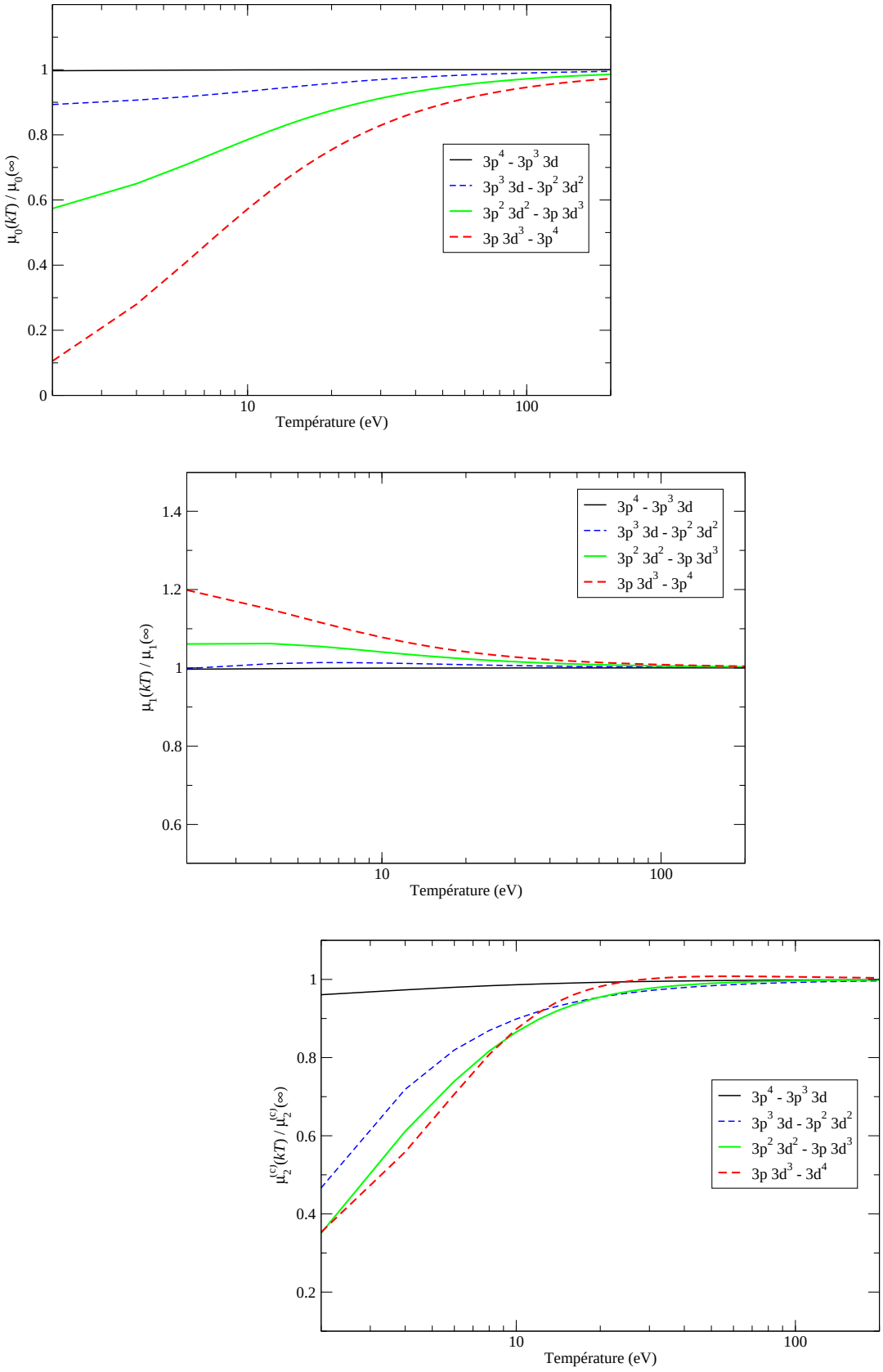


FIGURE 8.13 – Intensité totale, moyenne et variance des faisceaux du fer XIII exprimés en fonction de la température par rapport aux moments SWAP.

4. Un dernier régime, correspondant à des températures trop faibles pour être pertinentes dans des plasmas chauds, est celui dans lequel seul le niveau le plus bas reste probable, la probabilité des autres niveaux devenant négligeable.

On retrouve la compétition entre dégénérescence et exponentielle telle qu'évoquée Sec. 7.1.3. Notons cependant qu'en physique des plasmas chauds, on est très souvent dans les deux premiers régimes, rarement dans le troisième et jamais dans le dernier. De plus, seules des espèces au plus une ou deux fois ionisées sont présentes dans des plasmas de basse température (quelques eV), leur couplage *LS* sur les configurations initiales est assez fort et les différents niveaux J d'un même terme ${}^{L}2S+1$ ont des énergies si proches qu'il est de fait impossible de les distinguer. Nous allons proposer une correction à l'ordre 2 des fonctions de partition statistiques en utilisant les moments UTA d'ordre 0 à 2.

8.3 Traitement à l'ordre 2 des effets de la température

Nous avons montré Sec. 6.1 qu'il y avait une incohérence dans le calcul des fonctions de partition des configurations intiales de faiseaux détaillés, et nous avons détaillé les conséquences des différents arbitrages envisageables. Nous allons étudier, à l'ordre 2, l'effet de la température sur les fonctions de partition et les probabilités des configurations ainsi que les moments des faisceaux de transition.

8.3.1 Correction à l'ordre 2 des fonctions de partition et des probabilités

La fonction de partition d'un niveau d'énergie dans une configuration C s'écrit :

$$\mathcal{U}_{\gamma J}^{(\mathrm{D})} = (2J+1)\, e^{-\beta E_{\gamma J}}. \tag{8.9}$$

Dans l'hypothèse où l'extension σ_C des niveaux de la configuration C est petite par rapport à l'énergie moyenne du faisceau de transition $h\nu_{C\to C'}$, le facteur de Boltzmann du niveau γJ peut être approché par développement de Taylor à l'ordre n de l'exponentielle autour de E_C :

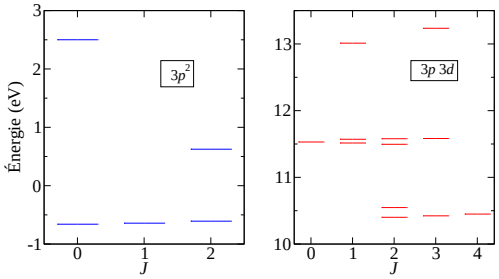
$$e^{-\beta E_{\gamma J}} \simeq e^{-\beta E_C}\left[1-\beta\left(E_{\gamma J}-E_C\right)+\sum_{p=2}^{n}\frac{(-\beta)^p}{p!}\left(E_{\gamma J}-E_C\right)^p\right]. \tag{8.10}$$

À l'ordre 2, il reste

$$e^{-\beta E_{\gamma J}} \simeq e^{-\beta E_C}\left[1-\beta\left(E_{\gamma J}-E_C\right)+\frac{\beta^2}{2}\left(E_{\gamma J}-E_C\right)^2\right]. \tag{8.11}$$

P : [Ne] $3s^2 3p^2$

Niveau	$2J+1$	Énergie (eV)
$^1S_0$	1	2,50041
$^3P_0$	1	-0,660221
$^3P_1$	3	-0,642119
$^3P_2$	5	-0,608147
$^1D_2$	5	0,625381



P : [Ne] $3s^2 3p3d$

Niveau	$2J+1$	Énergie (eV)
$^3P_0$	1	0,185606
$^3P_1$	3	0,170232
$^3D_1$	3	0,226397
$^1P_1$	3	1,66772
$^3F_2$	5	-0,943279
$^1D_2$	5	-0,797225
$^3P_2$	5	0,15089
$^3D_2$	5	0,234456
$^3F_3$	7	-0,921458
$^3D_3$	7	0,237928
$^1F_3$	7	1,89065
$^3F_4$	9	-0,894801

TABLE 8.3 – Niveaux des configurations $3s^2 3p^2$ (gauche) et $3s^2 3p3d$ (droite) du phosphore ionisé une fois. Le classement est fait par J puis énergie croissants.

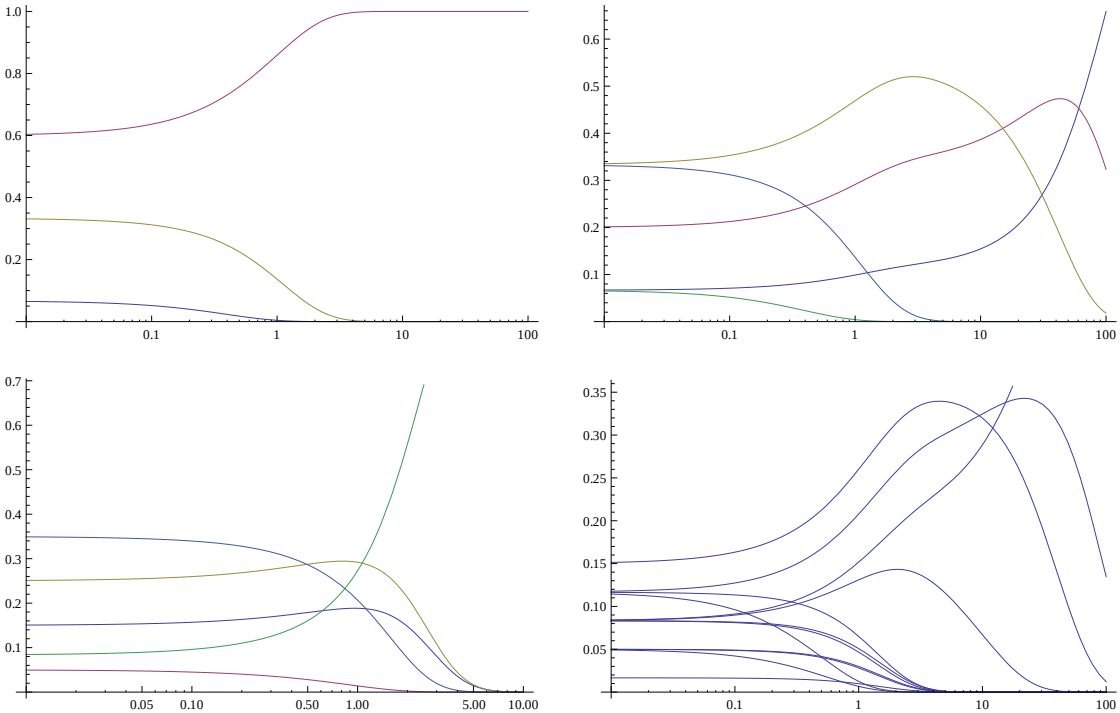


FIGURE 8.14 – Probabilités des termes spectroscopiques (gauche) et des niveaux (droite) en fonction de l'inverse de la température β pour la configuration P II $3s^2 3p^2$ (haut) et $3s^2 3p3d$ (bas).

En faisant la somme sur tous les niveaux de C, le terme d'ordre 1 s'annule par définition de E_C et

$$\begin{aligned}\mathcal{U}_C^{(\mathrm{D})} &= \mathcal{U}_C^{(\mathrm{S})} \left(\sum_{\gamma J \in C} \frac{2J+1}{g_C} e^{-\beta(E_{\gamma J}-E_C)} \right) \\ &\simeq \mathcal{U}_C^{(\mathrm{S})} \left[1 + \beta^2 \sum_{\gamma J \in C} \frac{2J+1}{g_C} \frac{(E_{\gamma J}-E_C)^2}{2} \right] \\ &\simeq \mathcal{U}_C^{(\mathrm{S})} \left[1 + \frac{\beta^2 v_C}{2} \right] = \mathcal{U}_C^{(\mathrm{S})} \left[1 + \frac{(\beta \sigma_C)^2}{2} \right], \end{aligned} \tag{8.12}$$

où $\mathcal{U}_C^{(\mathrm{S})} = g_C e^{-\beta E_C}$ est la fonction de partition statistique définie Tab. 6.1 p. 106. La *fonction de partition corrigée* $\mathcal{U}_C^{(\mathrm{K})}$ est le développement de Taylor à l'ordre 2 de l'équation (8.12) :

$$\mathcal{U}_C^{(\mathrm{K})} = \mathcal{U}_C^{(\mathrm{S})} \left[1 + \frac{(\beta \sigma_C)^2}{2} \right] = g_C e^{-\beta E_C} \left[1 + \frac{\beta^2 v_C}{2} \right]. \tag{8.13}$$

La fonction de partition de l'espèce ionique s'écrit alors :

$$\mathcal{U}_Q^{(\mathrm{K})} = \sum_{\Xi} \mathcal{U}_\Xi + \sum_C \mathcal{U}_C^{(\mathrm{K})} \tag{8.14a}$$

$$= \sum_{\Xi} \mathcal{U}_\Xi + \sum_C \mathcal{U}_C^{(\mathrm{S})} \left[1 + \frac{(\beta \sigma_C)^2}{2} \right]. \tag{8.14b}$$

Les probabilités statistiques corrigées à l'ordre 2 $\mathcal{P}_Q^{(\mathrm{K})}(C)$ peuvent alors être exprimées en fonction des variances des configurations :

$$\mathcal{P}_Q^{(\mathrm{K})}(C) = \frac{\mathcal{U}_C^{(\mathrm{K})}}{\mathcal{U}_Q^{(\mathrm{K})}} = \mathcal{P}_Q^{(\mathrm{S})}(C) \frac{1 + \frac{\beta^2 v_C}{2}}{1 + V_Q}, \tag{8.15}$$

où V_Q est la variance moyenne des configurations dans l'ion Q :

$$V_Q = \sum_C \frac{\mathcal{U}_C v_C}{\mathcal{U}_Q^{(\mathrm{K})}} = \sum_C \mathcal{P}_Q^{(\mathrm{K})}(C) v_C. \tag{8.16}$$

Les fonctions de partition et les probabilités corrigées à l'ordre 2 permettent d'approcher la fonction de partition d'une configuration jamais détaillée en utilisant la variance v_C à laquelle le formalisme UTA [62] nous donne accès. L'incohérence de Sec. 6.1 n'est pas levée, mais fortement réduite par le calcul à l'ordre 2.

8.3.2 Réécriture de l'opacité corrigée

Nous venons d'examiner plus haut le calcul des fonctions de partition des configurations à l'ordre 2, et les conséquences sur les probabilités des configurations. Mais une autre composante de l'opacité est formée par les intensités de chaque raie. Mais celles-ci sont modifiées, par la température, et pas qu'au travers des probabilités. L'opacité d'un ion Q s'écrit à l'aide des coefficients d'Einstein de toutes les raies et configurations non

résolues la composant :

$$\begin{aligned}\kappa_Q\left(h\nu\right) =& \frac{\mathcal{N}_\mathrm{A}}{A} h\nu \left[\sum_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'} \left(\mathcal{P}_Q(\gamma J) B_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'} - \mathcal{P}_Q(\gamma' J') B_{\gamma' J' \rightarrow \gamma J} \right) h\Phi_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'}\left(h\nu\right) \right. \\ &+ \sum_{C \rightarrow C'} \left(\mathcal{P}_Q(C) B_{C \rightarrow C'} - \mathcal{P}_Q(C') B_{C' \rightarrow C} \right) h\Phi_{C \rightarrow C'}(h\nu) \\ &\left. + \sum_{\Xi,\, \alpha \rightarrow \beta} \left(\mathcal{P}_Q(C) B_{\Xi,\, \alpha \rightarrow \beta} - \mathcal{P}_Q(C') B_{\Xi,\, \beta \rightarrow \alpha} \right) h\Phi_{\Xi,\, \alpha \rightarrow \beta}(h\nu) \right]. \end{aligned} \tag{8.17a}$$

avec $B_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'}$, $B_{C \rightarrow C'}$ et $B_{\Xi,\, \alpha \rightarrow \beta}$ les coefficients d'Einstein d'absorption respectifs et $B_{\gamma' J' \rightarrow \gamma J}$ et $B_{C' \rightarrow C}$ les coefficients d'Einstein d'émission stimulée respectifs, d'une raie, un faisceau et un suprafaisceau. Nous nous limitons dans cette section à la comparaison entre le traitement DLA et le traitement UTA des configurations et leurs conséquences sur les coefficients d'Einstein.

Les quantités $B^{(\mathrm{D})}_{C \rightarrow C'}$ et $\Phi^{(\mathrm{D})}_{C \rightarrow C'}\left(h\nu\right)$ peuvent être définies à partir de l'égalité (8.18) :

$$\begin{aligned}&\sum_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'} (2J+1)\, e^{-\beta E_{\gamma J}} B_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'} \Phi_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'}\left(h\nu\right) \\ &= \left[\sum_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'} (2J+1)\, e^{-\beta E_{\gamma J}} \right] \left[\frac{\displaystyle\sum_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'} (2J+1)\, e^{-\beta E_{\gamma J}} B_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'}}{\displaystyle\sum_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'} (2J+1)\, e^{-\beta E_{\gamma J}}} \right] \\ &\left[\frac{\displaystyle\sum_{\gamma J} (2J+1)\, e^{-\beta E_{\gamma J}} B_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'} \Phi_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'}\left(h\nu\right)}{\displaystyle\sum_{\gamma J} (2J+1)\, e^{-\beta E_{\gamma J}} B_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'}} \right] \\ &= \mathcal{U}^{(\mathrm{D})}_C\left(k_\mathrm{B}T\right) \mathcal{B}^{(\mathrm{D})}_{C \rightarrow C'}\left(k_\mathrm{B}T\right) \Phi^{(\mathrm{D})}_{C \rightarrow C'}\left(k_\mathrm{B}T, h\nu\right), \end{aligned} \tag{8.18}$$

avec $\mathcal{U}^{(\mathrm{D})}_C$, $B^{(\mathrm{D})}_{C \rightarrow C'}$ et $\Phi^{(\mathrm{D})}_{C \rightarrow C'}\left(T, h\nu\right)$ identifiés équations (8.19) :

$$\mathcal{U}^{(\mathrm{D})}_C\left(k_\mathrm{B}T\right) = \sum_{\gamma J} (2J+1)\, e^{-\beta E_{\gamma J}} \tag{8.19a}$$

$$B^{(\mathrm{D})}_{C \rightarrow C'}\left(k_\mathrm{B}T\right) = \frac{\displaystyle\sum_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'} (2J+1)\, e^{-\beta E_{\gamma J}} B_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'}}{\mathcal{U}^{(\mathrm{D})}_C} \tag{8.19b}$$

$$\Phi^{(\mathrm{D})}_{C \rightarrow C'}\left(k_\mathrm{B}T\right) = \frac{\displaystyle\sum_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'} (2J+1)\, e^{-\beta E_{\gamma J}} B_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'} \Phi_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'}\left(h\nu\right)}{B^{(\mathrm{D})}_{C \rightarrow C'}}. \tag{8.19c}$$

Les deux configurations s'écrivent :

$$C : (\lambda)^{\varpi}\, n\ell^{w} n'\ell'^{w'} \tag{8.20a}$$

$$C' : (\lambda)^{\varpi}\, n\ell^{w-1} n'\ell'^{w'+1}, \tag{8.20b}$$

où w désigne la population initiale de l'orbitale initiale $n\ell$ et w' la population initiale de l'orbitale finale $n'\ell'$. $(\lambda)^{\varpi}$ regroupe les autres orbitales, dites *spectatrices*[2]. Si $w' = 0$, alors le faisceau, de type $\ell^w - \ell^{w-1}\ell'$, est dit *de valence*. Si $w = 1$ et $w' = 0$, alors le faisceau, de type $\ell_0^{w_0}\ell' - \ell_0^{w_0}\ell''$, est dit *optique*.

Dans l'équation (8.17), les termes en configuration utilisent des variables déterminées par les formalismes statistiques, tels UTA, et les règles de somme [8] :

$$\mathcal{U}_C = \mathcal{U}_C^{(\mathrm{S})} = g_C e^{-\beta E_C} \tag{8.21a}$$

$$B_{C\to C'} = B_{C\to C'}^{(\mathrm{S})} = \frac{16\pi^3\alpha}{3he^2}\frac{(w+1)\,(4\ell'+2-w')}{(4\ell+2)\,(4\ell'+2)}2\ell_> D_{\ell\ell'}^2 \tag{8.21b}$$

$$\Phi_{C\to C'} = \Phi_{C\to C'}^{(\mathrm{S})} = \mathcal{V}_{\sqrt{\mu_2^{(\mathrm{c})}+w_{\mathrm{G}}^2},w_L}\left(h\nu - h\nu_{C\to C'}\right), \tag{8.21c}$$

avec $\mathcal{V}_{\sqrt{\mu_2^{(\mathrm{c})}+w_{\mathrm{G}}^2},w_L}\left(h\nu - h\nu_{C\to C'}\right)$ la fonction de Voigt de paramètres gaussien $\sqrt{\mu_2^{(\mathrm{c})} + w_G^2}$ et lorentzien w_L. L'expression de $B_{C\to C'}^{(\mathrm{S})}$ provient des règles de somme sur les forces de raies [8] :

$$\sum_{\gamma J\to\gamma' J'}\frac{2J+1}{g_C}B_{\gamma J\to\gamma' J'} = \frac{4\pi^2\alpha}{3he^2}\frac{1}{g_C}\sum_{\gamma J\to\gamma' J'}\mathcal{S}_{\gamma J\to\gamma' J'} \tag{8.22a}$$

$$= \frac{4\pi^2\alpha}{3he^2}\frac{(w+1)\,(4\ell'+2-w')}{(4\ell+2)\,(4\ell'+2)}2\ell_> D_{\ell\ell'}^2, \tag{8.22b}$$

avec α constante de structure fine, $D_{\ell\ell'}$ l'intégrale dipolaire électrique et $\ell_> = \max(\ell,\ell')$. Le lien évident entre les définitions statistique et détaillée se fait à haute température, lorsque $\beta \to 0$:

$$\mathcal{U}_C^{(\mathrm{S})} = \lim_{k_{\mathrm{B}}T\to\infty}\mathcal{U}_C^{(\mathrm{D})}\left(k_{\mathrm{B}}T\right) = \lim_{\beta\to 0}\mathcal{U}_C^{(\mathrm{D})}(\beta) \tag{8.23a}$$

$$B_{C\to C'}^{(\mathrm{S})} = \lim_{k_{\mathrm{B}}T\to\infty}B_{C\to C'}^{(\mathrm{D})}\left(k_{\mathrm{B}}T\right) = \lim_{\beta\to 0}B_{C\to C'}^{(\mathrm{D})}(\beta). \tag{8.23b}$$

À température finie, on peut comparer $B_{C\to C'}^{(\mathrm{D})}$ et $B_{C\to C'}^{(\mathrm{S})}$ en prenant leur quotient :

$$\frac{B_{C\to C'}^{(\mathrm{D})}}{B_{C\to C'}^{(\mathrm{S})}} = \frac{g_C\sum_{\gamma J\to\gamma' J'}\mathcal{S}_{\gamma J\to\gamma' J'}e^{-\beta E_{\gamma J}}}{\mathcal{U}_C^{(\mathrm{D})}\left(k_{\mathrm{B}}T\right)\sum_{\gamma J\to\gamma' J'}\mathcal{S}_{\gamma J\to\gamma' J'}}. \tag{8.24}$$

Le numérateur ne peut être simplifié par des règles de somme. En revanche, la règle de somme sur l'ensemble des raies partant d'un même niveau, dite « J-file sum rule », s'applique car l'exponentielle ne dépend que de $E_{\gamma J}$:

$$\sum_{\gamma J\to\gamma' J'}\mathcal{S}_{\gamma J\to\gamma' J'}e^{-\beta E_{\gamma J}} = D_{\ell\ell'}\sum_{\gamma J}(2J+1)\left[\frac{(w+1)\,\ell_>}{2\ell+1} + C_{\gamma J}\left(G^1(\ell,\ell')\right)\right], \tag{8.25}$$

[2]Ces concepts et notations auront été introduites au chapitre 3, cette définition complexe est donc temporaire.

où $C_{\gamma J}\left(G^1(\ell,\ell')\right)$ est le coefficient angulaire de l'intégrale de Slater $G^1(\ell,\ell')$ dans le développement en intégrales radiales de $E_{\gamma J}$. Le rapport (8.24) se réécrit :

$$\frac{B^{(\mathrm{D})}_{C\to C'}}{B^{(\mathrm{S})}_{C\to C'}} = \frac{4\ell'+2}{4\ell'+2-w'}\left(1+\frac{4\ell+2}{2\ell_>(w+1)\mathcal{U}^{(\mathrm{S})}_C(k_\mathrm{B}T)}\sum_{\gamma J} g_{\gamma J}C_{\gamma J}e^{-\beta E_{\gamma J}}\right). \tag{8.26}$$

Le terme dépendant de la température, multiple de $C_{\gamma J}$, requiert que la configuration C dépende de $G^1(\ell,\ell')$, sinon $C_{\gamma J}=0$ pour tout γJ. Si $C_{\gamma J}=0$ pour tout niveau γJ, alors le rapport (8.24) est toujours égal à 1. Par conséquent, **le formalisme statistique donne des taux de transition exacts pour des faisceaux de transition des types** $(\lambda)^\omega\,\ell^w-(\lambda)^\omega\,\ell^{w-1}\ell'$ **et** $(\lambda)^\omega\,\ell^{4\ell+2}\ell'^{w'}-(\lambda)^\omega\,\ell^{4\ell+1}\ell'^{w'+1}$. Dans le cas plus général, on peut démontrer que

$$0 \leq B^{(\mathrm{D})}_{C\to C'} \leq B^{(\mathrm{S})}_{C\to C'}. \tag{8.27}$$

$B^{(\mathrm{D})}_{C\to C'}$ peut être exprimé dans le formalisme des moyennes :

$$B^{(\mathrm{D})}_{C\to C'} = \frac{\left\langle e^{-\beta E_{\gamma J}}\right\rangle_{\gamma J\to\gamma' J'}}{\left\langle e^{-\beta E_{\gamma J}}\right\rangle_{\gamma J}}, \tag{8.28}$$

où

$$\left\langle e^{-\beta E_{\gamma J}}\right\rangle_{\gamma J} = \frac{\sum_{\gamma J}(2J+1)\,e^{-\beta E_{\gamma J}}}{\sum_{\gamma J}(2J+1)} \tag{8.29a}$$

$$\left\langle e^{-\beta E_{\gamma J}}\right\rangle_{\gamma J\to\gamma' J'} = \frac{\sum_{\gamma J\to\gamma' J'}\mathcal{S}_{\gamma J\to\gamma' J'}\,e^{-\beta E_{\gamma J}}}{\sum_{\gamma J\to\gamma' J'}\mathcal{S}_{\gamma J\to\gamma' J'}}. \tag{8.29b}$$

8.3.3 Méthode des distributions

L'approximation de la moyenne $\left\langle e^{-\beta E_{\gamma J}}\right\rangle_{g_{\gamma J}}$ par un développement de Taylor à l'ordre 2 de l'exponentielle est assez précise pour les fonctions de partition, elle l'est en revanche beaucoup moins pour les intensités des raies des faisceaux de Moszkowski [99].

L'idée est de transformer la somme sur les $e^{-\beta E_{\gamma J}}$ pondérés par les $w_{\gamma J}$ (ex. $g_{\gamma J}$, $\sum_{\gamma J\to\gamma' J'}S_{\gamma J}$) en intégrale sur l'énergie des niveaux E avec une pondération donnée par une distribution continue à choisir, appelée $\mathcal{D}_w$:

$$\left\langle e^{-\beta E_{\gamma J}}\right\rangle_w = \frac{\sum_{\gamma J} w_{\gamma J}\,e^{-\beta E_{\gamma J}}}{\sum_{\gamma J} w_{\gamma J}} \simeq \int_{-\infty}^{+\infty}\mathcal{D}_w(E)\,e^{-\beta E}\,\mathrm{d}E. \tag{8.30}$$

$\mathcal{D}_w$ doit être normalisée de manière à ce que

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathcal{D}_w(E)\,\mathrm{d}E = \sum_{\gamma J} w_{\gamma J}. \tag{8.31}$$

L'équation (8.30) peut être vue comme une transformée de Laplace de $\mathcal{D}_w$.

Un développement en séries de Taylor à l'ordre n_x arbitraire des facteurs exponentiels en βE fournit des contraintes pour la recherche et l'ajustement de la distribution :

$$\left\langle E_{\gamma J}^n \right\rangle_w = \frac{\sum_{\gamma J} w_{\gamma J} E_{\gamma J}^n}{\sum_{\gamma J} w_{\gamma J}} \simeq \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{D}_w(E) E^n \, \mathrm{d}E, \quad 0 \leq n \leq n_x. \tag{8.32}$$

Un exemple de distribution $\mathcal{D}_w$ parmi d'autres [99] est la distribution gaussienne dont la variance v_w s'exprime très simplement dans le formalisme des moyennes :

$$D_w(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi v_w}} \exp\left(-\frac{\left(E - \left\langle E_{\gamma J} \right\rangle_w\right)^2}{2v_w} \right), \quad v_w = \left\langle \left(E_{\gamma J} - \left\langle E_{\gamma J} \right\rangle_w\right)^2 \right\rangle_w. \tag{8.33}$$

Évaluée dans l'équation (8.30), $\mathcal{D}_w$ gaussienne donne l'approximation :

$$\left\langle e^{-\beta E_{\gamma J}} \right\rangle_w \simeq e^{-\beta \langle E_{\gamma J} \rangle_w + \beta^2 v_w / 2}. \tag{8.34}$$

Si $w_{\gamma J} = g_{\gamma J} = 2J + 1$, alors on obtient une approximation de la fonction de partition, et $v_w = v_C = \sigma_C^2$ variance de la configuration déjà utilisée. Si $w_{\gamma J} = \sum_{\gamma J \to \gamma' J'} S_{\gamma J \to \gamma' J'}$, alors les moments obtenus sont ceux de la *zone réceptive*, et $v_w = v_C$.

Nous avions calculé Sec. 6.1 la fonction de partition et la probabilité de la configuration en faisant un développement à l'ordre 2 de l'exponentielle. On peut également obtenir l'énergie moyenne et la dispersion de la configuration. La fonction de partition $\mathcal{U}_C^{(\mathrm{D})}$ peut se développer selon Taylor à un ordre n_x supérieur à 2 et être exprimée à l'aide des moments de la configuration :

$$\mathcal{U}_C^{(\mathrm{D})}(k_B T) \simeq \mathcal{U}_C^{(\mathrm{S})} \left(1 + \sum_{n=2}^{n_x} (-1)^n \frac{\beta^n \mu_n^{(\mathrm{c})}}{n!} \right) \tag{8.35}$$

$$\simeq \mathcal{U}_C^{(\mathrm{S})} \left[1 + \frac{\beta^2 v_w}{2} + \sum_{n=3}^{n_x} (-1)^n \frac{\left(\beta \sqrt{v_w}\right)^n \alpha_n}{n!} \right] \tag{8.36}$$

À l'ordre 2, on peut déjà obtenir des valeurs approchées pour les trois premiers moments statistiques des configurations :

$$E_C(k_B T) \simeq E_C(\infty) - \frac{2\beta v_C(\infty)}{2 + \beta^2 v_C(\infty)} \tag{8.37}$$

$$v_C(k_B T) \simeq v_C(\infty) \left(1 - \frac{\beta^2 v_C(\infty) \left(6 + \beta^2 v_C^2(\infty)\right)}{\left(2 + \beta^2 v_C(\infty)\right)^2} \right), \tag{8.38}$$

où $E_C(\infty) = E_C$ et $v_C(\infty) = v_C$.

Si les moments statistiques de la configuration dépendent de la température inverse à l'ordre 2, les moments statistiques sur les taux de transition sur les faisceaux de Moszkowski en dépendent à l'ordre 1, car

$$\frac{B_{C \to C'}^{(\mathrm{D})}(k_B T)}{B_{C \to C'}^{(\mathrm{S})}} \simeq e^{-\beta \delta}, \tag{8.39}$$

où $\delta = \langle E_{\gamma J}\rangle_{\gamma J \to \gamma' J'} - \langle E_{\gamma J}\rangle_{\gamma J}$. Déterminer le coefficient d'Einstein $B^{(\mathrm{D})}_{C\to C'}(k_\mathrm{B}T)$ pour $k_\mathrm{B}T < 1$ nécessite de connaître le taux pour une température nulle, c.-à-d. $\beta \to \infty$. Le passage à la limite dans (8.26) nous donne :

$$\frac{B^{(\mathrm{D})}_{C\to C'}(0)}{B^{(\mathrm{S})}_{C\to C'}} = \left(1 + \frac{C_0\,(4\ell+2)}{2\ell_>(w+1)}\right)\left(\frac{4\ell'+2}{4\ell'+2-w'}\right), \tag{8.40}$$

où C_0 est le coefficient de l'intégrale $G^1(\ell\ell')$ dans l'énergie du niveau fondamental de C. Le problème est qu'il n'existe pas d'expression analytique pour ce coefficient, car le niveau fondamental est *a priori* inconnu, ou du moins nécessite de diagonaliser le Hamiltonien. On peut cependant approcher le taux de transition de la configuration à l'ordre 2 en β, par le développement de Taylor :

$$\frac{B^{(\mathrm{D})}_{C\to C'}(k_\mathrm{B}T)}{B^{(\mathrm{S})}_{C\to C'}} \simeq e^{-\beta\delta}\left(\frac{2+\beta^2\omega_C^2}{2+\beta^2\sigma_C^2}\right), \tag{8.41}$$

ou en modélisant la distribution des niveaux par une gaussienne :

$$\frac{B^{(\mathrm{D})}_{C\to C'}(k_\mathrm{B}T)}{B^{(\mathrm{S})}_{C\to C'}} \simeq e^{-\beta\delta}\, e^{\frac{\beta^2}{2}\left(\omega_C^2-\sigma_C^2\right)}. \tag{8.42}$$

Le facteur de droite est une exponentielle d'une quantité positive divergente quand la température tend vers 0.

Le taux de transition obtenu par développement de Taylor tend vers 0 aux petites températures. Celui obtenu par distribution gaussienne des niveaux peut diverger en 0 si $\omega_C > \sigma_C$. On voit Fig. 8.13 que le développement de Taylor à l'ordre 2 est incapable de prendre en compte le fait que les taux de transition ne tendent pas tous vers 0 lorsque la température devient très faible. D'autre part, la méthode des distributions diverge lorsque la température devient très faible, mais approche les taux de transition au moins aussi précisément que le développement de Taylor à l'ordre 2 lorsque $\beta\, v_C$ est proche de l'unité.



INTERPRÉTATION ET ANALYSE DE RÉSULTATS EXPÉRIMENTAUX

Le code SCORCG permet l'analyse et l'interprétation de spectres obtenus à l'occasion d'expériences de spectroscopie plasma. En détaillant les faisceaux de transition, SCORCG peut non seulement lever les incertitudes sur la présence de certaines structures, mais aussi valider des approches statistiques. À travers plusieurs interprétations d'expériences, nous envisageons différents apports de SCORCG à l'analyse de résultats expérimentaux.

9.1 Spectroscopie plasma

Peu accessible en laboratoire, la spectroscopie plasma à l'équilibre thermodynamique local est primordiale dans l'étude des plasmas rencontrés aussi bien en astrophysique qu'en fusion par confinement inertiel.

9.1.1 Convolution de la transmission

Le diagnostic de la structure atomique des espèces présentes dans un plasma peut utiliser deux types de spectres :

- les spectres en émission, s'ils sont à l'équilibre thermodynamique local ;
- les spectres en transmission.

Les spectres en émission sont les plus faciles à obtenir, mais sont très difficiles à interpréter. En laboratoire, il est impossible d'obtenir un plasma homogène à l'É. T. L. Ceux en transmission facilitent l'interprétation, permettent d'accéder aux couches profondes et sont moins sensibles aux effets hors-É. T. L. que les spectres en émission.

On considère un milieu d'épaisseur l d'opacité spectrale $\kappa(h\nu)$ et de densité ρ[1]. L'opacité ne dépend que de ρ, et la dépendance est assez faible. La masse surfacique

[1] Mêmes notations que Sec. 1.3.2 dans cette section

ρl, en cm^2/g, est la quantité qui est le plus souvent considérée La transmission est reliée à l'opacité via l'équation (1.48) p. 23 :

$$T(h\nu) = \frac{I}{I_0} = \frac{I(l, h\nu)}{I(0, h\nu)} = e^{-\tau(h\nu)}, \tag{9.1}$$

avec

$$\tau(h\nu) = \int_0^l \rho(x)\kappa_\nu(l)\,\mathrm{d}x. \tag{9.2}$$

La double égalité traduit les chemins qui relient l'opacité, la transmission et l'intensité observée. Le spectre en transmission expérimentale est déterminé par rapport des deux intensités spectrales mesurées :

- l'intensité de référence $I_{0,\mathrm{exp}}$ provenant du backlighter sans passage dans le plasma ;
- l'intensité transmise $I_{T,\mathrm{exp}}$ du rayonnement du backlighter qui a traversé le plasma.

La transmission expérimentale brute T°_{exp} s'écrit alors

$$T^\circ_{\mathrm{exp}}(h\nu) = \frac{I_{T,\mathrm{exp}}}{I_{0,\mathrm{exp}}}. \tag{9.3}$$

La transmission théorique T°_Θ, elle, est déterminée par la seconde égalité, à savoir

$$T^\circ_\Theta(h\nu) = e^{-\tau(h\nu)} = e^{-\rho l \kappa(h\nu)}. \tag{9.4}$$

La seconde égalité, dite loi de Beer-Lambert, est vraie uniquement si le milieu est uniforme. Dans le cas général, la profondeur optique $\tau(h\nu)$ est donnée formule (9.2).

Les spectrographes sont limités en précision : un photon d'énergie $h\nu$ est mesuré comme ayant une énergie $h\nu + \Delta h\nu$, avec $\Delta h\nu \ll h\nu$ variable aléatoire en énergie dont la distribution est donnée par $\mathcal{W}_{\mathrm{exp}}(\Delta h\nu)$, appelée *erreur expérimentale*. La résolution instrumentale est le plus souvent donnée sous forme de $\frac{\lambda}{\Delta\lambda}$, où λ est la longueur d'onde. La conversion de λ à $h\nu$ est aisée, car $\frac{\lambda}{\Delta\lambda}$ est l'inverse d'une différentielle logarithmique, par conséquent

$$\frac{h\nu}{|\Delta(h\nu)|} = \frac{\lambda}{|\Delta\lambda|}. \tag{9.5}$$

Même si l'élargissement instrumental dépend de l'énergie spectrale, l'effet d'une faible variation de l'élargissement instrumental sur le spectre en transmission est peu discernable. Le considérer uniforme sur la fenêtre du calcul en transmission a des effets négligeables sur l'interprétation du spectre expérimental.

Les spectres expérimentaux à prendre en compte sont les produits de convolution $\mathcal{W}_{\mathrm{exp}} * I_{0,\mathrm{exp}}$ et $\mathcal{W}_{\mathrm{exp}} * I_{T,\mathrm{exp}}$ En général, la distribution $\mathcal{W}_{\mathrm{exp}}$ suit une loi normale, et la FWHM, qui est égale à environ 2,355 fois l'écart-type, est appelée *largeur instrumentale*. Pour prendre en compte l'erreur expérimentale, la transmission expérimentale doit être exprimée comme le quotient des deux produits de convolution :

$$T_{\mathrm{exp}}(h\nu) = \frac{\mathcal{W}_{\mathrm{exp}} * I_{T,\mathrm{exp}}}{\mathcal{W}_{\mathrm{exp}} * I_{0,\mathrm{exp}}} \tag{9.6}$$

Cependant, lors d'interprétations d'expériences, il n'est pas rare que des théoriciens effectuent la convolution suivante :

$$T^*_{\text{exp}}(h\nu) = \mathcal{W}_{\text{exp}} * \left(\frac{I_{T,\text{exp}}}{I_{0,\text{exp}}} \right), \tag{9.7}$$

le plus souvent parce qu'ils n'ont que la transmission brute à disposition, et ensuite prennent pour transmission $T^*_{\text{exp}}(h\nu)$. Cette opération conduit dans le cas général à une transmission fausse, en particulier si $I_{0,\text{exp}}$ présente des variations brutales, notamment des raies d'émission [100]. Ce type de méthode ne donne des transmissions exploitables que si $I_{0,\text{exp}}$ a une allure suffisamment lisse sur la fenêtre de calcul de transmission.

La transmission des spectres théoriques est issue de la convolution de l'expression $\tau(h\nu)$ qui dépend de l'opacité spectrale :

$$T_\Theta(h\nu) = \mathcal{W}_{\text{exp}} * e^{-\tau(h\nu)}. \tag{9.8}$$

Nous avons vu Sec. 5.3.3 que l'erreur instrumentale devait être convoluée sur la transmission, sous peine de résultats faux en cas de saturation de la transmission, ce qu'il est impossible de savoir avant le calcul d'opacité.

9.1.2 Effet de la non-uniformité spatiale

Dans nos calculs de transmission, nous supposons que le milieu traversé par le rayonnement est homogène, de température et densité uniformes. La réalité des plasmas de laboratoire, en particulier ceux produits par laser, est qu'il existe une multitude de gradients à un instant t dans un plasma qui se détend. Ces gradients sont dus à l'inhomogénéité du chauffage du plasma, qui est inévitable en spectroscopie de transmission. Dans beaucoup d'expériences, le plasma n'est chauffé que d'un côté [54]. L'étude de l'inhomogénéité de la densité est facilitée par le fait que l'opacité κ_ν dépend faiblement de ρ.

Dans l'axe z de propagation du rayonnement, l'inhomogénéité du faisceau ne peut jouer que sur la valeur de la profondeur optique $\int_0^L \rho(x)\,\mathrm{d}x$. Par contre, sur le plan (x, y) perpendiculaire à l'axe de propagation du rayonnement, l'inhomogénéité du plasma se traduit par une profondeur optique dépendante de la position dans le plan, dans la section droite S du faisceau de photons. Soit $\tau_\nu(x, y)$ la profondeur optique au point (x, y) de S. La transmission locale vaut $e^{-\tau_\nu(x,y)}$. La moyenne de cette transmission sur S nous donne la transmission du milieu :

$$T_\nu = \frac{1}{|S|} \iint_S e^{-\tau_\nu(x,y)}\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y = \left\langle e^{-\tau_\nu(x,y)} \right\rangle_S. \tag{9.9}$$

La transmission dans un plasma inhomogène s'écrit donc comme la moyenne d'une exponentielle. L'inégalité de Jensen nous dit que

$$T_\nu = \left\langle e^{-\tau_\nu(x,y)} \right\rangle_S \geq e^{-\langle \tau_\nu(x,y) \rangle_S} \geq T^{\text{H}}_\nu, \tag{9.10}$$

où T^{H}_ν est la transmission calculée en considérant le plasma homogène de profondeur optique $\langle \tau_\nu(x, y) \rangle_S$ moyenne de la profondeur optique sur la section droite du faisceau.

On peut ainsi conclure que l'hypothèse du milieu homogène, avec κ et ρL uniformes, sous-estime systématiquement la transmission du plasma. Il n'est donc pas

étonnant que les calculs théoriques donnent très souvent des transmissions plus faibles lors d'interprétations d'expériences.

Peu d'hypothèses peuvent être faites sur la distribution $\tau_\nu(x,y)$ dans le cas général. La plupart des cibles dans les expériences de plasmas chauffés par laser sont composées d'une tranche de métal prise en sandwich entre deux tranches de matériau léger dont les zones de raies sont nettement distinctes des zones de raies du métal dont on veut étudier l'opacité. Le profil thermodynamique d'un plasma chauffé par laser peut se résumer à une zone chaude et plus ou moins dense entourée par une zone froide assez dense. Si elle est constituée du même élément que la zone chaude, la densité de la zone froide est supérieure.

Il est possible de donner des modèles simples d'inhomogénéité avec des hypothèses fortes sur $\tau_\nu(x,y)$. Si, par exemple, on suppose que, dans la section S, il y a une proportion $c \in [0,1]$ de cette section qui a une profondeur optique $\frac{\tau_0}{c}$, et une proportion $1-c$ qui a une profondeur optique 0, alors la profondeur optique moyenne est égale à τ_0, mais la transmission totale vaut :

$$T = \frac{cS}{S}\, e^{-\tau_0/c} + (1-c)\, e^0 = c\, T_0^{1/c} + (1-c), \tag{9.11}$$

où $T_0 = e^{-\tau_0}$ est la transmission du plasma s'il était homogène de profondeur optique τ_0. Le terme $(1-c)$ fait apparaître un « plancher » dans la transmission, tandis que l'exposant $1/c$ tend à accélérer la saturation de la transmission, d'où une allure « en créneaux » pour c petit.

Les simulations hydrodynamiques [54, 55, 101] nous montrent que, dans la zone chaude où le plasma est le plus homogène, il y a un gradient en densité qui peut être estimé constant si la section S n'est pas trop étendue. Autrement dit, le développement de Taylor à l'ordre 1 approche bien la profondeur optique, $\overrightarrow{\nabla\tau} = (\nabla_x\tau, \nabla_y\tau)$, et on peut écrire, en notant $\vec{v} = (x,y)$:

$$\tau_\nu(\vec{v}) = \tau_0 + \overrightarrow{\nabla\tau} \cdot \vec{v}. \tag{9.12}$$

Si $S = [x_0, x_1] \times [y_0, y_1]$, la transmission peut s'écrire :

$$\begin{aligned} T_\nu &= \frac{S\, e^{-\tau_0}}{S} \int_{x_0}^{x_1} \int_{y_0}^{y_1} e^{-\left(\nabla_x\tau x + \nabla_y\tau y\right)}\, \mathrm{d}x\, \mathrm{d}y \\ T_\nu &= T_0\, \frac{e^{-\nabla_x\tau x_0} - e^{-\nabla_x\tau x_1}}{\nabla_x\tau}\, \frac{e^{-\nabla_y\tau y_0} - e^{-\nabla_y\tau y_1}}{\nabla_y\tau}. \end{aligned} \tag{9.13}$$

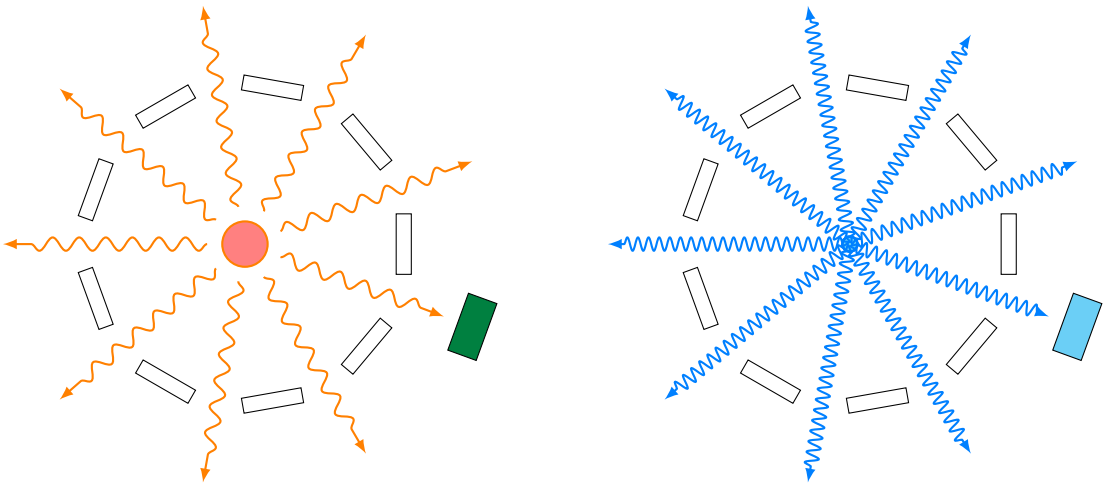
Ces exemples – « trous » et gradients – permettent un début de modélisation de plasmas inhomogènes en densité.

9.1.3 Protocoles expérimentaux

Étant donné qu'il est impossible de produire des plasmas chauds homogènes et à l'É. T. L., le but des dispositifs expérimentaux est de tendre le plus près possible de ces conditions idéales. Le procédé général consiste, comme le montre Fig. 9.2, à chauffer de manière isochore[2] un échantillon de corps pur en un temps bref – de l'ordre de

[2]Le chauffage isochore traduit le fait que le dépôt d'énergie doit être beaucoup plus bref que la détente du plasma créé par le début du chauffage.

la nanoseconde –, à l'aide d'un rayonnement pénétrant. L'échantillon est porté à l'état de plasma, et ce plasma subit une expansion hydrodynamique où il se détend et se refroidit. C'est ce plasma en expansion qui est utilisé pour la mesure de spectroscopie en transmission. Deux types de dispositifs sont utilisés pour les expériences de spectroscopie.



Phase de contraction :
chauffage de l'échantillon

Phase de stagnation :
X durs backlighters

FIGURE 9.1 – Schéma d'un dispositif de type Z-pinch.

Le premier type est mis en œuvre dans les machines Z, dont celle de Sandia[3] est le plus grand représentant. Dans ce type d'installation, un plasma à haute température (>keV) est engendré par une décharge électrique de très forte intensité. L'effet *Z-pinch*, ou striction magnétique, « pince » le plasma sur l'axe central, ce qui le rend plus conducteur, augmente l'intensité du courant et chauffe le plasma jusqu'à des températures de plusieurs keV, voire au-delà. Dans la phase de pincement, un rayonnement X à une température de plusieurs centaines d'eV est émis par le plasma de Z-pinch, renforcé par le rayonnement à quelques dizaines d'eV crée par les parois de la cavité chauffées par cette source centrale. C'est l'addition des deux rayonnements qui chauffe l'échantillon et le fait passer à l'état de plasma. Lors de la phase de compression maximale du Z-pinch, ou stagnation, le rayonnement a une température de plusieurs keV et peut alors jouer le rôle de backlighter [56, 102]. Il faut cependant choisir le matériau de manière à éviter que des raies d'émission se trouvent dans la fenêtre spectrale.

Beaucoup plus utilisé [54, 80], le second dispositif tire parti de la capacité qu'a le rayonnement laser à concentrer une forte puissance ($\sim 10^{12}$ W/cm^2) dans un espace de l'ordre de quelques milliers de $^-$m^3 et un intervalle de temps de l'ordre de la nanoseconde. La concentration d'un rayonnement de cette intensité sur un échantillon entraîne la vaporisation instantanée de celui-ci à l'état de plasma dont la température peut atteindre plusieurs dizaines d'eV si l'énergie du faisceau laser est suffisante. Le plasma formé par ablation de l'échantillon se détend en quelques nanosecondes. Cependant, il est très difficile d'obtenir un chauffage homogène en attaque directe, y compris avec un seul faisceau. En général, l'attaque indirecte permet une distribution plus homogène

[3]Sandia National Laboratory (SNL), Albuquerque, US-NM.

du rayonnement. Le dispositif expérimental utilisé pour la campagne d'expériences menées au laboratoire d'utilisation des lasers intenses de l'École Polytechnique (Palaiseau, France) en 2008 [54, 55] est schématisé Fig. 9.2. C'est une cavité, dite *hohlraum*, qui reçoit l'impulsion laser. Des trous de trois côtés permettent le passage des différents rayonnements. Les parois en or sont vaporisées par le faisceau laser et émettent un rayonnement proche de celui d'un corps noir. L'échantillon, qui bouche partiellement l'un des trous, est porté à l'état de plasma chaud par ce rayonnement thermique.

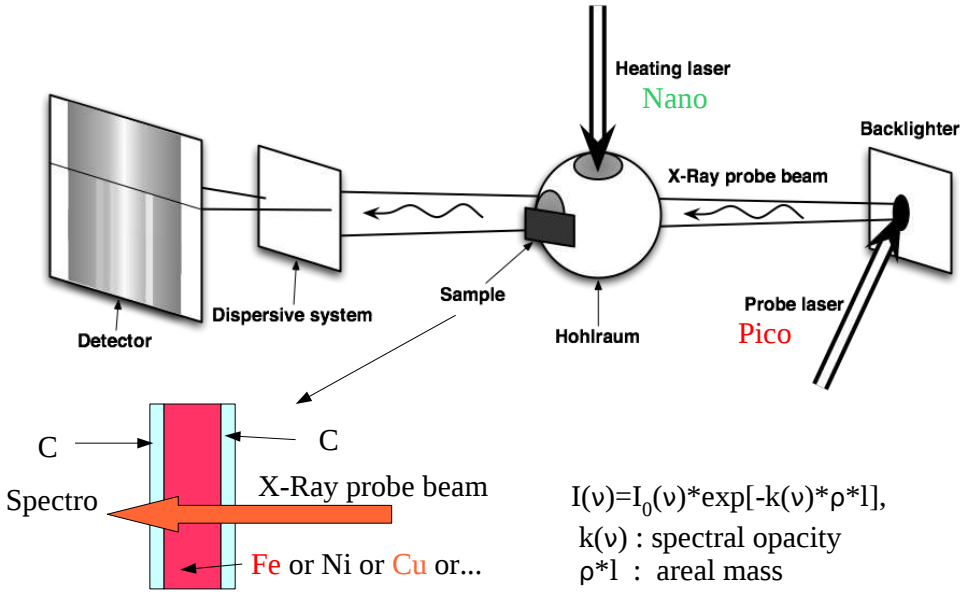


FIGURE 9.2 – Schéma du dispositif expérimental utilisé lors de la campagne d'expériences 2008 au LULI.

Pendant la détente du plasma, les mesures de spectroscopie peuvent avoir lieu. En spectroscopie de transmission, le backlighter est un rayonnement issu d'un plasma d'élément lourd chauffé par un laser picoseconde. Ce rayonnement émet généralement dans une gamme allant de plusieurs centaines d'électron-volt à plusieurs keV. Le rayonnement backlighter est perpendiculaire au faisceau laser incident dans la cavité. Il est déclenché au bout de 1,5 ns après le début du tir laser [54]. Il est très important que l'émission backlighter soit très brève afin que la variation en temps du plasma soit négligeable pendant la mesure.

La mesure d'une transmission spectrale nécessite deux mesures d'intensité spectrale : l'une provenant de la source du backlighter sans traversée du milieu à étudier, l'autre provenant de la source du backlighter et traversant le milieu. Il faut donc deux faisceaux séparés ayant même origine et même spectre en intensité en l'absence de milieu absorbant. La première solution est d'utiliser une lame séparatrice, qui sépare le faisceau backlighter en deux : cette solution est envisageable pour de l'XUV dont l'énergie est de l'ordre de 100 eV, mais pas les rayons X durs de l'ordre de 1 keV. La solution retenue pendant la campagne de 2008 au LULI est de placer l'échantillon dans l'axe, n'obstruant que partiellement l'ouverture nécessaire au backlighter.

Dans ce dernier cas, la solution généralement retenue est, soit de mesurer la sortie du backlighter, supposée isotrope par rapport à au moins un axe (cas des machines Z), soit d'utiliser un dispositif de miroirs sphériques rasants afin de dévier les X durs vers deux spectrographes, et de faire en sorte qu'un des faisceaux réfléchis ne passe pas à travers le plasma.

La dernière difficulté est de choisir le bon délai de mesure, c.-à-d. l'intervalle de temps entre le début de l'impulsion laser et le déclenchement du backlighter. Il doit être suffisamment tardif pour que l'échantillon soit assez chaud, mais pas trop car, outre le refroidissement de l'échantillon, sa détente finit, dans le cas du schéma Fig. 9.2 par obstruer complètement l'ouverture dont il n'est censé occuper qu'une partie. Le hohlraum doit être dimensionné de sorte que le plasma produit sous l'effet de l'impulsion laser principale ne fasse pas obstacle à la progression du rayonnement. On peut limiter les risques en choisissant un matériau de cavité qui ne présente pas de raie dans la fenêtre spectrale de mesure.

9.2 Spectres à résolution moyenne

La plupart des spectres en opacité présentent des résolutions de l'ordre de plusieurs centaines, ce qui signifie un pouvoir séparateur dans le spectre de l'ordre de plusieurs eV. Les spectres que nous présentons ici sont issus d'expériences où les plasmas sont crées par des lasers.

9.2.1 Campagne 2008 au LULI

L'installation LULI 2000, à l'École Polytechnique, abrite un laser de puissance. Elle est beaucoup utilisée pour la spectroscopie plasma, et le code SCORCG a été associé à l'exploitation des expériences des campagnes 2008 [54, 55, 103] et 2010 [104, 105].

La campagne 2008 était dédiée à l'opacité de couche L d'éléments de Z voisin de 30, en particulier le fer, le nickel, le cuivre et le germanium. Le premier élément joue un rôle central dans le calcul d'opacité en astrophysique, les deux derniers sont envisagés comme ablateurs en FCI. Le saut $2p - 3d$ chez ces éléments est très intéressant, car, aux alentours de 20 eV et en allant du fer au germanium, la couche $3d$ se remplit et la séparation spin-orbite devient suffisante pour que les deux sous-faisceaux relativistes montrent une séparation en dépit de l'élargissement configurationnel, issu de la multiplicité des états d'ionisation et d'excitation. L'ouverture de l'orbitale $3p$ doit être prise en compte, elle a pour effet notable de « palmer » les structures d'absorption correspondant à chaque degré de charge [55]. La campagne 2010 était dédiée à l'étude de l'opacité de couche M pour ces eléments, mais les spectres expérimentaux font toujours l'objet d'intenses discussions [104].

L'un des spectres les plus intéressants produits au cours de la campagne 2008 est issu d'un tir sur du cuivre avec l'orbitale $3p$ très peu ouverte et l'orbitale $3d$ ouverte à moitié. Il fait apparaître très clairement les sous-structures relativistes des sauts $2p - 3d$ et $2p - 4d$. Dans le calcul SCORCG dont les résultats sont présentés Fig. 9.3, toutes les orbitales jusqu'à $4f$ sont individualisées et 300 supraconfigurations sont calculées. Toutes les transitions partant de la couche L et arrivant sur les couches M, N et O sont relaxées.

Le calcul SCORCG confirme dans les grandes lignes ce qui a été observé Chap. 3 avec un modèle initial entièrement détaillé. L'interaction de sous-configurations relativistes a pour conséquence d'affaiblir la sous-structure d'énergie spectrale la plus éle-

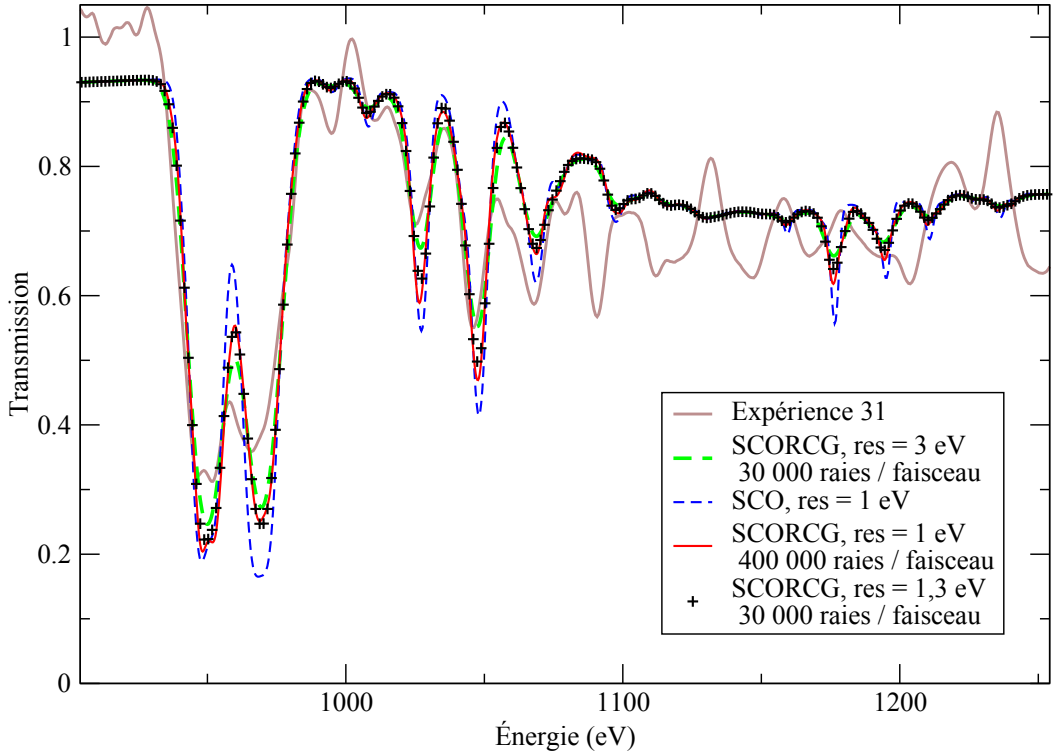


FIGURE 9.3 – Transmission du cuivre à 16 eV, 4 mg/cm^3 et avec une masse surfacique de 40 μg/cm^2.

vée[4] $2p_{1/2} - 3d_{3/2}$ [55, 106, 107, 108]. Trois calculs sont comparés : un calcul SCO, un calcul hybride SCORCG et un calcul SCORCG dont toutes les supraconfigurations non triviales ont été retirées. La comparaison Fig. 9.3 montre que la prise en compte des configurations à électrons de Rydberg – supracouche-chapeau non-vide – ne change pas le spectre de manière significative.

Le tir 25, pour lequel une comparaison entre spectres théoriques et expérience est présentée Fig. 9.4 a donné lieu à une exploitation dans laquelle l'opacité a été décomposée par état de charge. Cette décomposition illustre plusieurs effets du remplissage de la couche $3d$ sur le calcul du spectre en opacité, et donc en transmission.

1. Les positions spectrales des structures associées aux différents sauts monoélectroniques, autrement dit les énergies moyennes des faisceaux de transition, sont une fonction croissante de l'ionisation. Cependant, la croissance est plus rapide pour les transitions $2p - n\ell$ avec $n \geq 4$ que pour les transitions $2p - 3d$. L'explication à ce phénomène est que l'ionisation correspond au remplissage de la couche $3d$, presque vide dans les plus hauts degrés d'ionisation du cuivre. L'effet d'écran d'un électron $3d$ sur un électron $n\ell$ est très faible pour $n < 3$, partiel pour $n = 3$ et presque total (contribution proche de 1) pour les électrons sur les couches $n \geq 4$.

2. L'allure des transmissions Fig. 9.5 montre que le calcul d'opacité est presque entièrement statistique pour Cu IV tandis qu'il y a énormément de faisceaux détaillés dans la transmission de Cu X. Là aussi, c'est le remplissage de la sous-couche $3d$ qui explique la prépondérance de la contribution de l'une ou l'autre des méthodes :

[4] Ou de longueur d'onde la plus basse Fig. 9.3.

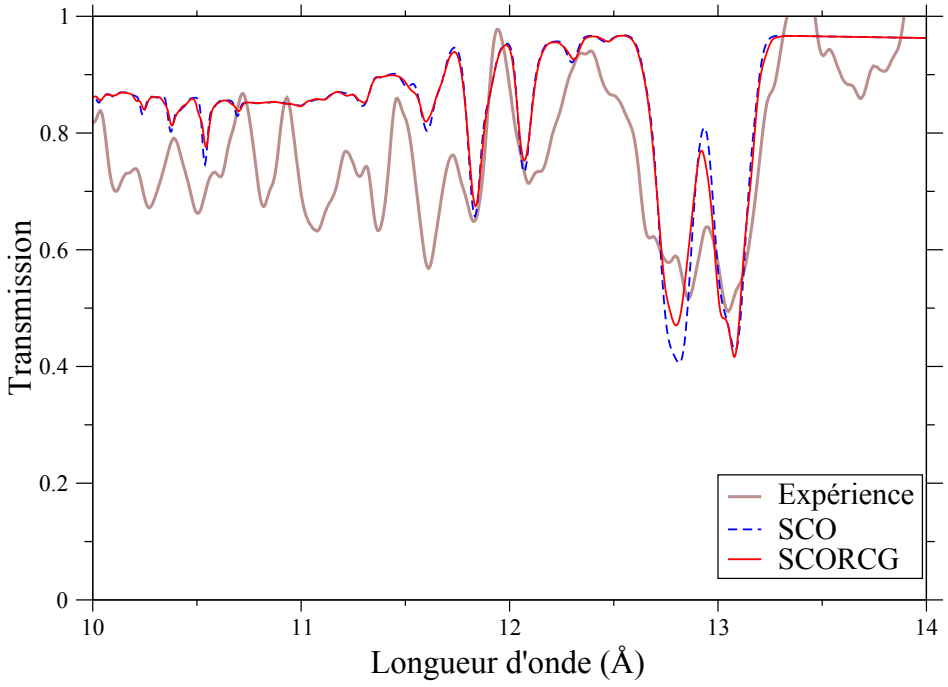


FIGURE 9.4 – Transmission du cuivre à 20 eV, 4 mg/cm^3 et avec une masse surfacique de 20 μg/cm^2.

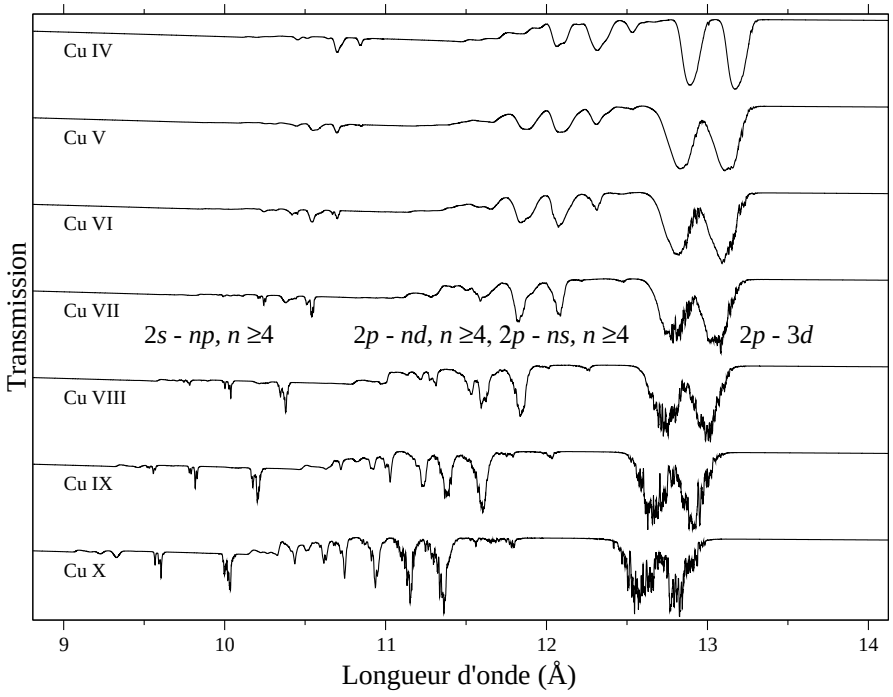


FIGURE 9.5 – Transmission du cuivre par état de charge à 20 eV et 4 mg/cm^3, en fonction de la longueur d'onde.

- détaillée dominante si l'orbitale $3d$ est plutôt vide, comme avec Cu X, dont la configuration fondamentale est $[\mathrm{Ar}]\,3d^2$ et les configurations excitées ont une couche $3d$ pratiquement vide ;
- statistique dominante si l'orbitale $3d$ est remplie à moitié, comme c'est le cas avec Cu V, dont la configuration fondamentale est $[\mathrm{Ar}]\,3d^7$, mais les configurations excitées ont plutôt 4 à 6 électrons dans la couche $3d$.

SCORCG nous permet de comparer les distributions ioniques obtenues par un calcul entièrement statistique et celles obtenues par un calcul hybride, comme le montre, sur l'expérience 25, Tab. 9.1. Bien que très faible, la distribution ionique est faiblement

Charge	Probabilité statistique	Probabilité hybride
3	0,31 %	0,3 %
4	5,78 %	5,66 %
5	31,28 %	30,91 %
6	47,66 %	47,89 %
7	14,40 %	14,66 %
8	0,56 %	0,57 %
Autres	0,01 %	0,01 %
Z^*	5,7175	5,7266

TABLE 9.1 – Distributions ioniques obtenues par SCORCG lors d'un calcul à 16 eV et 5 $\mathrm{mg/cm^3}$, en calcul totalement statistique et en calcul hybride.

influencée par le calcul hybride. Cependant, les états de plus faible charge sont sous-représentés dans le calcul hybride, tandis que les états de charge élevée sont plus abondants, ce qui a pour effet d'augmenter l'ionisation moyenne. Ceci est conforme aux observations faites Fig. 9.5 : les calculs statistiques dominent pour les états les moins ionisés, tandis que les calculs detaillés dominent pour les états les plus ionisés.

9.2.2 Bromure de sodium sur machine Z

Une expérience à Sandia publiée en 2003 sur un échantillon de bromure de sodium a permis l'obtention d'un spectre en transmission dans la fenêtre spectrale entre 1400 eV et 1900 eV, qui correspond à la zone d'excitation de la couche L des ions du brome [102].

On y retrouve des structures similaires à celles présentes dans les éléments de Z un peu inférieur que nous avons étudiés précédemment. En particulier, le traitement exact de l'ICR par RCG* donne des résultats probants L'originalité du spectre expérimental, dans la partie des transitions $2p - 3d$, est la présence de *digitations*[5], des petites structures qui apparaissent dans la transmission spectrale. Le spectre a été diagnostiqué à 50 eV en utilisant les raies de la couche K du sodium, et à 45 eV avec des calculs SCO [102]. La densité électronique est $n_\mathrm{e} = 2 \pm 1.10^{21}$ $\mathrm{cm^{-3}}$ [102], ce qui correspond à la densité de $0,01$ $\mathrm{g/cm^3}$ que nous adoptons pour nos calculs. À l'aide d'une approche entièrement détaillée avec peu de configurations, une interprétation à 37 eV a été établie [53], dans les mêmes conditions de densité que les autres calculs.

Bien qu'ils reproduisent le spectre expérimental dans les grandes lignes, les spectres de ces deux premières interprétations ont des lacunes. Celui de SCO, outre qu'il restitue mal le rapport entre les deux sous-structures de la transition $2p - 3d$, montre des

[5] C'est le meilleur mot que j'ai trouvé pour désigner ces structures qui évoquent des « doigts » d'absorption.

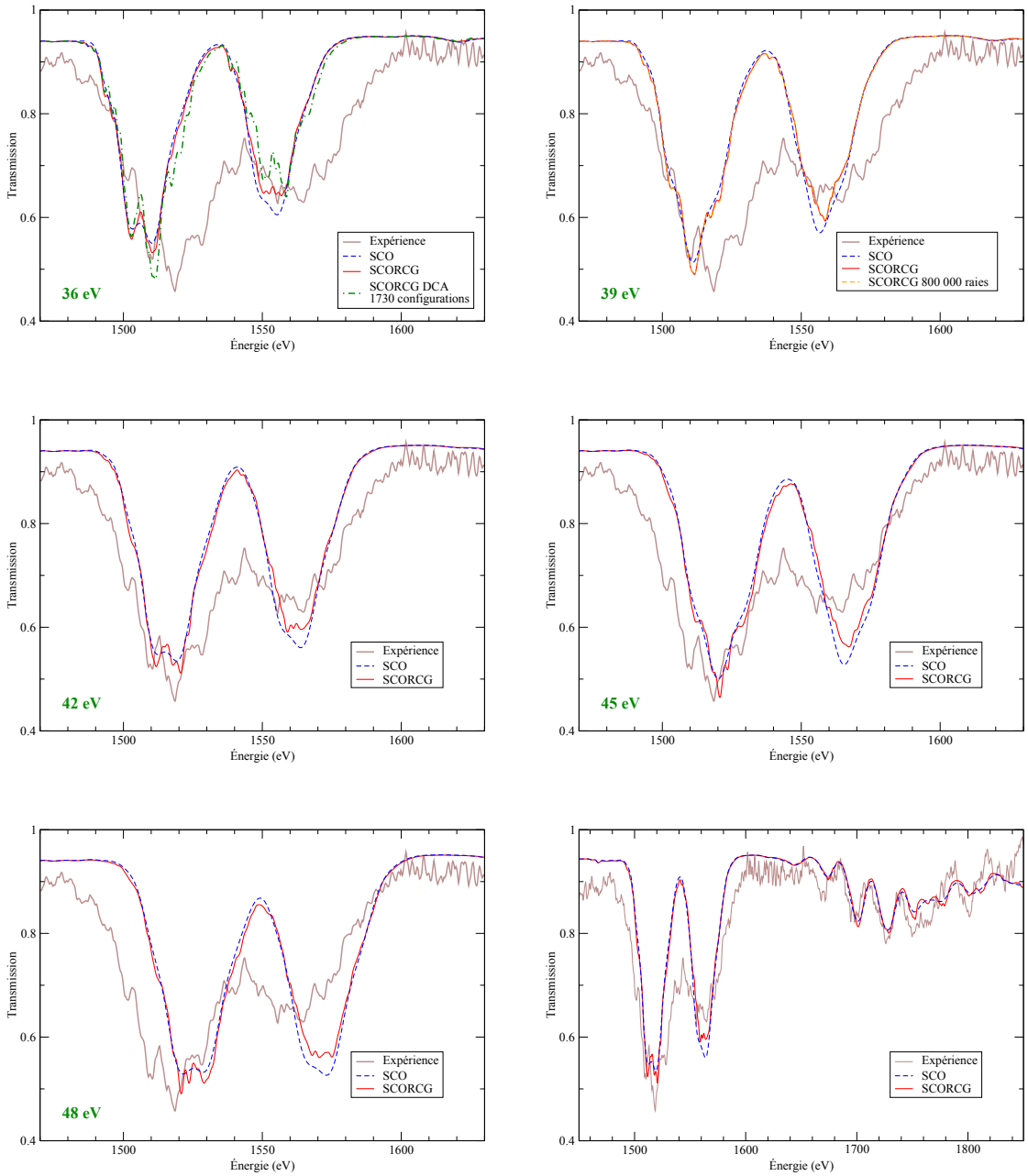


FIGURE 9.6 – Spectres en transmission dans la zone d'excitation $2p - 3d$ SCO et SCORCG comparés au spectre expérimental à cinq températures différentes. Le calcul en bas à droite présente la totalité de la fenêtre spectrale à 42 eV, température de meilleure correspondance.

structures totalement lisses, avec très peu de digitations, c.-à-d. de petits trous en transmission. Le spectre de Jin et Yang [53] montre beaucoup plus de variations secondaires qui semblent bien s'accorder avec les digitations du spectre expérimental, ce qui indique qu'elles ont un sens physique et ne sont pas qu'un bruit de mesure. Mais les configurations que ces derniers ont selectionnées pour leur calcul d'opacité sont limitées et les structures $2p - 4d$ ne sont pas situées aux bonnes positions spectrales ni aux bonnes proportions. De plus, la température de leur calcul spectroscopique est 15 % plus basse que celle des calculs SCO et des diagnostics de profil de raie [102].

Nous avons entrepris de réinterpréter ce spectre expérimental avec SCORCG, en mode tout statistique, hybride et DCA, en supprimant toutes les supraconfigurations non triviales pour le dernier. Comparer les résultats du calcul statistique et ceux du calcul hybride permet de retrouver l'effet déjà connu du traitement de l'interaction de configuration relativiste. Le nombre de raies par faisceau a été limité à 100 000 dans les calculs hybrides, sauf un calcul à 800 000 raies par faisceau à 39 eV. Pour comparaison, un calcul DCA avec 1730 configurations et au plus 800 000 raies par faisceau est présenté pour $T = 36$ eV. Tous les calculs ont été faits à une densité de $0,01$ g/cm^3.

Les calculs SCO et SCORCG à 5 températures différentes, de 36 à 48 eV, sont présents Fig. 9.6. Comme dans les interprétations plus anciennes [53, 102], les structures principales du spectre expérimental sont plus larges que celles provenant du calcul. Le spectre DCA avec 1730 configurations présente un rapport entre les deux sous-structures relativistes plus proche du spectre expérimental que les spectres produits par SCO et même celui produit par SCORCG, qui ne prend en compte l'ICR que sur les faisceaux détaillés. Les digitations du spectre expérimental, en particulier dans le sous-faisceau $2p_{3/2} - 2p_{5/2}$ (énergie la plus basse) correspondent avec un décalage d'environ 2 eV à celles des spectres SCO et surtout SCORCG. Le meilleur accord avec l'expérience correspond à une température de 42 eV.

Les différents spectres en température et la reproduction partielle et complémentaire des digitations du spectre expérimental incitent à prendre en compte un gradient de température dans l'interprétation. De plus, le dispositif expérimental [102] cause une asymétrie dans le chauffage de l'échantillon, ce qui donne à ces gradients un sens physique clair. En toute rigueur, les gradients de température nécessitent des calculs d'opacité puis de transmission pour chaque température envisagée, puis une intégration sur la plage de température. Mais les spectres ont tendance à varier localement de manière linéaire, sur de petits intervalles de température, et un échantillonnage grossier – tous les quelques eV – donne des résultats intéressants. Nous proposons deux calculs en gradient Fig. 9.7, en utilisant les opacités suivantes :

- la somme des opacités à 36, 42 et 48 eV augmentée de 20% ;
- la somme des opacités à 36, 39, 42, 45 et 48 eV augmentée de 25%.

Le spectre expérimental est bien mieux reproduit par les calculs incluant les gradient que par les calculs à température unique. Toutes les digitations sont bien reproduites dans les deux sous-structures correspondant à la transition $2p - 3d$. Les différentes structures des transitions $2p - 4\ell'$ sont également bien calquées sur le spectre expérimental, sauf vers 1800 eV où aucune interprétation n'a été concluante. Mais l'effet le plus remarquable, et le plus attendu dans ce genre de calcul, est le « comblement du trou » entre les deux sous-structures du saut $2p - 3d$. Notre approche incluant les gradients le comble mieux que n'importe quel code de calcul d'opacité à température unique. Nous comparons Fig. 9.8 la répartition des états de charge aux températures uniques et avec les deux gradients que nous avons proposés. La distribution ionique

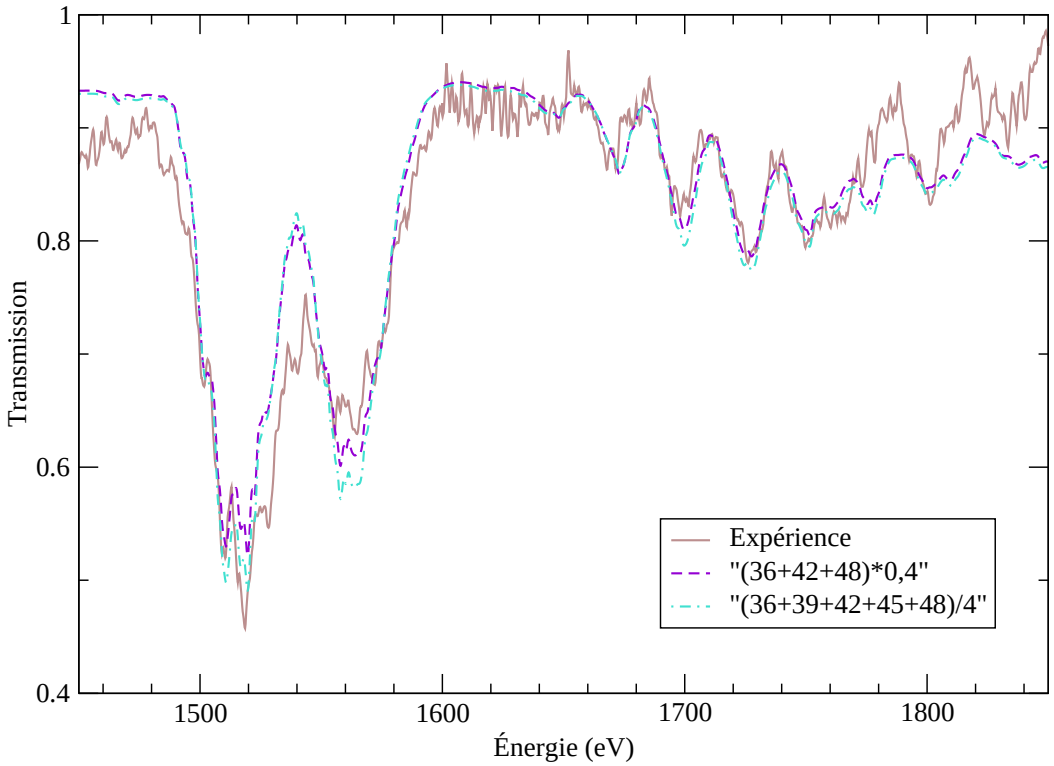


FIGURE 9.7 – Spectres en transmission issus de l'expérience de Bailey et des calculs en gradient à trois (violet) et cinq températures. Les spectres calculés par SCORCG ont été décalés de 1 eV vers la gauche.

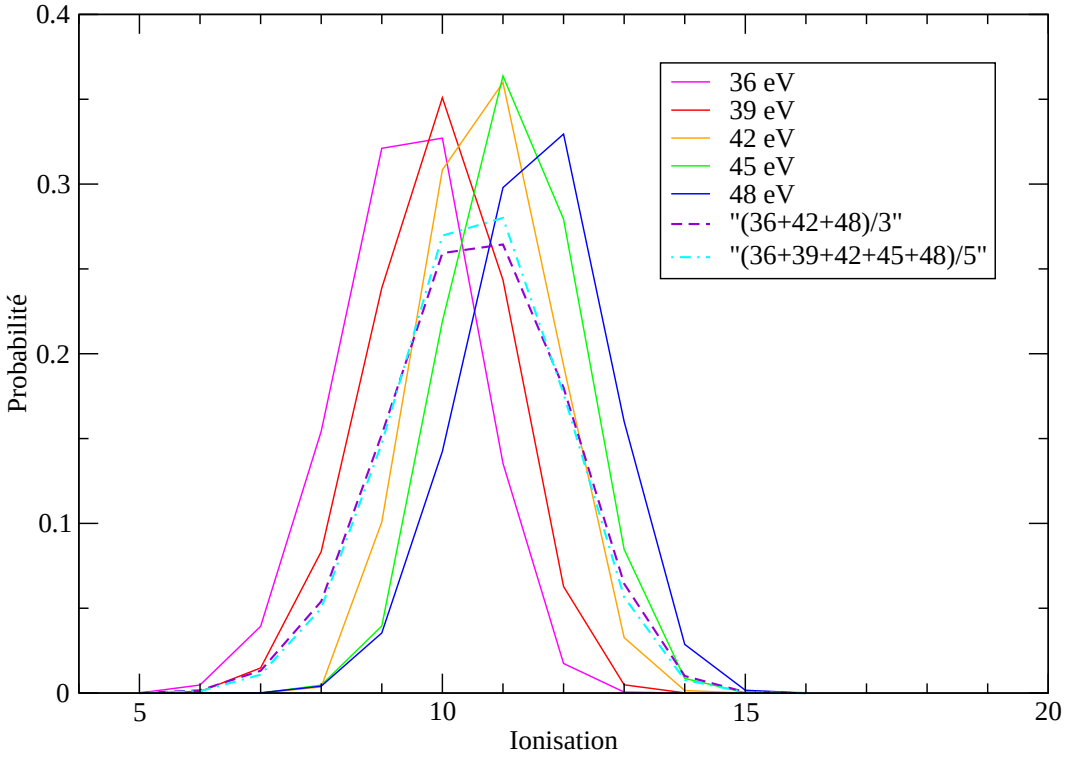


FIGURE 9.8 – Répartition des états de charge aux cinq températures, et dans les deux calculs de gradients effectués.

semble beaucoup plus large que ce que tous les codes d'opacité prévoient, ce qui nous amène à conclure qu'il y a un gradient de température de moyenne proche de 42 eV avec une extension de l'ordre de 6 eV de chaque côté.

9.2.3 Niobium de Perry

Le spectre de niobium issu de l'expérience de Perry est un spectre dont une assez bonne interprétation a déjà été donnée par le code STA [109]. C'est un exemple de spectre qui, au contraire du précédent, est bien interprété par les approches statistiques [109]. Le protocole expérimental est assez différent, puisque la transmission est obtenue par comparaison de deux intensités transmises dans deux directions perpendiculaires. Placé dans un hohlraum, l'échantillon est entouré uniformément d'une couche de matière plastique dite CH, ce qui permet d'y conserver une certaine uniformité en évitant des chocs trop forts à l'intérieur.

Nous avons essayé de le réinterpréter à l'aide de SCORCG, pour savoir si les accidents constatés dans la partie $2p - n\ell'$, $\ell' = s, d$ du spectre correspondent à des structures d'absorption détaillées. Interprété à une température de 47 eV et une densité de 17 mg/cm^3, le spectre de niobium présente une couche M presque totalement remplie lors d'un calcul à l'atome moyen, d'où des faisceaux $2p - 3d$ très fortement séparés par le spin-orbite de l'orbitale $2p$ et concentrés en une seule énergie, ce qui explique l'apparence très piquée et relativement faible de ces faisceaux. Quant aux faisceaux $2p - n\ell'$, ils présentent des structures plus complexes et, à la masse surfacique de $1,5.10^{-4}$ g/cm^2, ont une transmission spectrale proche de $1/2$, ce qui permet les mesures les plus fiables [54].

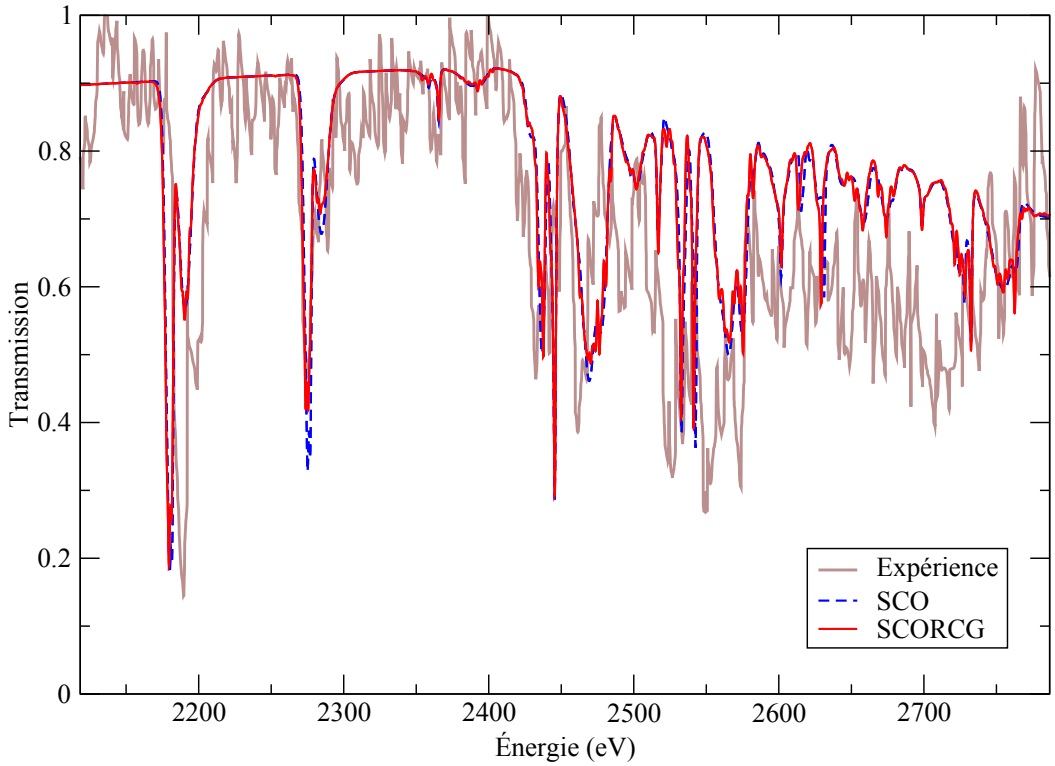


FIGURE 9.9 – Comparaison du niobium issu de l'expérience de Perry avec un calcul SCORCG à 47 eV, 17 mg/cm^3 et avec une masse surfacique de 150μg/cm^2.

Cependant, malgré la relaxation des transitions, Fig. 9.9 montre que les structures d'absorption lié-lié correspondent mal, sur le spectre, entre calcul théorique et résultat expérimental. De plus, le calcul SCORCG semble surévaluer la transmission, autrement dit sous-évaluer la masse surfacique. Cet effet est dû à la présence d'aluminium entourant l'échantillon de niobium dans l'expérience, ainsi qu'au protocole de mesure de transmission [109]. Dans cette partie du spectre, l'opacité de l'aluminium est continue, la zone d'excitation de la couche K de l'aluminium se trouvant en-dessous de 2 keV. C'est sur la transition $2p_{3/2} - 3d_{5/2}$ que la différence est la plus flagrante, avec un décalage de près de 10 eV : le minimum est à 2188 eV pour le spectre expérimental, 2179 eV pour le spectre théorique. Moins visible mais au moins aussi important, le décalage des structures d'absorption $2p - nd$ est très variable, de moins de 5 eV pour les transitions les plus rouges de $2p - 4d$ vers 2400 eV à plus de 20 eV pour les transitions les plus bleues vers 2700 eV. Ces décalages sont inversés par rapport aux sous-faisceaux $2p_{3/2} - 3d_{5/2}$. Seuls les sous-faisceaux $2p_{1/2} - 3d_{3/2}$, concentrés autour de 2275 eV, sont à des énergies spectrales quasiment identiques dans le spectre expérimental et le spectre théorique.

Ce fait nous incite donc à tenter une réinterprétation du spectre expérimental en appliquant une transformation affine à l'énergie spectrale :

$$h\nu \mapsto h\nu^\circ + k\ (h\nu - h\nu^\circ)\,. \tag{9.14}$$

$h\nu^\circ$ est le point fixe de la transformation, et est compris dans notre réinterprétation entre 2250 eV et 2400 eV, et k est un coefficient compris entre 0,9 et 1. Les sous-faisceaux de la transition $2p - 3d$ ont même position dans le spectre Fig. 9.10 pour $h\nu^\circ \simeq 2280$ eV et $k \simeq 0,92$. Cependant, les structures d'absorption des transitions $2p - n\ell'$ sont trop décalées vers le rouge pour ces valeurs de k et $h\nu^\circ$. Cette correspondance est fortement améliorée pour les transitions $2p - n\ell'$ si le jeu de valeurs est légèrement modifié. C'est

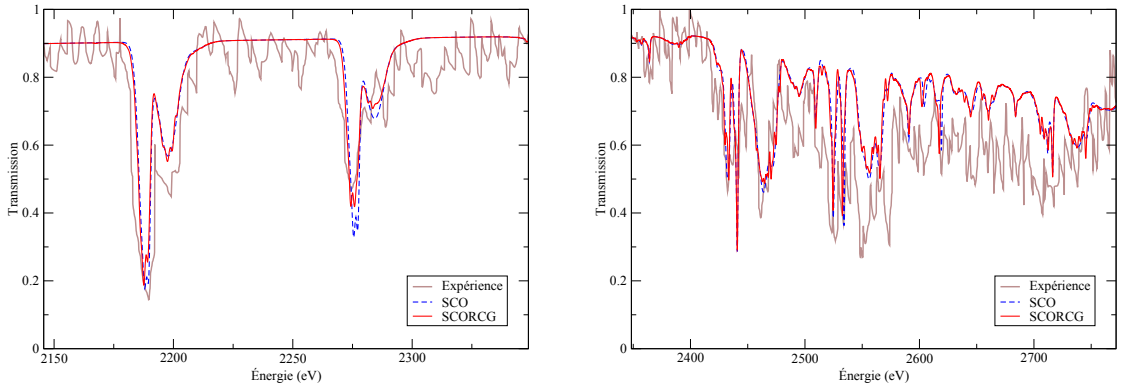


FIGURE 9.10 – Comparaison du spectre expérimental de niobium obtenu par Perry [109] avec des spectres théoriques pour lesquels l'énergie spectrale a été légèrement transformée. $k = 0,92, h\nu^\circ = 2280$ eV à gauche ; $k = 0,96, h\nu^\circ = 2360$ eV à droite.

le cas pour le spectre transformé avec $h\nu^\circ \simeq 2380$ eV et $k = 0,95$. Cette étude pourrait être menée sur d'autres spectres, toutefois l'effet est particulièrement important sur ce spectre expérimental, et a déjà été observé avec SCO [27].

Après correction des décalages par transformation du spectre théorique, des structures du spectre expérimental se retrouvent dans le spectre hybride, mais pas dans le spectre statistique, en particulier aux alentours de 2450 eV.

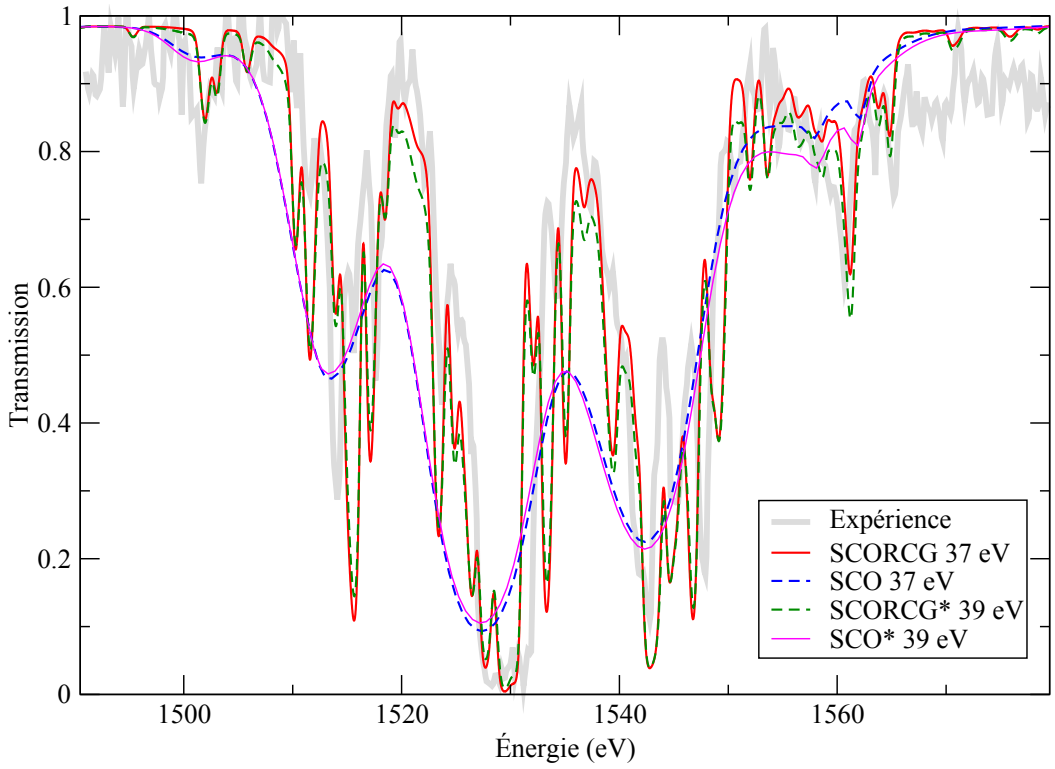


FIGURE 9.11 – Spectres en transmission de l'aluminium, avec l'expérience de Davidson, un calcul SCO et un calcul hybride à 37 eV et 10^{-2} mg/cm^3, avec une masse surfacique de 54 μg/cm^2. Les légendes avec astérisque indiquent des calculs sans prise en compte des effets de densité (interaction avec les électrons libres, cf Sec. 6.3.2).

9.3 Spectres présentant des effets de structure fine

L'intérêt de SCORCG réside dans la possibilité qu'il offre de pouvoir détailler des faisceaux de transition, permettant de mettre en évidence des structures liées à la forme de faisceaux résolus. Trois spectres expérimentaux en particulier sont bien mieux interprétés en calcul détaillé qu'en calcul statistique. Il s'agit de deux spectres d'aluminium [80, 110] à température modérée et d'un spectre de fer [56] à température élevée.

9.3.1 Aluminium sur HELEN

L'expérience de Davidson [80] sur l'installation laser HELEN a permis l'obtention d'un spectre en transmission dans la zone d'excitation de la couche K de l'aluminium, aux alentours de 1600 eV. Relativement bien interprété par les outils statistiques, le spectre expérimental présente de nombreuses structures, comme si des faisceaux étaient résolus. Comprise entre 1460 et 1600 eV, la région spectrale correspondant à l'excitation $1s - 2p$ est très riche en structures détaillées. De plus, l'interprétation à l'aide d'un code détaillé ou hybride est facilitée par une structure électronique simple, qui fait intervenir principalement les électrons de la couche $2p$. C'est ici le caractère automatique de SCORCG qui le rend très performant pour calculer en ligne l'opacité détaillée de l'aluminium.

Le spectre a été interprété à 40 eV [80]. Cette température a cependant été établie en négligeant l'interaction avec les électrons libres. En prenant en compte ces effets de den-

sité, loin d'être négligeables dans un plasma dont la densité est voisine de 10^{-2} g/cm^3, on voit Fig. 9.11 que la température de meilleure correspondance théorie/expérience est de 37 eV.

Les spectres hybride et expérimental ont une propriété remarquable : leurs zones de grande absorption sont bien plus séparées que celles du spectre statistique. Cet effet saisissant trouve son origine dans une caractéristique assez flagrante des faisceaux de transition de l'aluminium à 40 eV que nous avons observée Fig. 8.3 : ils sont plutôt platykurtiques. Autrement dit, les raies de la plupart des faisceaux se répartissent à l'intérieur d'un intervalle spectral bien délimité, et à l'extérieur de cet intervalle les raies sont rares et très faibles.

L'effet des faisceaux platykurtiques peut être correctement géré pour un élément léger comme l'aluminium en effectuant un maximum de calculs DLA. Mais pour des éléments de Z intermédiaire à la structure atomique plus complexe, ce calcul peut devenir très fastidieux voire ingérable. Cependant, si l'on sait calculer les moments d'ordre 3 et 4 des faisceaux de transition par des formalismes statistiques, la distribution de Pearson I, qui peut modéliser à l'ordre 4 les faisceaux platykurtiques, pourrait améliorer la modélisation statistique des faisceaux de transition dont le calcul détaillé est trop complexe.

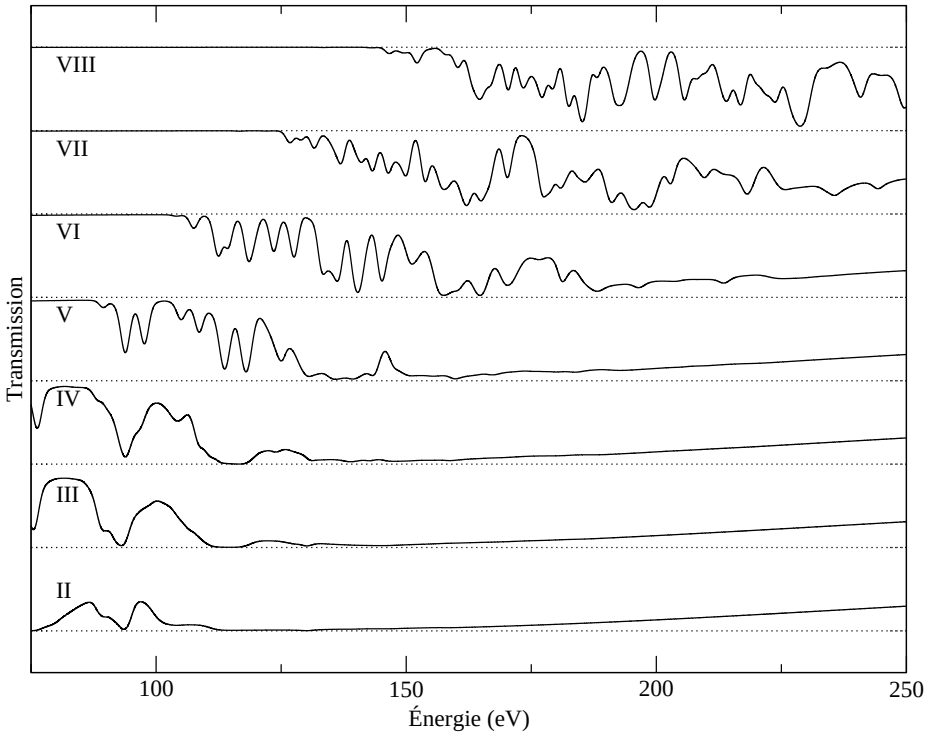


FIGURE 9.12 – Transmission des états de charge calculée sans pondération par la probabilité.

9.3.2 Aluminium sur le laser ASTERIX IV

L'expérience de WINHART et EIDMANN [110, 111] sur le laser ASTERIX IV[6] a produit un spectre en transmission dans la région d'excitation de la couche L de l'aluminium, aux alentours de 100 eV. Le laser a déposé 200 J en $0,4$ ns à une longueur d'onde de 400 nm. ntre 18 et 22 eV. L'expérience a été comparée à des spectres théoriques issus de calculs sur OPAL [112] puis SCO [27] à une température de 22 eV et une densité de 10 mg/cm^3.

Nous avons choisi de réinterpréter ce spectre avec SCORCG, car le spectre présente des structures d'absorption que les approches statistiques ne peuvent pas restituer. Dans nos calculs, la densité est de 10 mg/cm^3, mais la température varie e Étrangement, comme le montrent les spectres en transmission Fig. 9.13, le spectre théorique à une température de 20 eV s'accorde bien moins avec le spectre expérimental que les spectres calculés à 18 et 22 eV. Le meilleur accord est obtenu à une température de 22 eV.

La transmission par états de charge tracée Fig. 9.12 montre que c'est l'aluminium ionisé 4 fois (V sur le graphique) qui explique pour l'essentiel la forme des structures aux alentours de 96 eV et 116 eV. Largement dominant à 18 eV, l'état d'ionisation V est mis en minorité par l'ion VI, qui cependant présente deux structures autour de 116 eV qui renforcent celles issues de la contribution de l'état d'ionisation V. La transmission ion par ion révèle l'effet de l'ouverture de l'orbitale $2p$ à partir de l'ion V. Cette ouverture rend le spectre plus complexe, et décale la zone d'excitation vers le bleu, à cause de la disparition des électrons de l'orbitale $2p$ dont l'effet d'écran sur les autres électrons $2p$ est bien plus important que celui des électrons $3s$.

9.3.3 Fer sur machine Z

Un spectre de fer à haute température et d'excellente qualité a été produit à l'aide de la machine Z à Sandia National Laboratories [56]. Il présente des structures que seules des approches détaillées sont capables de restituer correctement. Le degré élevé d'ionisation du fer $Z^* \simeq 16$ fait que les configurations sont plus simples qu'à température plus basse : la couche $3d$ ne contient que des électrons excités.

Nous proposons, à la densité de $0,058$ g/cm^3, des interprétations à 150 eV, 155 eV et 160 eV La masse surfacique, pour tous les calculs en transmission, est de 20 μg/cm^2. SCORCG reproduit très bien Fig. 9.14 l'ensemble des structures d'absorption du spectre expérimental, mais à des températures variables selon la structure envisagée. Ainsi, l'absorption entre 11,2 et 12,2 Å est très bien reproduite à 150 eV, ainsi que celle entre 14,7 et 15, 4Å. Entre 13,4 et 14,3 Å, la transmission est mieux reproduite à 155 eV, tandis que la structure d'absorption autour de 13 Å est mieux reproduite à une température de 160 eV. Vers 14,5 Å, un trou en absorption est mieux reproduit à 160 eV, tandis que la structure autour de 12,5 Å n'est reproduite par aucun des calculs.

Néanmoins, une modification de la distribution ionique à 150 eV permet d'obtenir un accord bien meilleur avec l'expérience, ce que montre le spectre de Fig. 9.15.

[6] *Max-Planck-Institut für Quantenoptik*, Garching, Allemagne.

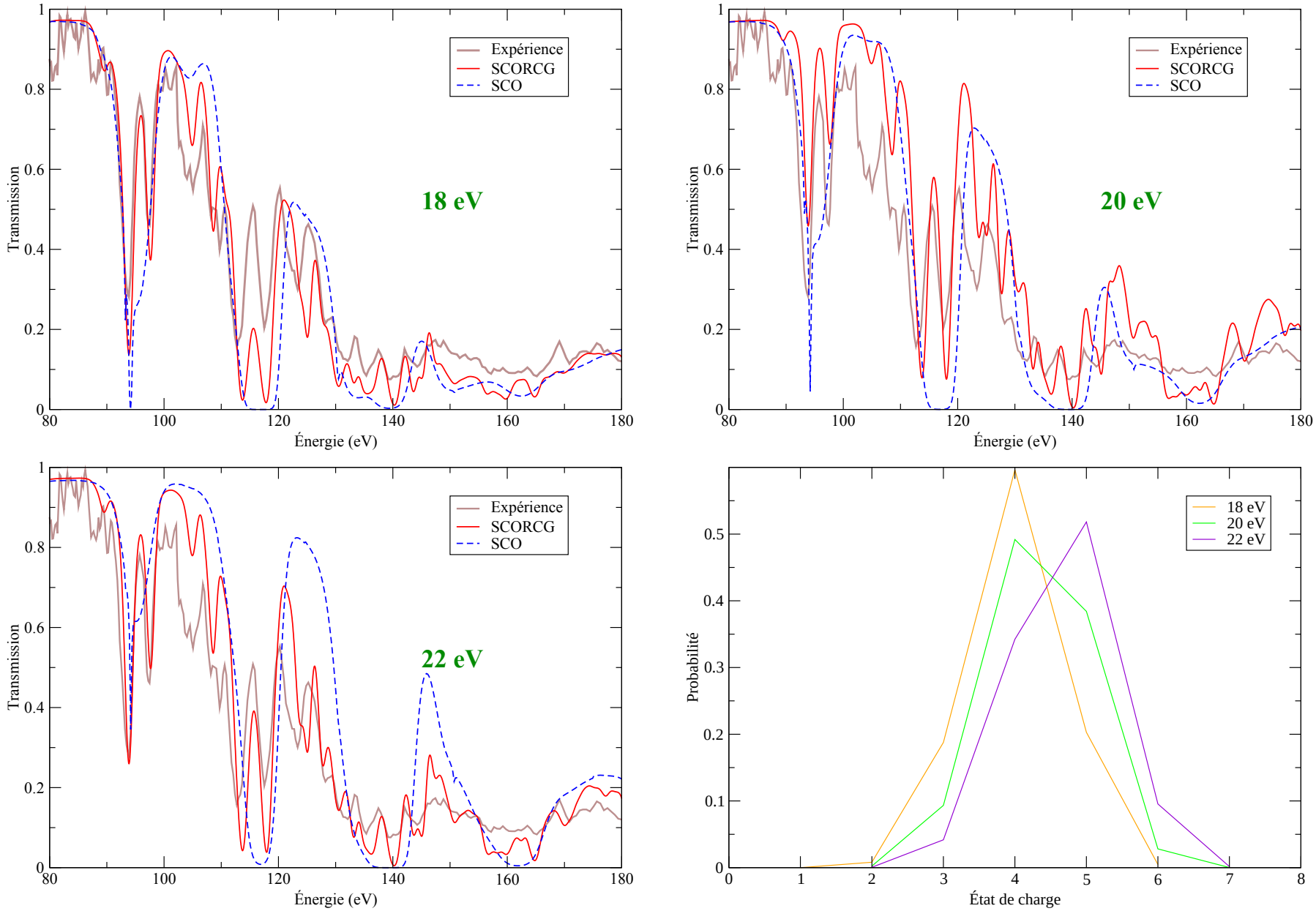


FIGURE 9.13 – Comparaison du spectre expérimental avec des spectres théoriques. Le diagramme en bas à droite représente la distribution ionique.

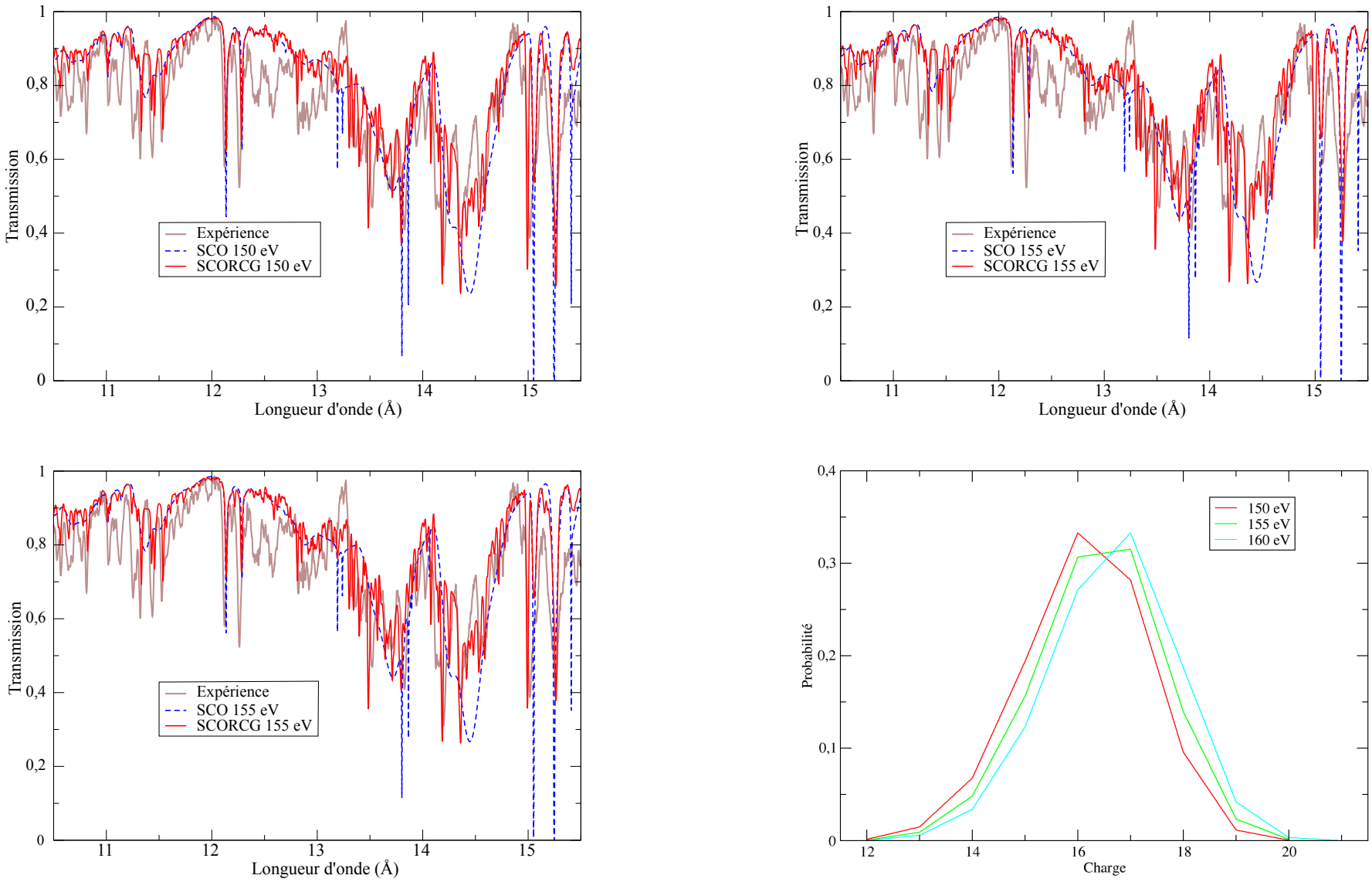


FIGURE 9.14 – Comparaison du spectre en transmission obtenu par l'équipe de J. BAILEY à Sandia [56] avec des calculs SCORCG à une densité de $0,058\ \mathrm{g/cm^3}$, et des températures de 150, 155 et 160 eV.

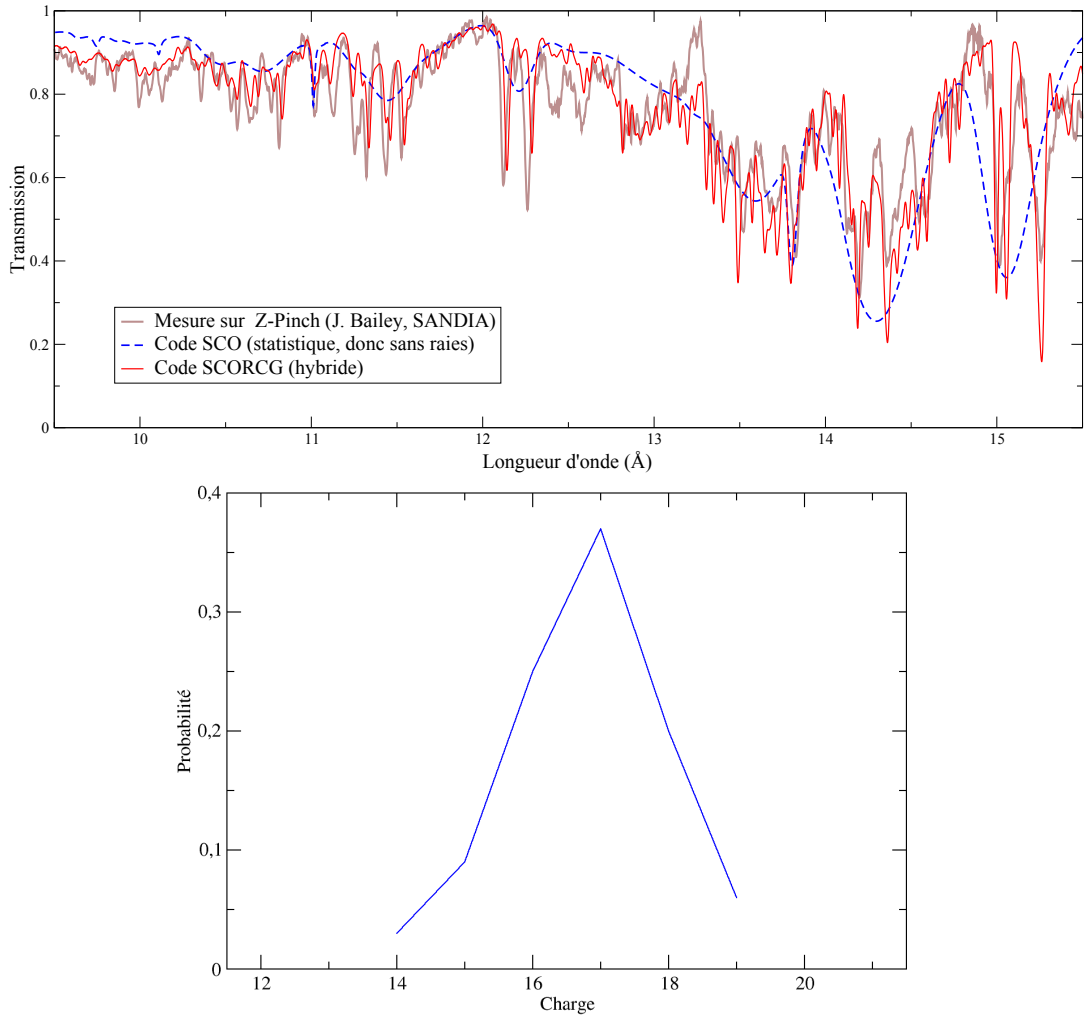


FIGURE 9.15 – Comparaison du spectre expérimental avec un calcul SCO ion par ion recombiné avec une distribution ionique légèrement modifiée.

CONCLUSION

Le but de cette thèse a été de développer une nouvelle approche du calcul des propriétés radiatives des plasmas chauds en tenant compte de l'environnement plasma. Le modèle que nous avons développé permet le calcul des spectres de photoabsorption en associant, au sein d'un même formalisme, méthodes détaillées et statistiques de spectres de raies dans le plasma à l'équilibre thermodynamique local. Après avoir démontré le bien-fondé théorique et la faisabilité pratique de ce modèle, nous l'avons mis en œuvre dans le code de calcul appelé SCORCG. Dans ce modèle, les fonctions d'onde utilisées pour le calcul de toutes les transitions, y compris détaillées, prennent en compte l'effet de l'environnement plasma.

Un des grands problèmes auxquels nous avons été confrontés pendant la thèse a été d'assurer la cohérence thermodynamique entre les objets traités avec des méthodes détaillées et ceux traités avec des méthodes statistiques. En effet, selon la finesse avec laquelle le plasma et les espèces qu'il contient sont décrits, les fonctions de partition des configurations sont altérées, tout comme les quantités qui en découlent comme les probabilités des espèces présentes dans le plasma. Un arbitrage a donc été nécessaire pour garantir un maximum de cohérence dans les calculs.

Une fois développé, notre modèle hybride a été utilisé, d'une part pour confrontation à des spectres expérimentaux déjà interprétés par d'autres approches du calcul d'opacité, d'autre part pour interprétation de spectres d'absorption obtenus par des équipes d'expérimentateurs avec lesquelles nous collaborons. Les spectres théoriques obtenus montrent un meilleur accord avec les résultats expérimentaux que les interprétations faites avec d'autres modèles qui n'effectuent que des calculs statistiques, et sont capables d'effectuer des calculs difficilement accessibles aux modèles entièrement détaillés. Par rapport aux approches détaillées, un des intérêts de l'approche hybride est d'apporter une vérification de la sélection des configurations pertinentes, et d'assurer une prise en charge de manière globale des faisceaux trop complexes pour être détaillés. Par rapport aux approches statistiques, le calcul hybride est capable de révéler l'existence de structures d'absorption que ces dernières ne peuvent pas décrire et, par exemple, d'étudier l'interaction de sous-configurations relativistes.

SCORCG est plus qu'un outil de calcul d'opacité à l'équilibre thermodynamique local assurant un passage progressif entre deux approches complémentaires. La nouveauté du problème abordé, en particulier la gestion de calculs détaillés massifs et du grand nombre de raies qui en est issu, fait de ce code un véritable « laboratoire numérique » pour vérifier la modélisation des spectres de plasmas complexes. Nous avons établi une condition suffisante de coalescence des faisceaux de transition dans le modèle d'élargissement de raies que nous avons utilisé ainsi que des formules d'estimation de leur complexité. L'amélioration des approches statistiques envisagée permettra de remédier au problème des différentes formes de faisceaux pas forcément bien restitués par des approches statistiques fondées sur le calcul de moyenne et de variance.

Cependant, notre modèle de calcul peut encore être amélioré sur plusieurs points. L'interaction des sous-configurations relativistes appartenant à une configuration non-relativiste est prise en compte, mais l'interaction générale de configurations n'est pas incluse. Cette dernière peut avoir un effet important sur l'opacité des plasmas, par exemple dans des applications astrophysiques. Une autre amélioration de la modélisation des faisceaux de transition serait de prendre en compte les moments d'ordre supérieur à 2 dans les approches statistiques, notamment l'asymétrie et le kurtosis. La

modélisation du spectre lié-libre reste pour l'instant statistique, mais peut être améliorée par des calculs en partie détaillés. La physique des profils de raie a été abordée partiellement dans la thèse. Nous faisons l'hypothèse que les profils de raies sont des fonctions de Voigt et identiques pour chaque raie d'un même faisceau de transition. L'effet des profils de raies sur des spectres non-résolus est souvent faible, et des approches très simplifiées de calcul de l'élargissmeent des raies donnent des résultats satisfaisants. Cependant, dans le cas de spectres très résolus, la modélisation des profils de raies nécessite des formules plus élaborées que les celles utilisées pour l'instant dans SCORCG.

BIBLIOGRAPHIE

[1] A. DEVDARIANI, E. DALIMIER, et P. SAUVAN, *International Journal of Spectroscopy* **2010**, 812471 (2010).

[2] V. E. FORTOV, *Extreme States of Matter : on Earth and in the Cosmos*, FizMathLit, 2008.

[3] R. KIPPENHAHN et A. WEIGERT, *Stellar structure and evolution*, Astronomy and astrophysics library, Springer-Verlag, 1994.

[4] A. WEISS, The Life of a Star, Notes on lectures, 1997.

[5] Y. ZEL'DOVICH et Y. RAIZER, *Physics of Schock Waves and High Temperature Hydrodynamic Phenomena*, Academic, New York, 1966.

[6] S. ICHIMARU, *Reviews of Modern Physics* **54**, 1017 (1982).

[7] D. SALZMANN, *Atomic Physics in Hot Plasmas*, Oxford University Press (New York), 1998.

[8] R. D. COWAN, *The Theory of Atomic Structure and Spectra*, The Regents of the University of California, 1981.

[9] G. FAUSSURIER, *Traitement statistique des propriétés spectrales à l'équilibre thermodynamique local dans le cadre du modèle hydrogénique écranté*, Thèse de doctorat, École Polytechnique, 1996.

[10] B. F. ROZSNYAI, *Physical Review A* **5**, 1137 (1972).

[11] T. BLENSKI et B. CICHOCKI, *Physical Review E* **75**, 056402 (2007).

[12] R. PIRON et T. BLENSKI, *Physical Review E* **83**, 026403 (2011).

[13] T. BLENSKI, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **99**, 84 (2006).

[14] J.-C. PAIN, *Sur la physique atomique des ions dans les plasmas en présence de l'écrantage*, Thèse de doctorat, Université de Paris-Sud XI Orsay, 2002.

[15] O. PEYRUSSE, Quelques éléments pour le calcul des opacités de Z faibles à modérés.

[16] B. F. ROZSNYAI, *Physical Review A* **43**, 3035 (1991).

[17] S. ROSSELAND, *Monthly Notices of Royal Astronomical Society* **84**, 525 (1924).

[18] P. GOLDREICH et D. A. KEELEY, *Astrophysical Journal* **212**, 243 (1977).

[19] A. S. BRUN, S. TURCK-CHIÈZE, et J. P. ZAHN, *The Astrophysical Journal* **525**, 1032 (1999).

[20] S. TURCK-CHIÈZE, S. COUVIDAT, et L. PIAU, *EAS Publications Series* **17**, 149 (2005).

[21] A. EDDINGTON, *The Observatory* **40**, 290 (1917).

[22] E. CONDON et G. A. SHORTLEY, *The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge University Press, 1935.

[23] I. I. SOBELMAN, *Introduction to the theory of atomic spectra*, New York : Pergamon, 1972.

[24] J.-L. BASDEVANT et J. DALIBARD, *Mécanique quantique*, Les Éditions de l'École Polytechnique, 2000.

[25] H. HOPF, *Annals of Mathematics* **42**, 22 (1941).

[26] C. KASSEL, *Christian Kassel : Quantum Groups (Graduate Texts in Mathematics).*, Springer-Verlag, 1998.

[27] F. PERROT, T. BLENSKI, et A. GRIMALDI, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **58**, 845 (1997).

[28] H. IYETOMI et S. ICHIMARU, *Physical Review A* **34**, 433 (1986).

[29] G. RACAH, *Physical Review* **61**, 186 (1942).

[30] G. RACAH, *Physical Review* **62**, 438 (1942).

[31] R. XU et Z. DAI, *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics* **39**, 3221 (2006).

[32] F. GILLERON et J.-C. PAIN, *High Energy Density Physics* **5**, 320 (2009).

[33] A. BAR-SHALOM, M. KLAPISCH, et J. OREG, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **71**, 169 (2001).

[34] M. F. GU, *Canadian Journal of Physics* **86**, 675 (2008).

[35] M. KLAPISCH, *The Parametric Potential, a Method for the Computation of Atomic Wavefunctions*, Thèse de doctorat, Université Paris XI Orsay, 1969.

[36] M. KLAPISCH, *Computer Physics Communications* **2**, 239 (1971).

[37] F. J. ROGERS, B. G. WILSON, et C. A. IGLESIAS, *Physical Review A* **38**, 5007 (1988).

[38] S. MABONG, G. MAYNARD, et K. KATSONIS, *Laser and Particle Beams* **14**, 575 (1996).

[39] S. MABONG, *Détermination d'un potentiel paramétrique type OPAL d'ions lourds multichargés. Application à la fusion inertielle*, Thèse de doctorat, Université Paris XI Orsay, 1996.

[40] J. C. SLATER, *Physical Review* **36**, 57 (1930).

[41] E. CLEMENTI et D. L. RAIMONDI, *Journal of Chemistry and Physics* **38**, 2686 (1963).

[42] T. BLENSKI, A. GRIMALDI, et F. PERROT, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **65**, 91 (2000).

[43] T. BLENSKI, A. GRIMALDI, et F. PERROT, *Un programme de calcul d'opacité par la méthode des superconfigurations*, Commissariat à l'énergie atomique, 1995.

[44] V. M. KLECHKOVSKI, *Soviet Physics - JETP* **14**, 334 (1962).

[45] P. ZEEMAN, *Nature* **55 (1424)**, 347 (1897).

[46] P. ZEEMAN, *Philosophical Magazine* **43**, 226 (1897).

[47] P. ZEEMAN, *Philosophical Magazine* **44**, 55 (1897).

[48] R. D. COWAN, *Programs RCN Mod 36 / RCN2 (Mod 36)*, Los Alamos National Laboratory, 1993.

[49] R. D. COWAN, *Program RCG Mod 11 : calculation of atomic energy levels and spectra*, Los Alamos National Laboratory, 1993.

[50] J. I. LANGFORD, *Journal of Applied Cristallography* **11**, 10 (1978).

[51] V. N. F. (trad. D. P. GROSSMAN), *Uspekhi Matematicheskikh Nauk* **7 :1 (47)**, 211 (1952).

[52] C. A. IGLESIAS, V. SONNAD, B. G. WILSON, et J. I. CASTOR, *High Energy Density Physics* **5**, 97 (2009).

[53] F. JIN et J. YUAN, *Physical Review E* **72**, 016404 (2005).

[54] G. LOISEL, P. ARNAULT, S. BASTIANI-CECCOTTI, T. BLENSKI, T. CAILLAUD, J. FARIAUT, W. FÖLSNER, F. GILLERON, J.-C. PAIN, M. POIRIER, C. REVERDIN, V. SILVERT, F. THAIS, S. TURCK-CHIÈZE, et B. VILLETTE, *High Energy Density Physics* **5**, 173 (2009).

[55] T. BLENSKI, G. LOISEL, M. POIRIER, F. THAIS, P. ARNAULT, T. CAILLAUD, J. FARIAUT, F. GILLERON, J.-C. PAIN, Q. PORCHEROT, C. REVERDIN, V. SILVERT, B. VILLETTE, S. BASTIANI-CECCOTTI, S. TURCK-CHIÈZE, W. FOELSNER, et F. DE GAUFRIDY DE DORTAN, *High Energy Density Physics* **7**, 320 (2011).

[56] J. E. BAILEY, G. A. ROCHEAU, C. A. IGLESIAS, J. ABDALLAH, J. J. MACFARLANE, I. GOLOVKIN, P. WANG, R. C. MANCINI, P. W. LAKE, T. C. MOORE, M. BUMP, O. GARCIA, et S. MAZEVET, *Physical Review Letters* **99**, 265002(4) (2007).

[57] L. H. THOMAS, *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* **23**, 542 (1927).

[58] R. P. FEYNMAN, N. METROPOLIS, et E. TELLER, *Physical Review* **75**, 1561 (1949).

[59] R. M. MORE, K. H. WARREN, D. A. YOUNG, et G. B. ZIMMERMAN, *Physics of Fluids* **31**, 3059 (1988).

[60] R. M. MORE, *Advances in Atomic and Molecular Physics* **21**, 305 (1985).

[61] Q. PORCHEROT, G.FAUSSURIER, et C. BLANCARD, *High Energy Density Physics* **6**, 76 (2010).

[62] C. BAUCHE-ARNOULT, J. BAUCHE, et M. KLAPISCH, *Physical Review A* **20**, 2424 (1979).

[63] C. BAUCHE-ARNOULT, J. BAUCHE, et M. KLAPISCH, *Physical Review A* **25**, 2641 (1982).

[64] R. KARAZIJA, *Sums of Atomic Quantities and Mean Characteristics of Spectra (en russe)*, 1991.

[65] R. KARAZIJA, *Lithuanian Journal of Physics* **35**, 155 (1995).

[66] C. BAUCHE-ARNOULT, J. BAUCHE, et M. KLAPISCH, *Physical Review A* **31**, 2248 (1985).

[67] A. BAR-SHALOM, J. OREG, W. H. GOLDSTEIN, D. SHVARTS, et A. ZIGLER, *Physical Review A* **40**, 3183 (1989).

[68] A. BAR-SHALOM, J. OREG, et M. KLAPISCH, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **58**, 427 (1997).

[69] O. PEYRUSSE, *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics* **33**, 4303 (2000).

[70] O. PEYRUSSE, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **71**, 571 (2001).

[71] F. GILLERON et J.-C. PAIN, *Physical Review E* **69**, 056117 (2004).

[72] J. OREG, A. BAR-SHALOM, et M. KLAPISCH, *Physical Review E* **55**, 5875 (1997).

[73] F. JIN, T. HUANG, Y. DING, Z. ZHENG, et J. YUAN, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **111**, 78 (2010).

[74] M. S. DIMITRIJEVIĆ et N. KONJEVIĆ, *Astronomy and Astrophysics* **172**, 345 (1987).

[75] B. ROZSNYAI, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **17**, 77 (1977).

[76] S. B. HANSEN, J. BAUCHE, C. BAUCHE-ARNOULT, et M. F. GU, *High Energy Density Physics* **3**, 109 (2007).

[77] J. L. W. V. JENSEN, *Nyt Tideskrift for Mathematik* **16B**, 49 (1905).

[78] J. L. W. V. JENSEN, *Acta Mathematica* **30**, 175 (1906).

[79] S. MAZEVET et J. ABDALLAH, *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics* **39**, 3419 (2006).

[80] S. J. DAVIDSON, J. M. FOSTER, C. C. SMITH, K. A. WABURTON, et S. J. ROSE, *Applied Physics Letters* **52**, 847 (1987).

[81] J. M. FOSTER, D. J. HOARTY, C. C. SMITH, P. A. ROSEN, S. J. DAVIDSON, S. J. ROSE, T. S. PERRY, et F. J. D. SERDUKE, *Physical Review Letters* **67**, 3255 (1991).

[82] D. HOARTY, C. BENTLEY, B. CROWLEY, S. DAVIDSON, S. GALES, P. GRAHAM, J. HARRIS, C. IGLESIAS, S. JAMES, et C. SMITH, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **99**, 283 (2006).

[83] B. TALIN, A. CALISTI, L. GODBERT, R. STAMM, et R. W. LEE, *Physical Review A* **51**, 1918 (1995).

[84] A. CALISTI, F. KHELFAOUI, R. STAMM, B. TALIN, et R. W. LEE, *Physical Review A* **42**, 5433 (1990).

[85] A. CALISTI, S. FERRI, et C. MOSSÉ, *Journal de Physique IV France* **138**, 95 (2006).

[86] J. BAUCHE et C. BAUCHE-ARNOULT, *Journal of Physics B : Atomic and Molecular Physics* **20**, 1659 (1987).

[87] J. BAUCHE et P. COSSÉ, *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics* **28**, 1411 (1997).

[88] G. RACAH, *Physical Review* **63**, 367 (1943).

[89] G. RACAH, *Physical Review* **69**, 1352 (1949).

[90] W. H. PRESS, S. A. TEUKOLSKY, W. T. WETTERLING, et B. P. FLANNERY, *Fortran Numerial Recipes*, Cambridge University Press, 1992.

[91] J. ABDALLAH, D. KILCREASE, N. MAGEE, S. MAZEVET, P. HAKEL, et M. SHERRILL, *High Energy Density Physics* **3**, 309 (2007).

[92] M. KLAPISCH et M. BUSQUET, *High Energy Density Physics* **5**, 105 (2009).

[93] M. KLAPISCH et M. BUSQUET, *High Energy Density Physics* **7**, 98 (2011).

[94] J. A. GAFFNEY et S. J. ROSE, *High Energy Density Physics* **7**, 240 (2011).

[95] C. E. PORTER et R. G. THOMAS, *Physical Review* **104**, 483 (1956).

[96] J. BAUCHE, C. BAUCHE-ARNOULT, J.-F. WYART, P. DUFFY, et M. KLAPISCH, *Physical Review A* **44**, 5707 (1991).

[97] M. G. KENDALL et A. STUART, *Advanced Theory of Statistics*, volume 1, Hafner, 69.

[98] S. B. HANSEN, J. BAUCHE, et C. BAUCHE-ARNOULT, *High Energy Density Physics* **7**, 1574 (2011).

[99] F. GILLERON, J.-C. PAIN, Q. PORCHEROT, J. BAUCHE, et C. BAUCHE-ARNOULT, *High Energy Density Physics* **7**, 277 (2011).

[100] C. A. IGLESIAS, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **99**, 295 (2006).

[101] J. FILEVICH, J. J. ROCCA, E. JANKOWSKA, E. C. HAMMARSTEN, K. KANIZAY, M. C. MARCONI, S. J. MOON, et V. N. SLYAPTSEV, *Physical Review E* **67**, 056409(6) (2003).

[102] J. E. BAILEY, P. ARNAULT, T. BLENSKI, G. DEJONGHE, O. PEYRUSSE, J. J. MACFARLANE, R. C. MANCINI, M. E. CUNEO, D. S. NIELSEN, et G. A. ROCHAU, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **81**, 31 (2003).

[103] Q. PORCHEROT, J.-C. PAIN, F. GILLERON, et T. BLENSKI, *High Energy Density Physics* **7**, 234 (2011).

[104] D. GILLES, S. TURCK-CHIÈZE, G. LOISEL, L. PIAU, J.-E. DUCRET, M. POIRIER, T. BLENSKI, F. THAIS, C. BLANCARD, P. COSSÉ, G. FAUSSURIER, F. GILLERON, J.-C. PAIN, Q. PORCHEROT, J. GUZIK, D. KILCREASE, N. MAGEE, J. HARRIS, M. BUSQUET, F. DELAHAYE, C. J. ZEIPPEN, et S. BASTIANI-CECCOTTI, *High Energy Density Physics* **7**, 312 (2011).

[105] S. TURCK-CHIÈZE, G. LOISEL, D. GILLES, L. PIAU, C. BLANCARD, T. BLENSKI, M. BUSQUET, T. CAILLAUD, P. COSSÉ, F. DELAHAYE, G. FAUSSURIER, J. FARIAUT, F. GILLERON, J. GUZIK, J. HARRIS, D. KILCREASE, N. MAGEE, J.-C. PAIN, Q. PORCHEROT, M. POIRIER, G. SOULLIER, C. ZEIPPEN, S. BASTIANI-CECCOTTI, C. REVERDIN, V. SILVERT, F. THAIS, et B. VILLETTE, *Astrophysics and Space Science* **336**, 103 (2011).

[106] A. BAR-SHALOM, J. OREG, et W. H. GOLDSTEIN, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **51**, 27 (1994).

[107] A. BAR-SHALOM, J. OREG, M. KLAPISCH, et T. LEHECKA, *Physical Review E* **59**, 3512 (1999).

[108] F. GILLERON, J. BAUCHE, et C. BAUCHE-ARNOULT, *Journal of Physics B : Atomic and Molecular Physics* **40**, 3057 (2007).

[109] T. S. PERRY, P. T. SPRINGER, D. F. FIELDS, D. R. BACH, F. J. D. SERDUKE, C. A. IGLESIAS, F. J. ROGERS, J. K. NASH, M. H. CHEN, B. G. WILSON, W. H. GOLDSTEIN, B. ROZSNYAI, R. A. WARD, J. D. KILKENNY, R. DOYAS, L. B. DA SILVA, C. A. BACK, et R. CAUBLE, *Physical Review E* **54**, 5617 (1996).

[110] K. EIDMANN, A. BAR-SHALOM, SAEMANN, et G. WINHART, *Europhysics Letters* **44**, 459 (1998).

[111] G. WINHART, K. EIDMANN, C. A. IGLESIAS, et A. BAR-SHALOM, *Physical Review E* **53**, R1132 (1996).

[112] F. J. ROGERS, F. J. SWENSON, et C. A. IGLESIAS, *Astrophysical Journal* **456**, 902 (1996).

[113] M. S. DIMITRIJEVIĆ et N. KONJEVIĆ, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **24**, 451 (1980).

[114] M. S. DIMITRIJEVIĆ et N. KONJEVIĆ, *Astronomy and Astrophysics* **163**, 297 (1986).

[115] J. J. OLIVERO et R. L. LONGBOTHUM, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **17**, 233 (1977).

[116] H. WANG et J. ZHOU, *Journal of Applied Cristallography* **38**, 830 (2005).

[117] J.-C. PAIN, F. GILLERON, J. BAUCHE, et C. BAUCHE-ARNOULT, *High Energy Density Physics* **5**, 294 (2009).

[118] F. GILLERON, J.-C. PAIN, J. BAUCHE, et C. BAUCHE-ARNOULT, *Physical Review E* **77**, 026708 (2008).

ANNEXES



CHAMP DE RAYONNEMENT

L'objectif de cette annexe est de définir les concepts liés à la distribution et à la propagation du rayonnement dans les plasmas, ainsi qu'aux conventions utilisables dans la définition des coefficients d'Einstein.

Il existe dans tout plasma un rayonnement constitué de photons qui, chacun, sont caractérisés par :

- une longueur d'onde λ, fréquence $\nu = \frac{c}{\lambda}$, pulsation $\omega = 2\pi\nu$ ou énergie écrite $h\nu$ ou $\hbar\omega$ et exprimée en eV ; h est la constante de Planck et $\hbar$ la constante de Planck réduite ;
- une direction $\mathbf{u}$, vecteur unitaire ; l'ensemble des directions constitue la sphère-unité $\mathcal{S}_O(1)$, dont une partie est un *angle solide* ;
- une polarisation $\mathbf{v}$.

Dans la thèse, nous choisissons d'exprimer l'énergie spectrale en fonction de $h\nu$. Le rayonnement en tout point de l'espace $\mathbf{r}$ et à tout temps t est donc caractérisé par les paramètres suivants :

- la *direction de propagation* $\mathbf{u}$ (vecteur unitaire), direction dans laquelle ce rayonnement se propage ;
- l'énergie des photons $h\nu$;
- la polarisation du rayonnement.

Dans les plasmas que nous étudions, le rayonnement n'est pas supposé polarisé, ou plutôt toutes les directions de polarisation sont également représentées. La fonction de distribution de photons $f(\mathbf{r}, t; \mathbf{u}, h\nu)$ est alors fonction de la position, de l'instant, de la direction $\mathbf{u}$ et de l'énergie spectrale $h\nu$. Le nombre de photons $\mathrm{d}\mathcal{N}$ s'exprime alors avec les quantités infinitésimales que sont l'angle solide $\mathrm{d}^2\Omega$, la plage en énergie de photon ou *gamme spectrale* $(h\nu, h\nu + \mathrm{d}h\nu)$ et le volume $\mathrm{d}^3\mathbf{r}$:

$$\mathrm{d}\mathcal{N} = f_\nu(\mathbf{r}, t; \mathbf{u}, h\nu)\, \mathrm{d}h\nu\, \mathrm{d}^2\Omega\, \mathrm{d}^3\mathbf{r}. \tag{A.1}$$

Le produit de f_ν par l'énergie des photons donne la distribution en énergie radiative u_ν :

$$u_\nu(\mathbf{r}, t; \mathbf{u}, h\nu) = h\nu f(\mathbf{r}, t; \mathbf{u}, h\nu). \tag{A.2}$$

De cette distribution en énergie radiative peut être déduite, par somme sur toutes les directions, la *densité d'énergie radiative* U_ν :

$$U_\nu(\mathbf{r}, t; h\nu) = \frac{1}{4\pi} \int_{\mathcal{S}_O(1)} u_\nu(\mathbf{r}, t; \mathbf{u}, h\nu)\, \mathrm{d}\Omega. \tag{A.3}$$

La quantité d'énergie radiative dans la gamme spectrale $(h\nu, h\nu + \mathrm{d}h\nu)$ qui se propage dans l'angle solide $\mathrm{d}^2\Omega$ autour de la direction $\mathbf{u}$ à travers une petite surface $\mathrm{d}S$ perpendiculaire à $\mathbf{u}$ peut s'écrire

$$dE = I_\nu(\mathbf{r}, t; \mathbf{u}, h\nu)\, \mathrm{d}h\nu\, \mathrm{d}^2\Omega\, \mathrm{d}^2S. \tag{A.4}$$

$I_\nu(\mathbf{r}, t; \mathbf{u}, h\nu)$ est l'*intensité radiative spectrale* au point $\mathbf{r}$, à l'instant t et à la fréquence ν dans la direction $\mathbf{u}$. Chaque photon progressant à la vitesse de la lumière c, on a une relation entre l'intensité spectrale et la distribution de photons :

$$I_\nu(\mathbf{r}, t; \mathbf{u}, h\nu) = c\, u_\nu(\mathbf{r}, t; \mathbf{u}, h\nu). \tag{A.5}$$

En faisant la moyenne sur toutes les directions $\mathbf{u}$, on obtient l'*intensité moyenne* :

$$J_\nu(\mathbf{r}, t; h\nu) = \frac{1}{4\pi} \int_{\mathcal{S}_O(1)} I_\nu(\mathbf{r}, t; \mathbf{u}, h\nu)\, \mathrm{d}^2\Omega. \tag{A.6}$$

L'intensité radiative et la densité d'énergie spectrales peuvent être reliées par la formule suivante :

$$\int_{\mathcal{S}_O(1)} I_\nu(\mathbf{r}, t; \mathbf{u}, h\nu)\, \mathrm{d}^2\Omega = \frac{4\pi}{c} J_\nu = c\, U_\nu. \tag{A.7}$$

Reste le *flux radiatif spectral* $F_\nu(\mathbf{r}, t; \mathbf{u}, h\nu)$. Soit $\mathrm{d}F_\nu$ le flux d'énergie radiative par unité de fréquence traversant l'élément de surface $\mathrm{d}S$ en faisant un angle θ par rapport à la normale à $\mathrm{d}S$:

$$\mathrm{d}F_\nu = I_\nu \cos\theta\, \mathrm{d}^2\Omega, \tag{A.8}$$

le flux radiatif spectral s'obtient par intégration sur toutes les directions :

$$F_\nu(\mathbf{r}, t; h\nu) = \int I_\nu(\mathbf{r}, t; \mathbf{u}, h\nu) \cos\theta\, \mathrm{d}^2\Omega. \tag{A.9}$$

Une synthèse des définitions des grandeurs de rayonnement se trouve Tab. A.1. Les unités des différentes grandeurs sont indiquées. L'énergie radiative est en erg mais l'énergie spectrale est en eV. Les intensité, densité d'énergie et flux totaux sont obtenus par intégration des quantités spectrales sur les fréquences $h\nu$:

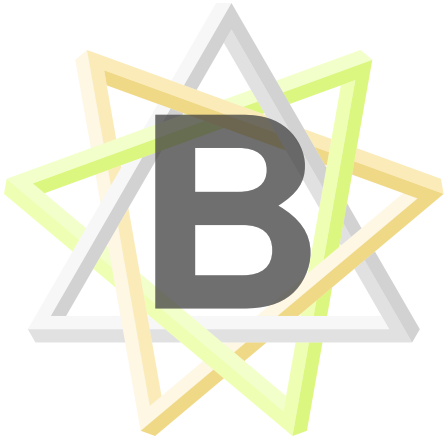
$$I = \int_\nu I_\nu\, \mathrm{d}\nu \tag{A.10a}$$

$$U = \int_\nu U_\nu\, \mathrm{d}\nu \tag{A.10b}$$

$$F = \int_\nu F_\nu\, \mathrm{d}\nu. \tag{A.10c}$$

Grandeur	Notation	Unité
Distribution des photons	$f(\mathbf{r}, t; \mathbf{u}, h\nu)$	$\mathrm{cm}^{-3}/\mathrm{eV}/\mathrm{sr}$
Distribution en énergie radiative	$u_\nu(\mathbf{r}, t; \mathbf{u}, h\nu)$	$\mathrm{eV}/\mathrm{cm}^3/\mathrm{eV}/\mathrm{sr}$
Densité d'énergie radiative	$U_\nu(\mathbf{r}, t; h\nu)$	$\mathrm{eV}/\mathrm{cm}^3/\mathrm{eV}$
Intensité radiative	$I_\nu(\mathbf{r}, t; \mathbf{u}, h\nu)$	$\mathrm{eV}/\mathrm{cm}^2/\mathrm{s}/\mathrm{eV}/\mathrm{sr}$
Intensité moyenne	$J_\nu(\mathbf{r}, t; h\nu)$	$\mathrm{erg}/\mathrm{cm}^2/\mathrm{s}/\mathrm{eV}$
Flux radiatif	$F_\nu(\mathbf{r}, t; \mathbf{u}, h\nu)$	$\mathrm{eV}/\mathrm{cm}^2/\mathrm{s}/\mathrm{eV}/\mathrm{sr}$

TABLE A.1 – Grandeurs caractérisant le champ de rayonnement. La fréquence, le nombre d'onde et quelquefois la pulsation ou la longueur d'onde remplacent l'énergie spectrale.



TRAITEMENT DES ÉLARGISSEMENTS

Cette annexe présente en détail le traitement des élargissements par SCORCG ainsi que le calcul des profils de raies. Nous envisageons une approximation du profil de Voigt par une distribution de Pearson VII.

B.1 Brève physique des élargissements

Dans un plasma chaud, quatre types de phénomènes physiques contribuent à l'élargissement des raies.

Le premier est la *largeur naturelle*, due au temps de vie des états excités. Notée w_n, c'est une largeur lorentzienne. Son expression pour une transition $\gamma J \rightarrow \gamma' J'$ est la demi-somme de tous les coefficients d'Einstein d'émission spontanée depuis γJ et $\gamma' J'$ [7] :

$$w_n = \frac{h}{2}\left[\sum_{m<\gamma J} A_{\gamma J \rightarrow m} + \sum_{m'<\gamma' J'} A_{\gamma' J' \rightarrow m'}\right]. \tag{B.1}$$

Dans les plasmas chauds, cette largeur est insignifiante, plusieurs ordres de grandeurs au-dessous de toutes les autres.

Le deuxième processus est l'effet Doppler engendré par les vitesses thermiques des électrons, dont la distribution à l'É. T. L. dans un plasma modérément dense est une maxwellienne. Noté w_d, c'est un élargissement gaussien. Son expression à l'É. T. L. pour une raie d'énergie $h\nu_0$ est assez simple :

$$w_d = h\nu_0\sqrt{\frac{2k_B T}{mc^2}}. \tag{B.2}$$

Cette expression reste vraie tant que les électrons ne sont pas relativistes, ce qui n'arrive pas dans le domaine d'étude.

Les autres processus sont dus aux collisions atomiques. La théorie des collisions atomiques est extrêmement complexe, et deux cas simples peuvent être envisagés, en

remarquant qu'à température équivalente, les électrons sont beaucoup plus rapides que les ions, car beaucoup plus légers.

1. Le cas où les collisions sont beaucoup plus rapides que le temps de vie des niveaux excités. Ces processus sont causés par l'impact des électrons libres, aussi on parle d'élargissement électronique collisionnel.

2. Le cas où les collisions sont beaucoup plus lentes que le temps de vie des niveaux excités. Ces processus sont causés par les ions voisins au déplacement lent, et on parle d'élargissement quasi-statique ou élargissement Stark.

Il est cependant possible d'aboutir à des formules exploitables par une description semi-classique des collisions élastiques, simplifiée à l'interaction entre l'atome et la particule perturbante supposée avoir une trajectoire droite [7]. Ainsi, la largeur due aux impacts électroniques est lorentzienne, et notée w_c. Ce raisonnement permet aussi d'établir que les impacts électroniques décalent légèrement l'énergie moyenne de la raie, mais nous n'en tiendrons pas compte dans la thèse. En première approximation, la largeur d'impact électronique a une propriété intéressante :

$$w_c \propto \frac{n_\mathrm{e}}{\sqrt{k_\mathrm{B} T}}. \tag{B.3}$$

En réalité, l'obtention de largeurs réalistes nécessite la prise en compte des contributions multipolaires, l'effet d'écran de l'environnement plasma et les collisions inélastiques, dominantes dans les plasmas chauds à l'É. T. L. où les probabilités des espèces sont principalement maintenues par l'ionisation et l'excitation par impact électronique. Ces phénomènes rendent complexe le calcul des largeurs collisionnelles.

Le profil Stark n'est en toute rigueur ni gaussien ni lorentzien. Le raisonnement semi-classique permet de déduire une expression des profils Stark qui reste très approximative et nécessite des corrections importantes, pour prendre en compte le fait que les trajectoires ne sont pas rectilignes, l'écrantage de Debye causé par les particules autour et l'effet des électrons lents. Cependant, aux conditions auxquelles nous travaillons, un calcul exact d'un profil Stark n'est pas pertinent, car les élargissements thermique ou collisionnel sont du même ordre ou plus importants. C'est pour ces raisons qu'un profil Stark gaussien n'est pas forcément inapproprié dans un calcul en ligne.

La détermination exacte des profils Stark et des largeurs collisionnelles est un sujet toujours d'actualité. Des outils comme le code PPP [84, 85] sont capables de calculer des profils Stark exacts, mais au prix d'une complexité peu compatible avec du calcul d'opacités. C'est pourquoi, pour le calcul de l'élargissement Stark, les formules rapides et approximatives sont toujours utilisées pour le calcul d'opacités en ligne, basées par exemple sur une approximation dipolaire des interactions avec les ions voisins [43, 75]. Dans cette approche, l'élargissement Stark w_i se décompose par rapport aux états initial et final :

$$w_\mathrm{i}^2 = w_{\mathrm{i},i}^2 + w_{\mathrm{i},f}^2, \tag{B.4}$$

et chaque composante est une somme de largeurs :

$$w_{\mathrm{i},s} = w_{\mathrm{i},s,\ell_s+1} + w_{\mathrm{i},s,\ell_s-1}, \quad s = i, f, \tag{B.5}$$

où ℓ_s est le nombre quantique secondaire de l'orbitale associée à s et

$$w_{\mathrm{i},s,\ell_s\pm1} = m\frac{\Delta\varepsilon_{\ell_s,\ell_s\pm1}}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{\left(\Delta\varepsilon_{\ell_s,\ell_s\pm1}\right)^2 + 4V^2_{\ell_s,\ell_s\pm1}}, \tag{B.6}$$

avec $\Delta\varepsilon_{\ell_s,\ell_s\pm1} = |\varepsilon_{n_s,\ell_s} - \varepsilon_{n_s,\ell_s\pm1}|$ la différence d'énergie entre l'état s et les états avec lesquels il interagit, et $V_{\ell_s,\ell_s\pm1}$ un potentiel perturbateur donné par [75] :

$$V_{\ell_s,\ell_s\pm1} = \frac{\left(Z^*\right)^2}{R^2}\, e^{-q_{TF}R}\, \frac{3}{\Gamma}\, D^2_{\ell_s,\ell_s\pm1}\, \frac{\ell_< + 1}{3\left(2\ell_< + 1\right)}. \tag{B.7}$$

On retrouve dans ce potentiel l'intégrale dipolaire électrique $D_{\ell_s,\ell_s\pm1}$ entre les deux orbitales concernées par l'interaction et Γ la constante de couplage ionique. $\ell_< = \min(\ell, \ell\pm1)$, R est le rayon ionique moyen R_i augmenté du rayon du cœur de l'atome (rayon moyen de la couche partiellement remplie), et q_{TF} est le vecteur d'onde de Thomas-Fermi [7].

L'élergissement causé par les collisions inélastiques peut être approché par la formule de Dimitrijević et Konjević [74, 113, 114], dont une version simple et numérique adaptée Réf. [15] nous donne la formule :

$$w_c = \frac{4\pi}{3}\,\frac{\hbar^3}{m^{3/2}}\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\sqrt{\frac{1}{k_\mathrm{B}T}}\left(0,9 - \frac{1,1}{Z}\right)\sum_{s\in\{i,f\}}\left(\frac{3n_s}{2Z}\right)^2\left(n_s^2 - \ell_s^2 - \ell_s - 1\right). \tag{B.8}$$

Le calcul d'élargissements précis n'est pas primordial en calcul d'opacité et sert surtout aux diagnostics de spectres expérimentaux [56, 102]. Cependant, des profils Stark non gaussiens peuvent avoir un impact significatif si les autres élargissements ne dominent pas le Stark. Nous avons constaté à l'usage de SCO et SCORCG que l'élargissement Stark est rarement dominant. Le calcul du profil des raies a un effet déterminant sur la moyenne de Rosseland de plasmas dont la densité est inférieure ou de l'ordre de 10^{-3} g/cm^3.

B.2 Approximation du profil de Voigt

Le profil de Voigt, dont le calcul est fastidieux et sujet à caution loin de l'énergie moyenne de la transition ($|h\nu - h\nu_{X\to X'}| \gg$ HWHM), peut être approché par des fonctions au calcul plus direct.

B.2.1 HWHM d'un profil de Voigt

Ces quantités ne sont pas toutes calculables analytiquement pour le profil de Voigt. Par exemple, la largeur à mi-hauteur d'un profil de Voigt ne peut être calculée exactement. Néanmoins, une formule analytique donne la mi-largeur à mi-hauteur $W_\mathcal{V}$ à 2 % près

[115] en fonction des largeurs définies Tab. 3.1 p. 58 :

$$W_{\mathcal{V}} \simeq \left(1 - \sqrt{K}\right) w_{\mathcal{L}} + \sqrt{2 \ln 2\, w_{\mathcal{G}}^2 + K\, w_{\mathcal{L}}^2} \tag{B.9a}$$

$$W_{\mathcal{V}} \simeq \left(1 - \sqrt{K}\right) W_{\mathcal{L}} + \sqrt{W_{\mathcal{G}}^2 + K\, W_{\mathcal{L}}^2} \tag{B.9b}$$

$$W_{\mathcal{V}} \simeq 0,5346\, W_{\mathcal{L}} + \sqrt{0,2166\, W_{\mathcal{L}}^2 + W_{\mathcal{G}}^2} \tag{B.9c}$$

$$W_{\mathcal{V}} \simeq 0,5346\, w_{\mathcal{L}} + \sqrt{0,2166\, w_{\mathcal{L}}^2 + 1,3863\, w_{\mathcal{G}}^2}, \tag{B.9d}$$

où

$$K = \frac{(\ln 2/\pi)^{1/4}}{\sqrt{10}} \simeq 0,2166. \tag{B.10}$$

Les valeurs numériques proviennent de [115].

Soit

$$k = \frac{w_{\mathcal{L}}}{w_{\mathcal{G}}\sqrt{2}} \tag{B.11}$$

le paramètre de forme du profil de Voigt. La valeur en 0 de la fonction de Voigt est

$$\mathcal{V}_k(0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\, w_{\mathcal{G}}}\, e^{k^2} \mathrm{erfc}(k), \tag{B.12}$$

où erfc est la fonction d'erreur complémentaire :

$$\mathrm{erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^{+\infty} e^{-t^2}\, \mathrm{d}t. \tag{B.13}$$

Comme le profil est normalisé, la largeur intégrale est égale à l'inverse de la valeur en 0 :

$$\beta_{\mathcal{V}} = \frac{\sqrt{2\pi}\, w_{\mathcal{G}}\, e^{-k^2}}{\mathrm{erfc}(k)} \tag{B.14}$$

Le facteur de forme de la distribution de Voigt s'écrit en fonction des paramètres gaussien et lorentzien :

$$\phi_{\mathcal{V}}(k) = \phi_{\mathcal{V}}(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\, \frac{W_{\mathcal{V}}}{w_{\mathcal{G}}}\, e^{k^2} \mathrm{erfc}(k), \tag{B.15}$$

avec $\frac{W_{\mathcal{V}}}{w_{\mathcal{G}}}$ qui peut être exprimée en fonction de k :

$$\frac{W_{\mathcal{V}}}{w_{\mathcal{G}}} \simeq \sqrt{2} \left[\sqrt{\ln 2 + K\, k^2} + \left(1 - \sqrt{K}\right) k \right]. \tag{B.16}$$

On peut remarquer qu'il est tout à fait possible, en utilisant les équations (B.11) et (B.16), de paramétrer la fonction de Voigt avec la HWHM $W_{\mathcal{V}}$ et le paramètre de profil k.

B.2.2 Utilisation de la distribution de Pearson VII

Produit de convolution d'une gaussienne et d'une lorentzienne, le profil de Voigt n'a pas d'expression analytique réelle. Sous forme intégrale, la fonction de Voigt, dépen-

dant des paramètres gaussien σ et lorentzien γ, s'écrit :

$$\mathcal{V}_{\sigma,\gamma}(x) = \mathcal{L}_\gamma * \mathcal{G}_\sigma(x) = \frac{\gamma}{\sigma\sqrt{2\pi^3}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\frac{t^2}{2\sigma^2}}}{\gamma^2 + (x-t)^2}\,\mathrm{d}t. \tag{B.17}$$

Cependant, il existe une expression analytique à l'aide de la fonction d'erreur complexe de Fadeeva :

$$\mathcal{V}_{\sigma,\gamma}(x) = \Re\left(\frac{\operatorname{erfc}\left(\frac{\gamma-ix}{\sigma\sqrt{2}}\right)\,\exp\left(\frac{(\gamma-ix)^2}{2\sigma^2}\right)}{\sigma\sqrt{2\pi}}\right). \tag{B.18}$$

Malgré cette formule analytique, le calcul numérique d'un profil de Voigt, intégrale impropre, reste complexe, même si l'algorithme de Ribicky permet d'atteindre une précision remarquable de l'ordre de 10^{-4}. De plus, calculer des profils de Voigt exacts est coûteux et inutile, compte tenu du traitement déjà très approximatif des profils de raies dans les outils de calcul d'opacité en ligne.

Dans ce cas, l'utilisation de fonctions paramétrées aux propriétés similaires à la fonction de Voigt, mais à l'expression analytique, permet de gagner en rapidité sans perdre une précision significative. De telles fonctions doivent notamment, aux limites du paramètre, tendre vers une gaussienne ou une lorentzienne. Deux familles de fonctions sont particulièrement intéressantes [50] :

1. La fonction pseudo-Voigt, qui est un barycentre entre la gaussienne et la lorentzienne. Très facile à calculer, cette fonction approche bien le profil de Voigt quand l'élargissement lorentzien est faible.

2. La fonction de Pearson VII, qui recoupe le cas symétrique de la distribution de Pearson IV que nous envisageons Chap. 8. Moins facile à calculer, cette fonction présente d'autres intérêts, même par rapport à un profil de Voigt exact. La Pearson VII est très proche de la fonction de Voigt lorsque l'élargissement gaussien est faible.

L'expression analytique de la distribution de Pearson VII normalisée s'écrit

$$P_{w,\mu}(x) = \frac{2^{2(\mu-1)}\sqrt{2^{1/\mu}-1}\,\Gamma(\mu)^2}{\Gamma(2\mu-1)\,\pi w\,\left[\left(2^{1/\mu}-1\right)\left(\frac{x}{w}\right)^2+1\right]^\mu}. \tag{B.19}$$

Elle est définie sur toute la droite des réels. w est la mi-largeur à mi-hauteur et μ le paramètre. Si $w = 1$, alors la Pearson VII est une lorentzienne ; si $w \to \infty$, alors la Pearson VII tend vers une gaussienne, car $2^{1/\mu} - 1 \sim \frac{\ln 2}{\mu}$ quand μ devient grand. La valeur de la distribution de Pearson VII en 0 est calculable simplement :

$$P_{w,\mu}(0) = \frac{2^{2(\mu-1)}\sqrt{2^{1/\mu}-1}\,\Gamma(\mu)^2}{\Gamma(2\mu-1)\,\pi w}. \tag{B.20}$$

Le facteur de forme est un indicateur du comportement dans les ailes. Le facteur de forme de la Pearson VII vaut

$$\phi_P(\mu) = \frac{2^{2\mu-1}}{\pi\,\Gamma(2\mu-1)}\,\sqrt{2^{1/\mu}\,\Gamma(\mu)^2-1}. \tag{B.21}$$

Profil	Gaussien		Lorentzien
k	0	$\longrightarrow$	$+\infty$
μ	$+\infty$	$\longrightarrow$	1
ϕ	$2\sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}}$	$\longrightarrow$	$\frac{2}{\pi}$

TABLE B.1 – Variations de k, μ et ϕ entre le profil gaussien et le profil lorentzien.

Le comportement à l'infini de la distribution de Pearson VII varie entre celui d'une gaussienne, en $e^{-\left(\frac{x}{w/\sqrt{\ln 2}}\right)^2}$, et celui d'une lorentzienne. Pour tout μ, l'équivalent à l'infini de la fonction de Pearson VII est :

$$P_{w,\mu}(x) = \frac{2^{2(\mu-1)}\sqrt{2^{1/\mu}-1}\,\Gamma(\mu)^2}{\Gamma(2\mu-1)\,\pi w\,\left(2^{1/\mu}-1\right)}\left(\frac{x}{w}\right)^{-2\mu}, \tag{B.22}$$

alors que la fonction de Voigt conserve un équivalent en $\left(\frac{x}{w}\right)^{-2}$.

Pour faire correspondre distributions de Voigt et de Pearson VII, plusieurs caractéristiques de chacune d'elles peuvent être prises en compte pour établir une équivalence dans les profils. Les expérimentateurs [50] choisissent deux grandeurs mesurables expérimentalement, et pertinentes pour tout calcul de profil de raie : le maximum sur lequel le profil, symétrique, est centré, et la largeur à mi-hauteur. Mais, avec des distributions centrées au même point, on a : $\mathcal{V}_{\sigma,\gamma}(0)$, σ et γ pour la distribution de Voigt, et $P_{w,\mu}(0)$, w et μ pour la distribution de Pearson VII. Il reste donc un troisième paramètre libre à fixer, et le facteur de forme est un très bon candidat car il caractérise la forme du profil de manière intrinsèque.

Une distribution de Voigt et de Pearson VII sont définies comme correspondantes si, et seulement si, leurs maxima, leurs HWHM et leurs facteurs de forme sont égaux. Ces deux égalités sont utilisées pour définir le paramétrage des distributions, donc l'égalité sur les facteurs de forme nous donne $\phi_P(\mu) = \phi_{\mathcal{V}}(k)$, qui est une équation transcendante. Vu les variations Tab. B.1, chaque facteur de forme est une fonction monotone du paramètre k, autrement dit la correspondance $k \leftrightarrow \mu$ est unique.

La résolution de cette équation est possible par tabulation et interpolation comme proposé Réf. [116], pour des valeurs de k comprises entre 0,1 et 3,9. La distribution de Pearson VII approche particulièrement bien celle de Voigt lorsque l'élargissement lorentzien est dominant (cas en bas de Fig. B.1, $k > 1$). L'approximation est cependant un peu moins bonne lorsque k est faible, mais redevient parfaite lorsque l'élargissement gaussien est très dominant ($k \ll 1$). Cependant, cette interpolation a une lacune : elle n'explique pas comment traiter correctement le cas où $k \to 0$ et $k \to \infty$. Cette interpolation peut être faite par développement limité ou asymptotique à l'ordre 1 de ϕ_P et $\phi_{\mathcal{V}}$, aux bornes de leur domaine de validité. Le développement limité à l'ordre 1 de ϕ_P en 1 est :

$$\phi_P(\mu) \simeq \frac{2}{\pi}\left(1 + \ln 2\,(\mu - 1)\right), \tag{B.23}$$

et le développement asymptotique à l'ordre 1 en $+\infty$ est :

$$\phi_P(\mu) \simeq 2\sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}}\left(1 - \frac{3 - 2\ln 2}{8\,\mu}\right). \tag{B.24}$$

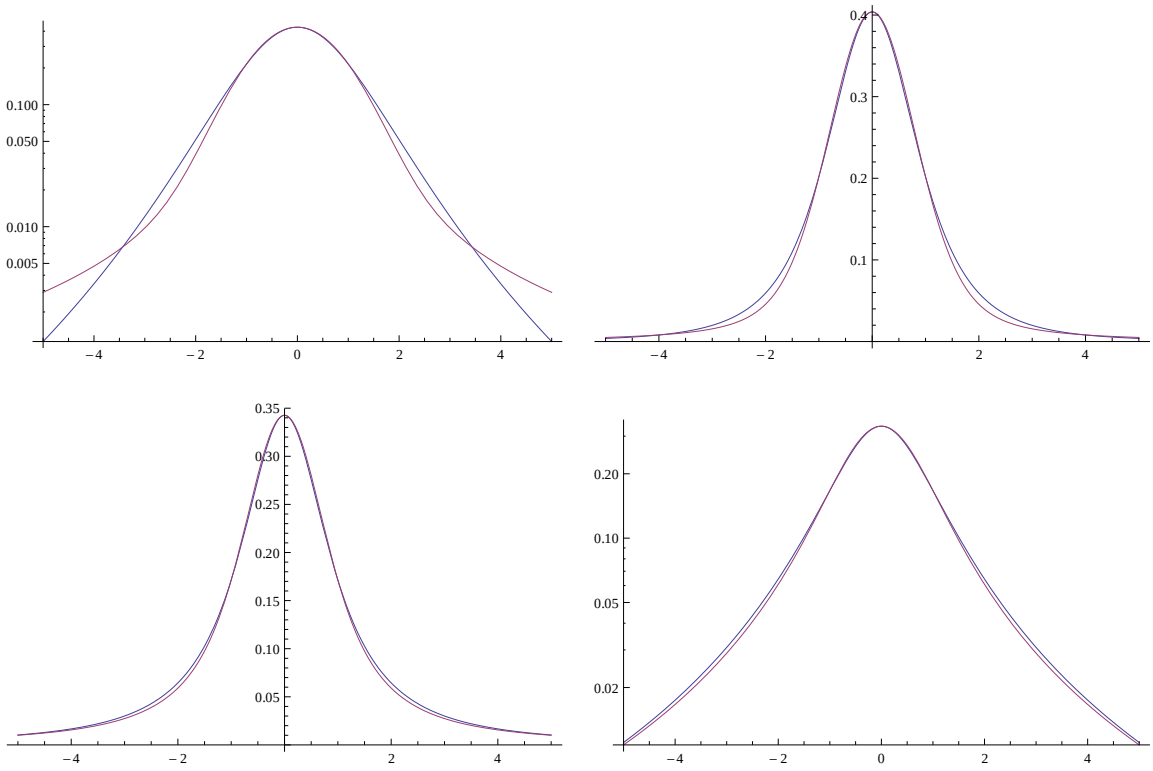


FIGURE B.1 – Comparaison de fonctions de Voigt (rouge) et Pearson VII (bleu) correspondantes, pour, dans le sens de lecture habituel, $k = 0,2$ (semi-logarithmique), $k = 0,4$ (linéaire), $k = 1,5$ (linéaire) et $k = 2$ (semi-logarithmique).

Pour $\phi_{\mathcal{V}}(w_{\mathcal{G}}, k)$, le développement asymptotique à l'ordre 2 lorsque $k \to \infty$ s'écrit

$$\phi_{\mathcal{V}}(k) \simeq \frac{2}{\pi}\left(1 + \frac{\frac{\ln 2}{\sqrt{K}} - 1,}{2k^2}\right) \tag{B.25}$$

tandis que le développement limité à l'ordre 1 en $k \to 0$ s'écrit :

$$\phi_{\mathcal{V}}(k) \simeq 2\sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} + \frac{2}{\sqrt{\pi}}\left(1 - \sqrt{K} - 2\frac{\ln 2}{\pi}\right). \tag{B.26}$$

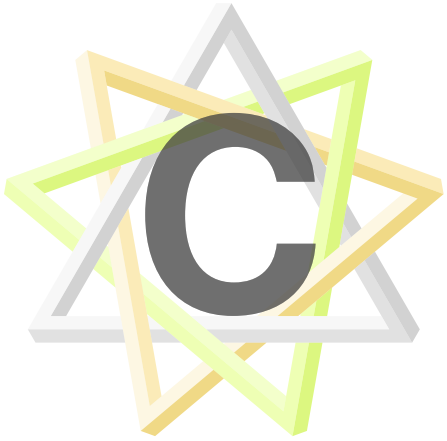
En réinjectant ces développements limités et asymptotiques dans l'équation $\phi_P(\mu) = \phi_{\mathcal{V}}(k)$, on obtient des développements asymptotiques de μ en fonction de k, car $\mu = \phi_P^{-1} \circ \phi_{\mathcal{V}}(k)$ en 0 (gaussienne) et à l'infini (lorentzienne). Lorsque le profil est quasiment gaussien, on a

$$\mu = \phi_P^{-1} \circ \phi_{\mathcal{V}}(k) \simeq \frac{\sqrt{\ln 2}}{8} \frac{2\ln 2 - 3}{1 - \sqrt{K} + 2\sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}}}, \tag{B.27}$$

tandis que, pour un profil quasiment lorentzien :

$$\mu = 1 + \frac{\frac{\ln 2}{K} - 1}{2\ln 2\, k^2}. \tag{B.28}$$

Ces deux développements asymptotiques confirment que la distribution de Pearson VII est particulièrement bien adaptée pour la modélisation des profils à dominante lorentzienne. Néanmoins, la grosse différence entre profil de Voigt et Pearson VII est le comportement à l'infini, pour lesquels les deux distributions ne sont pas équivalentes. Or le profil de Voigt n'est une bonne modélisation du profil de raie qu'à une distance spectrale de l'ordre de quelques HWHM de l'énergie moyenne. Plus loin, il existe des énergies spectrales à partir desquelles les ailes du profil sont « coupées » par des fonctions qui tendent bien plus vite vers 0 en ∞ [100]. L'effet de la modélisation des ailes des profils de raies sur l'opacité spectrale et les opacités moyennes est très important [100]. Finalement, ces phénomènes de coupures de profils de raies sont mieux reproduits par la distribution de Pearson VII qui, loin de l'énergie moyenne de la raie, tend plus vite vers 0.



PRÉCIS DE STATISTIQUE À L'ORDRE 4

C.1 Moments statistiques

La notion de moment statistique est définie ici pour des distributions discrètes, comme les raies d'un faisceau de transition, et pour des distributions continues, comme celles utilisées pour la modélisation des faisceaux de transition.

C.1.1 Généralités

Soit une distribution statistique $\mathcal{D}$ sur la variable réelle x. $\mathcal{D}$ est en général une distribution continue, et sa *densité de probabilité*[1] est notée $\mathcal{D}(x)$. $\mathcal{D}$ peut être une distribution discrète, elle est notée sous la forme $(x_m, \mathcal{D}_m)$, où m est un entier. Le premier cas regroupe, entre autres, les distributions statistiques utilisées pour le calcul des faisceaux de transition UTA. Le second cas correspond à la distribution des raies d'un faisceau de transition, la force et la position de chaque raie étant connue. Une distribution discrète peut se réécrire comme une combinaison linéaire, ou série si la distribution n'est pas finie, de pics de Dirac en x_m : $\delta_{x_m} = \delta(x - x_m)$:

$$(x_m, \mathcal{D}_m) = \sum_m \mathcal{D}_m \delta_{x_m}, \tag{C.1}$$

de sorte que toute distribution discrète peut être traitée comme une distribution sur R, à l'instar des distributions continues. Pour toute fonction f définie sur l'ensemble des valeurs que peut prendre x, on définit[2] le *test* de $\mathcal{D}$ par f équation (C.2) :

$$\int f\mathcal{D} = \begin{cases} \sum_m^\infty f(x_m)\mathcal{D}_m & \text{si } \mathcal{D} \text{ est discrète} \\ \int_{-\infty} f(x)\mathcal{D}(x)\mathrm{d}x & \text{si } \mathcal{D} \text{ est continue} \end{cases}. \tag{C.2}$$

[1] PDF dans la littérature anglophone

[2] À condition que les éventuelles intégrales impropres ou sommes infinies **convergent**.

On appelle *somme à l'ordre n* de $\mathcal{D}$ le test de $x \mapsto x^n$ sur $\mathcal{D}$:

$$\Sigma_n(\mathcal{D}) = \int x^n \mathcal{D}(x)\mathrm{d}x = \begin{cases} \sum_m x_m^n \mathcal{D}_m & \text{si } \mathcal{D} \text{ est discrète} \\ \int_{-\infty}^{\infty} x^n \mathcal{D}(x)\mathrm{d}x & \text{si } \mathcal{D} \text{ est continue} \end{cases}. \tag{C.3}$$

La somme de $\mathcal{D}$ à l'ordre 0, notée μ_0 et très souvent appelée *moment d'ordre 0*, *nombre total*, *force totale* ou *intensité totale* dans la thèse, est le test de $\mathcal{D}$ par la fonction unité :

$$\mu_0 = \Sigma_0(\mathcal{D}) = \int \mathcal{D}(x)\mathrm{d}x = \sum_m \mathcal{D}_m. \tag{C.4}$$

La *moyenne en x* de $\mathcal{D}$, notée μ_1 et aussi appelée *moment d'ordre 1*, est donnée équation (C.5) :

$$\mu_1(\mathcal{D}) = \frac{\Sigma_1(\mathcal{D})}{\Sigma_0(\mathcal{D})} = \frac{1}{\mu_0}\int x\mathcal{D}(x)\mathrm{d}x = \frac{1}{\mu_0}\sum_m x_m\,\mathcal{D}_m. \tag{C.5}$$

C'est le quotient du test de $\mathcal{D}$ par la fonction identité. Une autre notation de la moyenne, utilisée Sec. 8.2, s'écrit

$$\langle x \rangle_{\mathcal{D}} = \mu_1(\mathcal{D}) \tag{C.6}$$

Le calcul des moments suivants bruts, à la manière de μ_1, ne présente que peu d'intérêt pour les ordres supérieurs. Mais le calcul des moments centrés permet de s'affranchir des moments d'ordre 0 et 1. Le moment centré d'ordre n $\mu_n^{(\mathrm{c})}$ s'écrit comme le test de $\mathcal{D}$ par le polynôme $(x-\mu_1)^n$ équation (C.7) :

$$\mu_n^{(\mathrm{c})} = \frac{1}{\mu_0}\int (x-\mu_1)^n \mathcal{D}(x)\mathrm{d}x = \sum_m (x_m-\mu_1)^n \mathcal{D}_m \tag{C.7}$$

ou, en formalisme des moyennes,

$$\mu_n^{(\mathrm{c})} = \langle (x - \langle x \rangle_{\mathcal{D}})^n \rangle_{\mathcal{D}}. \tag{C.8}$$

La *variance* est le moment centré d'ordre 2 de $\mathcal{D}$:

$$v(\mathcal{D}) = \mu_2^{(\mathrm{c})} = \langle (x - \langle x \rangle_{\mathcal{D}})^2 \rangle_{\mathcal{D}} = \langle x^2 \rangle_{\mathcal{D}} - \langle x \rangle_{\mathcal{D}}^2. \tag{C.9}$$

L'*écart-type* $\sigma(\mathcal{D})$ est la racine carrée de la variance :

$$\sigma(\mathcal{D}) = \sqrt{\mu_2^{(\mathrm{c})}(\mathcal{D})}. \tag{C.10}$$

Homogène à x, σ est un bon indicateur de la dispersion d'une distribution.

Quand les moments d'ordre 0 à 2 sont connus, la distribution qui est caractérisée uniquement par ces trois moments est la distribution *gaussienne*, dont la densité de probabilité suit une *loi normale* :

$$\mathcal{D}(x) = \frac{\mu_0}{\sigma\sqrt{2\pi}}\, e^{-\frac{(x-\mu_1)^2}{2\sigma^2}} = \frac{\mu_0}{\sqrt{2\pi\mu_2^{(\mathrm{c})}}}\, e^{-\frac{(x-\mu_1)^2}{\mu_2^{(\mathrm{c})}}}. \tag{C.11}$$

C.1.2 Moments d'ordre supérieur à 2 ; asymétrie et kurtosis

Ces trois premiers moments et leurs valeurs dérivées sont utilisées à partir de Chap. 4. Utilisés en physique atomique, ils ne nous indiquent que trois grandeurs : l'intensité, la position et la dispersion. La modélisation des faisceaux de transition ou des configurations obtenue est très réductrice, et dans bien des cas peu satisfaisante. Les deux ordres suivants, 3 et 4, permettent de caractériser deux propriétés *intuitives* d'un faisceau : son asymétrie et sa forme piquée, ou kurtosis. Pour $n \geq 2$, le moment centré et réduit d'ordre n, $\alpha_n^{(c)}$, est défini équation (C.12) :

$$\alpha_n = \frac{\mu_n^{(c)}}{\mu_0 {\mu_2^{(c)}}^{n/2}} = \frac{\mu_n^{(c)}}{\mu_0 \sigma^n}. \tag{C.12}$$

En physique, les moments réduits sont sans unité, et caractérisent la forme de la distribution statistique.

Deux sont particulièrement pertinents : l'ordre 3 et l'ordre 4, car ils quantifient des notions intuitives :

1. α_3, moment d'ordre 3, est appelé *biais* ou *asymétrie*. Une distribution asymétrique pour laquelle $\alpha_3 \neq 0$ a un côté en x où se trouve le maximum de la densité de probabilité et où, en s'éloignant de $\langle x \rangle$, la densité décroît très rapidement. Ce côté est appelé *tête* de la distribution. L'autre côté, où la décroissance de la densité de probabilité est plus lente en s'éloignant de x, est appelé *queue* de la distribution asymétrique. La variable dérivée $\beta_3 = \alpha_3^2$ est très fréquemment utilisée.

2. α_4, moment d'ordre 4, est appelé *kurtosis*. Il rend compte de la répartition de la distribution entre le centre et les ailes. Le kurtosis de la gaussienne vaut 3. Les autres distributions reçoivent le qualificatif de :

   - *leptokurtique* si le kurtosis est supérieur à 3 ; la distribution a une allure très piquée au centre avec des ailes importantes ;
   - *mésokurtique* si le kurtosis est égal à 3, comme c'est le cas pour la distribution gaussienne ;
   - *platykurtique* si le kurtosis est inférieur à 3 ; la distribution a une allure plate au voisinage de la moyenne, en revanche les ailes sont très réduites.

   On utilise couramment le kurtosis réduit $\beta_4 = \alpha_4 - 3$, car il est nul pour une distribution normale.

L'asymétrie et le kurtosis de toute distribution statistique positive sont reliés par une inégalité :

$$\alpha_4 \geq \beta_3 + 1 \geq \alpha_3^2 + 1, \tag{C.13}$$

avec égalité si, et seulement si, la distribution est sur deux valeurs de x. « Visuellement », l'asymétrie d'une distribution statistique est assez mal rendue par la variable α_3, et pour en rendre compte, la quantité

$$\gamma_3 = \frac{\beta_3}{\alpha_4 - 1} = \frac{\alpha_3^2}{\alpha_4 - 1}, \tag{C.14}$$

appelée *asymétrie visuelle*, est préférable. L'asymétrie visuelle varie de 0 à 1.

C.2 Distributions statistiques paramétrées à l'ordre 4

Les moments d'ordre 3 et 4 sont pris en compte par différentes distributions non-gaussiennes. On suppose désormais que la distribution a pour trois premiers moments :

- $\mu_0 = 1$;
- $\mu_1 = 0$
- $\mu_2^{(c)} = \sigma = 1$.

On peut se ramener à ce jeu de valeurs par le changement de variables :

$$\begin{aligned} x &\mapsto u = \frac{x - \mu_1}{\sigma} \\ \mathcal{D} &\mapsto \frac{\mathcal{D}}{\mu_0 \sigma}. \end{aligned} \tag{C.15}$$

De nombreuses distributions prennent en compte partiellement les moments d'ordre 3 et 4.

C.2.1 Gram-Charlier à l'ordre 3 et 4

À notre connaissance, la distribution de Gram-Charlier de type A a été la première utilisée dans la modélisation des faisceaux de transition à l'ordre 4 [86, 117]. Son expression par rapport aux moments est de loin la plus simple : il s'agit du produit de la fonction gaussienne par un polynôme de Hermite :

$$GC_n(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-u^2/2} \left(1 + \sum_{k=2}^{n} c_k \mathrm{He}_k(u) \right), \tag{C.16}$$

où

$$c_k = \sum_{j=0}^{k/2} \frac{(-1)^j}{2^j j!(k-2j)!} \tag{C.17}$$

et $\mathrm{He}_k(u)$ est le polynôme de Hermite d'ordre k (forme probabiliste).

$$\mathrm{He}_k(u) = (-1)^k e^{x^2/2} \frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}x^k} e^{-x^2/2}. \tag{C.18}$$

Deux ordres sont très utilisés en physique atomique. La formule de Gram-Charlier à l'ordre 3 peut construire des distributions asymétriques qui modélisent mieux la répartition en énergie des niveaux d'une configuration [8] :

$$GC_3(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-u^2/2} \left(1 - \frac{\alpha_3}{2} \left(u - \frac{u^3}{3} \right) \right). \tag{C.19}$$

La formule de Gram-Charlier à l'ordre 4 pair est utilisée dans équation (7.8) Sec. 7.1 pour modéliser la distribution des $P(M)$ [86]. Comme la distribution est paire, les moments d'ordre 1 et 3 sont nuls. Pain *et coll.* [117] ajoutent les termes impairs dans la

formule de Gram-Charlier, ce qui donne la formule prenant en compte à la fois l'asymétrie et le kurtosis :

$$GC_4(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-u^2/2} \left[1 - \frac{\alpha_3}{2}\left(u - \frac{u^3}{3}\right) + \frac{\alpha_4 - 3}{24}\left(3 - 6u^2 + u^4\right)\right]. \tag{C.20}$$

Bien que modélisant par une formule simple des distributions avec les moments d'ordre 0 à 4 imposés, la distribution de Gram-Charlier pose de nombreux problèmes qui la rendent peu apte à modéliser des distributions à l'ordre 4. Comme on peut le voir Fig. C.1, cette distribution présente, en-dehors d'une zone où le kurtosis est proche de 3 ou 4 et l'asymétrie proche de 0, plusieurs minima locaux alors qu'un profil statistique compact présente un seul maximum et aucun minimum local. Or un faisceau de transition avec un spin-orbite faible présente en général une forme assez compacte, avec un seul maximum s'il est suffisamment coalescent. Dans le cas où le faisceau présente plusieurs maxima sans spin-orbite important, leur distribution ne correspond en général pas à une distribution de Gram-Charlier. Pire, la fonction peut prendre des valeurs négatives si elle présente une forte asymétrie ou un kurtosis élevé ou faible. De ce fait, la distribution de Gram-Charlier à l'ordre 4 est mal adaptée à la modélisation de faisceaux de transition, car elle ne correspond pas à la réalité physique où les faisceaux apparaissent en une seule composante. Les valeurs de α_3 et α_4 pour lesquelles la distribution de Gram-Charlier est d'un seul tenant, avec un seul minimum local, forment une région très restreinte du plan (α_3, α_4).

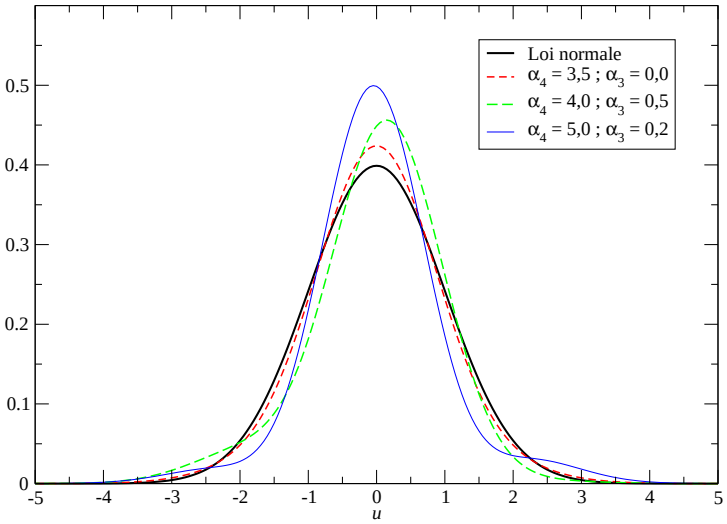
La région du plan (α_3, α_4) dans lequel Gram-Charlier à l'ordre 4 reste strictement positive est délimitée par une courbe dont l'équation est calculable. L'équation (C.20) peut se réécrire sous la forme du produit d'un polynôme par l'exponentielle :

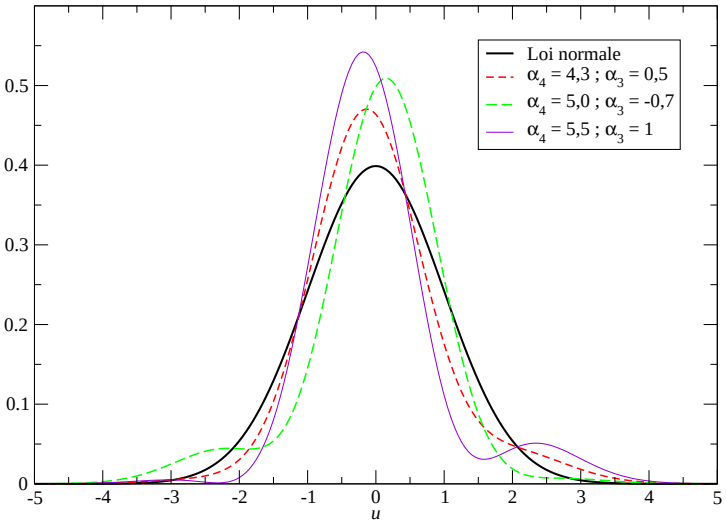
$$GC_4(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-u^2/2} P_{\alpha_3,\alpha_4}(u) \tag{C.21}$$

$$P_{\alpha_3,\alpha_4}(u) = 1 - \frac{\alpha_3}{2}\left(u - \frac{u^3}{3}\right) + \frac{\alpha_4 - 3}{24}\left(3 - 6u^2 + u^4\right). \tag{C.22}$$

La distribution ne change pas de signe si, et seulement si, le polynôme multiplicateur P_{α_3,α_4} de l'exponentielle, de degré 4, n'a pas de racine réelle. C'est le cas pour $\alpha_3 = 0$ et $\alpha_4 = 4$, dont tous les minima locaux restent au-dessus de 0. Si $\alpha_3 = 1$ et $\alpha_4 = 4$, P_{α_3,α_4} a un minimum en-dessous de 0. Or P_{α_3,α_4} est continu en (α_3, α_4), par conséquent il existe un couple pour lequel un minimum local est exactement 0, ce qui correspond à une racine multiple. Autrement dit, la région (α_3, α_4) pour laquelle P_{α_3,α_4} est toujours positive sur $\mathbb{R}$ est délimitée par une partie des couples (α_3, α_4) pour lesquels P_{α_3,α_4} a au moins une racine multiple.

Or, une caractéristique des polynômes admettant une racine multiple est que leur discriminant est nul. Le discriminant d'un polynôme quelconque est le produit des carrés des différences deux à deux de ses racines, réelles ou complexes. Les racines multiples sont différenciées, ce qui fait que le discriminant est nul dès lors que le polynôme a une seule racine double. Bien qu'il n'existe pas d'expression générale simple en fonction des coefficients, son calcul est possible pour chaque degré, à l'aide des fonctions symétriques. La frontière du domaine (α_3, α_4) de positivité de GC_4 est donc donnée par





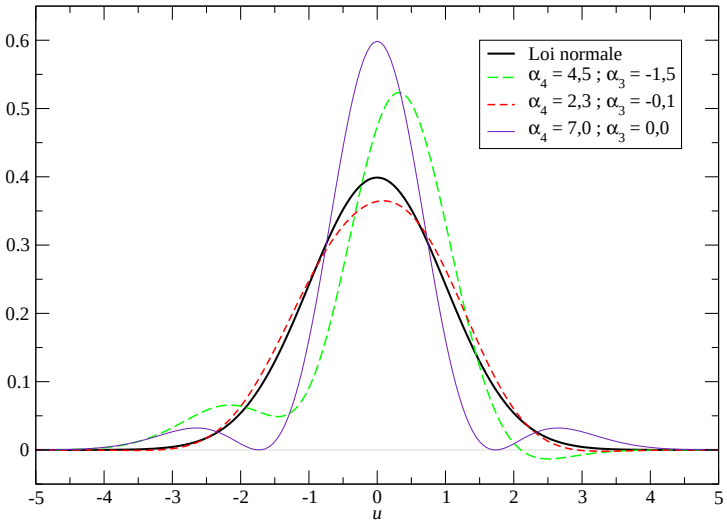


FIGURE C.1 – Comparaison de distributions de Gram-Charlier à l'ordre 4 avec la loi normale. De haut en bas : distributions régulières, distributions très asymétriques et distributions limite ou en partie négatives.

une partie de la courbe d'équation $\Delta(\alpha_3, \alpha_4) = 0$ où Δ est le discriminant de P_{α_3,α_4} :

$$\begin{aligned}\Delta(\alpha_3, \alpha_4) = \frac{1}{6912} \Big[&(\alpha_4 - 7)^2 (\alpha_4 - 3)^3 (\alpha_4 + 5) \\ &+ 6 (\alpha_4 - 7) (\alpha_4 - 3)^2 (\alpha_4 + 1) \alpha_3^2 \\ &+ 3 (\alpha_4 + 1) (5\alpha_4 - 27) \alpha_3^4 + 16 \alpha_3^6 \Big] .\end{aligned} \tag{C.23}$$

Cette courbe se compose de deux composantes, une extérieure et une intérieure, et la composante intérieure délimite la zone dans laquelle P_{α_3,α_4} n'a pas de racine réelle, et Gram-Charlier pour ce couple de moments est strictement positive. Il est possible de donner une équation explicite de la courbe d'équation $\Delta(\alpha_3, \alpha_4) = 0$ sous forme $\alpha_3(\alpha_4)$, mais sous forme complexe uniquement, car l'équation (C.23) est une équation du troisième degré en β^2, et deux des racines de ce polynôme de degré 3 sont positives et la troisième négative si α_4 est compris entre 3 et 7.

L'utilisation du discriminant permet de déduire le domaine dans lequel Gram-Charlier à l'ordre 4 ne s'annule pas. Cependant, une distribution statistique continue se doit d'avoir le comportement le plus régulier possible, et ne doit pas présenter de maximum secondaire qui n'a pas forcément de sens statistique, même s'il peut améliorer la modélisation d'un petit nombre de distributions. Dans une moindre mesure, les points d'inflexion en excès dégradent la qualité de la distribution et une distribution avec une bonne allure a un minimum de points d'inflexion, deux dans le cas d'une distribution de $-\infty$ à $+\infty$. Or la dérivation de GC_4 est le produit de l'exponentielle par un polynôme de degré 5. Une seconde dérivation donne un polynôme multiplicateur de degré 6. Ici encore, le lieu de couples (α_3, α_4) pour lesquels le discriminant du polynôme

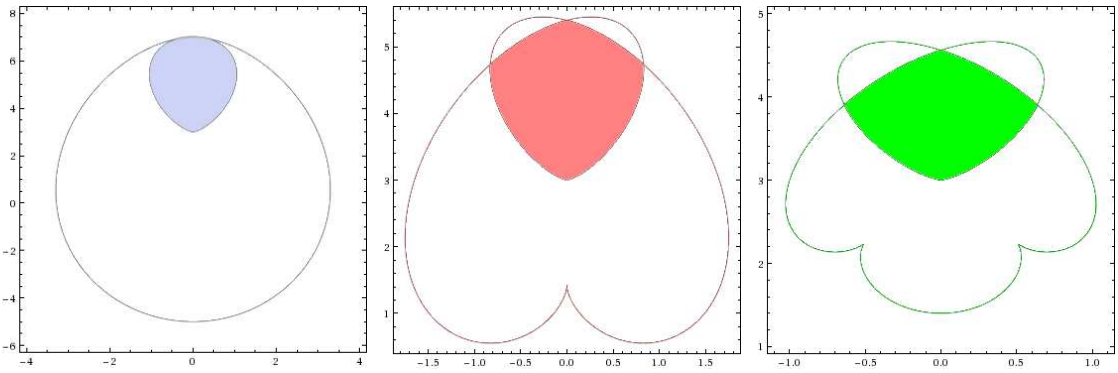


FIGURE C.2 – De gauche à droite, lieux des points (α_3, α_4) pour lesquels le discriminant des polynômes multiplicateurs de la distribution de Gram-Charlier et ses deux premières dérivées est nul. Le domaine coloré est celui dans lequel le nombre de racines est minimal. Les figures ne sont pas à l'échelle. La pointe colorée inférieure correspond au point $(\alpha_3, \alpha_4) = (0, 3)$, autrement dit à la gaussienne.

est nul sépare les régions du plan (α_3, α_4) dans lesquelles le polynôme multiplicateur s'annule 1, 3 ou 5 fois pour la dérivée, et 2, 4 ou 6 fois pour la dérivée seconde. Les domaines dans lesquels la distribution de Gram-Charlier et ses dérivées ont un nombre de zéros plus ou moins souhaitable sont tracés Fig. C.2. La zone rouge est celle où les distributions sont les meilleures, les zones verte et jaune correspondent à des distributions avec un seul maximum mais moins régulières, et en-dehors de la zone verte les distributions sont seulement positives. Le domaine (α_3, α_4) pour lequel la distribution et ses deux premières dérivées s'annulent en un minimum de points est finalement très

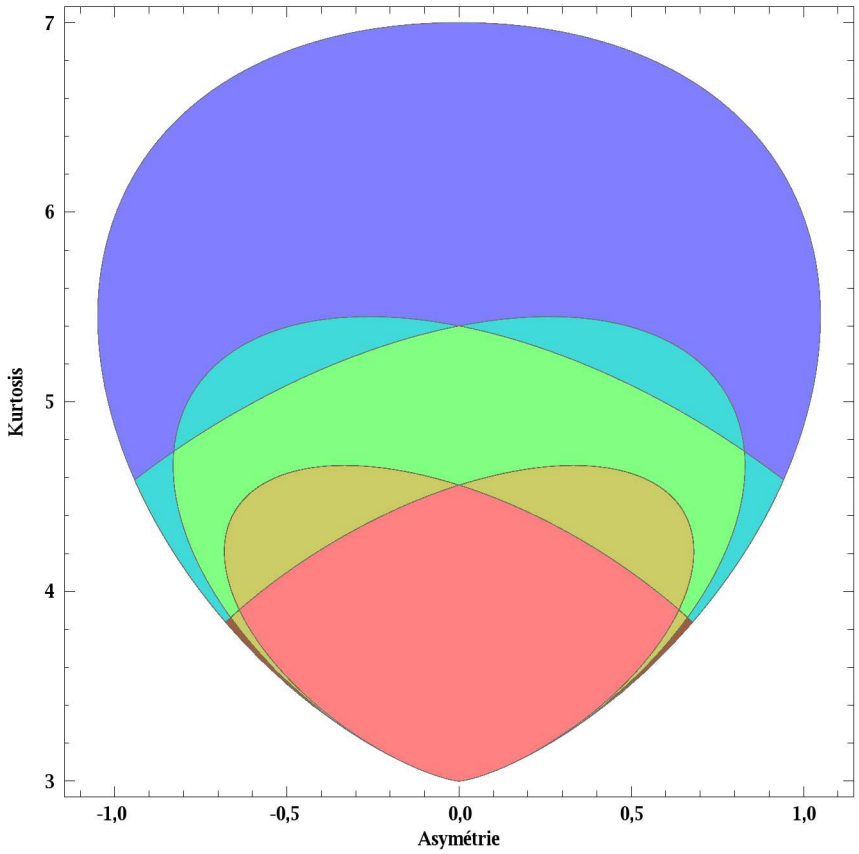


FIGURE C.3 – Superposition de différents domaines (α_3, α_4) relatifs aux propriétés de la distribution de Gram-Charlier. La distribution est positive dans le ballon bleu. La dérivée s'annule une seule fois à l'intérieur du domaine vert, trois dans les lobes cyan et brun, cinq ailleurs. La dérivée seconde s'annule deux fois dans le domaine rouge, quatre dans les domaines jaune et brun et six dans les autres domaines.

restreint, d'autant plus que peu de faisceaux de transition se trouvent dans ce domaine représenté parmi d'autres Fig. C.3. Ce qui dessert Gram-Charlier est, en plus de son domaine restreint, le fait que cette distribution soit incapable de couvrir la plupart des faisceaux de transition, en particulier les plus importants.

C.2.2 Gaussienne généralisée

La *gaussienne généralisée* est une distribution symétrique par rapport à la moyenne. De paramètre n, elle s'écrit

$$GG_n(u) = \frac{n\, e^{-\left|\frac{u}{\lambda}\right|^n}}{2\lambda\Gamma\left(\frac{1}{n}\right)} \quad \text{avec} \quad \lambda = \sqrt{\frac{\Gamma(1/n)}{\Gamma(3/n)}} \tag{C.24}$$

avec les notations de (C.15) La symétrie force $\alpha_3 = 0$, de même que tous les moments d'ordre impair. Les moments d'ordre pair, eux, s'écrivent :

$$\alpha_{2k}(GG_n) = \lambda^{2k} \frac{\Gamma\left(\frac{1+2k}{n}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{n}\right)}. \tag{C.25}$$

En particulier, le kurtosis s'exprime en fonction de ν :

$$\alpha_4(GG_n) = \frac{\Gamma(1/n)\Gamma(5/n)}{\Gamma(3/n)^2}. \tag{C.26}$$

L'équation (C.26) ne peut être inversée analytiquement pour obtenir n à partir de α_4, cependant une bonne approximation a été donnée Réf. [118] :

$$n = 1,62796 \ln(\alpha_4 - 0,783143)^{\frac{0,796349}{\alpha_4^2} - 1}. \tag{C.27}$$

Bien qu'elle ne modélise pas l'asymétrie d'une distribution, la gaussienne généralisée a l'avantage d'avoir des variations correctes, sans point d'inflexion ni extremum intermédiaire, ce qui se rapproche de la réalité physique des faisceaux en une seule composante. La gaussienne généralisée présente quelques valeurs remarquables :

- pour $\alpha_4 \to (9/5)^+$, $n \to \infty$ et la gaussienne généralisée tend vers un créneau de demi-largeur $\sqrt{3}$ en unités réduites ;
- pour $\alpha_4 = 3$, $\nu = 2$ et la distribution est une gaussienne ;
- pour $\alpha_4 = 6$, $\nu = 1$ et la distribution est une laplacienne.

Pour $\alpha_4 \geq 6$, la gaussienne généralisée reste continue, mais n'est plus dérivable en 0. Pain *et coll.* [117] estiment cependant que la non-dérivabilité en 0 n'est pas un problème car la distribution de raies est censée être convoluée par les élargissements physiques.

Les distributions énumérées ci-dessus intègrent les moments d'ordre 3 et 4 soit dans un domaine restreint (Gram-Charlier), soit avec un seul degré de liberté. De ce fait, elles ne sont guère pratiques pour la modélisation de faisceaux de transition dont les moments peuvent prendre des valeurs dans un domaine étendu en asymétrie et kurtosis. Néanmoins l'asymétrisation de la gaussienne généralisée permettrait d'étendre son domaine d'utilisation à des faisceaux asymétriques, car les faisceaux symétriques sont plus l'exception que la règle.

C.2.3 Gaussienne normale inverse

Pour pouvoir modéliser correctement avec deux degrés de liberté, èla *gaussienne normale inverse*, ou NIG[3] présente de nombreuses qualités pour la modélisation des faisceaux de transition [117] :

- elle est définie sur la continuité garantie dans le domaine où elle (α_3, α_4) est calculable ;
- le domaine de paramètres (α_3, α_4) dans lequel la NIG est définie est un des plus étendus [117] ;

[3] Acronyme de l'anglais *Normal Inverse Gaussian*.

- le passage des moments aux paramètres de la NIG est analytique ;
- le calcul de la distribution est lui aussi analytique, ne faisant intervenir que les fonctions de Bessel ;

La gaussienne normale inverse est définie par les paramètres α, γ, δ et μ équation (C.28) :

$$\mathrm{NIG}(x) = \frac{\delta\alpha e^{\delta}\sqrt{\alpha^2-\gamma^2}+\gamma\,(x-\mu)}{\delta^2+(x-\mu)^2} K_1\left(\alpha\sqrt{\delta^2+(x-\mu)^2}\right), \tag{C.28}$$

où K_1 est la fonction de Bessel modifiée du troisième type. Le diagramme semi-

Paramètre	Expression	Signification
α	$\frac{3\sqrt{3\beta_4-4\beta_3}}{(3\beta_4-5\beta_3)\,\sigma}$	Importance de la queue
γ	$\frac{3\sqrt{\beta_3}}{(3\beta_4-5\beta_3)\,\sigma}$	Asymétrie
δ	$\frac{3\sigma\sqrt{3\beta_4-5\beta_3}}{3\beta_4-4\beta_3}$	Paramètre d'échelle
μ	$\mu_1-\frac{\delta\alpha_3}{\sqrt{3\beta_4-5\beta_3}}$	Position du maximum

TABLE C.1 – Conversion des moments aux paramètres NIG.

logarithmique Fig. C.4 nous montre que l'asymétrie au maximum de la NIG se répercute dans les ailes : l'aile du côté du maximum, appelée *tête*, décroît bien plus rapidement quand on s'éloigne de la moyenne que l'aile du côté opposé au maximum, appelée *queue*. Les quatre paramètres α, γ, δ et μ sont obtenus directement à partir de μ_1, σ, β_3 et β_4, comme indiqué en table C.1. La NIG est définie pour tout (β_3, β_4) tel que les expressions sous radical sont strictement positives, autrement dit la seule contrainte pour la définition de la NIG est que

$$3\beta_4 > 5\beta_3 \quad\Longleftrightarrow\quad \alpha_4 > 3+\frac{5}{3}\alpha_3^2. \tag{C.29}$$

On peut remarquer Fig. C.5 que le domaine de positivité de Gram-Charlier est contenu dans le domaine de définition de la NIG. C'est ce qui explique que la NIG soit maintenant préférée à la distribution de Gram-Charlier. Cependant, aucune des deux distributions n'est capable de modéliser des faisceaux de kurtosis inférieur à 3 ou fortement asymétriques.

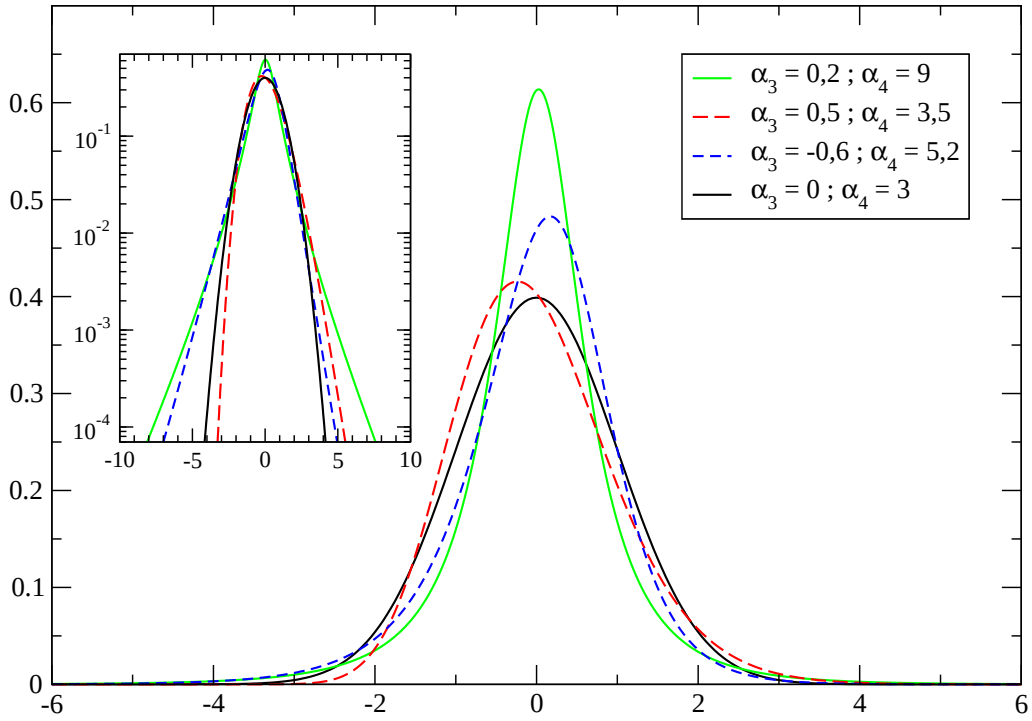


FIGURE C.4 – Exemples de distributions gaussiennes normales inverses d'aire égale à 1, moyenne nulle et variance égale à 1. Le diagramme en médaillon représente les mêmes courbes en semi-logarithmique.

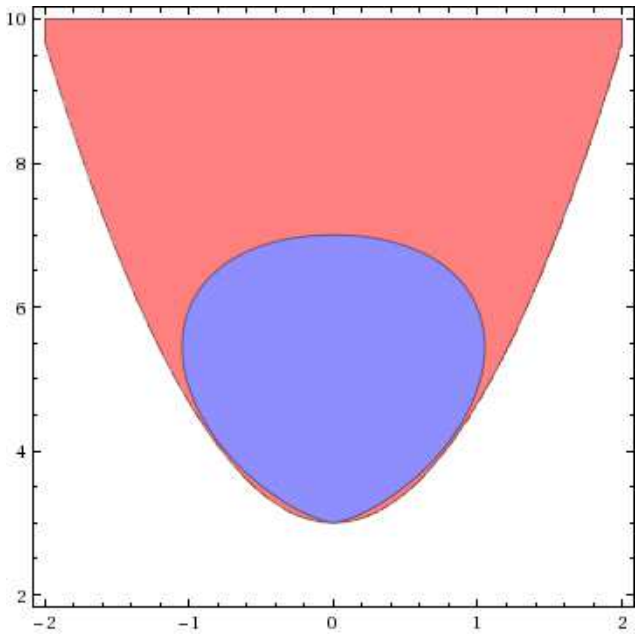


FIGURE C.5 – Comparaison des domaines de définition des distributions de Gram-Charlier (bleu) et NIG (rouge). Asymétrie en abscisses et kurtosis en ordonnées.

C.3 Intérêt des distributions de Pearson pour la modélisation des faisceaux

La famille des distributions de Pearson regroupe un ensemble de distributions de probabilités continues et définies sur un intervalle de R qui peut être R entier.

C.3.1 La distribution de Pearson IV

Une autre distribution d'allure très semblable à la NIG est la distribution de Pearson IV. Définie sur R, cette distribution notée $\mathrm{P_{IV}}$ a pour formule

$$\mathrm{P_{IV}}(y) = C(1+y^2)^{-m}\, e^{-\nu \arctan y}. \tag{C.30}$$

Si la formule est d'allure très simple, l'expression des variables m, ν, y et surtout C en fonction des moments d'ordre 0 à 4 est un peu complexe.

On pose :

$$r = 6\frac{\alpha_4 - \beta_3 - 1}{2\alpha_4 - 3\beta_3 - 6}. \tag{C.31}$$

On a directement l'exposant :

$$m = 1 + \frac{r}{2}. \tag{C.32}$$

Le coefficient de $\arctan y$, ν, s'exprime également en fonction de r :

$$\nu = -\frac{r\,(r-2)\,\sqrt{\beta_3}}{\sqrt{16\,(r-1) - \beta_3\,(r-2)^2}}. \tag{C.33}$$

Le coefficient ν et la distribution de Pearson IV ne sont définis sur R que si la différence sous radical est positive, c.-à-d.

$$16\,(r-1) - \beta_3\,(r-2)^2 > 0 \tag{C.34}$$

Reste le changement de variable

$$x \mapsto y = \frac{x-\lambda}{\alpha}, \tag{C.35}$$

où λ et α sont les paramètres liés à la moyenne et à la dispersion de la distribution :

$$\lambda = \mu_1 - (r-2)\,\frac{\sqrt{\beta_3 \mu_2^{(c)}}}{4} \tag{C.36}$$

$$\alpha = \sqrt{\mu_2^{(c)}\left[(r-1) - \frac{\beta_3}{16}\,(r-2)^2\right]}. \tag{C.37}$$

La constante C est d'expression un peu plus complexe :

$$C = \frac{1}{\alpha\,\mathrm{B}\left(m-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)}\left|\frac{\Gamma\left(m+\frac{\nu}{2}i\right)}{\Gamma(m)}\right|^2. \tag{C.38}$$

Γ est la fonction Gamma prolongée sur l'ensemble des nombres complexes, et B est la fonction Beta définie par :

$$\mathrm{B}(a,b) = \frac{\Gamma(a)\Gamma(b)}{\Gamma(a+b)} = \int_0^1 t^{a-1}\,(1-t)^{b-1}\,\mathrm{d}t. \tag{C.39}$$

Le domaine (β_3, α_4) dans lequel la distribution de Pearson IV peut être définie correspond à celui dans lequel l'inéquation (C.34) est vérifiée :

$$63\beta_3 + 36\beta_3^2 - 96\alpha_4 - 78\beta_3\alpha_4 + 32\alpha_4^2 - \beta_3\alpha_4^2 > 0, \tag{C.40}$$

ce qui, associé à l'inégalité $\alpha_4 \geq \beta_3 + 1$, recouvre une région du plan moins étendue que la NIG.

Si $\beta_3 = 0$, alors $\nu = 0$ et la distribution est symétrique. Ce cas particulier de Pearson IV est appelé Pearson VII, dont une utilisation a été envisagée Chap. 3.

C.3.2 Autres distributions de Pearson utiles

Bien que la Pearson IV soit une distribution valable sur un domaine en définitive assez restreint, d'autres distributions statistiques de la famille des distributions de Pearson sont très utiles dans le calcul de distributions statistiques fortement asymétriques ou platykurtiques. La théorie de Pearson telle que développée au départ avait pour but de proposer une modélisation statistique à l'ordre 4 pour tout couple de moments (β_3, α_4) accessible avec une distribution positive.La construction proposée ci-dessous est inspirée de celle, bien référencée, qui peut être trouvée sur la Wikipédia anglophone. Il s'agit de récupérer la solution de cette équation qui passe en 0.

Elle part de la résolution de l'équation différentielle inspirée par des lois de probabilité connues vers 1900 :

$$p'(x) + \frac{a + (x-\lambda)}{b_2\,(x-\lambda)^2 + b_1\,(x-\lambda) + b_0} = 0. \tag{C.41}$$

La solution générale de cette équation différentielle ordinaire s'écrit sous forme d'une expponentielle intégrale :

$$p(x) \propto \exp\left(-\int \frac{x-a}{b_2x^2 + b_1x + b_0}\mathrm{d}x\right). \tag{C.42}$$

Les trois variables b_0, b_1 et b_2 peuvent être reliées aux moments d'ordre 3 et 4 β_3 et α_4 via des formules de passage, avec r donné par la formule (C.31) :

$$b_0 = \frac{4\alpha_4 - 3\beta_3}{10\alpha_4 - 12\beta_3 - 18}\,\mu_2^{(\mathrm{c})} = \frac{r-1}{r+2}\,\mu_2^{(\mathrm{c})} \tag{C.43}$$

$$b_1 = \frac{\alpha_4 + 3}{10\alpha_4 - 12\beta_3 - 18}\sqrt{\mu_2^{(\mathrm{c})}\beta_3} = \frac{1}{2}\,\frac{r-2}{r+2}\sqrt{\mu_2^{(\mathrm{c})}\beta_3} \tag{C.44}$$

$$b_2 = \frac{2\alpha_4 - 3\beta_3 - 6}{10\alpha_4 - 12\beta_3 - 18} = \frac{1}{r+2} \tag{C.45}$$

On a aussi $b_1 = a$. D'après l'équation (C.41), on $p'(\lambda - a) = 0$, et $\lambda - a$ est le seul point stationnaire de p. La nature des solutions de l'équation différentielle dépend es-

sentiellement des changements de signe du dénominateur dans la solution (C.42), qui engendrent des points singuliers.

Le trinôme ne change pas de signe si, et seulement si

$$4b_0b_2 > b_1^2 \quad \Longleftrightarrow \quad 16\,(r-1) > \beta_3\,(r-2)^2\,, \tag{C.46}$$

ce qui nous ramène au cas de la Pearson IV. Si le trinôme a deux racines réelles, soient a_1 et a_2 les racines :

$$a_1 = \frac{1}{2b_2}\left(-b_1 - \sqrt{b_1^2 - 4b_2b_0}\right) \tag{C.47}$$

$$a_2 = \frac{1}{2b_2}\left(-b_1 + \sqrt{b_1^2 - 4b_2b_0}\right). \tag{C.48}$$

La solution peut se réécrire

$$p(x) \propto \exp\left(-\frac{1}{b_2}\int \frac{x-a}{(x-a_1)(x-a_2)}\mathrm{d}x\right) \tag{C.49}$$

ou, en posant

$$\nu = \frac{1}{b_2\,(a_2-a_1)}, \tag{C.50}$$

et en calculant les primitives,

$$p(x) \propto |x-a_1|^{\nu(a_1-a)}|x-a_2|^{-\nu(a_2-a)} \tag{C.51}$$

$$\propto \left|1-\frac{x}{a_1}\right|^{\nu(a_1-a)}\left|1-\frac{x}{a_2}\right|^{-\nu(a_2-a)}. \tag{C.52}$$

Deux cas se présentent :

- $b_0b_2 < 0$, c.-à-d. les racines a_1 et a_2 sont de signes opposés ;
- $b_0b_2 > 0$, c.-à-d. les racines a_1 et a_2 sont de même signe.

Le premier cas correspond à la distribution de Pearson I. Sa densité de probabilité est définie sur l'intervalle (a_1, a_2), ramenable à $(0,1)$ par changement de variable :

$$p(x) = C\,(x-a_1)^{\nu(a_1-a)}\,(a_2-x)^{-\nu(a_2-a)} \tag{C.53}$$

$$= \frac{1}{\mathrm{B}(m_1+1, m_2+1)}y^{m_1}\,(1-y)^{m_2} \tag{C.54}$$

$$x \mapsto y = \frac{x-a_1}{a_2-a_1}, \tag{C.55}$$

avec m_1 et m_2 définis ainsi :

$$m_1 = \frac{a_1-a}{b_2\,(a_2-a_1)} \tag{C.56}$$

$$m_2 = \frac{a-a_2}{b_2\,(a_2-a_1)}. \tag{C.57}$$

La constante C s'exprime elle aussi à l'aide de la fonction Beta :

$$C = \frac{(a_2 - a_1)^{\nu(a_2-a_1)-1}}{\mathrm{B}(1+\nu\,(a_1-a)\,,1-\nu\,(a_2-a))}. \tag{C.58}$$

Il est cependant nécessaire que $m_1 > -1$ et $m_2 > -1$ pour que l'intégrale converge. L'intervalle sur y contient 0 si $m_1 \geq 0$, 1 si $m_2 \geq 0$.

Dans le second cas, les deux racines sont de même signe, et la solution définie en 0 a un domaine de définition délimité seulement par la racine la plus proche de 0 d'un côté, et non borné de l'autre. On suppose désormais que les racines sont toutes les deux négatives, donc $a_1 < a_2 < 0$. L'égalité (C.51) se réécrit alors :

$$p(x) = C\,(x-a_1)^{\nu(a_1-a)}\,(x-a_2)^{-\nu(a_2-a)}\,, \tag{C.59}$$

où C est la constante de normalisation. La fonction peut être normalisée en fonction de distribution de probabilité si, et seulement si,

$$\begin{aligned} a_2 - a &< b_2(a_2-a_1) && \text{(C.60)}\\ b_2 &< 1, && \text{(C.61)} \end{aligned}$$

ce qui force a compris entre a_2 et a_1. Or ceci est garanti par la définition de ces trois quantités.

C.3.3 Domaines d'usage des distributions de Pearson

Les distributions de Pearson I, IV et VI sont définies pour toute asymétrie et kurtosis envisageables sur une distribution statistique positive, sachant la relation :

$$\alpha_4 \geq \beta_3 + 1 \tag{C.62}$$

En les caractérisant par le discriminant de l'équation (C.34) :

$$\Delta = \beta_3\,(r-2)^2 - 16\,(r-1)\,, \tag{C.63}$$

et le produit des racines éventuelles du dénominateur, il est possible de décrire tous les domaines des différentes distributions de Pearson.

Le domaine dans lequel la distribution est une Pearson IV est donné dans l'inégalité (C.40). Vue comme une équation du second degré en β_3, l'inégalité peut s'écrire :

$$\beta_3 < f(\alpha_4) \quad \Leftrightarrow \quad |\alpha_3| < \sqrt{f(\alpha_4)}. \tag{C.64}$$

À l'extérieur du domaine de la Pearson IV – hors de l'adhérence –, le trinôme au dénominateur s'annule en deux valeurs. Partons d'un point de l'axe $\beta_3 = 0$ et fixons $\alpha_4 > 3$. La figure C.6 représente les domaines de validité des différentes distributions de Pearson. Près du domaine de la Pearson IV, les deux racines du dénominateur sont de même signe, tandis qu'en s'éloignant un peu plus, le discriminant s'éloigne suffisamment de 0 pour qu'une des racines change de signe. Le domaine de la Pearson IV est donc entouré par celui de la Pearson VI, lui-même entouré par le domaine de la Pearson I jusqu'à la frontière $\alpha_4 \geq \beta_3 + 1$.

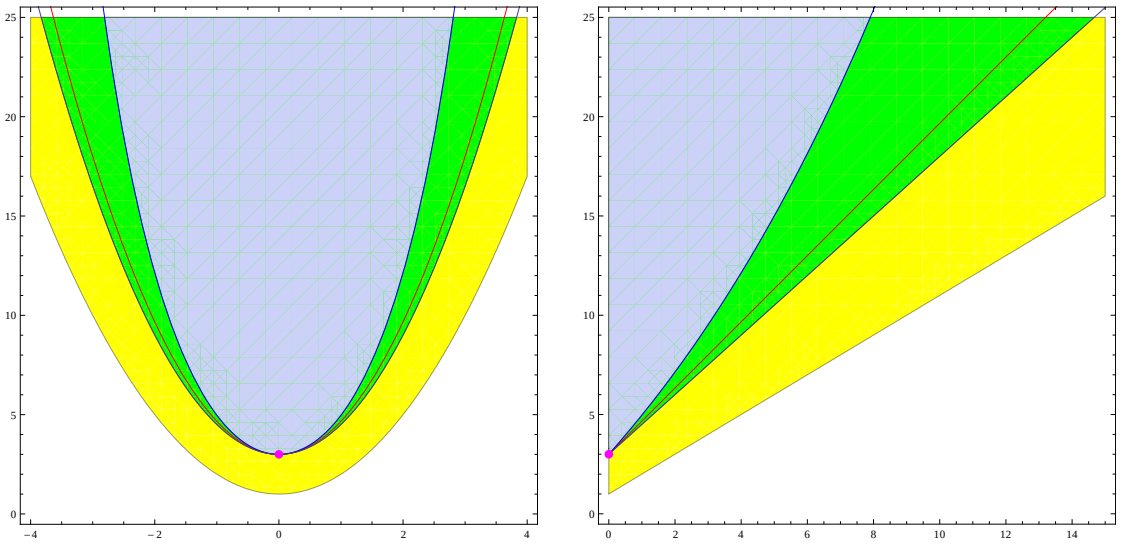
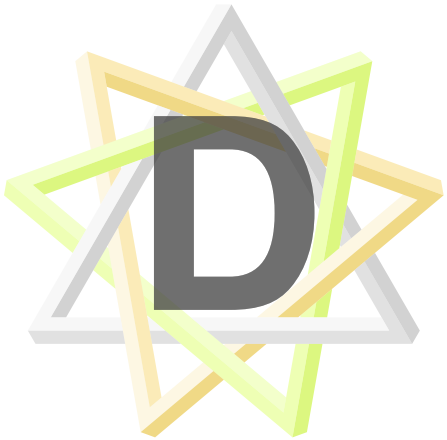


FIGURE C.6 – Domaines en (α_3, α_4) (à gauche) et (β_3, α_4) (à droite) dans lesquels les différentes distributions de Pearson sont applicables. La Pearson IV s'applique dans la région bleue, la Pearson VI dans la région verte et la Pearson I dans la région jaune. La courbe rouge dénote la limite inférieure en α_4 d'application de la NIG et le point rose la loi normale, symétrique et de kurtosis égal à 3.

Restent deux cas limites, aux frontières des domaines : le cas où $\Delta = 0$ et le cas où une racine est nulle, autrement dit $b_0 = 0$. Si $\Delta = 0$, alors le trinôme admet une racine double en un point, et la solution est une Pearson de type V, ou distribution gamma inverse. L'équation de la courbe correspondante, qui délimite Pearson IV et Pearson VI, est

$$63\beta_3 + 36\beta_3^2 - 96\alpha_4 - 78\beta_3\alpha_4 + 32\alpha_4^2 - \beta_3\alpha_4^2 = 0 \tag{C.65}$$

Si $b_0 = 0$, c.-à-d. $r = 1$, une des racines du trinôme est nulle, et la solution est une Pearson de type III, dite aussi loi gamma ou loi du chi-carré. La loi normale est un cas de Pearson III.



SORTIE DU CODE SCORCG

Très similaire à celle de SCO, l'exécution de SCORCG se fait en deux étapes, qui peuvent être enchaînées automatiquement lors de calculs intensifs. La première exécution, ou mode préparatoire, est en tous points semblable à celle de SCO, il s'agit de préparer le calcul du spectre en opacité par un calcul à l'atome moyen, qui permet, entre autres, de sélectionner les configurations et supraconfigurations à inclure.

Le paramétrage adéquat des fenêtres et grilles de calcul est crucial dès que des spectres à résolution très fine sont manipulés. De plus, la liste de supraconfigurations sélectionnées peut être modifiée par l'utilisateur,ce qui permet des calculs ion par ion ou en sélectionnant différemment les configurations.

La seconde exécution, ou mode exécutoire, se fait à partir du fichier écrit en mode préparatoire. SCORCG relit l'intégralité du fichier et, supraconfiguration par supraconfiguration, calcule l'ensemble des faisceaux de transition dipolaires electriques autorisés. En-dehors du couplage SCO - RCG, la sortie de SCORCG se compose de plusieurs types de données. Les données sur l'atome moyen, les supraconfigurations et les transitions sont conservées.

1. L'ensemble des données de structure atomique à l'atome moyen, à savoir :
   - l'énergie moyenne de chaque sous-couche ;
   - le nombre moyen d'électrons par sous-couche ainsi que son écart-type ;
2. Pour chaque supraconfiguration sont conservées :
   - la structure de la supraconfiguration ;
   - les énergies individuelles ;
   - les intégrales radiales à un et deux électrons pertinentes pour le calcul du faisceau de transition ;
   - les intégrales dipolaires électriques ;
   - la fonction de partition ;
   - les abondances relatives dans le plasma ;

   et, si la supraconfiguration est une configuration détaillée :
   - la structure fine, sous la forme $(J, E_{\gamma J})$;

- les moments réduits d'ordres 3 à un nombre défini par l'utilisateur (4 par défaut), dans l'approximation SWAP ou avec pondération par le facteur de Boltzmann ;
- la fonction de partition détaillée ainsi que les abondances relatives avec cette fonction de partition.

3. Le calcul des faisceaux de transition : pour chaque (supra)faisceau de transition sont conservées :

   - l'énergie moyenne du faisceau (moment statistique d'ordre 1) ;
   - la force du faisceau (moment d'ordre 0)
   - l'élargissement statistique du faisceau (moment statistique d'ordre 2)
   - tous les élargissements physiques : naturel, Doppler, Stark et collisionnel (si activés), ainsi que les élargissements gaussien et lorentzien totaux, la FWHM et le facteur de forme ;
   - les corrections de relaxation et de thermodynamique ;
   - le traitement du faisceau de transition et la motivation du choix.

   Si la supraconfiguration de départ est une configuration individuelle :

   - le nombre de raies de chaque faisceau, détaillé ou non ;
   - la complexité du calcul détaillé ;

   et, si le faisceau de transition est détaillé,

   - le nombre de raies total et de super-raies traitées ;
   - les moments d'ordre supérieur à 2 dans l'approximation SWAP ainsi que ceux calculés en pondérant la probabilité des niveaux par le facteur de Boltzmann.

Le programme enregistre les données importantes issues du calcul SCORCG.

1. Les spectres en opacité SCO, déjà présents dans la version de SCO avant couplage avec RCG. Ils ont un nombre assez limité de points, jamais supérieur à 20000. Les données enregistrées regroupent notamment :

   - la diffusion ;
   - l'opacité libre-libre ;
   - l'opacité lié-libre ;
   - l'opacité lié-lié ;
   - l'opacité totale.

2. Les spectres en opacité détaillée, avec un bien plus grand nombre de points puisqu'ils utilisent la grille détaillée. L'opacité statistique étant interpolée sur la grille détaillée, les données suivantes sont écrites :

   - la somme des opacités impliquant des états libres ainsi que la diffusion ;
   - l'opacité lié-lié de tous les faisceaux de transition traités en statistique ;
   - l'opacité lié-lié de tous les faisceaux de transition traités en détaillé ;

- l'opacité lié-lié totale ;
- l'opacité totale.

3. Les spectres « de présentation », écrits avec la grille de sortie ou une combinaison des grilles détaillée et statistique, qui incluent sous forme convoluée par la largeur instrumentale :
   - le spectre en transmission ;
   - le spectre en émission ;
   - le spectre en opacité si désiré.

LISTE DES TABLEAUX

1.1 Formalismes et fonctions de partition rencontrés ultérieurement. 17

2.1 Correspondance nombre - lettre pour le moment cinétique orbital. 28
2.2 Noms des couches électroniques. 35
2.3 Les configurations de gaz noble. 37
2.4 Exemple de J-moissonneuse sur d^3, passage de $Q(L,S)$ à $Q(J)$. 43

3.1 Quantités relatives aux largeurs de profil. 58

5.1 Évolution des tailles des différents tableaux dans les versions utilisées du code Cowan. 91

6.1 Récapitulatif de l'expression des fonctions de partition et des probabilités utilisées dans l'approche hybride. 106

7.1 Définition des moments d'ordre 0, 2 et 4 sous forme discrète et continue. 126
7.2 Comparaison des variances et des dégénérescences des orbitales ℓ^w. . . . 129
7.3 Effet multiplicateur des excitations sur le poids statistique $g_{C'}$ de la configuration finale. 132
7.4 Dégénéresences relatives de configurations excitées de l'aluminium VI. Les énergies et températures sont en eV. Inex. signifie que la température d'inversion est inexistante car $g_{C'} < g_C$. 133
7.5 Dégénéresences relatives de configurations excitées du fer VI. Les énergies et températures sont en eV. 133
7.6 Élargissements relatifs $\frac{w_g}{w_s}$ et $\frac{w_l}{w_s}$ pour lesquels on a $\chi = 0,02$, sur différents faisceaux de transition. 146
7.7 Légende des types de faisceaux, d'après la nomenclature de Chap. 2. . . 146

8.1 Moments d'ordre 3 et 4 des deux faisceaux de transition. 157
8.2 Élargissements relatifs $\frac{w_g}{w_s}$ et$\frac{w_l}{w_s}$ pour lesquels on a $\chi = 0,02$ entre le DTA et l'UTA NIG d'ordre 4, sur des faisceaux de transition dont les moments réduits α_3 et α_4 sont dans le domaine accessible à la NIG. 159
8.3 Niveaux des configurations $3s^2 3p^2$ (gauche) et $3s^2 3p 3d$ (droite) du phosphore ionisé une fois. Le classement est fait par J puis énergie croissants. 168

9.1 Distributions ioniques obtenues par SCORCG lors d'un calcul à 16 eV et 5 mg/cm^3, en calcul totalement statistique et en calcul hybride. 184

A.1 Grandeurs caractérisant le champ de rayonnement. La fréquence, le nombre d'onde et quelquefois la pulsation ou la longueur d'onde remplacent l'énergie spectrale. 209

B.1 Variations de k, μ et ϕ entre le profil gaussien et le profil lorentzien. . . . 216

C.1 Conversion des moments aux paramètres NIG. 228

TABLE DES FIGURES

1.1 Les différents types de plasmas en fonction de la température et de la densité. La zone rouge correspond à la dégénérescence du gaz d'électrons, la zone verte au couplage ionique. La zone bleue correspond approximativement au domaine d'étude de la thèse. 8

1.2 Schéma des différents processus d'absorption (gauche) et opacité de l'aluminium à la température de 40 eV et 10 mg/cm^3 montrant les trois contributions : libre-libre continue mais faible, lié-libre avec ses seuils et lié-lié caractérisée par de nombreuses raise (droite). 22

1.3 Schéma de la propagation dans un milieu absorbant. 23

2.1 Schéma de l'atome en couches : chaque couche se divise en orbitales qui se divisent en cases qui peuvent chacune contenir 2 électrons. L'énergie n'est pas à l'échelle. L'atome est un lithiumoïde avec deux électrons dans l'orbitale $1s$ et un électron avec $(m_\ell = -1, m_s = +1/2)$ dans l'orbitale $3p$. 35

2.2 Répartition des électrons dans les orbitales des ions Mg^{4+} $1s^2 2s^2 2p^4$ (gauche) et Fe^{7+} $[Ar]\, 4s$ (droite). 36

2.3 Schéma de couplage des moments cinétiques envisageables entre les moments cinétiques de chaque électron (en haut) et les moments cinétiques de la configuration (en bas). La flèche bleue illustre la démarche du couplage LS, la flèche rouge illustre la démarche du couplage jj. 38

2.4 Décomposition en niveaux d'énergie de la configuration p^2 suivant les couplages LS (gauche) et jj (droite). 39

2.5 Représentation des différents chemins de couplage permettant d'arriver vers $Q(L,S)$ et $Q(J)$ via les différentes distributions intermédiaires. Les flèches en pointillés représentent le passage, irréversible, d'une description par rapport à (L,S) à une description par rapport à J. Les flèches doubles indiquent le passage d'une description en états à une description en termes ou niveaux. Les flèches larges indiquent le couplage entre plusieurs orbitales. L'ensemble des flèches indiquent le sens dans lequel on peut évoluer. Les flèches rouges sont les opérations pour lesquelles la J-moissonneuse peut être utilisée ; la flèche en bleu indique l'opération fastidieuse équation (2.47) ; en vert est indiqué ce qui est tabulé Réf. [8]. 42

2.6 Illustration de la zone (points en vert dans le rectangle bleu) dans laquelle la relation du triangle est satisfaite pour $(L_x = 6, S_x = 3)$ et $J = 2$. 42

3.1 Schéma des concepts de transition lié-lié utilisés dans ce chapitre. 50

3.2 Comparaison entre le spectre produit à une température de 16 eV et une densité de 5 mg/cm^3 par notre approche et un spectre expérimental en transmission à la masse surfacique de 40 μg/cm^2 [54, 55]. 64

3.3 Spectres en transmission du fer à 155 eV, avec une profondeur optique de $32,8$ μg/cm^2. 65

4.1 w_i^* minimal (ordonnées) en fonction de g_i (abscisse) dans le cas où $m = 2$ et $m = \sqrt{g_i}$ pour que les configurations avec $w_i = 1$ puissent être incluses 73

5.1 Schéma des différents types de faisceaux de transition lié-lié rencontrés lors d'un calcul SCO. 88
5.2 Schéma de fonctionnement de l'approche hybride dans SCORCG. 94
5.3 Détail d'un spectre en transmission mettant en évidence les différentes grilles dans un calcul en transmission. 96
5.4 Enveloppes et moyennes glissantes du spectre en opacité de la couche M du cuivre, avec $\delta = 0,1$ eV. 96
5.5 Détail de l'opacité autour de 87 eV montrant l'effet de la résolution de la grille sur la forme du spectre. 97
5.6 Comparaisons des contributions détaillée et statistique en fonction de la supracouche-chapeau. 99
5.7 Comparaison de transmissions à travers un milieu optiquement mince en fonction de la supracouche-chapeau. Les courbes plus ou moins discontinues au-dessus indiquent l'opacité lié-lié totale, les courbes continues dessous indiquent la contribution statistique au lié-lié. 100
5.8 Comparaison de l'opacité en couche L de l'aluminium à 20 eV et 10 mg/cm^3 avec ou sans convolution des faisceaux et des raies par un élargissement expérimental de paramètre $0,7$ eV. 101
5.9 Comparaison des spectres en transmission détaillés et statistiques obtenus par les deux méthodes de prise en compte de l'élargissement expérimental. 102

6.1 Haut : spectre en opacité de l'aluminium à 10^{-2} g/cm^3 et 37 eV avec 200 supraconfigurations. Milieu : composantes de l'opacité lié-lié hybride comparées avec l'opacité statistique. Bas : intensité totale des faisceaux ayant tel nombre de raies. 113
6.2 Spectre en opacité du germanium à 43 eV et 25 mg/cm^3, avec 200 000 raies par faisceau. 114
6.3 Comparaison des contibutions détaillée et statistique à l'opacité dans les mêmes conditions que Fig. 6.2. 114
6.4 Transmission du fer à 150 eV et 58 mg/cm^3. 115
6.5 Opacité et contributions du cuivre à 35 eV et 4 mg/cm^3. 116
6.6 Transmission de la couche L du germanium à 70 eV et 50 mg/cm^3. 117

7.1 Enveloppe (haut) et détail (bas) d'un spectre de cuivre à 10^{-3} g/cm^3 et 20 eV calculé selon les trois méthodes de gestion des raies. 137
7.2 Effet du spin-orbite sur la modélisation par MUTA pour une séquence isoélectronique (même remplissage, Z variable) sur $[\mathrm{Ar}]\, 3p^6 3d^2 4s - 3p^5 3d^2 4s 4d$ (51 878 raies) pour $Z = 29$, 39 et 49. L'elargissement gaussien est de $0,5$ eV, et le seuil est la force de raie moyenne. 140
7.3 Diagramme semi-logarithmique du faisceau de transition $\mathrm{Cu}^{8+} 3d^6 - 3d^5 4f$ calculé raie par raie et en MUTA à la moyenne, avec un élargissement gaussien de 2.10^{-2} eV. 141
7.4 Comparaison d'un calcul de faiseau $\mathrm{Cu}^{8+} 3p^6 3d^2 4s - 3p^5 3d^3 4s 4d$ en détaillant toutes les rais et avec un MUTA à la moyenne. 141
7.5 À gauche : un faisceau de transition avec des élargissements de plus en plus élevés en descendant. À droite : trois faisceaux de transition pour lesquels $\chi \simeq 0,02$, de formes variées. 143

7.6 Graphes de surface représentant l'indicateur de forme χ en fonction des élargissements gaussien et lorentzien en eV, pour, du haut vers le bas, les faisceaux de transition $Cu^{7+}3d^34p - 3d^35d$, $Cu^{7+}3d^4 - 3d^34f$ et $Cu^{5+}3d^6 - 3d^55p$. 147

8.1 Faisceau de Germanium X $3d^44p - 3d^34p4f$, tracé sur un graphe linéaire (gauche) et semi-logarithmique (droite). Le faisceau a 88 492 raies dipolaires électriques. 152
8.2 Faisceau de Gadolinium V $4f^55d - 4f^56p$, graphes comme Fig. 8.1. . . . 152
8.3 Cartographie de l'asymétrie (abscisses) et du kurtosis (ordonnées) des faisceaux de transition de l'aluminium à 40 eV et 10 mg/cm^3. L'intensité des faisceaux est proportionnelle à l'aire contenue dans chaque cercle, triangle et carré ; la couleur dénote les couches initiale et finale tandis que la forme dénote les ℓ initial et final. Les intensités ont été multipliées pour les couches K et M. La parabole bleue minore en α_4 le domaine dans lequel asymétrie et kurtosis peuvent prendre leurs valeurs pour toute distribution positive ; la parabole rouge minore en α_4 le domaine dans lequel la NIG (voir Sec. C.2 dans les annexes.) est calculable. 154
8.4 Cartographie des moments d'ordre 3 et 4 des faisceaux de transition du cuivre à 35 eV et 4 mg/cm^3, l'aire enclose étant proportionnelle à l'intensité du faisceau. Le médaillon montre la totalité des faisceaux de transition sur une plage plus large. 155
8.5 Cartographie du nombre de raies des faisceaux du cobalt en fonction de l'asymétrie et du kurtosis des faisceaux. 156
8.6 Cartographie du nombre de raies (proportionnel à l'aire) des faisceaux du cobalt en fonction de l'asymétrie et du kurtosis des faisceaux. 157
8.7 Faisceau de Germanium X $3d^44p - 3d^34p4f$, tracé sur un graphe linéaire (gauche) et semi-logarithmique (droite). 158
8.8 Faisceau de Gadolinium V $4f^55d - 4f^56p$, graphes comme Fig. 8.7. . . . 158
8.9 Histogramme comparant les élargissements à la limite de la coalescence $\chi = 0,02$. 159
8.10 Graphes de surface des indicateurs de forme à l'ordre 2 (légende `chi2d2`) et à l'ordre 4 (légende `chi2d4`), pour les faisceaux $Cu^{7+}3d^4 - 3d^34f$ (en haut), $Cu^{7+}3d^54p - 3d^55d$ (au milieu) et $Gd^{6+}4f^44f^36d$ (en bas). 161
8.11 Faisceaux de transition du chrome II $3d^44s - 3d^34s4f$: comparaison des formes SWAP et à 4 températures différentes. 163
8.12 Faisceaux de transition du fer XIII, $3p^4 - 3p^33d$ en haut, $3p^33d - 3p^23d^2$ en bas. Graphes linéaires à gauche, semi-logarithmiques à droite. 164
8.13 Intensité totale, moyenne et variance des faisceaux du fer XIII exprimés en fonction de la température par rapport aux moments SWAP. 166
8.14 Probabilités des termes spectroscopiques (gauche) et des niveaux (droite) en fonction de l'inverse de la température β pour la configuration P II $3s^23p^2$ (haut) et $3s^23p3d$ (bas). 168

9.1 Schéma d'un dispositif de type Z-pinch. 179
9.2 Schéma du dispositif expérimental utilisé lors de la campagne d'expériences 2008 au LULI. 180
9.3 Transmission du cuivre à 16 eV, 4 mg/cm^3 et avec une masse surfacique de 40 μg/cm^2. 182

9.4 Transmission du cuivre à 20 eV, 4 mg/cm^3 et avec une masse surfacique de 20 μg/cm^2. 183
9.5 Transmission du cuivre par état de charge à 20 eV et 4 mg/cm^3, en fonction de la longueur d'onde. 183
9.6 Spectres en transmission dans la zone d'excitation $2p - 3d$ SCO et SCORCG comparés au spectre expérimental à cinq températures différentes. Le calcul en bas à droite présente la totalité de la fenêtre spectrale à 42 eV, température de meilleure correspondance. 185
9.7 Spectres en transmission issus de l'expérience de Bailey et des calculs en gradient à trois (violet) et cinq températures. Les spectres calculés par SCORCG ont été décalés de 1 eV vers la gauche. 187
9.8 Répartition des états de charge aux cinq températures, et dans les deux calculs de gradients effectués. 187
9.9 Comparaison du niobium issu de l'expérience de Perry avec un calcul SCORCG à 47 eV, 17 mg/cm^3 et avec une masse surfacique de 150μg/cm^2. 188
9.10 Comparaison du spectre expérimental de niobium obtenu par Perry [109] avec des spectres théoriques pour lesquels l'énergie spectrale a été légèrement transformée. $k = 0,92, h\nu^\circ = 2280$ eV à gauche ; $k = 0,96, h\nu^\circ = 2360$ eV à droite. 189
9.11 Spectres en transmission de l'aluminium, avec l'expérience de Davidson, un calcul SCO et un calcul hybride à 37 eV et 10^{-2} mg/cm^3, avec une masse surfacique de 54 μg/cm^2. Les légendes avec astérisque indiquent des calculs sans prise en compte des effets de densité (interaction avec les électrons libres, cf Sec. 6.3.2). 190
9.12 Transmission des états de charge calculée sans pondération par la probabilité. 191
9.13 Comparaison du spectre expérimental avec des spectres théoriques. Le diagramme en bas à droite représente la distribution ionique. 193
9.14 Comparaison du spectre en transmission obtenu par l'équipe de J. BAILEY à Sandia [56] avec des calculs SCORCG à une densité de 0,058 g/cm^3, et des températures de 150, 155 et 160 eV. 194
9.15 Comparaison du spectre expérimental avec un calcul SCO ion par ion recombiné avec une distribution ionique légèrement modifiée. 195

B.1 Comparaison de fonctions de Voigt (rouge) et Pearson VII (bleu) correspondantes, pour, dans le sens de lecture habituel, $k = 0,2$ (semi-logarithmique), $k = 0,4$ (linéaire), $k = 1,5$ (linéaire) et $k = 2$ (semi-logarithmique). 217

C.1 Comparaison de distributions de Gram-Charlier à l'ordre 4 avec la loi normale. De haut en bas : distributions régulières, distributions très asymétriques et distributions limite ou en partie négatives. 224
C.2 De gauche à droite, lieux des points (α_3, α_4) pour lesquels le discriminant des polynômes multiplicateurs de la distribution de Gram-Charlier et ses deux premières dérivées est nul. Le domaine coloré est celui dans lequel le nombre de racines est minimal. Les figures ne sont pas à l'échelle. La pointe colorée inférieure correspond au point $(\alpha_3, \alpha_4) = (0, 3)$, autrement dit à la gaussienne. 225

C.3 Superposition de différents domaines (α_3, α_4) relatifs aux propriétés de la distribution de Gram-Charlier. La distribution est positive dans le ballon bleu. La dérivée s'annule une seule fois à l'intérieur du domaine vert, trois dans les lobes cyan et brun, cinq ailleurs. La dérivée seconde s'annule deux fois dans le domaine rouge, quatre dans les domaines jaune et brun et six dans les autres domaines. 226
C.4 Exemples de distributions gaussiennes normales inverses d'aire égale à 1, moyenne nulle et variance égale à 1. Le diagramme en médaillon représente les mêmes courbes en semi-logarithmique. 229
C.5 Comparaison des domaines de définition des distributions de Gram-Charlier (bleu) et NIG (rouge). Asymétrie en abscisses et kurtosis en ordonnées. 229
C.6 Domaines en (α_3, α_4) (à gauche) et (β_3, α_4) (à droite) dans lesquels les différentes distributions de Pearson sont applicables. La Pearson IV s'applique dans la région bleue, la Pearson VI dans la région verte et la Pearson I dans la région jaune. La courbe rouge dénote la limite inférieure en α_4 d'application de la NIG et le point rose la loi normale, symétrique et de kurtosis égal à 3. 234

Résumé

Dans les plasmas chauds et denses, la contribution des phénomènes radiatifs au transfert d'énergie est souvent prédominante. L'opacité de ces plasmas a donc une incidence majeure sur leur structure et leur évolution.

En principe, le calcul raie par raie de l'opacité spectrale permet d'obtenir les résultats les plus précis, mais il nécessite souvent une grande quantité de ressources. À l'inverse, les méthodes statistiques de calcul d'opacité sont capables de prendre en compte un très grand nombre d'états excités, mais elles ne restituent pas les raies détaillées et ne sont pas toujours adaptées à des calculs destinés à la spectroscopie.

L'objectif de la thèse est de calculer l'opacité de plasmas chauds en combinant ces deux approches. La méthode présentée a rendu possible le couplage d'un code de calcul d'opacités avec un code de structure atomique. Le modèle développé a été utilisé pour l'interprétation de spectres expérimentaux (laser, Z-pinch) et des pistes d'optimisation sont envisagées.

Mots-clefs

Physique atomique, plasmas chauds, photoabsorption, structure fine, méthodes statistiques.

Abstract

In hot dense plasmas, most energy transfer is due to radiation. Therefore, the effects of opacity on structure and evolution of plasmas are quite important.

Normally, detailed line by line calculation of plasma opacities give the most precise results, but sometimes requires such an amount of resources it is not tractable. Conversely, the use of statistical enables one to handle a large number of excited states, but do not render any detailed line, thus are not always suitable for spectroscopy calculation.

The goal of the thesis is to calculate opacities of hot plasmas with joint use of both approaches. The presented method allowed the coupling of an opacity code with an atomic structure code. The developed model has been used to interpret experimental spectra (laser, Z-pinch).

Keywords

Atomic physics, hot plasmas, photoabsorption, fine structure, statistical methods.