

UNIVERSITÉ PARIS-SUD XI

ÉCOLE DOCTORALE 288 :
ONDES ET MATIÈRE

Laboratoire : Interactions dynamique et lasers

THÈSE DE DOCTORAT

PHYSIQUE

par

Madeny Belkhiri

**Plasma out of thermodynamical equilibrium : influence of
the plasma environment on atomic structure and
collisional cross sections**

Date de soutenance : Le 3 Novembre 2014

Composition du jury :

Directeur de thèse :	Michel Poirier	Chercheur C.E.A Saclay
Rapporteurs :	Christophe Blancard Olivier Peyrusse	Ingénieur-chercheur C.E.A Bruyères-le-châtel Ingénieur-chercheur CELIA
Examineurs :	Guy Bonnaud Djamel Benredjem Jean-Marcel Rax	Professeur INSTN Professeur Paris XI Sud Professeur Paris XI Sud

Résumé

Dans les plasmas chauds denses, l'interaction d'un ion avec les autres ions et les électrons libres peut affecter fortement la structure atomique. Pour tenir compte de ces effets, nous avons implémenté un potentiel plasma fondé sur le modèle d'un gaz d'électron uniforme et sur une approche de type Thomas-Fermi dans le Flexible Atomic Code (FAC). Ce code a été utilisé pour obtenir les énergies, les fonctions d'onde, et les taux radiatifs modifiés par l'environnement plasma. Dans des ions hydrogénoïdes, les résultats numériques ont été comparés avec succès à un calcul analytique basé sur la théorie des perturbations du premier ordre. Dans le cas des ions multi-électroniques, on observe un décalage des niveaux, en accord avec d'autres calculs récents. Diverses méthodes pour les calculs de section efficace de collision sont examinées. L'influence de la densité du plasma sur ces sections est analysée en détail. Certaines expressions analytiques sont proposées pour les ions hydrogénoïdes dans la limite où l'approximation de Born ou Lotz s'applique et sont comparés aux résultats numériques du code de FAC. Enfin, à partir de ce travail, nous étudions l'influence de l'environnement de plasma dans le cadre d'un nouveau modèle collisionnel-radiatif nommé Foch que nous avons élaboré au cours de cette thèse. En raison de cet environnement, la charge moyenne du plasma augmente, ce qui est principalement dû à l'abaissement du continuum. Nous observons également un décalage des raies sur les spectres d'émission. Un bon accord est trouvé entre notre travail et les données expérimentales sur un plasma de titane.

Keywords : Modèle collisionnel-radiatif, sphère ionique, potentiel plasma, Flexible Atomic Code, Section efficace collisionnelles

Chapitre 9

Synthèse

9.1 Introduction

La principale information à laquelle les physiciens ont accès, est le rayonnement émis par le plasma. L'objectif du théoricien est de construire une théorie capable de retrouver ou de prédire ces informations. Les photons émis par un plasma sont le résultat de transitions d'un état atomique à un autre. Par conséquent, pour décrire les propriétés spectrales (émissivité, absorption), il est nécessaire de déterminer les niveaux d'énergie atomiques et leurs occupations. La modélisation d'un tel problème est une tâche complexe car le plasma est un problème à N-corps. Pour contourner cette difficulté, deux descriptions physiques doivent être combinées, l'approche statistique et l'approche atomique. La physique atomique est utilisée pour calculer les populations atomiques, les énergies et les fonctions d'onde, tandis que la physique statistique permet de caractériser la thermodynamique du plasma.

Deux approches se dégagent pour modéliser les plasmas. La première approche tient d'abord compte de l'environnement et de la thermodynamique d'une manière cohérente et est classé sous le terme générique de modèle de l'atome moyen. Par environnement nous entendons l'ensemble des effets des électrons libres et des ions voisins sur l'ion central. La seconde approche cherche tout d'abord à déterminer la structure atomique d'un ion isolé, puis dans un second temps détermine les populations des niveaux atomique par des lois statistiques ou des équations cinétiques. Ces théories sont nommées ici "Hartree-Fock-type" même si une autre description atomique pourrait être utilisée.

A l'équilibre thermodynamique les populations atomiques sont déterminées par les équations de Saha-Boltzmann. Dans le régime hors de l'équilibre thermodynamique aucune loi statistique ne peut plus être déduite. En conséquence chaque état atomique dépend de tous les processus atomiques qui le peuplent et le dépeuplent. Ces processus atomiques sont divisés en deux catégories, les processus de collision et radiatifs. Pour calculer ces quantités, la physique atomique associée aux théories de la diffusion doivent être considérés. Par conséquent, pour obtenir les populations atomiques, il faut résoudre des équations ciné-

tiques. Cette approche conduit à construire un modèle appelé modèle collisionnel-radiatif .

Le but de ce travail de thèse est de fournir une description détaillée des plasma, le plus souvent hors équilibre thermodynamique local. Pour réaliser cette tâche, une approche de type Hartree-Fock basé sur le code atomique FAC [20] a été choisie. Ce dernier fournit la structure atomique ainsi que les sections efficaces collisionnelles. Un code collisionnel-radiatif nommé Foch a été développé pour obtenir les populations atomique, l'émissivité du plasma et d'autre propriétés. Ce code est capable de réaliser des calculs détaillés ou en Unresolved Transition Array (UTA). Dans ce travail, un important effort a été fait pour inclure l'environnement plasma dans le calcul de structure atomique. En effet, dans les approches de notre domaine, les ions du plasma sont considérés comme isolés. Pour modéliser cet environnement plasma nous avons choisis le modèle dit de la sphère ionique. La thèse s'articule ainsi autour de trois objectifs :

- Construire un code cinétique utilisant les données de FAC pour obtenir les populations atomique, ainsi que les spectres d'émission.
- Prendre en compte l'environnement plasma tout en conservant une description atomique précise.
- Étudier les sections efficaces collisionnelles. Ce point a été motivé par l'inclusion de l'environnement plasma, mais également par la nécessité de réduire le temps de calcul

9.2 Définition des plasmas étudiés

Plusieurs paramètres sans dimensions caractérisent les propriétés des plasmas que nous étudions. La densité électronique N_e et ionique N_i sont liées par la condition de neutralité

$$N_e = Z^* N_i$$

Z^* étant la charge moyenne du plasma, nous exprimons dans ce travail la densité en cm^{-3} . Même si nous étudie est principalement hors de l'équilibre thermodynamique, nous supposons les électrons libre thermalisés, et ainsi nous pouvons donc les décrire par une température kT_e . Le paramètre k est la constante de Boltzmann et T_e la température des électrons. Cependant par convenance kT_e désigne la température. Deux mécanismes sont en compétition dans les plasmas : l'agitation thermique et l'interaction Coulombienne entre électrons. Cette compétition est mesuré par le paramètre de couplage Γ . Cette quantité est définie [3] par

$$\Gamma = \frac{Z^{*2}}{R_0 k T_e} \quad (9.2.1)$$

en unité atomique, R_0 est défini par la condition de neutralité

$$R_0^3 = \frac{3Z^*}{4\pi N_e}. \quad (9.2.2)$$

Dans le cas d'une agitation thermique importante on a $\Gamma \ll 1$, le plasma est dit faiblement corrélé (plasmas idéaux) et le désordre domine. De tels plasmas se rencontrent en fusion magnétique et dans la couronne solaire. Au contraire pour $\Gamma \gg 1$, le plasma est fortement corrélé et il possède une structure organisée proche d'un fluide. Les intérieurs stellaires constituent un bon exemple de plasma dominé par les force Coulombienne.

Le second paramètre γ détermine si les électrons libres doivent être décrits par une approche classique ou quantique. Définissant la longueur d'onde thermique comme $\lambda_{th} = h/(2\pi mkT_e)^{1/2}$, où h est la constante de Planck et m la masse de l'électron. Nous exprimons γ par

$$\gamma = N_e \lambda_{th}^3 \quad (9.2.3)$$

Si $\gamma \ll 1$, une statistique de Maxwell-Boltzmann peut s'appliquer pour décrire les électrons libres mais si $\gamma \gg 1$ la statistique de Fermi-Dirac s'impose.

Ce travail se concentre sur les plasmas denses avec une densité comprises entre 10^{15}cm^{-3} et 10^{25}cm^{-3} , c'est à dire des densités proche de l'état solide. Concernant la température, elle se situe au-dessus de l'électron-volt, cependant, nous n'étudions pas les plasmas relativistes pour lesquels $kT_e \geq mc^2$. Ainsi, les plasmas considérés dans ce travail sont modérément à fortement corrélés $10 > \Gamma > 10^{-2}$, et la plupart du temps non-dégénérés $\gamma < 1$.

9.3 Cadre théorique

Dans le régime hors équilibre thermodynamique local (NLTE), les collisions par les électrons libres ne permettent pas d'assurer la thermalisation des niveaux ioniques à cause de l'importance des processus radiatifs. Sous cette hypothèse l'équation de Boltzmann n'est pas vérifiée, de même pour l'équation de Saha-Boltzmann. Dans le régime NLTE, nous devons tenir compte de tous les processus élémentaires qui peuplent et dépeuplent les niveaux atomiques. Ainsi pour obtenir les populations atomiques nous devons poser l'équation cinétique suivante

$$\frac{dn_j(z)}{dt} = \sum_{z'} \sum_k n_k(z) W_{kj}^{z',z} - n_j(z) \sum_{z'} \sum_i W_{ji}^{z,z'} \quad (9.3.1)$$

où $W_{ji}^{z,z'}$ est la matrice contenant tous les processus élémentaire qui contribuent à la dépopulation du niveau j de l'ion z vers le niveau i de l'ion z' . La matrice $W_{kj}^{z',z}$ représente tous les processus élémentaires qui peuplent le niveau j de l'ion z vers le niveau i de l'ion

z' . Les populations atomiques sont contraintes par la condition :

$$\sum_{z'} \sum_j n_j(z') = 1. \quad (9.3.2)$$

Ces équations de taux sont difficiles à résoudre pour plusieurs raisons. Premièrement pour décrire de manière précise un ion, nous devons décrire un très grand nombre d'états (plusieurs milliers en pratique), mais également étudier plusieurs ions. Ensuite, il faut prendre en compte toutes les transitions possibles entre ces ions, ce qui atteint aisément le million de transitions. Pour simplifier notre tâche, nous effectuons les hypothèses suivantes : un environnement optiquement fin, une thermalisation des électrons libres, une étude en régime stationnaire et un plasma uniforme. Ainsi, la thermodynamique du plasma est entièrement décrite par la température électronique kT_e et la densité électronique N_e .

9.4 Modélisation de l'environnement plasma

La plupart des développements présents dans littérature, via une approche de type Hartree-Fock modélisent un ion isolé. Cependant, notre travail est consacré à des ions immergés dans un environnement plasma. Peu de codes atomiques prennent en compte cet environnement. La plupart du temps l'effet du plasma est ajouté dans le code atomique à travers la théorie de perturbation ou bien à l'étape du code cinétique. Notre travail, constitue une première tentative d'inclusion de l'effet du plasma dans le code FAC. L'environnement des ions joue un rôle important à haute densité, conduisant à des effets tels que des changements de polarisation de plasma, une ionisation induite par la pression, des changements sur les spectres d'absorption et d'émission ainsi que sur l'équation d'état. Tenir compte de ces effets de manière cohérente est une tâche difficile puisque le nombre de particules impliquées est très élevé, ce qui suggère de traiter statistiquement les électrons libres. Comme mentionné par Rosznay[8] nous distinguons deux types d'approches pour modéliser l'environnement plasma : le modèle d'ion corrélation et le modèle de sphère ionique.

Dans le modèle d'ion corrélation, l'ion est immergé dans un médium polarisé infini (aussi nommé jellium). Asymptotiquement, les charges positives et négatives s'annulent mutuellement pour former un fond neutre. Le modèle d'ions corrélation est surtout connu et utilisé par la théorie de Debye-Hückel [87, 88, 89]. Une autre approche liée à la densité de la fonctionnelle est l'atome dans le jellium de Perrot [10] et Piron [11].

Dans le modèle de la sphère ionique, l'ion est enfermé dans une cellule qui contient le nombre exact d'électrons pour assurer la neutralité de la sphère. Le modèle de la sphère d'ionique a été largement utilisé [7, 9, 12, 90], afin d'obtenir des niveaux d'énergie et les taux de transition des ions dans les plasmas. Ces modèles supposent une symétrie sphérique et définissent une répartition de densité d'électrons qui obéit à des équations d'auto-cohérence. En couplant l'équation de Poisson et la distribution statistique des

électrons, on peut obtenir le modèle de Thomas-Fermi [91, 92] ou Thomas-Fermi relativiste [7], ou hypernetted-chain [3]. Toutes ces théories appartiennent à la théorie de la fonctionnelle de la densité [93]. Il faut remarquer qu'elles supposent toutes l'équilibre thermodynamique. En outre, certains formalismes supposent une symétrie cylindrique et utilisent une approche moléculaire décrivant l'interaction avec l'ion le plus proche [94]; cette approche concerne principalement les plasmas fortement corrélés. Lorsque qu'une description quantique réaliste des électrons liés est nécessaire et lorsqu'il s'agit de traiter des plasmas hors équilibre thermodynamique local (non-LTE), il est nécessaire de limiter le traitement statistique aux électrons libres. En vertu de cette hypothèse (ion-sphère + traitement statistique des électrons libres), nous avons tout d'abord utilisé le modèle d'un gaz uniforme d'électrons (UEGM), puis une approche de type Thomas-Fermi (TF). Les deux approches sont mises en œuvre dans le code FAC [20]. Nous rappelons qu'un modèle très populaire pour les décalage des niveaux qui effectue la connexion entre le Debye-Hückel et le modèle d'ions sphère a été développé par Stewart et Pyatt [95]. Toutefois ce modèle suppose un équilibre thermique pour les ions et les électrons, ce qui n'est donc pas directement utilisable dans l'analyse de plasmas hors de l'équilibre thermodynamique local.

Dans ce chapitre, nous abordons brièvement la théorie de Debye-Hückel. Ensuite, une discussion approfondie est effectuée sur le modèle de la sphère d'ions pour la UEGM et l'approche de type TF. Nous étendons les approches antérieures basées sur des hypothèses UEGM en dérivant des formules analytiques pour des ions hydrogénoides non relativistes. Ce travail d'analyse est utilisée pour vérifier les données atomiques du code FAC modifié.

9.5 Modèle de la sphère ionique

Tous les modèles rattachés à l'approche de la sphère ionique supposent une cellule neutre contenant un ion central plongé dans son environnement. De plus, il est supposé que la densité d'électrons libres annule exactement la densité ionique au delà de la sphère de Wigner-Seitz. Dans cette théorie le potentiel généré par cette densité de charge est calculé par l'équation de Poisson. Les différents modèles de sphère ionique se départagent sur la façon de déterminer la densité d'électrons libres. Nous présentons ici deux modèles de sphère ionique, le modèle du gaz d'électron uniforme et l'approche de type Thomas-Fermi.

9.5.1 Modèle du gaz d'électron uniforme

Le modèle du gaz d'électron uniforme (UEGM) suppose une distribution uniforme des électrons libre N_e . Cette hypothèse signifie que nous pouvons négliger la polarisation des électrons libres par le noyau. Cette hypothèse a été validé dans la référence [98], en comparant les valeurs théorique du modèle et des mesures expérimental dans le cas d'ions très chargés. Comme pour tout modèle de sphère ionique (par exemple [9]), nous

supposons qu'en dehors de la sphère, la densité d'électron libre compense la densité de l'ion. Ceci assume la condition de neutralité

$$Z - N_b - \frac{4}{3}\pi R_0^3 N_e = 0, \quad (9.5.1)$$

où R_0 est le rayon de la sphère, Z le numéro atomique, N_b le nombre d'électron lié et N_e la densité d'électron libre.

Sous l'hypothèse d'un gaz d'électron uniforme, nous obtenons le potentiel

$$V_{\text{plasma}}(r) = \frac{Z_f}{2R_0} \left(3 - \frac{r^2}{R_0^2} \right) \quad \text{si } r \leq R_0 \quad (9.5.2)$$

$$V_{\text{plasma}}(r) = \frac{Z_f}{r} \quad \text{si } r \geq R_0. \quad (9.5.3)$$

avec Z_f le nombre d'électrons libres défini par

$$Z_f = Z - N_b \quad (9.5.4)$$

Dans ce travail, nous n'avons pas imposé l'annulation des fonctions d'ondes à $r = R_0$, contrairement à d'autres auteurs [99, 100]. Sachant que nous nous intéressons à des plasma dense, le rayon de la sphère R_0 peut être assez large comme détaillé plus bas. De plus, l'annulation de la fonction d'onde sur la surface de la sphère implique un potentiel infiniment répulsif au-delà de la sphère, ce qui conduit à des effets non-physiques. Enfin, malgré sa simplicité le modèle UEGM a été validé contre des approches auto-consistante et s'est ainsi révélé tout à fait acceptable pour des densités modérées [101, 102, 103, 104].

9.5.2 Approche de type Thomas-Fermi

Les équations auto-consistantes définissant la densité d'électrons libres et le potentiel plasma dans une approche semi-classique — Thomas-Fermi restreint aux électrons libres — a été discutée dans une série d'articles [97, 104]. La condition de neutralité est toujours supposée dans la sphère de Wigner-Seitz de rayon R_0 définie par

$$4\pi R_0^3 N_e / 3 = Z_f, \quad (9.5.5)$$

avec les même notations que précédemment. Les électrons libres et les autres ions sont supposés se neutraliser, ainsi

$$n_e(r) = 0 \text{ for } r \geq R_0. \quad (9.5.6)$$

Afin de se conformer à la définition de la densité moyenne N_e , nous devons imposer

$$4\pi \int_0^{R_0} dr r^2 n_e(r) = Z_f. \quad (9.5.7)$$

Nous supposons que les électrons libres se thermalisent, mais pas nécessairement les ions ce qui est consistant avec les hypothèses du modèle collisionnel-radiatif. Ainsi la densité des électrons libres suit

$$n_e(r) \propto \int_{p_0(r)}^{\infty} dp p^2 \exp\left(-\left(\frac{p^2}{2} + V(r)\right)/k_B T_e\right) \quad (9.5.8)$$

où kT_e est la température des électrons libres et $p_0(r)$ est la valeur minimale de l'impulsion permettant à l'électron d'avoir une énergie positive i.e., $p_0(r) = (-2V(r))^{1/2}$ if $V(r) \leq 0$, or 0 if $V(r) > 0$. Le paramètre $V(r)$ est l'énergie associée à l'interaction électrostatique avec toute les charges incluse dans la sphère de Wigner-Seitz, c'est à dire le noyau, les électrons liés et libres

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Z}{r} + V_b(r) + V_{\text{pl}}(r). & r \leq R_0 \\ 0 & r > R_0 \end{cases} \quad (9.5.9)$$

Le terme $V_{\text{pl}}(r)$ décrit l'interaction avec les électrons libres, que nous avons nommé potentiel plasma. L'utilisation de la statistique de Fermi-Dirac n'est pas toujours nécessaire comme discuté dans la section 9.5.3. Nous avons également supposé que les électrons sont non relativistes, ce qui est vrai tant que $k_B T_e \ll 511$ keV.

La dernière équation, requise pour obtenir le potentiel plasma, est l'équation de Poisson. Sous forme intégrale cette dernière s'écrit

$$V_{\text{pl}}(r) = 4\pi \left(\frac{1}{r} \int_0^r ds s^2 n_e(s) + \int_r^{R_0} ds s n_e(s) \right). \quad (9.5.10)$$

Cette expression assure que $V_{\text{pl}}(r)$ ainsi que ses dérivées soient continue en $r = R_0$, sachant que $V_{\text{pl}}(r) = Z_f/r$ si $r \geq R_0$, d'après les hypothèses du modèle de sphère ionique.

En supposant le potentiel attractif $V(r) < 0$, l'équation de Maxwell-Boltzmann (9.5.8) conduit à

$$n_e(r) = \frac{K}{2} e^{-V(r)/k_B T_e} (2k_B T_e)^{3/2} \Gamma\left(\frac{3}{2}, -\frac{V(r)}{k_B T_e}\right) \quad (9.5.11)$$

$$= \frac{K}{2} (2k_B T_e)^{3/2} \left[\left(-\frac{V(r)}{k_B T_e}\right)^{1/2} + \frac{\pi^{1/2}}{2} e^{-V(r)/k_B T_e} \operatorname{erfc}\left(\left(-\frac{V(r)}{k_B T_e}\right)^{1/2}\right) \right] \quad (9.5.12)$$

la constante K provient de la condition de neutralité (9.5.7). Dans l'expression de la densité, nous avons introduit la fonction Gamma incomplète

$$\Gamma(a, x) = \int_x^{\infty} dt t^{a-1} e^{-t}$$

ainsi que la fonction d'erreur complémentaire $\operatorname{erfc}(x) = (2/\pi^{1/2}) \int_x^{\infty} du e^{-u^2}$ [57].

Pour l'implémentation numérique du modèle, nous initialisons avec le modèle UEGM

puis itérons avec l'équation (9.5.12) pour déterminer le potentiel plasma (9.5.10). La convergence du schéma numérique est contrôlée par la variation de densité sur la sphère de Wigner-Seitz $|n_e^{(i+1)}(R_0) - n_e^{(i)}(R_0)|$, l'itération prend fin lorsque cette valeur devient inférieure à ε . Nous trouvons qu'une valeur de $\varepsilon = 10^{-8}$ en unité atomique donne un schéma auto-consistant de bonne précision et avec une convergence couramment atteinte en moins de 12 itérations.

9.5.3 limitations du modèle

Nous discutons ici du domaine de validité du modèle de la sphère d'ions. Tout d'abord, si l'extension spatiale de la fonction d'onde de l'électron lié est plus grande que le rayon de la sphère ionique, les orbitales de deux ions voisins se chevauchent et des effets quasi-moléculaires doivent être pris en compte. Cette condition est également reliée à la possibilité d'ionisation à la pression. Le paramètre décrivant ce recouvrement est

$$\beta = \frac{\langle r \rangle}{R_0}, \quad (9.5.13)$$

où $\langle r \rangle$ est la taille moyenne de l'orbital la plus extérieur et R_0 la moitié de la distance entre deux ions voisins. Si $\beta > 1$, les fonctions d'ondes de deux ions voisins se chevauchent significativement. Le code de structure atomique permet de calculer $\langle r \rangle$. Dans le cas d'un ion hydrogénoïde, l'extension classique de la fonction d'onde est liée à la position du point tournant extérieur $\langle r \rangle \lesssim 2n^2/Z$, où n est le nombre quantique principal. Pour les ions multi-électronique, une estimation grossière du rayon moyen peut être obtenue en supposant un écrantage complet par $N_b - 1$ électrons liés, ainsi la taille de l'orbitale est $2n^2/(Z - N_b + 1)$. Sachant que la fonction d'onde décroît de manière exponentielle au-delà du point tournant, il est suffisant d'imposer la condition

$$\frac{2n^2}{Z_f + 1} < R_0 \quad (9.5.14)$$

ce qui revient à

$$N_e \lesssim 0.03 \frac{(Z_f + 1)^3 Z_f}{n^6} \sim 2.10^{23} \frac{Z^4}{n^6} \text{ cm}^{-3} \quad (9.5.15)$$

Une condition similaire a été dérivée par d'autres auteurs [101, 103].

La discussion qui précède ne tient pas compte de la réponse dynamique des électrons libres. En effet, lorsque l'électron actif se déplace loin du noyau, les électrons libres neutralisent la charge positive avec un temps caractéristique égal à l'inverse de la fréquence de plasma. Dans ce cas, la charge nette vue par un électron situé loin du noyau est égal à zéro, en contradiction avec la formule (9.5.3). L'électron actif est lié par un potentiel $-(Z - N_b + 1)/r$ — le noyau étant écrané par les autres électrons liés — ce qui ajoute à électrons libres $(Z - N_b)/r$ et se traduit par une valeur non nulle $-1/r$ d'un potentiel de Coulomb loin de noyau. C'est pourquoi nous devons imposer à la fréquence orbitale

d'électrons (ou fréquence de Bohr) ω_{orbital} et à la fréquence du plasma ω_{pe} la condition adiabatique

$$\omega_{\text{pe}} = (4\pi N_e)^{1/2} \ll \omega_{\text{orbital}} \quad (9.5.16)$$

ce qui dans le cas hydrogénoïde ou en supposant un écrantage complet par les électrons liés s'écrit

$$N_e \ll \frac{(Z_f + 1)^4}{4\pi n^4} \sim 5.35 \times 10^{23} \frac{Z^4}{n^6} \text{ cm}^{-3}. \quad (9.5.17)$$

Cette condition est liée à l'hypothèse de non-recouvrement (9.5.15). Une condition évidente est que ω_{orbital} est au dessus de la fréquence de coupure lorsque la condition (9.5.17) est remplie. Constatant que les conditions (9.5.17) et (9.5.15) sont très proche. Il paraît donc difficile de tenir compte de l'ionisation par la pression sans la réponse dynamique.

Le modèle UEGM, n'inclut pas directement la température kT_e , cependant celle-ci est relié à la quantité Z_f par l'intermédiaire de la balance d'ionisation — donnée par l'équation de Saha ou tout autre modèle d'ionisation—. On peut également estimer le paramètre de corrélation reliant kT_e et Z_f

$$\Gamma = \frac{Z_f^2}{R_0 kT_e} \quad (9.5.18)$$

Numériquement, nous avons $\Gamma \sim 1$ pour les paramètres $kT_e = 650 \text{ eV}$ et $N_e = 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ — ce qui donne $\langle Z_f \rangle \sim 12$ selon la loi de Saha pour l'aluminium. Ainsi, le modèle présenté s'applique pour les plasmas avec un faible ou moyen paramètre de couplage.

Afin d'estimer si la statistique de Maxwell-Boltzmann ou de Fermi-Dirac s'applique pour les électrons libre, nous devons estimer le paramètre de dégénérescence défini par

$$\gamma = \frac{T_{\text{Fermi}}}{T_e} = \frac{(3\pi^2 N_e)^{2/3}}{2kT_e} = \frac{3^{2/3}\pi^{1/3}}{2} (N_e \lambda_{th}^3)^{2/3}. \quad (9.5.19)$$

En utilisant $N_e = 10^{23} \text{ cm}^{-3}$, nous obtenons $kT \simeq 8 \text{ eV}$. Ainsi, les plasmas considérés ici seront généralement non-dégénérés. La condition de non-dégénérescence s'écrit

$$N_e \lambda_{th}^3 \ll 1 \quad (9.5.20)$$

9.5.4 Développement analytique pour les ions hydrogénoïdes

Différent articles [97, 102, 103] ont montré qu'à partir du potentiel UEGM (9.5.2) une expression analytique peut être dérivée pour l'énergie au premier ordre de la théorie des perturbations. Nous étendons ici cette approche en donnant l'expression explicite des fonctions d'ondes, des taux radiatifs dipolaires et quadrupolaires au premier ordre des perturbations, mais également les énergies et les fonctions d'ondes au second ordre. Pour une approche simple, nous ne prenons pas en compte les effets relativistes. Ce travail repose sur la théorie perturbative standard de Rayleigh-Schrödinger et complété par la

technique de sommation de Dalgarno et Lewis [110, 111]. Nous notons, H_0 l'hamiltonien non perturbé avec les énergies propres $E_i^{(0)}$ et fonction propres $\Phi_i^{(0)}$, et V le potentiel perturbateur, Cette technique consiste à essayer de d'obtenir au premier ordre la fonction propre $\Phi_i^{(1)}$ par la résolution directe de l'équation en représentation \mathbf{r}

$$\langle \mathbf{r} | H_0 - E_i^{(0)} | \Phi_i^{(1)} \rangle = \langle \mathbf{r} | E_i^{(1)} - V | \Phi_i^{(0)} \rangle, \quad (9.5.21)$$

où l'énergie au premier ordre obtenue est

$$E_i^{(1)} = \langle \Phi_i^{(0)} | V | \Phi_i^{(0)} \rangle. \quad (9.5.22)$$

Cette méthode peut être généralisée à tous les ordres des perturbations. L'équation radiale de la fonction d'onde hydrogénoïde perturbée s'écrit $R_{nl}(r) + v_{nl}(r)$ où R_{nl} est la fonction non perturbé au premier ordre, n et l étant respectivement le nombre quantique principal et orbital, v_{nl} est solution de

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \frac{1}{n^2} \right) v_{nl} = \frac{Z_f}{Z^4 R_0^3} (\langle \rho^2 \rangle - \rho^2) R_{nl}(r), \quad (9.5.23)$$

où $\rho = Zr$ est le rayon mis à l'échelle. Pour assurer la neutralité, il faut que $Z = Z_f + 1$. Dans cette équation radiale, la dépendance à grand r (9.5.3) du potentiel plasma a été ignorée . Comme étudié dans l'appendice A.1 cette oubli est acceptable tant que $R_0 > 2n^2/Z$. Le carré du rayon moyen est donné par

$$\langle \rho^2 \rangle = \frac{1}{2} n^2 (5n^2 - 3l(l+1) + 1). \quad (9.5.24)$$

L'essai de résolution que nous avons effectué (9.5.23) dans de nombreux cas suggère qu'une solution particulière peut être trouvée comme une somme du terme $c_j \rho^j \exp(-\rho/n)$ avec j variant de l à n . La solution générale est donnée par une telle équation plus la solution homogène habituelle R_{nl} multipliée par une constante à déterminer. Pour obtenir une correction au premier ordre convenablement normalisée, nous devons suivre la condition d'orthogonalité

$$\int_0^\infty d\rho \rho^2 R_{nl} v_{nl} = 0. \quad (9.5.25)$$

Nous avons été capable d'obtenir une expression analytique pour n'importe quelle valeurs de n, l , cependant leur écriture est trop lourde pour être donnée explicitement. Nous restreignons donc à des cas simples mais représentatifs, comme $n = l + 1$

Si $n = l + 1$, la solution générale de l'équation (9.5.23) avec normalisation s'écrit

$$v_{nn-1} = \langle r | \widetilde{n \ n - 1} \rangle = \frac{Z_f}{Z^{5/2} R_0^3} \frac{(2/n)^{n+1/2}}{(2n)!^{1/2}} \left(\frac{n}{6} \rho^3 + \frac{n^2}{4} (n+1) \rho^2 - \frac{n^4}{24} (n+1)(2n+1)(5n+6) \right) \rho^{n-1} e^{-\rho/n}. \quad (9.5.26)$$

Pour l'énergie correspondante, l'expression est

$$E_{nn-1}^{(1)} = \frac{Z_f}{2R_0} \left(3 - \frac{n^2}{Z^2 R_0^2} (n+1) \left(n + \frac{1}{2} \right) \right), \quad (9.5.27)$$

Ces développements nous permettent de contrôler la qualité des résultats numériques obtenue par la version de FAC modifiée.

9.6 Effet de l'environnement plasma

Dans cette partie nous étudions l'effet du potentiel plasma sur la structure atomique, sur les sections efficaces et sur le modèle collisionnel-radiatif.

9.6.1 Structure atomique

9.6.1.1 Énergies

La différence entre les modèles de TF et UEGM réside dans la façon de considérer la température. La température est directement présente pour l'approche TF à travers la distribution de Maxwell. Alors que dans UEGM la température est implicitement présente via la valeur supposée Z^* . Sur la figure 9.6.1, nous traçons l'évolution de l'énergie de liaison de Al XIII pour le niveau $1s_{1/2}$ en fonction de la température, et ceci pour les deux potentiels (TF et UEGM). Nous voyons clairement que l'énergie de liaison croît avec la température dans le cas de TF. Nous vérifions aussi qu'à haute température l'approche TF converge vers le UEGM.

Le potentiel plasma de TF est toujours plus important que celui de UEGM. Ainsi, nous pouvons attendre à ce que l'énergie de liaison soit plus basse avec TF qu'avec UEGM. La figure. 9.6.2 confirme cette prédiction. Un point important est souligné par les figures 9.6.1 et 9.6.2 . L'effet le plus important sur le décalage des niveaux provient de la densité et non pas de la température. Ce résultat est contraire à l'observation faite par Salzmann et Szychman's [102] qui obtiennent dans certain cas un décalage du à l'UEGM est supérieur à celui du à TF.

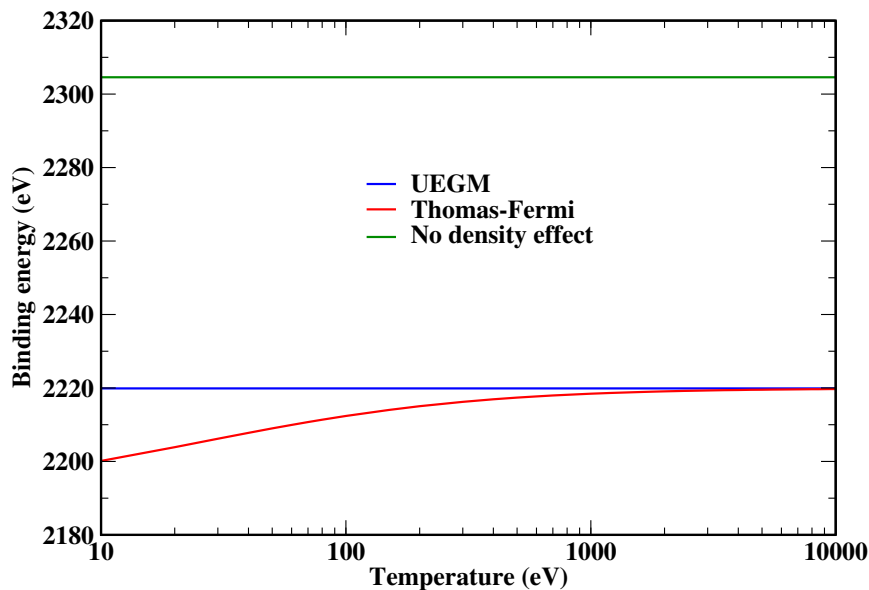


FIGURE 9.6.1 – Influence of temperature on binding energy of Al XIII for $1s_{1/2}$ level with an average density $N_e = 10^{23} \text{ cm}^{-3}$

9.6.1.2 Fonction d’ondes

L’inclusion du potentiel plasma conduit à un écrantage par les électrons libre du champ du noyau, ce qui conduit à un étalement des fonctions d’ondes. Cet effet peut s’observer sur la Figure 9.6.3 pour l’orbital $3p_{1/2}$ de l’aluminium hydrogénoïde. Afin de vérifier les calculs numériques, nous présentons sur la Figure 9.6.4 une comparaison entre les fonctions d’onde obtenues par FAC et et les fonctions d’onde obtenues analytiquement via la formule (5.4.15). L’accord entre les deux approche est très bon lorsque la densité n’est pas trop forte, tout comme pour le décalage en énergie. Comme mentionné précédemment, lorsque la densité est trop élevée les deux calculs divergent car l’approche perturbative n’est plus valable. L’effet du plasma observé sur les fonctions d’onde est modéré mais visible, ce qui souligne la nécessité de les prendre en compte, comme par exemple pour les spectres atomique.

9.6.1.3 Taux radiatifs

Avec l’analyse des fonctions d’ondes perturbées par l’effet du plasma, nous pouvons calculer les taux radiatifs. Ces taux ont été calculés par le code FAC dans une approximation non-relativiste.

Nous ne pouvons pas affirmer catégoriquement que tous les taux radiatifs décroissent ou croissent avec l’augmentation de la densité. Un tel comportement a été mentionné par Li et Rosmej [123]. Ceci à cause de la dépendance des éléments de matrice dipolaire vis-à-vis de l’énergie de transition. Ce fait s’observe sur la Figure. 9.6.5, nous y voyons l’énergie de transition croître ou décroître en fonction de la densité.

Plus spécifiquement, la transition d’énergie entre le triplet $^3P_{0,1}$ et le singulet 1S_0 décroît

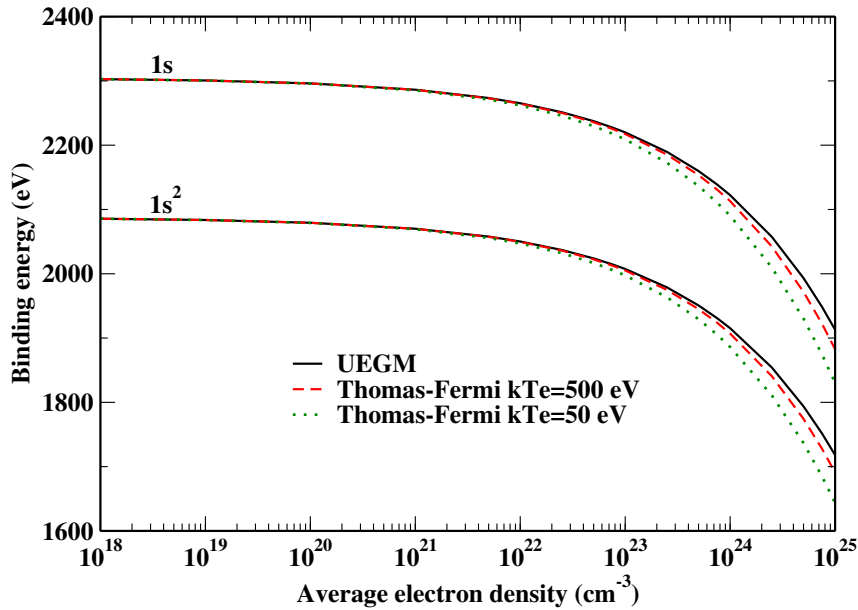


FIGURE 9.6.2 – Influence of density on binding energy of Al XIII and XII for $1s_{1/2}$ and $1s^{21}S_0$ levels.

avec la densité, dans le même temps elle croit avec la densité entre le triplet ${}^3P_{0,1}$ et le triplet 3S_1 . Ainsi les taux radiatifs peuvent avoir différent comportement en fonction de la densité. Comme règle, la plupart des taux radiatifs décroissent à cause de l'effet du plasma, ceci est dû à la diminution de ΔE_{ij}^3 dans la probabilité de transition. Le cas de la figure 9.6.6 est spécifique car ΔE_{ij} est très petit.

9.6.2 Sections efficaces

9.6.2.1 Excitation collisionnelle

Nous utilisons deux méthodes pour étudier les sections efficaces d'excitation collisionnelles : l'approximation en onde plane de Born (PWB) et la méthode des ondes distordues (DW) (voir chapitre 3 de [Sobelman1995] et le chapitre 4 de ce manuscrit.).

Le choix entre les deux méthodes nécessite de considérer le comportement asymptotique supposé pour le potentiel à longue portée. Toutes les deux sont des théories perturbatives et valables uniquement dans le cas d'un faible potentiel d'interaction entre la cible et les électrons incidents. Les différences sont cependant importantes. DW tient compte de la forme du potentiel à longue portée contrairement à l'approximation de Born. La forme asymptotique de la fonction d'onde pour la particule incidente est une onde plane pour PWB et de type Coulombien pour DW. Par conséquent, le modèle DW n'est pas pertinent lorsque les effets de densité sont inclus dans le cadre du modèle de sphère ionique, car le potentiel asymptotique n'est pas Coulombien. Tout au plus, on peut utiliser l'approximation DW lorsque la densité est si faible que le rayon est plus grand que la zone où le processus de collision a lieu. En outre, nous rappelons que la méthode DW mise en

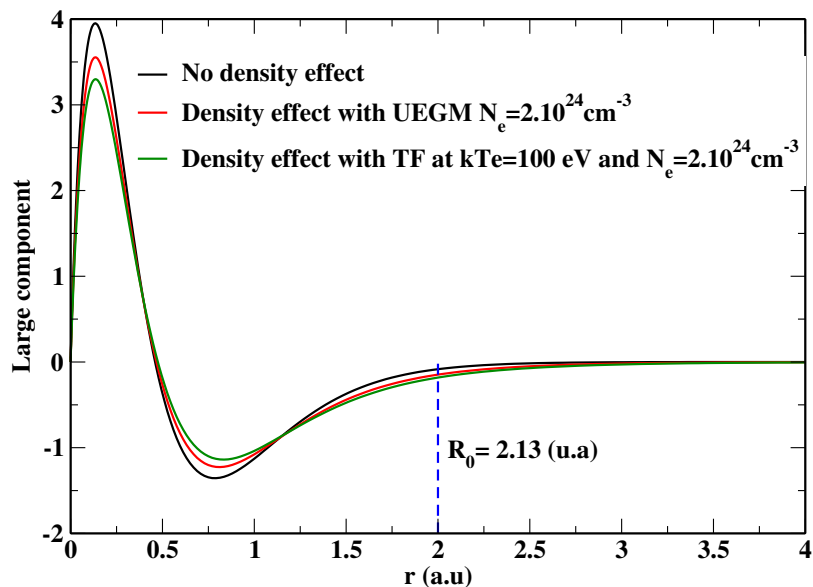


FIGURE 9.6.3 – Comparison of perturbed and unperturbed (solid line) large component of the wave-function $3p_{1/2}$ in H-like Al obtained with FAC. The perturbed wave-function has been computed assuming a $N_e = 2 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$ free-electron density. For the UEGM (red curve) $\langle r \rangle = 1.09 \text{ a.u.}$, Thomas-Fermi (green curve) $\langle r \rangle = 1.13 \text{ a.u.}$ and for the unperturbed situation $\langle r \rangle = 0.98 \text{ a.u.}$ The ion-sphere radius at this density is 2.13 atomic units.

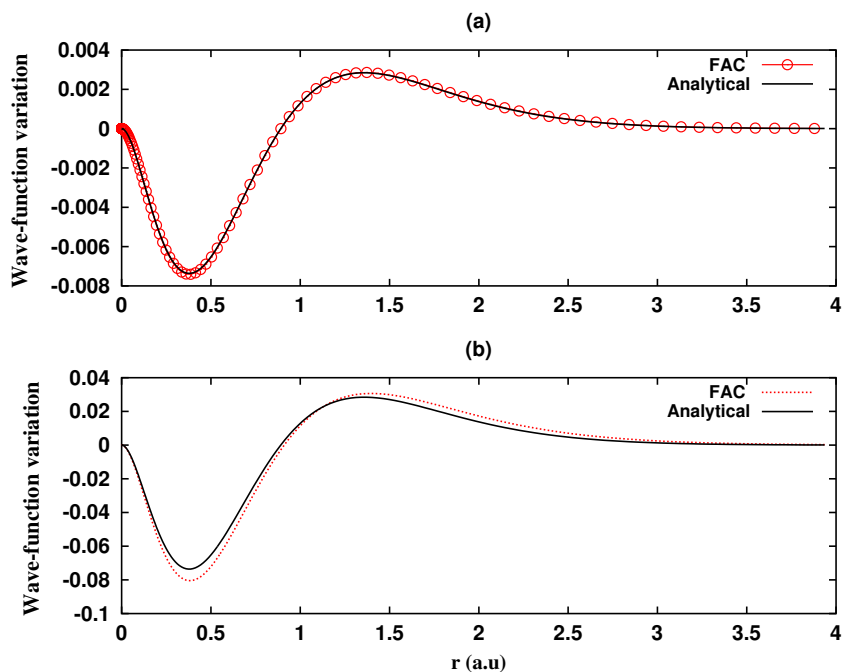


FIGURE 9.6.4 – Density effect on the $3d_{3/2}$ wave-function of H-like aluminum. The large-component variation $P(N_e) - P(N_e = 0)$ calculated with FAC and the first-order perturbed wave-function (5.4.15) are plotted as a function of the radius. The upper subfigure corresponds to $N_e = 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ and the lower subfigure to $N_e = 10^{24} \text{ cm}^{-3}$.

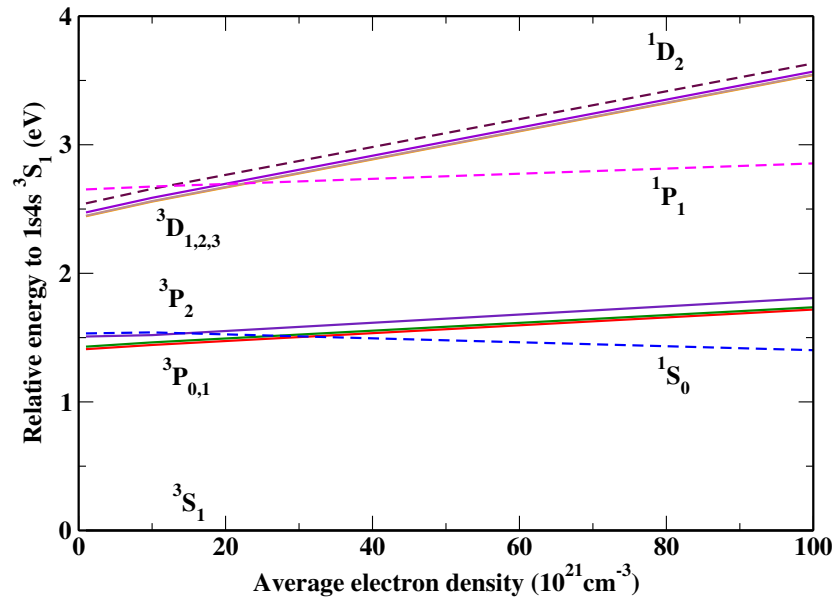


FIGURE 9.6.5 – Energy of helium-like Al relative to the level $1s4s\ ^3S_1$ versus density for various levels of the configuration $1s4l$ with Thomas-Fermi potential at 100 eV.

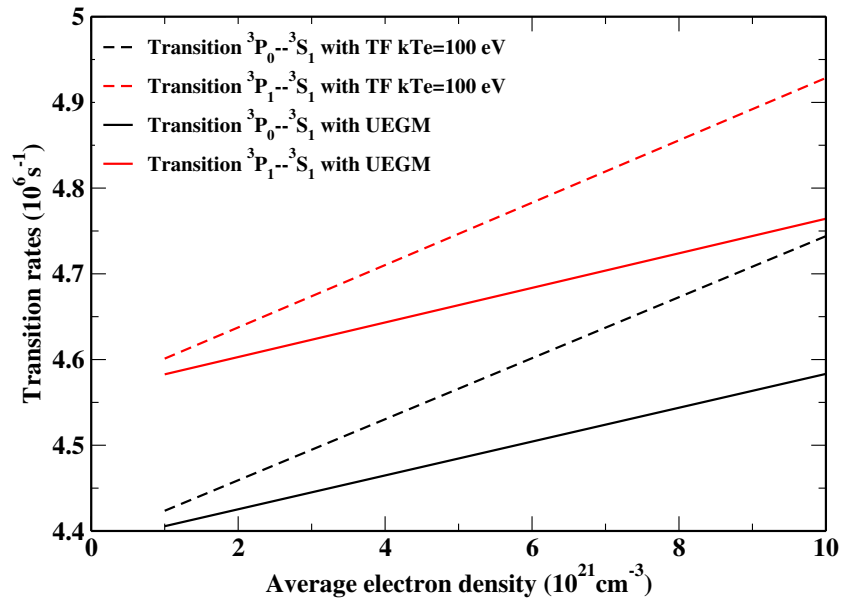


FIGURE 9.6.6 – Dipolar radiative rates $1s4p^3P_J-1s4s^3S_1$ in Al XII versus average electron density at $T_e = 100$ eV.

œuvre dans FAC n'est pas fiable pour les neutres et quasi-neutres comme mentionné par l'auteur de FAC et observé au chapitre 4 de cette thèse. En conséquence, l'approximation en ondes planes de Born est utilisé dans ce travail lorsque l'effet de la densité est pris en compte.

Nous devons souligner que rencontrons une difficulté pour observer l'influence du plasma sur les sections efficaces d'excitation. En effet, le potentiel plasma change le comportement à longue portée du potentiel. Cependant, à haute énergie le méthodes DW et PWB convergent, ce qui signifie que nous pouvons isoler l'influence de plasma.

Afin de comparer les résultats obtenus par PWB et DW, nous traçons sur la Figure.9.6.7 la section efficace d'excitation de la transition $1s-2p_{1/2}$ de Al XIII.

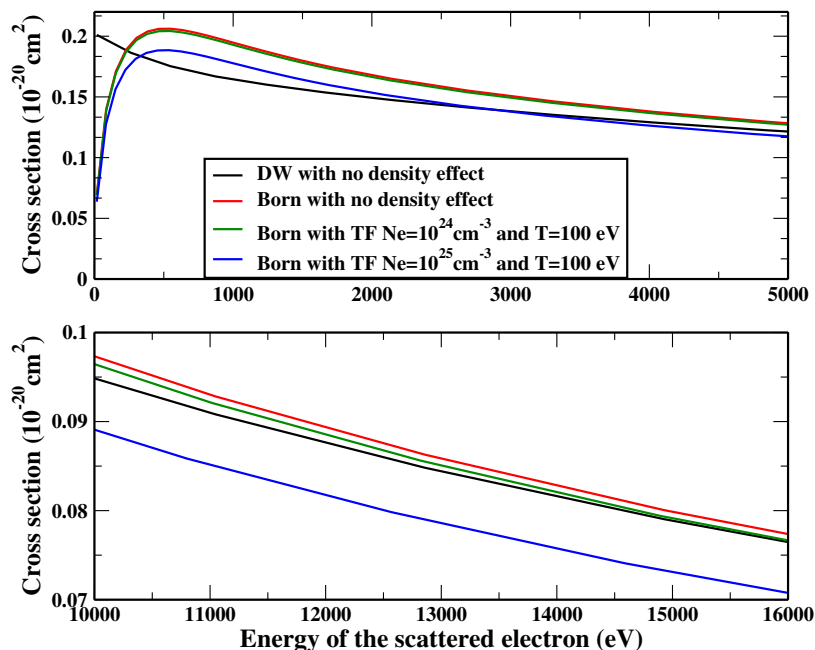


FIGURE 9.6.7 – Comparison of excitation cross section for transition $1s-2p_{1/2}$ for Al XIII at several densities and $T = 100$ eV

Le comportement des sections efficaces donné par les deux méthodes est différent près du seuil en raison de la façon dont elles traitent l'interaction à longue portée. A haute énergie, les sections efficaces montrent le même comportement. Sur la Figure. 9.6.7 on remarque que l'effet du plasma contribue à diminuer la section efficace, même si cela est modéré. Pour observer un changement significatif, nous devons atteindre des densité de l'ordre de $N_e = 10^{25} \text{ cm}^{-3}$. A cette densité le rayon de la sphère de Wigner-Seitz est $R_0 = 1.25 a_0$, ce qui est plus grand que l'extension de la fonction d'onde, dans ce cas le paramètre de couplage $Z_f^2/kT_e R_0$ est proche de 1. Ceci signifie que notre formalisme vérifie la condition de non-recouvrement [28], et est applicable lorsque des effets de densité non négligeables se produisent.

Nous avons vu que les taux radiatifs peuvent croître ou décroître selon la transition étudiée. Le même raisonnement s'applique aux section efficace d'excitation collisionnelle. Par exemple dans le cas de la transition de $1s4p^1P_1$ vers $1s4d^1D_2$, l'énergie diminue

avec la densité, puis à partir de $N_e \simeq 1.2 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ ces deux niveaux se croisent. Pour cette transition, nous avons observé une augmentation de la section efficace jusqu'à la densité critique $N_e \simeq 1.2 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$. Par la suite l'émission s'effectue de 1D_2 vers 1P_1 , et ainsi la section efficace décroît avec la densité. Une possible explication du croisement de niveaux est que l'interaction électronique est faible. En conséquence, dans cette situation le potentiel plasma a un effet plus fort, ce qui signifie que l'électron lié interagit préférentiellement avec le continuum plutôt qu'avec les électrons liés.

Nous utilisons la formule de Van Regemorter [71] pour confirmer nos observations. Cette formule est valable dans le cadre de l'approximation de Born et de Bethe (haute énergie et transition dipolaire)

$$\sigma_{ij} = \frac{8\pi}{\sqrt{3}} \frac{R_y^2}{e_i} \frac{f_{ij}}{\Delta E_{ij}} \bar{g}(e_i/\Delta E_{ij}) \pi a_0^2, \quad (9.6.1)$$

où ΔE_{ij} est la transition d'énergie du niveau i vers j , a_0 est le rayon de Bohr, R_y la constante de Rydberg, e_i l'énergie de l'électron incident, \bar{g} le facteur de Gaunt déterminé par des observations empiriques et f_{ij} la force d'oscillateur. Nous choisissons le facteur de Gaunt suggéré par Mewe [72]

$$\bar{g} = 0.15 + 0.28 \log \left(\frac{e_i}{\Delta E_{ij}} \right). \quad (9.6.2)$$

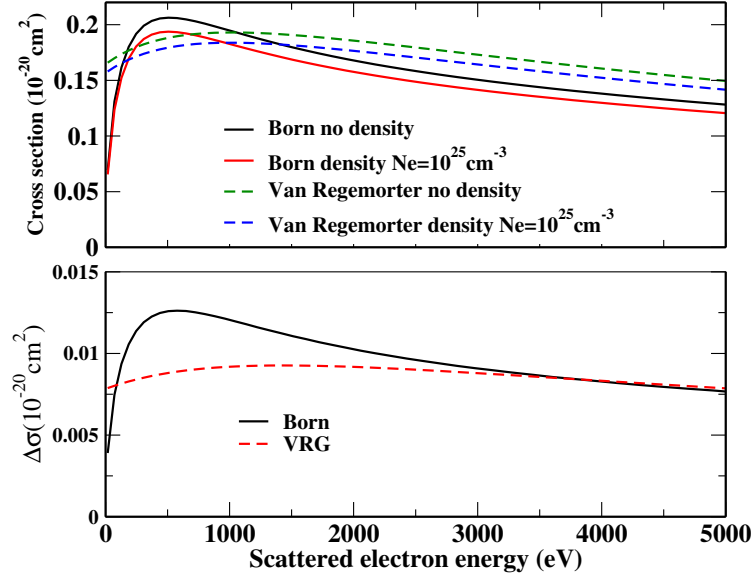


FIGURE 9.6.8 – Excitation cross sections for the transition $1s_{1/2}-2p_{1/2}$ in Al XIII: comparison between Born approximation and Van Regemorter formula. The upper figure represents the cross sections while on the lower figure are plotted the variations $\sigma(N_e = 0) - \sigma(N_e > 0)$ for both approximations.

Nous comparons les sections efficaces numériques et la formule de Van Regemorter sur la Figure. 9.6.8. Nous notons que le décalage de la section efficace est similaire. Afin de fournir une expression analytique nous utilisons un développement basé sur l'équation

(9.6.1). Dans cette équation, l'effet de densité modifie la transition d'énergie ΔE_{ij} et la force d'oscillateur f_{ij} . Le facteur de Gaunt est aussi modifié mais nous le négligeons car il varie lentement avec ΔE_{ij} . Ainsi l'amplitude de la section efficace dépend principalement du rapport $f_{ij}/\Delta E_{ij}$. A une constante numérique près ce ratio correspond au carré de l'élément de matrice dipolaire :

$$\frac{f_{ij}}{\Delta E_{ij}} \propto \langle n_i l_i | r | n_j l_j \rangle^2. \quad (9.6.3)$$

En utilisant les formules analytiques (chapitre 5) pour les ions hydrogèneoïde dans le cadre du potentiel UEGM, nous sommes en mesure d'isoler la contribution du potentiel du plasma par la décomposition de l'élément de matrice à l'ordre 0 et au premier ordre de la théorie des perturbations.

$$\langle n_i l_i | r | n_j l_j \rangle = \langle n_i l_i | r | n_j l_j \rangle^0 + \widetilde{\langle n_i l_i | r | n_j l_j \rangle}. \quad (9.6.4)$$

Nous calculons l'élément de matrice avec le potentiel UEGM dans un cadre non relativiste et obtenons donc, en unité atomique

$$\langle 1s | r | 2p \rangle = \frac{128 \sqrt{6}}{243 Z} \left(1 - \frac{3059}{36} \frac{Z_f}{Z^4 R_0^3} \right). \quad (9.6.5)$$

Dans le case d'un ion aluminium hydrogèneoïde, nous obtenons

$$\langle 1s | r | 2p \rangle^0 = 9.925 \times 10^{-2} \quad (9.6.6)$$

et pour une densité électronique moyenne $N_e = 10^{24} \text{ cm}^{-3}$

$$\widetilde{\langle 1s | r | 2p \rangle} = -1.8329 \times 10^{-4}. \quad (9.6.7)$$

A cette densité l'élément de matrice perturbé est très petit. Les équations (9.6.6) et (9.6.7) confirment que les sections efficaces d'excitations collisionnelles ne changent pas notablement.

Nous avons également constaté que les transitions interdites et permises sont affectées différemment par l'environnement plasma. Ce fait a été observé par Hatton *et al* [115] qui ont utilisé le formalisme de Debye Hückel.

9.6.2.2 Ionisation collisionnelle

Ici, nous avons adopté le formalisme de TF pour inclure l'effet du plasma, pour les sections efficaces d'ionisation, à la place de DW. C'est la méthode Binary encounter dipole theory (BED) [83] qui est utilisé par FAC. Cette méthode combine le calcul des sections efficaces semi-classique de Mott [86] pour la diffusion de deux électrons libres (valable pour les grands transfert d'impulsion), et la théorie de Bethe [124] qui est fondé sur l'approximation

mation en onde plane de Born (valable à haute énergie et petit transfert de quantité de mouvement) avec seulement le terme dipolaire retenu. Cette théorie est d'un grand intérêt en raison de son applicabilité à la fois pour les ions et les neutres. Contrairement au cas de l'excitation, nous n'avons pas besoin de changer notre approche de calcul lorsque l'effet de plasma est inclus.

Nous traçons sur la figure 9.6.9. la section efficace d'ionisation collisionnelle de l'état $1s^2$ à $1s$ pour l'aluminium, et ceci pour diverses densités. Nous y effectuons aussi une comparaison avec la formule de Lotz [42]

$$\sigma_{ij} = C\pi a_0^2 Ry^2 \frac{w_n}{e_i \Delta E_{ij}} \log\left(\frac{e_i}{\Delta E_{ij}}\right), \quad (9.6.8)$$

où $C = 2.77$, w_n est le nombre initial d'électron dans la couche concernée par l'ionisation.

Notre but n'est pas de discuter la précision de la formule de Lotz par rapport à BED, mais de caractériser l'effet du plasma.

La section efficace croît avec la densité, comme observé sur la figure 9.6.9. Nous expliquons cette augmentation par la diminution de l'énergie de transition qui ainsi conduit à faciliter l'ionisation. La variation de la section efficace due à l'effet du plasma à 10^{23} cm^{-3} et $T = 200 \text{ eV}$ est la quasi similaire avec BED et la formule de Lotz. L'effet de la température est opposé à celui de la densité, quand la température augmente la section efficace diminue.

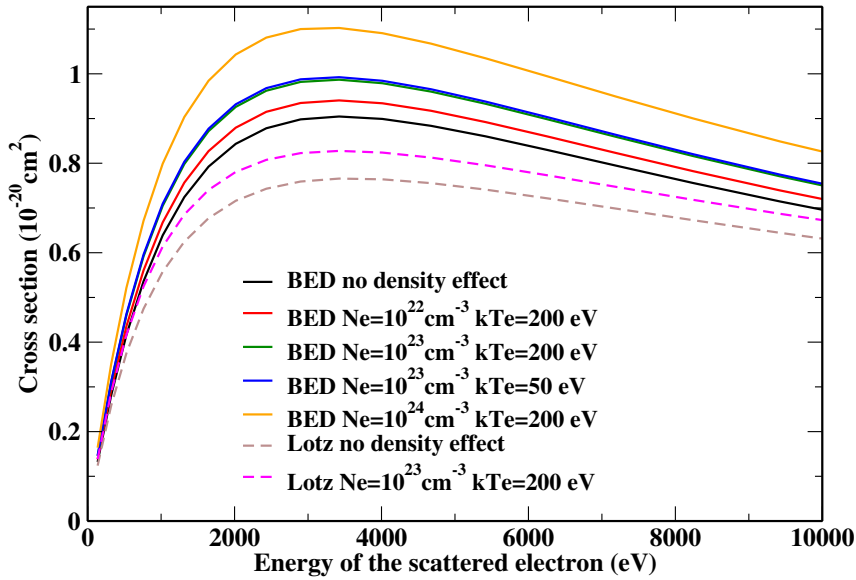


FIGURE 9.6.9 – Comparison of ionization cross section for the transition $1s^2$ to $1s$ for AlXII and XIII at $T = 200 \text{ eV}$. The free-electron density is obtained from Thomas-Fermi model, and for the scattering process BED and Lotz formalisms are compared.

Nous pouvons soutenir ces résultats en utilisant un formalisme fondé sur la formule de Lotz et une approche perturbative avec le potentiel UEGM. Comme mentionné ci-dessus,

dans UEGM, la correction de l'énergie du premier ordre pour un ion hydrogénoïde est

$$E_{\text{plasma}}^{(1)} = \frac{Z_f}{R_0} \left(\frac{3}{2} - \frac{\langle r^2 \rangle_{nl}}{2R_0^2} \right), \quad (9.6.9)$$

avec

$$\langle r^2 \rangle_{nl} = \frac{n^2}{2Z^2} (5n^2 - 3l(l+1) + 1). \quad (9.6.10)$$

Par exemple, pour l'ionisation d'un ion hydrogénoïde dans un état nl vers un ion épluché, nous obtenons l'énergie de transition

$$\Delta E = \frac{Z^2}{2n^2} - \frac{Z_f}{R_0} \left(\frac{3}{2} - \frac{\langle r^2 \rangle_{nl}}{2R_0^2} \right), \quad (9.6.11)$$

ce qui montre que l'énergie diminue avec la densité. La section efficace augmente à cause de sa dépendance en énergie en $1/\Delta E_{ij}$, comme observé sur la Figure. 9.6.9. L'étude sur d'autres éléments a montré les mêmes résultats.

Nos résultats sont en accord avec ceux de Wu *et al* [120] quant à l'augmentation des sections efficaces d'ionisation avec la densité, bien que leur travaux utilisent l'approximation des ondes distordues. Comme mentionné par Pindzola *et al* [116], nous avons vérifié que leur section efficace pour l'or germaniumoïde est sous-estimée d'un facteur 2. Cependant pour Pindzola *et al*. [116] les sections efficaces diminuent avec la densité. Les auteurs expliquent que ce comportement est lié à l'écrantage de l'interaction inter-électronique par leur modèle fondé sur Debye-Hückel. Nous notons que leur travail étant basé sur Debye-Hückel, il n'est pas applicable pour les plasmas faiblement corrélés, alors que cette restriction ne s'applique pas à notre travail.

9.6.3 Modèle collisionnel-radiatif

Nous étudions ici, l'effet de l'environnement plasma sur le code collisionnel-radiatif. Le code cinétique que nous avons développé se nomme Foch. Il est fondé sur les hypothèses faites dans la section 9.3. Pour le code Foch, par défaut, tous les taux sont calculés par l'intermédiaire des données atomiques de FAC en effectuant une intégration de Gauss-Laguerre. En raison de ce procédé, la grille dépend de la température électronique. Pour nos calculs nous prenons 16 points pour réaliser l'intégration. Pour la résolution des équation cinétiques, nous utilisons un solveur fonctionnant sur le principe d'une méthode LU pour matrice à bande (dgbvsx de lapack [134]).

En ce qui concerne les spectres, le code calcule l'émissivité pour les processus, lié-libre, libre-libre et lié-lié. Le profil de raie choisi pour les spectres lié-lié est un profil de Voigt (méthode de Drayson [135]). Un profil Gaussien ou Lorentzien peut également être utilisé. Pour les calculs détaillés, nous utilisons un élargissement le naturel et Doppler. Pour inclure l'élargissement de Stark due aux collisions électroniques, nous utilisons la formule semi-empirique de Dimitrijevic [50].

Pour établir l'effet de l'environnement plasma sur le code cinétique, nous nous comparons à une expérience récemment publiée par Khattak et al. [128] sur le Titane. Cette expérience a été effectuée au laboratoire Rutherford Appleton sur l'installation lasers terawatt ASTRA. Dans l'article un décalage de la raie $He - \alpha$ est rapporté. La raie $He - \alpha$ non-décalée est prise à 4749.73eV, cette valeur provient de Beiersdorfer et al [137]. Nous notons que le code FAC fournit une valeur de 4749.34eV.

Les mesures expérimentales [128] font état d'un décalage de la raie de 3.4eV avec d'une largeur à mi hauteur (FWHM) de 12.1eV. Afin d'évaluer la densité et la température, deux simulations ont été réalisées dans l'article. La première simulation a été menée par le code hydrodynamique HYADES [138] et post-traité avec le code collisionnel-radiatif SOBOLEV [139]. Cette simulation conclut que la densité du plasma excède 10^{24}cm^{-3} avec une température de 3000 eV. La seconde simulation a été faite avec le code de simulation spectrale MARIA [140]. Ce dernier fournit une densité et une température proche du premier calcul.

Pour notre simulation numérique (FAC+Foch), un décalage de la raie $He - \alpha$ de 3.4 eV est obtenu pour une densité de $3.7 \times 10^{24}\text{cm}^{-3}$ avec une température électronique de 3000 eV. Dans ce cas le paramètre de couplage est environ 1.94 avec une sphère de Wigner-Seitz moyenne de $2.098a_0$ ($Z^* \sim 21.21$). Le nombre quantique principal utilisé est de 3 afin de satisfaire la condition $\omega_{pe} \ll \omega_{orbital}$ et la condition de non-recouvrement.

Sur la figure 9.6.10, nous avons tracé le spectre lié-lié calculé avec la code Foch (profil de Voigt avec élargissement naturel et Doppler). Sur le graphique, la ligne verticale en pointillé représente la raie $He - \alpha$ non décalée, la courbe rouge représente le spectre lié-lié sans effet du plasma. La courbe bleue correspond au spectre lié-lié avec l'effet du plasma et $N_e = 3.7 \times 10^{24}\text{cm}^{-3}$ et $kT_e = 3000$ eV. Ce graphique peut être comparé à celui mesuré[128]. Cependant, nous observons que le ratio entre la raie Li-likes et $He - \alpha$ est supérieur à celui mesuré par [128]. Malgré tout, la densité et la température sont en bon accord avec ceux mentionnés dans l'article. L'utilisation d'un élargissement naturel et Doppler n'est pas suffisant pour retrouver la largeur à mi hauteur mesuré expérimentalement. En conséquence nous avons ajouté un élargissement Stark via la formule semi-empirique de Dimitrijevic[50]. Nous obtenons une largeur à mi hauteur de $\sim 6.03\text{eV}$ ce qui est deux fois plus petit que la valeur attendue. Nous expliquons ceci par l'absence de méthode sophistiquée dans notre code pour la prise en compte l'élargissement des raies.

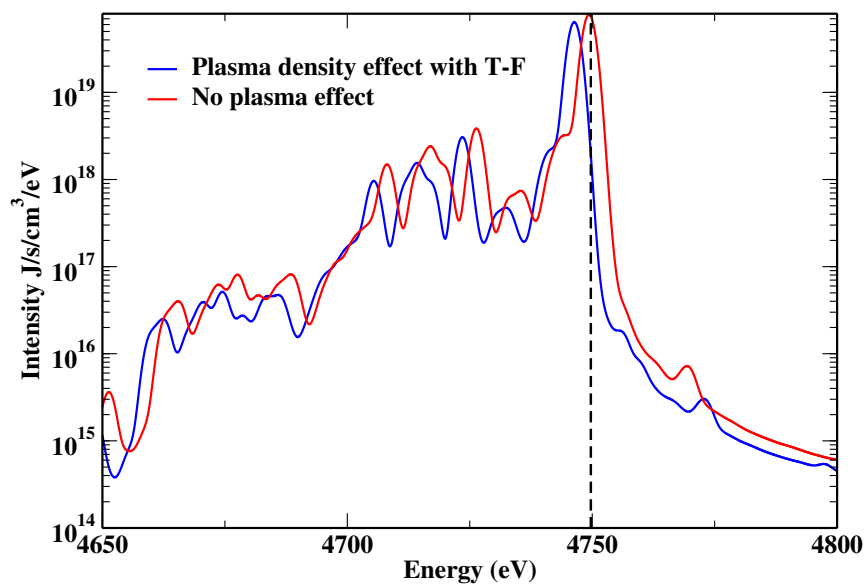


FIGURE 9.6.10 – Bound bound spectra of Titanium element at $N_e = 3.7 \times 10^{24} \text{cm}^{-3}$ and $kT_e = 3000 \text{ eV}$ with (blue curves) and without (red curves) screening. Both spectra are calculated with natural and Doppler broadening. Black dashed line represent the unshifted $He - \alpha$ line .

Bibliography

- [1] Jeffrey P. Freidberg. *Plasma Physics and Fusion Energy*. Cambridge University Press, 2007.
- [2] S. Atzeni and J. Meyer-ter Vehn. *The Physics of Inertial Fusion : BeamPlasma Interaction, Hydrodynamics, Hot Dense Matter: BeamPlasma Interaction, Hydrodynamics, Hot Dense Matter*. International Series of Monographs on Physics. Clarendon Press, 2004.
- [3] Setsuo Ichimaru. Strongly coupled plasmas: high-density classical plasmas and degenerate electron liquids. *Rev. Mod. Phys.*, 54:1017–1059, 1982.
- [4] Richard W. Lee, Stephen J. Moon, Hyun-Kyung Chung, Wojciech Rozmus, Hector A. Baldis, Gianluca Gregori, Robert C. Cauble, Otto L. Landen, Justin S. Wark, Andrew Ng, Steven J. Rose, Ciaran L. Lewis, Dave Riley, Jean-Claude Gauthier, and Patrick Audebert. Finite temperature dense matter studies on next-generation light sources. *J. Opt. Soc. Am. B*, 20(4):770–778, Apr 2003.
- [5] P. Hohenberg and W. Kohn. Inhomogeneous electron gas. *Phys. Rev.*, 136:B864–B871, Nov 1964.
- [6] W. Kohn and L. J. Sham. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys. Rev.*, 140:A1133–A1138, Nov 1965.
- [7] Balazs F. Rozsnyai. Relativistic Hartree-Fock-Slater calculations for arbitrary temperature and matter density. *Phys. Rev. A*, 5:1137–1149, Mar 1972.
- [8] Balazs F. Rozsnyai. Photoabsorption in hot plasmas based on the ion-sphere and ion-correlation models. *Phys. Rev. A*, 43:3035–3042, Mar 1991.
- [9] David A. Liberman. Self-consistent field model for condensed matter. *Phys. Rev. B*, 20:4981–4989, Dec 1979.
- [10] F.Perrot. Atome dans le jellium de charge imposée. *C.E.A internat report*.
- [11] R.Piron. *Atome moyen variationnel dans les plasmas quantiques (Variational Average-Atome in Quantum Plasmas, VAAQP)*. These de doctorat, Ecole polytechnique, 2009.

- [12] T. Blenski and B. Cichocki. Variational theory of average-atom and superconfigurations in quantum plasmas. *Phys. Rev. E*, 75:056402, May 2007.
- [13] P. A. M. Dirac. The Quantum Theory of the Electron. *Royal Society of London Proceedings Series A*, 117:610–624, 1928.
- [14] R.D.Cowan. *The Theory of Atomic Structure and Spectra*. University of California Press, Berkeley, 1981.
- [15] W. Eissner, M. Jones, and H. Nussbaumer. Techniques for the calculation of atomic structures and radiative data including relativistic corrections. *Computer Physics Communications*, 8(4):270, 1974.
- [16] A. Bar-Shalom, M. Klapisch, and J. Oreg. Hullac, an integrated computer package for atomic processes in plasmas. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 71(2), 2001.
- [17] I.P. Grant, B.J. McKenzie, P.H. Norrington, D.F. Mayers, and N.C. Pyper. An atomic multiconfigurational dirac-fock package. *Computer Physics Communications*, 21(2):207, 1980.
- [18] Douglas H. Sampson, Hong Lin Zhang, and Christopher J. Fontes. A fully relativistic approach for calculating atomic data for highly charged ions. *Physics Reports*, 477(4):111, 2009.
- [19] Grasp: A general-purpose relativistic atomic structure program. *Computer Physics Communications*, 55(3):425, 1989.
- [20] M F Gu. The flexible atomic code. *Can. J. Phys.*, 86(5):675–689, 2008.
- [21] O Peyrusse. Atomic configuration averages and non-local thermodynamical equilibrium plasma spectroscopy calculations. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 32(3):683, 1999.
- [22] O Peyrusse. A superconfiguration model for broadband spectroscopy of non-lte plasmas. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 33(20):4303, 2000.
- [23] M. Klapisch J.Bauche, C. Bauche-Arnoult. Transition arrays in the spectra of ionized atoms. In *Advance in atomic and moleuclar physics*, pages 131–195. 1987.
- [24] Richard M. More. Electronic energy-levels in dense plasmas. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 27(3):345, 1982.
- [25] H.-K. Chung, M.H. Chen, W.L. Morgan, Y. Ralchenko, and R.W. Lee. Flychk: Generalized population kinetics and spectral model for rapid spectroscopic analysis for all elements. *High Energy Density Physics*, 1(1):3, 2005.

-
- [26] H.A. Scott and S.B. Hansen. Advances in {NLTE} modeling for integrated simulations. *High Energy Density Physics*, 6(1):39 – 47, 2010.
- [27] G. Faussurier, C. Blancard, and E. Berthier. Nonlocal thermodynamic equilibrium self-consistent average-atom model for plasma physics. *Phys. Rev. E*, 63:026401, Jan 2001.
- [28] M. Belkhiri and M. Poirier. Density effects in plasmas: Detailed atomic calculations and analytical expressions. *High Energy Density Phys.*, 9(3):609 – 617, 2013.
- [29] M. Belkhiri and M. Poirier. Analysis of density effects in plasmas and their influence on electron-impact cross sections.
- [30] Hans A. Bethe and Edwin E. Salpeter. *Quantum mechanics of one- and two-electron atoms*. Plenum Press, New York, USA, 1977.
- [31] W.R Johnson. *Atomic Structure Theory: Lectures on Atomic Physics*. Springer Berlin, 2007.
- [32] I.P. Grant. *Relativistic Quantum Theory of Atoms and Molecules: Theory and Computation*. Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics. Springer, 2007.
- [33] J. C. Slater. A simplification of the hartree-fock method. *Phys. Rev.*, 81:385–390, Feb 1951.
- [34] M. Klapisch. the parametric potential method. *C. R. Acad. Sci B*, 265(5):914, 1967.
- [35] M. Klapisch. A program for atomic wavefunction computations by the parametric potential method. *Computer Physics Communications*, 2(5):239 – 260, 1971.
- [36] Christopher J. Fontes, Douglas H. Sampson, and Hong Lin Zhang. Inclusion of the generalized breit interaction in excitation of highly charged ions by electron impact. *Phys. Rev. A*, 47:1009–1022, Feb 1993.
- [37] A. M. Desiderio and W. R. Johnson. Lamb shift and binding energies of electrons in heavy atoms. *Phys. Rev. A*, 3:1267–1275, Apr 1971.
- [38] Thomas Blenski and Kenichi Ishikawa. Pressure ionization in the spherical ion-cell model of dense plasmas and a pressure formula in the relativistic pauli approximation. *Phys. Rev. E*, 51:4869–4881, May 1995.
- [39] Yu. Ralchenko, G. Abdallah, C. J. Fontes, M. Foster, F. de Gaufridy de Dortan, I. Golovkin, S. B. Hansen, R. W. Lee, V. Novikov, J. Oreg, O. Peyrusse, M. Poirier, A. Sasaki, H. Scott, and H. L. Zhang. Calculation of ionization distributions and radiation losses for tungsten in tokamak plasmas. *AIP Conference Proceedings*, 1161(1):242, 2009.

- [40] L. Spitzer. *Physics of Fully Ionized Gases*. New York: Interscience (2nd edition), 1962.
- [41] D. Salzmänn. *Atomic Physics in Hot Plasmas*. The International Series of Monographs on Physics. Oxford University Press, Incorporated, 1998.
- [42] Wolfgang Lotz. An empirical formula for the electron-impact ionization cross-section. *Zeit. Phys.*, 206(2):205–211, 1967.
- [43] H. A. Kramers. Xciii. on the theory of x-ray absorption and of the continuous x-ray spectrum. *Philosophical Magazine Series 6*, 46(275):836–871, 1923.
- [44] Hans R. Griem. *Principles of Plasma Spectroscopy*. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2005.
- [45] Hans R. Griem. Validity of local thermal equilibrium in plasma spectroscopy. *Phys. Rev.*, 131:1170–1176, Aug 1963.
- [46] McWhirter. *Plasma Diagnostic techniques*. Cambridge Monographs on Plasma Physics. Cambridge University Press, Cambridge, 1963.
- [47] Arthur S. Eddington. *The Internal Constitution of the Stars*. Cambridge University Press, 1988. Cambridge Books Online.
- [48] M. Baranger. Spectral line broadening in plasmas. In D.R Bates, editor, *Atomic and molecular processes*, page 335. New York.
- [49] H.R. Griem. *Spectral line broadening by plasmas*. Academic Press, New York and London, 1974.
- [50] M.S. Dimitrijevic and N. Konjevic. Simple estimates for Stark broadening of ion lines in stellar plasmas. *Astron. Astrophys.*, 172:345–349, January 1987.
- [51] J. Holtsmark. Über die verbreiterung von spektrallinien. *Annalen der Physik*, 363(7):577–630, 1919.
- [52] A. Burgess and M.J. Seaton. A general formula for the calculation of atomic photoionization cross-sections. *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.*, 120:121, 1960.
- [53] I. I. Sobel'man, L. A. Vainshtein, and E. A. Yukon. *Excitation of Atoms and Broadening of Spectral Lines*. Springer, Berlin, 1995.
- [54] J.R. Taylor. *Scattering Theory: The Quantum Theory of Nonrelativistic Collisions*. Dover Books on Engineering. Dover Publications, 2012.
- [55] N.F. Mott and H.S.W. Massey. *The theory of atomic collisions*. Number vol. 2 in International series of monographs on physics. Clarendon Press, 1965.

-
- [56] M J Seaton. Strong coupling in optically allowed atomic transitions produced by electron impact. *Proceedings of the Physical Society*, 77(1):174, 1961.
- [57] M. Abramowitz and I.A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions*. National Bureau of Standards, Washington DC, USA, 1972.
- [58] V. I. Ochkur. The born-oppenheimer method in the theory of atomic collisions. *Sov. Phys. JETP*, 18:503, Aug 1963.
- [59] I. L. Beigman and L. A. Vainshtein. Effective cross sections for the exchange excitation of atoms and ions by electron impact. *Sov. Phys. JETP*, 52:185, Jan 1967.
- [60] Yong-Ki Kim. Scaling of plane-wave born cross sections for electron-impact excitation of neutral atoms. *Phys. Rev. A*, 64:032713, Aug 2001.
- [61] U.Fano and M.inokuti. On the theory of ionization by electron collisions. Technical report, Argonne national laboratory, 1976.
- [62] Ronald J.W. Henry. Excitation of atomic positive ions by electron impact. *Physics Reports*, 68(1):1 – 91, 1981.
- [63] Yukikazu Itikawa. Distorted-wave methods in electron-impact excitation of atoms and ions. *Physics Reports*, 143(2):69 – 108, 1986.
- [64] P G Burke, S Ormonde, and W Whitaker. Low-energy electron scattering by atomic hydrogen: I. the close-coupling approximation. *Proceedings of the Physical Society*, 92(2):319, 1967.
- [65] M J Seaton. Computer programs for the calculation of electron-atom collision cross sections. ii. a numerical method for solving the coupled integro-differential equations. *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, 7(14):1817, 1974.
- [66] B.H. Bransden. *Atomic collision theory*. Lecture Notes and Supplements in Physics Series. Benjamin/Cummings Publishing Company, Advanced Book Program, 1983.
- [67] Michael S. Pindzola and Hugh P. Kelly. Electron excitation of the 2s and 2p states of hydrogen from threshold to 50 ev. *Phys. Rev. A*, 11:221–229, Jan 1975.
- [68] D. H. Madison and W. N. Shelton. Distorted-wave approximation and its application to the differential and integrated cross sections for electron-impact excitation of the 2 1p state of helium. *Phys. Rev. A*, 7:499–513, Feb 1973.
- [69] K H Winter. On distorted-wave approximations for excitation. *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, 11(1):149, 1978.
- [70] Mitio Inokuti. Inelastic collisions of fast charged particles with atoms and molecules—the bethe theory revisited. *Rev. Mod. Phys.*, 43:297–347, Jul 1971.

- [71] Henri Van Regemorter. Rate of collisional excitation in stellar atmospheres. *Astrophys. J.*, 136:906, nov 1962.
- [72] R. Mewe. Interpolation formulae for the electron impact excitation of ions in the h-, he-, li-, and ne- sequences. *Astron. Astrophys.*, 20:215, aug 1972.
- [73] Douglas H. Sampson and Hong Lin Zhang. Use of the van regemorter formula for collision strengths or cross sections. *Phys. Rev. A*, 45:1556–1561, Feb 1992.
- [74] Joseph B. Mann. Excitation collision strengths for iron ions calculated with a distorted wave method. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 29(3):407 – 452, 1983.
- [75] Peter L. Hagelstein and Rosemary K. Jung. Relativistic distorted-wave calculations of electron collision cross sections and rate coefficients for Ne-like ions. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 37(1):121 – 188, 1987.
- [76] György Csanak, Howard S. Taylor, and Robert Yaris. Many-body methods applied to electron scattering from atoms and molecules. ii. inelastic processes. *Phys. Rev. A*, 3:1322–1328, Apr 1971.
- [77] L D Thomas, Gy Csanak, H S Taylor, and B S Yarlagadda. The application of first order many-body theory to the calculation of the differential and integral cross sections for the electron impact excitation of the $2\ 1\ s$, $2\ 1\ p$, $2\ 3\ s$, $2\ 3\ p$ states of helium. *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, 7(13):1719, 1974.
- [78] Luiz E. Machado, Emerson P. Leal, and George Csanak. Electron-impact excitation of some low-lying levels of neon. *Phys. Rev. A*, 29:1811–1824, Apr 1984.
- [79] N. T. Padial, G. D. Meneses, F. J. da Paixao, Gy. Csanak, and David C. Cartwright. Electron-impact excitation of the lowest four excited states of argon. *Phys. Rev. A*, 23:2194–2212, May 1981.
- [80] T N Rescigno, C W McCurdy Jr, and V McKoy. A relationship between the many-body theory of inelastic scattering and the distorted wave approximation. *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, 7(17):2396, 1974.
- [81] Christopher J. Fontes, Hong Lin Zhang, and Joseph Abdallah. An overview of relativistic distorted wave cross sections. *AIP Conference Proceedings*, 730(1):41–49, 2004.
- [82] N. H. Magee, J. Abdallah, J. Colgan, P. Hakel, D. P. Kilcrease, S. Mazevet, M. Sherrill, C. J. Fontes, and H. L. Zhang. Los alamos opacities: Transition from ledcop to atomic. *AIP Conference Proceedings*, 730(1):168–179, 2004.
- [83] Yong-Ki Kim and M. Eugene Rudd. Binary-encounter-dipole model for electron-impact ionization. *Phys. Rev. A*, 50:3954–3967, Nov 1994.

-
- [84] L. Vriens. Binary encounter and classical collision theories. In W. McDaniel and R.C. McDowell, editors, *Case studies in atomic collision physics*, page 335. Amsterdam.
- [85] L.D. Landau and E.M. Lifshits. *Quantum Mechanics: Non-relativistic Theory*. Butterworth Heinemann. Butterworth-Heinemann, 1977.
- [86] N. F. Mott. The collision between two electrons. *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, 126(801):259–267, 1930.
- [87] P. Debye and E. Hückel. Zur Theorie der Elektrolyte. I Gefrierpunktserniedrigung und verwandte Erscheinungen (The theory of electrolytes. I. Lowering of freezing point and related phenomena). *Phys. Z.*, 24:185–206, 1923.
- [88] Dimitri Mihalas. *Stellar atmospheres*. Series of Books in Astronomy and Astrophysics. W. H. Freeman, San Francisco, 2nd edition, 1978.
- [89] P. Quarati and A. M. Scarfone. Modified Debye-Hückel electron shielding and penetration factor. *Astrophys. J.*, 666(2):1303, 2007.
- [90] R. Piron and T. Blenski. Variational-average-atom-in-quantum-plasmas (vaaqp) code and virial theorem: Equation-of-state and shock-hugoniot calculations for warm dense al, fe, cu, and pb. *Phys. Rev. E*, 83:026403, Feb 2011.
- [91] R. P. Feynman, N. Metropolis, and E. Teller. Equations of state of elements based on the generalized fermi-thomas theory. *Phys. Rev.*, 75:1561–1573, May 1949.
- [92] R. M. More. Atomic processes in high-density plasmas. In C. J. Joachain and D. E. Post, editors, *Atomic and Molecular Physics of Controlled Thermonuclear Fusion*, number 101 in NATO Advanced Science Institutes Series, pages 399–440. Plenum Press, New York, 1983.
- [93] M. W. C. Dharma-wardana and François Perrot. Density-functional theory of hydrogen plasmas. *Phys. Rev. A*, 26:2096–2104, Oct 1982.
- [94] D. Salzmann, J. Stein, I. B. Goldberg, and R. H. Pratt. Effect of nearest-neighbor ions on excited ionic states, emission spectra, and line profiles in hot and dense plasmas. *Phys. Rev. A*, 44:1270–1280, Jul 1991.
- [95] J. C. Stewart and K. D. Pyatt, Jr. Lowering of Ionization Potentials in Plasmas. *Astrophys. J.*, 144:1203, june 1966.
- [96] Jon Weisheit. Atoms in plasmas. In Gordon W. F. Drake, editor, *Atomic, Molecular and Optical Physics Handbook*. AIP Press, Woodbury NY, 1996.
- [97] Hoe Nguyen, Michel Koenig, Djamel Benredjem, Monique Caby, and Gérard Coulaud. Atomic structure and polarization line shift in dense and hot plasmas. *Phys. Rev. A*, 33:1279–1290, 1986.

- [98] S. Bhattacharyya, A. N. Sil, S. Fritzsche, and P. K. Mukherjee. Effect of strongly coupled plasma on the spectra of hydrogenlike carbon, aluminium and argon. *Eur. Phys. J. D*, 46(1):1–8, 2008.
- [99] A. N. Sil, J. Anton, S. Fritzsche, P. K. Mukherjee, and B. Fricke. Spectra of heliumlike carbon, aluminium and argon under strongly coupled plasma. *Eur. Phys. J. D*, 55:645–652, 2009.
- [100] Madhusmita Das. Effect of strongly coupled plasma on photoionization cross section. *Physics of Plasmas*, 21(1):709, 2014.
- [101] G. Massacrier. *Effets de densité et de température sur les ions des plasmas denses et chauds : structure atomique dans un modèle multiconfigurationnel ; équilibre statistique*. These de doctorat, Université de Paris VI, 1988.
- [102] D. Salzmann and H. Szichman. Density dependence of the atomic transition probabilities in hot dense plasmas. *Phys. Rev. A*, 35:807–814, 1987.
- [103] X. Li and F. B. Rosmej. Quantum-number dependent energy level shifts of ions in dense plasmas: A generalized analytical approach. *EPL Europhys. Lett.*, 99:33001, 2012.
- [104] F. Rosmej, K. Bennadji, and V. S. Lisitsa. Effect of dense plasmas on exchange-energy shifts in highly charged ions: An alternative approach for arbitrary perturbation potentials. *Phys. Rev. A*, 84:032512, 2011.
- [105] G. Massacrier and J. Dubau. A theoretical approach to N-electron ionic structure under dense plasma conditions: I. Blue and red shift. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 23(13):2459S, 1990.
- [106] T. Vallotton. *Ionisation par la pression et effets de densité dans les plasmas hors équilibre thermodynamique local*. These de doctorat, Université de Paris XI, 2009.
- [107] C. Blancard and J. Dubau. Inelastic electron-ion scattering in hot and dense plasmas. *Laser and Particle Beams*, 12:401–406, 9 1994.
- [108] Jon C. Weisheit. Atomic phenomena in hot dense plasmas. In H. S. W. Massey, E. W. Mc Daniel, and B. Bederson, editors, *Applied Atomic Collision Physics Vol. 2*. Academic Press, Orlando, 1984.
- [109] A. Calisti, S. Ferri, M. Marciante, and B. Talin. Warm dense matter through classical molecular dynamics. *High Energy Density Physics*, 13(0):1 – 8, 2014.
- [110] A. Dalgarno and J. T. Lewis. The exact calculation of long-range forces between atoms by perturbation theory. *Proc. R. Soc.*, 233(1192):70–74, 1955.

-
- [111] Leonard I. Schiff. *Quantum mechanics*. McGraw-Hill, New York, USA, 1968.
- [112] B Saha and S Fritzsche. Influence of dense plasma on the low-lying transitions in be-like ions: relativistic multiconfiguration dirac–fock calculation. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 40(2):259, 2007.
- [113] D. P. Kilcrease, R. C. Mancini, and C. F. Hooper. Ion broadening of dense-plasma spectral lines including field-dependent atomic physics and the ion quadrupole interaction. *Phys. Rev. E*, 48:3901–3913, Nov 1993.
- [114] J. Davis and M. Blaha. Level shifts and inelastic electron scattering in dense plasmas. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 27(3):307 – 313, 1982.
- [115] G J Hatton, N F Lane, and J C Weisheit. Inelastic electron-ion scattering in a dense plasma. *J. Phys. B*, 14(24):4879, 1981.
- [116] M. S. Pindzola, S. D. Loch, J. Colgan, and C. J. Fontes. Electron-impact ionization of atoms in high-temperature dense plasmas. *Phys. Rev. A*, 77:062707, Jun 2008.
- [117] B. L. Whitten, N. F. Lane, and J. C. Weisheit. Plasma-screening effects on electron-impact excitation of hydrogenic ions in dense plasmas. *Phys. Rev. A*, 29:945–952, Feb 1984.
- [118] Mark C. Zammit, Dmitry V. Fursa, and Igor Bray. Convergent-close-coupling calculations for excitation and ionization processes of electron-hydrogen collisions in debye plasmas. *Phys. Rev. A*, 82:052705, Nov 2010.
- [119] M. Schlanges and Th. Bornath. Ionization and recombination coefficients for a dense nonideal hydrogen plasma: effects of screening and degeneracy. *Physica A*, 192(2):262–279, 1993.
- [120] Z Q Wu, G X Han, J Yan, and J Q Pang. Plasma effects on electron impact ionization. *J. Phys. B*, 35(10):2305, 2002.
- [121] T. N. Chang and T. K. Fang. Atomic photoionization in a changing plasma environment. *Phys. Rev. A*, 88:023406, Aug 2013.
- [122] Satyabrata Sahoo and Y. K. Ho. Photoionization of li and na in debye plasma environments. *Physics of Plasmas*, 13, 2006.
- [123] X. Li and F. B. Rosmej. Spin-dependent energy-level crossings in highly charged ions due to dense plasma environments. *Phys. Rev. A*, 82:022503, 2010.
- [124] H. Bethe. Zur Theorie des Durchgangs schneller Korpuskularstrahlen durch Materie. *Ann. Phys. (Leipzig)*, 397(3):325–400, 1930.

- [125] John W. Cooper. Photoionization from outer atomic subshells. a model study. *Phys. Rev.*, 128:681–693, Oct 1962.
- [126] Carlos A. Iglesias and Richard W. Lee. Density effects on collisional rates and population kinetics. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 58(4):637, 1997.
- [127] S. Bastiani-Ceccotti, N. Kontogiannopoulos, J.-R. Marques, S. Tzortzakis, L. Lecherbourg, F. Thais, I. Matsushima, O. Peyrusse, and C. Chenais-Popovics. Analysis of the x-ray and time-resolved xuv emission of laser produced xe and kr plasmas. *High Energy Density Physics*, 3(1):20, 2007.
- [128] F Y Khattak, O A M B Percie du Sert, F B Rosmej, and D Riley. Evidence of plasma polarization shift of ti he-a resonance line in high density laser produced plasmas. *Journal of Physics: Conference Series*, 397(1):012020, 2012.
- [129] T Vallotton, O Peyrusse, and D Benredjem. Density-induced continuum resonances and quasi-bound states in the collisional-radiative equilibrium of dense plasmas. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 43(15):155207, 2010.
- [130] R Florido, R Rodriguez, J M Gil, J G Rubiano, P Martel, D Suarez, M Mendoza, and E Minguez. ABAKO a new code for population kinetics and radiative properties of plasmas under NLTE conditions. *Journal of Physics: Conference Series*, 112(4):042008, 2008.
- [131] Stephen J. Goett, Robert E.H. Clark, and Douglas H. Sampson. Intermediate coupling collision strengths for $n = 0$ transitions produced by electron impact on highly charged he- and be-like ions. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 25(3):185 – 217, 1980.
- [132] Role of dielectronic recombination and autoionizing states in the dynamic equilibrium of non-lte plasmas. *High Energy Density Physics*, 5:51 – 60, 2009.
- [133] William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, and Brian P. Flannery. *Numerical Recipes 3rd Edition: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, New York, NY, USA, 2007.
- [134] E. Anderson, Z. Bai, C. Bischof, L. S. Blackford, J. Demmel, Jack J. Dongarra, J. Du Croz, S. Hammarling, A. Greenbaum, A. McKenney, and D. Sorensen. *LAPACK Users' Guide (Third Ed.)*. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, USA, 1999.
- [135] S.R. Drayson. Rapid computation of the voigt profile. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 16(7):611 – 614, 1976.

- [136] Stephanie Hansen, G.S.J. Armstrong, S. Bastiani-Ceccotti, C. Bowen, H.-K. Chung, J.P. Colgan, F. de Dortan, C.J. Fontes, F. Gilleron, J.-R. Marquès, R. Piron, O. Peyrusse, M. Poirier, Yu. Ralchenko, A. Sasaki, E. Stambulchik, and F. Thais. Testing the reliability of non-lte spectroscopic models for complex ions. *High Energy Density Physics*, 9(3):523 – 527, 2013.
- [137] P. Beiersdorfer, M. Bitter, S. von Goeler, and K. W. Hill. Experimental study of the x-ray transitions in the heliumlike isoelectronic sequence. *Phys. Rev. A*, 40:150–157, Jul 1989.
- [138] Jon T. Larsen and Stephen M. Lane. Hyades, a plasma hydrodynamics code for dense plasma studies. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 51(1):179, 1994.
- [139] David Riley. Time dependent modelling of k-shell emission lines from laser produced plasmas. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 60(2):221, 1998.
- [140] F B Rosmej. Hot electron x-ray diagnostics. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 30(22):L819, 1997.
- [141] C. Blancard and G. Faussurier. Equation of state and transport coefficients for dense plasmas. *Phys. Rev. E*, 69:016409, Jan 2004.