



HAL
open science

Structure atomique, équation d'état et propriétés radiatives des plasmas chauds

Jean-Christophe Pain

► **To cite this version:**

Jean-Christophe Pain. Structure atomique, équation d'état et propriétés radiatives des plasmas chauds. Physique Atomique [physics.atom-ph]. Université Paris-Saclay, 2021. tel-03325468v1

HAL Id: tel-03325468

<https://theses.hal.science/tel-03325468v1>

Submitted on 24 Aug 2021 (v1), last revised 14 Jan 2022 (v2)

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Structure atomique, équation d'état et propriétés radiatives des plasmas chauds

Mémoire présenté en vue de l'obtention du diplôme
d'habilitation à diriger des recherches

par

Jean-Christophe Pain

à

l'Université Paris-Saclay

le 5 mars 2021 devant le jury composé de

P. Audebert	Directeur de recherche CNRS
D. Benredjem (président)	Professeur d'Université
A. Calisti (rapporteur)	Directrice de recherche CNRS
G. Massacrier (rapporteur)	Chargé de recherche CNRS
G. Maynard	Directeur de recherche CNRS
M. Poirier	Ingénieur-chercheur CEA
L. Tchang-Brillet (rapporteur)	Professeur émérite d'Université

Résumé

Ce document présente les principales questions sur lesquelles j'ai travaillé depuis ma thèse de doctorat. Toutes s'inscrivent dans le contexte de la physique atomique des plasmas chauds et suivent une ligne directrice : calculer l'équation d'état, la conductivité électrique et l'opacité radiative de ces plasmas, qui constituent des données nécessaires à l'interprétation ou la prévision de leur évolution hydrodynamique en présence de rayonnement, que ce soit dans un contexte astrophysique ou pour des études liées à la fusion nucléaire. Au-delà de cet objectif, il s'agit de comprendre les propriétés intrinsèques de la structure et des spectres atomiques complexes des plasmas chauds.

Mots-clés

Physique atomique - Plasmas denses et chauds - Equation d'état - Ion moyen - Structure électronique - Champ central - Auto-cohérence - Compression par choc - Courbes de Rankine-Hugoniot - Formulation de Ziman de la résistivité électrique statique - Opacité radiative - Transitions E1 - Algèbre de Racah - Spectres atomiques complexes - Méthodes statistiques - Formalismes UTA, SOSA et STA - Super-configurations - Théorie des matrices aléatoires - Symétries en mécanique quantique - Profils de raie - Effet Stark - Effet Zeeman - Collisions électroniques - Excitation collisionnelle - Processus multi-photoniques -

Remerciements

Je tiens à remercier tous les membres du jury : Patrick Audebert, Djamel Benredjem, Annette Calisti, Gérard Massacrier, Gilles Maynard, Michel Poirier et Lydia Tchang-Brillet pour leur lecture attentive du manuscrit, leurs remarques et leur bienveillance, et en particulier Annette, Gérard et Lydia pour avoir accepté d'en être rapporteurs.

Je remercie les nombreuses personnes avec qui j'ai travaillé ces dernières années, théoriciens et expérimentateurs, et en particulier Franck Gilleron, pour les nombreuses études menées ensemble.

Je remercie les membres (actuels et anciens) du laboratoire de Physique Atomique des Plasmas, que je suis très fier de diriger depuis huit ans. Nous avons accompli beaucoup de choses ensemble et il nous reste encore de belles pages à écrire.

Mes remerciements vont également à Lydie Gropellier et Marianne Sécheresse, mes chefs de service et de département, et Laurence Bonnet, directrice scientifique du CEA/DAM, pour m'avoir encouragé et donné les moyens de finaliser cette habilitation.

Je n'oublie pas ceux qui sont partis : Jacques Bauche, Jean Bruneau et Gérard Dejonghe.

Je pourrais vous dire : après tout, c'étaient des pistes à suivre, peu importait, où elles allaient ; il importait même que cela n'aille nulle part, en tout cas pas dans une direction qui soit prédéterminée ; c'étaient comme des pointillés : à vous de les continuer ou de les infléchir, à moi, éventuellement, de les poursuivre ou de leur donner une autre configuration. Après tout, ces fragments, on verra bien, vous et moi, ce qu'on peut en faire.

Je me faisais un peu l'effet d'un cachalot qui saute par-dessus la surface de l'eau en y laissant une petite trace provisoire d'écume, et qui fait croire, veut croire ou croit peut-être effectivement lui-même qu'en dessous, là où on ne le voit plus, là où il n'est plus perçu ni contrôlé par personne, il suit une trajectoire profonde, cohérente et réfléchie”.

Michel Foucault, cours au Collège de France : “Il faut défendre la société”, 7 janvier 1976.

Table des matières

1	Introduction	9
2	Rappels concernant la structure atomique et la notion de champ central	17
2.1	Hamiltonien et approximation du champ central	17
2.2	Configuration électronique	19
2.3	Couplage intermédiaire et interaction de configurations	20
3	Distribution des niveaux γJ et des termes LS	21
3.1	Niveaux γJ	21
3.1.1	Dénombrement par récurrence	21
3.1.2	Description statistique	22
3.2	Termes LS	24
3.2.1	Dénombrement des termes LS par des méthodes récursives	24
3.2.2	Modélisation statistique	26
4	Distribution des raies spectrales	29
4.1	Calcul exact	29
4.2	Modélisation statistique des faisceaux de raies	30
4.2.1	Développement de Gram-Charlier	32
4.2.2	Distribution “NIG” (Normal Inverse Gaussian)	33
4.2.3	Gaussienne Généralisée ou HyperGaussienne	33
4.2.4	Comparaisons des distributions	34
4.2.5	Confrontation à la mesure de transitions $2p \rightarrow 3d$	35
4.2.6	Le calcul des moments d’ordre supérieur : un travail laborieux	40
4.2.7	Estimation du kurtosis	42
4.2.8	Conclusion concernant la modélisation statistique des raies détaillées	43
4.3	Propriétés intrinsèques des spectres atomiques complexes : régularités et symétries	44
4.3.1	L’ensemble orthogonal Gaussien	44
4.3.2	Loi de Learner et nature fractale des spectres atomiques	46
4.3.3	La loi des nombres anormaux	46
4.3.4	Lien avec le chaos quantique	49
4.3.5	Cicatrices des symétries	51
4.4	Force maximale	51
4.4.1	Force maximale pour la distribution de Porter et Thomas	52
4.4.2	Force maximale associée à la loi de Learner	54

5	Calcul de l'opacité de plasmas à l'ETL : niveaux, configurations et super-configurations	57
5.1	Définitions	57
5.1.1	L'équilibre thermodynamique local	57
5.1.2	Les différents processus	58
5.1.3	Des niveaux aux configurations	59
5.1.4	Des configurations aux super-configurations	62
5.2	Moyennes de Planck et Rosseland	64
5.3	Le code détaillé SCO-RCG	64
5.3.1	Principe	65
5.3.2	Description d'un calcul SCO-RCG	68
5.3.3	Processus physiques d'élargissement des structures	69
5.3.4	Modélisation des états très excités	71
5.3.5	Limites actuelles du modèle	75
5.3.6	Effets des moments d'ordre 3 et 4 sur la modélisation des faisceaux	75
5.3.7	Effets de la température sur l'énergie moyenne et la variance	76
5.3.8	Effet du nombre maximum de raies par faisceau de transition sur les opacités moyennes	77
5.3.9	Conclusion concernant le code SCO-RCG	78
5.4	Interprétation d'expériences	78
5.4.1	Transmission et profondeur optique	79
5.4.2	Transmission de l'aluminium auprès du laser HELEN	81
5.4.3	Transmission du cuivre auprès du laser LULI 2000	81
5.4.4	Transmission de fer sur machine Z-pinch	82
5.4.5	L'expérience énigmatique relative à l'opacité du fer	83
5.4.6	Contribution de l'absorption multi-photonique à l'opacité	86
6	Contribution à l'étude des profils de raie	93
6.1	Le code ZEST (Zeeman- Stark)	93
6.2	Modélisation statistique de l'effet Stark	95
6.2.1	Série de Lyman	96
6.2.2	Série de Balmer ($n \rightarrow 2$)	97
6.3	Modélisation statistique de l'effet Zeeman	97
6.4	Sur les collisions électroniques	101
6.4.1	Contribution à l'étude des collisions pénétrantes	101
6.4.2	Processus d'excitation collisionnelle	102
7	Equations d'état des plasmas chauds et denses	105
7.1	Effets de la structure en couches sur les adiabatiques dynamiques (courbes de Hugoniot)	105
7.1.1	Relations de Rankine-Hugoniot	106
7.1.2	Calcul auto-cohérent de la structure électronique : les modèles d'atome moyen quantique	107
7.1.3	Effet des orbitales	109
7.1.4	Comparaisons avec des données expérimentales	114
7.1.5	Evaluation simple du taux de compression maximal	115

7.1.6	Conclusion concernant les courbes de Rankine-Hugoniot	117
7.2	Plasmas de mélange	118
7.2.1	Minimisation de l'énergie libre totale	120
7.2.2	Probabilités des espèces ioniques et quantités thermodynamiques moyennes	121
7.2.3	Système d'équations	121
7.2.4	Application au centre du soleil	122
7.2.5	Opacité et équation d'état d'un plasma de mélange	123
7.2.6	Conclusion concernant le traitement des mélanges	126
7.3	Instabilité de D'yakov	126
8	Résistivités électriques statiques	129
8.1	Généralités	130
8.2	Section efficace de diffusion électron-ion	132
8.3	Facteur de structure	133
8.4	Comparaisons avec des valeurs expérimentales (technique du fil explosé)	133
8.5	Effet des fluctuations de populations	133
8.6	Travaux récents : rôle des diffusions élastiques	135
8.6.1	Le facteur de structure ion-ion	136
8.6.2	Conductivités isochores	141
8.6.3	Conductivités isobares	145
8.6.4	Conductivités bi-température	146
8.7	Conclusion concernant les calculs de résistivités	149
9	Conclusion générale du mémoire et perspectives	153
9.1	Conclusion	153
9.2	Perspectives	153
10	Annexe A : Seconde quantification et théorème de Uylings	173
11	Annexe B : Dimension fractale de la loi de Learner	175
12	Annexe C : Importance de la théorie des groupes en spectroscopie	177
13	Annexe D : moyenne de formes linéaires et bilinéaires dans le formalisme STA	179
13.1	Relation de double récurrence	179
13.2	Moyennes des populations	180
13.3	Moyennes des interactions à deux corps	181
13.4	Moyennes sur les super-couches	183
13.5	Moyennes sur les super-configurations	184
14	Annexe E : Expression des moments STA	185
14.1	Formules générales	185
14.2	Moments d'ordre 0, 1 et 2	186
14.3	Moments STA d'ordre 3 et 4 sans structure fine	189

15 Annexe F : Premières couronnes de vecteurs réciproques	193
15.1 Cas du réseau cubique faces centrées (cfc)	193
15.2 Cas du réseau cubique centré (cc)	194

Chapitre 1

Introduction

L'étude de la matière dans des conditions extrêmes a de nombreuses applications en science des matériaux et en astrophysique. La modélisation du transfert radiatif dans les plasmas d'ions multichargés, qui sont des systèmes composés d'ions (il existe 4186 degrés de charge possibles entre $Z=2$ et $Z=92$) et d'électrons, ainsi que le calcul de l'équation d'état de ces plasmas, sont au cœur des préoccupations de nombreux physiciens depuis des décennies. Dans ces milieux, l'énergie peut être transportée principalement de deux manières : par conduction thermique (loi de Fourier) ou par transfert de rayonnement. Dans la matière très chaude, le transfert de rayonnement devient la composante énergétique dominante, et il est essentiel d'en comprendre les mécanismes pour simuler l'évolution stellaire ou encore la fusion par confinement inertiel (FCI). En pratique, cela signifie que les propriétés des matériaux doivent être connues aux températures et densités très élevées résultant du dégagement rapide de l'énergie nucléaire. Parmi ces propriétés, l'opacité radiative, la pression et l'énergie interne nous intéressent particulièrement. En astrophysique, tous les calculs de structure et d'évolution stellaires (naines blanches, croûte externe des étoiles à neutrons, supernovæ, disques d'accrétion autour des trous noirs, ...) nécessitent la connaissance de l'opacité et de l'équation d'état. Le bilan radiatif dans les étoiles et les atmosphères stellaires est un facteur important de leur équilibre. Des études ont montré que la période de pulsation des Céphéides ou les oscillations du soleil ne sont bien modélisées qu'en effectuant un calcul du bilan radiatif dans lequel les opacités spectrales sont calculées très précisément. Ce bilan est régi par l'absorption de rayonnement X ou XUV dans les différentes couches stellaires [378–380]. En effet, c'est dans la gamme d'énergie de photon de 0.1 à 1 keV que le dépôt d'énergie est maximal, ce rayonnement étant absorbé puis réémis sur des distances très courtes.

Le rôle de l'opacité en astrophysique est connu depuis longtemps. En 1926, Eddington identifie cette quantité comme un élément clé des modèles stellaires. En 1929, Russell publie la première analyse quantitative de la composition chimique de l'atmosphère solaire, effectuée par Payne-Gaposchkin en 1924. A de telles températures et densités, la plupart des éléments ne sont pas complètement ionisés. On assiste ensuite à une raréfaction des publications dans le domaine à cause de la seconde guerre mondiale et de l'importance des opacités pour les applications militaires. C'est seulement au début des années soixante que Cox et Huebner introduisent les processus de photo-excitation et de photo-ionisation dans les calculs d'opacités stellaires.

Une Céphéide est une étoile géante variable qui pulse selon un rythme très régulier. La première étoile de ce type est δ Cephei, découverte en 1784 par l'astronome amateur Goodricke dans la constellation de Céphée. Contrairement à bon nombre d'objets astrophysiques pulsants

dont la fluctuation lumineuse est produite par le ballet d’une étoile autour d’une autre, la pulsation des Céphéides est le résultat d’un mouvement régulier de dilatation (provoqué par la pression du gaz) et de contraction liée à la gravité. Ces changements de taille s’accompagnent de variations de température, donc de luminosité. Au début du XX^{ème} siècle, l’astronome américaine Henrietta Leavitt découvre qu’il existe une relation entre la période des Céphéides et leur luminosité : plus la période est grande, plus l’étoile est brillante. En observant la variabilité des Céphéides, il devenait alors possible de déterminer leur luminosité absolue et donc leur distance. La découverte de cette relation période-luminosité allait permettre de mesurer la distance des galaxies jusqu’à 80 millions d’années-lumière, seuil au-delà duquel les plus grands télescopes ne peuvent plus détecter d’étoile isolée dans une galaxie. Plus d’un siècle après la découverte des Céphéides, les astronomes continuent d’affiner l’étalonnage absolu de la relation période-luminosité en cherchant à déterminer avec toujours plus de précision la distance de quelques Céphéides-étalons proches. Malgré cela, certaines propriétés des étoiles restent inexplicables. A la fin des années 1970, les rapports observés de périodes de pulsations des Céphéides diffèrent significativement des prédictions. Ainsi l’origine du “moteur” des pulsations de ces étoiles reste inexplicé. En 1982, Simon [365] suggère que ces deux problèmes pourraient provenir d’une sous-estimation significative de la contribution des éléments “lourds” (numéro atomique $Z > 2$ en astrophysique) dans les opacités de Los Alamos. Pour les températures supérieures à 100 000 K, il estime qu’une augmentation d’opacité d’un facteur 2 à 3, tout en maintenant les abondances relatives, permettrait de satisfaire les observations. L’absence de données sur les transitions atomiques des ions lourds et de confrontation directe avec l’expérience fait cruellement défaut. Dans la décennie qui suit, deux groupes, OP (Opacity Project, une collaboration académique internationale) et OPAL (OPAcity Livermore, du Lawrence Livermore National Laboratory aux Etats-Unis), approfondissent indépendamment les calculs d’opacité en enrichissant la physique atomique. Le groupe OPAL a pour objectif principal les intérieurs stellaires, le groupe OP les enveloppes stellaires, mais ces deux équipes finiront par produire des tables complètes. Dans le cadre du programme OPAL, Iglesias et coll. [173, 174] montrent que la prise en compte des transitions $\Delta n=0$ en couche M augmente considérablement l’opacité du fer dans les proportions requises par Simon. Les travaux d’OP entrepris par Seaton et coll. (1994) [361] aboutissent à des conclusions similaires.

La structure interne et l’évolution temporelle des étoiles de la séquence principale ne sont pas parfaitement comprises. Pour des étoiles massives (*i.e.* dont la masse est supérieure à 9 masses solaires M_{\odot}), les incertitudes concernent :

- La rotation, qui réduit la luminosité et la température interne, mais augmente la densité centrale. Elle induit un mélange interne qui conduit à des modifications d’abondances de surface pendant l’évolution.
- Le mélange de matière dans le cœur où brûle l’hydrogène (“convection overshooting”), qui affecte les durées de vie des étoiles.
- Les opacités : avec les nouvelles abondances solaires (révision à la baisse des abondances de C, N, O) [13] une augmentation de l’opacité des éléments lourds dans le Soleil est requise pour reproduire les données mesurées d’héliosismologie. La même conclusion vaut pour l’excitation des modes de pulsation dans les étoiles massives.

En 1902, Edwin Frost découvre la variabilité de la vitesse radiale de β Cephei (β Canis Majoris ou Alfirk). Les étoiles du type β Cephei (ou β -Céphéides) ont une masse entre 8 à 18 M_{\odot} . Elles ne doivent pas être confondues avec les Céphéides mentionnées ci-dessus (nommées comme nous l’avons vu d’après δ Cephei et qu’il faudrait donc nommer “ δ -Céphéides”). Les

β -Céphéides sont des étoiles chaudes (bleues ou blanches) de classe spectrale B. Parmi elles, on trouve ν Eridani, γ Pegasi, β Crucis, β Centauri, *etc.*. Ces étoiles sont très sensibles à l’opacité des éléments du “groupe du fer” : Cr, Fe et Ni (voir par exemple [144–146, 297, 389–392]). Leur température est de l’ordre de 200-300 000 K et leur densité de l’ordre de 10^{-7} - 10^{-6} g/cm³. Leur magnitude est comprise entre +3.16 et +3.27 et leur période de pulsation de 4.57 heures. Une particularité de ces étoiles est que le pic d’opacité du groupe du fer dans un diagramme [température - opacité moyenne de Rosseland] excite des modes acoustiques par le “ κ -mécanisme” (κ est la lettre grecque par laquelle on désigne usuellement l’opacité). Les différentes étapes du κ -mécanisme sont les suivantes :

- Le mouvement d’une couche de l’étoile vers son centre sous l’effet de l’attraction gravitationnelle tend à augmenter la densité de la couche.
- La couche devient plus opaque, le flux provenant des couches plus internes reste piégé dans la région de forte opacité.
- Cet accroissement de chaleur produit une augmentation de la pression qui repousse la couche vers l’extérieur.
- La couche se détend, se refroidit et devient plus transparente au rayonnement.
- L’énergie et la pression en-deçà de la couche diminuent.
- La couche retombe et le cycle se répète.

A noter que certaines étoiles comme les étoiles “Slowly Pulsating B” (SPB) sont soumises à des modes de gravité (modes “g”), également fortement liés à l’opacité du fer. Leur masse varie de 2 à 6 M_{\odot} .

En 2012, Salmon et coll. [354] ont trouvé que dans les β -Céphéides de faible métallicité (*i.e.* faible proportions des éléments autres que l’hydrogène et l’hélium) du nuage de Magellan, une augmentation de l’opacité du fer ne résoudrait pas le problème contrairement à une augmentation de l’opacité du nickel. En 2016, Moravveji [253] a construit de nouvelles tables d’opacités en augmentant les contributions respectives du fer et du nickel à l’opacité moyenne de Rosseland de 75 % et ont reproduit les positions observées de 10 étoiles dans le diagramme de Kiel (représentant la gravité en fonction de la température effective). En 2017, Daszýnska-Daszkievicz et coll. [90] ont noté que les opacités OPLIB (calculées récemment avec le code américain ATOMIC du Los Alamos National Laboratory) donnaient de meilleurs résultats que les opacités OPAL et OP, en tout cas pour ν Eridani. En 2018, Hui-Bon-Hoa et Vauclair [170] ont montré que la diffusion atomique conduisait à une surabondance des éléments du pic du fer dans la partie supérieure de l’enveloppe (toujours pour ν Eridani). Les auteurs ont conclu également que les opacités peuvent devenir aussi élevées que ce qui est requis à condition de prendre en compte le “fingering mixing” (analogue de la convection thermohaline en océanographie) dans les calculs. Les modes mixtes (acoustique / gravitationnel) ne sont reproduits par aucune des tables d’opacité (là aussi une augmentation de l’opacité est requise).

Les propriétés structurales et radiatives des plasmas sont importantes également pour les recherches relatives à la fusion par confinement inertiel [242]. L’objectif est d’atteindre la fusion en appliquant une chaleur et une pression intenses à une cible, provoquant son implosion. Lorsque la cible implose, sa partie externe dégage de l’énergie et comprime la partie interne. La cible comprimée se transforme en plasma, fusionne et émet de l’énergie. Cette chaleur et cette pression peuvent être obtenues par des faisceaux lasers. Dans le schéma dit de l’attaque indirecte, la cible est placée dans un Hohlraum (une cavité) en or généralement rempli(e) de gaz à faible densité et les faisceaux laser sont focalisés sur les parois intérieures du Hohlraum. L’énergie laser est convertie en rayons X qui “chauffent” la cible, composée d’un mélange com-

bustible gazeux de deutérium et de tritium (DT). La couche la plus externe des gaz est gelée (cible cryogénique) et est recouverte par une capsule en plastique, l'ablateur. La campagne NIC (National Ignition Campaign) s'est achevée en septembre 2012 après presque trois douzaines d'expériences destinées à obtenir l'allumage du DT cryogénique. L'allumage n'a pas été réalisé, à cause de la croissance importante d'instabilités au front d'ablation, mais des progrès substantiels ont été accomplis : des vitesses d'implosion de 350 km/s, des densités de matière supérieures à 800 g/cm³ et des pressions de stagnation supérieures à 100 Gbar ont été atteintes. La capacité de contrôler à la fois le séquençage temporel de l'implosion et sa symétrie a également été démontrée. Afin de résoudre ces problèmes, plusieurs campagnes exploratoires sont en cours pour mieux comprendre la performance des cibles NIC en termes de stabilité hydrodynamique et propriétés radiatives du Hohlraum. Simultanément, plusieurs scénarios d'allumage sont étudiés en utilisant différents matériaux pour l'ablateur et différentes configurations de Hohlraum. Les ablateurs sont généralement en plastique dopé avec une concentration en atomes allant jusqu'à environ quelques % de silicium (Si) ou de germanium (Ge). Les matériaux d'ablateur de numéro atomique Z modéré réduisent les effets néfastes des instabilités hydrodynamiques (Rayleigh-Taylor) et laser-plasma (comme la désintégration à deux plasmons). Les dopants Si et Ge aident à protéger la couche de DT cryogénique du préchauffage par les rayons X émis par le Hohlraum. Ils régulent le chauffage de la capsule en absorbant le rayonnement de la région ablatée, ou de la région qui dégage de l'énergie après avoir été chauffée par le rayonnement X. Ce rayonnement provoque la détente de la coquille et diminue sa densité, rendant la cible plus stable lors de l'implosion. Généralement, les ablateurs de numéro atomique Z modéré présentent plusieurs avantages par rapport aux matériaux de faible Z : une température électronique plus élevée, une meilleure absorption dans la couronne, conduisant à une intensité plus faible au quart de la densité critique et une longueur caractéristique de variation de la densité plus petite à cause de la lente détente du fluide plus lourd. Le Hohlraum émet du rayonnement X avec une température de rayonnement allant jusqu'à 300 eV, ce qui affecte l'ionisation des dopants lorsqu'ils se mélangent au cœur de DT chaud et comprimé. Le cœur en implosion émet également du rayonnement qui peut modifier l'équilibre d'ionisation du dopant en coquille, affectant donc diverses propriétés du plasma, telles que sa conductivité thermique, son équation d'état et ses propriétés optiques. Le dopant modifie, par des changements d'opacité, la pression d'ablation en fonction de la profondeur. Ainsi, le succès d'une conception de capsule donnée dépend de la connaissance exacte des opacités de Si et Ge, qui elles-mêmes dépendent fortement du rayonnement et de la température du matériau, ainsi que de la densité de matière. Les taux d'excitation et d'ionisation et collisionnelles peuvent aussi avoir un effet direct sur la température et la densité du plasma. Plus exactement, le problème se résume à la détermination de l'opacité en fonction de la fréquence pour des plasmas de mélange hors équilibre thermodynamique local (ETL).

Les lasers de puissance et les machines à striction magnétique permettent de reproduire en laboratoire une partie des conditions thermodynamiques rencontrées depuis le centre jusqu'à la surface d'une étoile. Dans ces conditions extrêmes de température et de densité, le plasma est proche de l'ETL. Mais s'il existe de nombreux modèles permettant de calculer l'opacité et l'équation d'état de ces plasmas d'ions multichargés indépendamment, il est fondamental mais beaucoup plus ambitieux et difficile de comprendre la manière dont elles dépendent les unes des autres et de proposer une approche pour les calculer simultanément, c'est-à-dire à partir d'un formalisme commun. Il est essentiel, afin de décrire ces plasmas denses et particulièrement leur capacité à absorber le rayonnement électromagnétique, de disposer d'une caractérisation cohérente et réaliste des espèces ioniques dans ces plasmas.

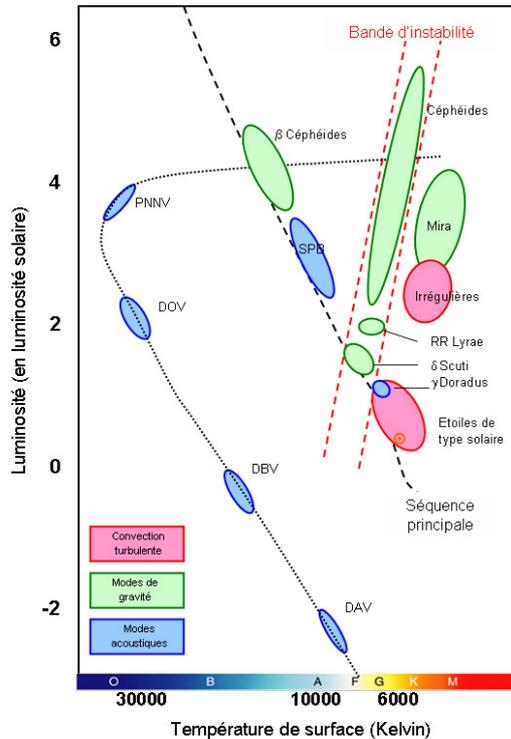


FIGURE 1.1 – Diagramme simplifié de Hertzsprung-Russell.

Une grande partie de mon activité de recherche concerne la spectroscopie des plasmas chauds. Le concept de spectres complexes a été introduit par opposition aux spectres simples, pour lesquels la formation de séries de Rydberg est la signature la plus évidente [186]. Les spectres complexes se caractérisent par l'apparition de multiplets ou groupes de raies avec des espacements et des forces caractéristiques. Kuhn attribue les spectres complexes aux atomes ou ions ayant plus d'un électron (ou trou) de valence avec un nombre quantique orbital $\ell > 0$ [215]. Une autre distinction entre spectres simples et complexes a été proposée par Racah à la "Rydberg Centennial Conference" à Lund en 1954 : "Les spectres atomiques peuvent être divisés en trois catégories (je prends la liberté de traduire "filling-up shell" par "couche incomplète") :

- (i) les spectres présentant une couche p incomplète, qui peuvent être qualifiés de spectres simples,
- (ii) les spectres présentant une couche d incomplète, considérés comme des spectres complexes
- (iii) les spectres présentant une couche f incomplète, qui sont si complexes que la plupart n'ont pas été étudiés du tout" [333].

Les choses ont changé depuis, bien sûr : la situation des éléments $4f$ - lanthanides ou terres rares - a considérablement évolué au cours des années 1970 grâce à de meilleurs outils expérimentaux et théoriques. Dans son article intitulé "Complex Atomic Spectra" [192], Judd propose une revue des méthodes de modélisation des atomes complexes accompagnée d'une liste

détaillée de références relatives à tous les systèmes de configurations étudiés avant 1985. Pour introduire la distinction entre spectres simples et complexes il est judicieux de faire intervenir la notion de “limite de série”. Pour une valeur donnée de ℓ , les niveaux d’énergie correspondant à différentes valeurs du nombre quantique principal n forment une “série de Rydberg”. Lorsque n tend vers l’infini, chaque série tend vers une énergie limite appelé “limite de série”. Ainsi, le jeu des termes dans un spectre simple a seulement une limite de série alors que les spectres complexes en contiennent plusieurs. Cette définition est très proche de celle donnée par Kuhn [215], alors que nous trouvons des spectres simples et complexes (au sens de Judd) dans les trois catégories introduites par Racah. Les spectres simples ont un point de convergence commun, la limite d’ionisation, qui peut être obtenue par extrapolation à partir des séries de Rydberg. Les multiples limites de série dans les spectres complexes sont dues à l’existence d’un jeu de termes LS qui peuvent appartenir à plus d’une configuration. Ainsi, une distinction entre spectres simples et complexes, fondée sur le nombre de limites de série, inclut la structure du cœur atomique, qui détermine, dans une large mesure, la structure de l’atome lui-même. L’existence d’un grand nombre d’électrons de valence et la compétition dans l’énergie de liaison entre électrons d et s donne naissance à un grand nombre de termes du cœur équidistants en énergie, qui se comportent comme des limites de série multiples. Notons, pour l’anecdote, que Cowan a comparé l’analyse des termes spectroscopiques à l’assemblage de pièces d’un puzzle en dents de scie [86] : “The problem is rather like that of trying to put together the pieces of a complicated jigsaw puzzle when the pieces never fit exactly, some pieces fit spuriously, some critical pieces are missing, and there are pieces that belong to one or more entirely different puzzle”.

Autour de 1950, Wigner a introduit l’idée de modéliser la réalité physique par un ensemble de matrices aléatoires et de s’en servir pour étudier les niveaux d’énergie des noyaux lourds. Depuis lors, le domaine de la théorie des matrices aléatoires s’est considérablement développé [216,245], avec des applications allant des fluctuations des marchés économiques aux spectres atomiques complexes. Il est intéressant d’appliquer cette théorie à la structure et aux transitions radiatives dans les atomes complexes, en se plaçant dans le cadre de l’ensemble orthogonal Gaussien. Des propriétés intrinsèques de la physique atomique des plasmas chauds, peuvent être en partie expliquées par la théorie des matrices aléatoires.

Les spectres d’absorption et d’émission des plasmas d’ions multichargés sont composés de faisceaux de transition (un faisceau de transition est l’ensemble des raies associées à un saut mono-électronique entre deux configurations) contenant un nombre de raies dipolaires-électriques (E1) qui peut être considérable. Heureusement, dans certains cas, ces raies fusionnent en de larges structures spectrales dites “non résolues” (au sens où l’on n’en perçoit pas nettement les détails). Un tel phénomène peut être dû au grand nombre de raies, généré par l’ouverture d’une ou plusieurs couches dans les configurations initiale ou finale impliquées dans la transition. Cela se produit pour des plasmas de numéro atomique Z intermédiaire ou élevé, ayant une structure électronique complexe. La coalescence peut également être induite par les mécanismes d’élargissements physiques. Pour les plasmas denses, l’effet Stark et les collisions électroniques conduisent à un élargissement des niveaux et des raies qui, lorsqu’il est important (à forte densité) va provoquer la coalescence des raies. Le faisceau peut alors être modélisé de manière statistique : la distribution des raies est représentée par une enveloppe continue, dont les deux premiers moments (énergie moyenne et largeur à mi-hauteur) sont calculés en utilisant l’algèbre de Racah, les techniques de seconde quantification de Judd [190] et les méthodes graphiques de Yutsis [100–102, 189]. Le modèle résultant, nommé UTA [32] (Unresolved Transition Array) et les méthodes dérivées sont utilisées dans la plupart des codes d’opacité. Le pendant relativiste

(couplage jj) de l'approche UTA est l'approche SOSA (Spin-Orbit Split Array).

Le choix de la distribution statistique à utiliser pour représenter les faisceaux de transition est ouvert. Nous avons montré que la Gaussienne, qui est souvent employée dans le formalisme UTA, n'est pas toujours la distribution la plus pertinente, car elle ne permet pas de reproduire l'aspect plus ou moins asymétrique et / ou piqué des structures spectrales. Par ailleurs, son utilisation systématique amène souvent à surestimer la largeur des structures. Nous avons suggéré d'utiliser la distribution Gaussienne Généralisée [187, 259, 395] qui introduit un paramètre supplémentaire (la puissance de l'argument dans l'exponentielle) pouvant être ajusté de manière à conserver le coefficient d'aplatissement (ou kurtosis) du faisceau. Nous avons illustré la pertinence de ce choix en simulant l'enveloppe de différents faisceaux de transition calculés de manière détaillée avec le code de R.D. Cowan, et en analysant plusieurs expériences récentes de photo-absorption (laser ou Z-pinch). Nous avons en outre étudié l'effet de l'asymétrie (skewness) à l'aide du développement de Gram-Charlier et de la distribution NIG (Normal Inverse Gaussian) et proposé une formule analytique approximative pour estimer le kurtosis d'un faisceau.

Cependant, même si l'on est capable de décrire, au moins de manière globale, les nombreuses raies dipolaires électriques entre deux configurations, une autre difficulté se pose à nous : le nombre de configurations lui-même peut être extrêmement grand. Pour remédier à ce problème, Bar-Shalom et coll. ont développé l'approche STA (Super Transition Arrays) [29], fondée sur la notion de super-configuration (ensemble de configurations). Une super-configuration est un ensemble de super-couches peuplées par des électrons, une super-couche étant simplement un ensemble de sous-couches proches en énergie. La première raison pour laquelle ce formalisme a été développé est que les spectres fondés sur le modèle de l'ion moyen (ou atome moyen) ne sont souvent pas suffisamment riches pour interpréter correctement certains spectres expérimentaux ou pour calculer des moyennes de Rosseland précises, indispensables à toute étude concernant le transfert de rayonnement. La seconde raison est qu'il n'est pas réaliste d'envisager un calcul en configurations détaillées, car elles sont beaucoup trop nombreuses. Les super-configurations permettent donc en théorie de disposer d'une précision ajustable de calcul entre deux situations extrêmes : le calcul par degré de charge consistant en une seule super-couche pour tout le plasma et par conséquent une seule super-configuration par degré de charge, et le calcul en configurations détaillées.

Les méthodes globales, UTA [32], SOSA [35] et STA [29] ne sont cependant pas toujours suffisamment précises et atteignent leurs limites lorsque certains faisceaux de transition présentent des structures détaillées. Les spectres d'absorption et d'émission des plasmas d'ions multichargés peuvent contenir des faisceaux riches en raies dipolaires-électriques (E1) coalescentes, pour lesquels une approche globale est parfaitement adaptée, et d'autres comportant une poignée de raies, nécessitant la diagonalisation de la matrice Hamiltonienne. Nous avons alors entrepris, dans le cadre de la thèse de Quentin Porcherot, de développer un code de calcul d'opacité hybride combinant les approches statistiques mentionnées ci-dessus (lorsque c'est nécessaire ou suffisant) et le calcul (détaillé) de la structure fine atomique. Cela implique de définir des critères pour décider de la nécessité du traitement détaillé des raies et cerner la validité des approches statistiques. Les données nécessaires au calcul des faisceaux détaillés (intégrales de Slater, de spin-orbite et élément dipolaire) sont calculées et transmises par le code de super-configurations SCO (Super-configuration Code for Opacity) [61], qui propose une bonne description des effets d'environnement plasma (écranage et ionisation par pression) sur les fonctions d'onde. Ensuite, les énergies des niveaux et les raies (position et force) sont calculées par une version du sous-programme RCG du code de Cowan [86] adapté pour l'occasion. L'outil obtenu per-

met d'obtenir des opacités précises, requises pour l'astrophysique et la FCI, et d'étudier les propriétés intrinsèques des spectres atomiques complexes. Ce modèle s'avère performant pour l'interprétation de spectres expérimentaux tels que ceux obtenus récemment au Laboratoire pour l'Utilisation des Lasers Intenses de l'Ecole Polytechnique et au Sandia National Laboratory (Z-pinch) à Albuquerque au Nouveau Mexique (Etats-Unis).

Du fait du grand nombre de raies à prendre en compte dans un calcul d'opacité réaliste, il n'est pas possible aujourd'hui de mettre en œuvre des calculs précis de profils de raie pour toutes les transitions. Si cela est faisable pour des atomes à faible nombre d'électrons (transitions en couche K principalement), ce n'est pas accessible pour des transitions en couches L, M, *etc.*. Cependant, la moyenne de Rosseland étant une moyenne harmonique de l'opacité, elle est très sensible aux creux (fenêtres) dans le spectre, et donc aux profils de raie (notamment dans les ailes). Nous avons donc décidé de nous former à cette thématique, avec un double objectif : disposer d'un outil de référence, le code ZEST (ZEeman-STark), dédié aux effets Stark et Zeeman, et proposer des approches statistiques (dans la même veine que pour les faisceaux de transitions radiatives mentionnés plus haut) présentant le meilleur compromis simplicité / précision possible. ZEST nous permet de tester les modèles simplifiés d'effet Stark que nous utilisons dans le code SCO-RCG.

Le code SCO-RCG commence par un calcul auto-cohérent d'atome moyen confiné, afin de connaître la liste des sous-couches pertinentes à la température et à la densité considérées. Le même type de calcul est effectué ensuite pour chaque configuration (mais avec des nombres entiers d'électrons fixés). Cette manière de faire permet de prendre en compte les effets de densité (ou effets d'environnement plasma) sur les fonctions d'onde, mais aussi de calculer la contribution électronique à l'équation d'état du plasma.

Dans le chapitre 3 sont mentionnées, après des rappels sur le calcul de la structure atomique au chapitre 2, des études relatives à la distribution des niveaux d'énergie et des termes spectroscopiques dans une configuration. Le chapitre 4 se concentre sur la distribution des raies au sein d'un faisceau de transition. Le code d'opacité détaillé SCO-RCG est présenté au chapitre 5. Dans le chapitre 6, un certain nombre d'études relatives aux profils de raie sont évoquées, à travers le développement du code ZEST, on encore un travail destiné à proposer une modélisation statistique de l'effet Stark pour les atomes hydrogénoïdes. Une modélisation statistique de l'effet Zeeman pour les codes de calcul d'émissivité ou d'opacité est proposée. Toujours dans cette thématique, nos travaux portant sur les collisions électroniques pénétrantes et les calculs d'excitation collisionnelle par la méthode Multi-Configuration Dirac-Fock sont brièvement décrits.

Le chapitre 7 s'intéresse à l'équation d'état des plasmas chauds et denses, obtenues grâce à des modèles d'atomes moyens quantiques ou par des processus de moyennes sur les configurations / super-configurations. L'impact de la structure électronique sur les courbes d'Hugoniot est discuté, et une manière de calculer les mélanges est proposée. Dans le chapitre 8, nos travaux relatifs au calculs de la résistivité électrique statique dans le formalisme de Ziman sont présentés.

Le chapitre 9 rappelle les grandes lignes du mémoire et propose des perspectives de recherche pour les années à venir, dans le domaine de la physique atomique des plasmas chauds.

Chapitre 2

Rappels concernant la structure atomique et la notion de champ central

2.1 Hamiltonien et approximation du champ central

Le Hamiltonien le plus simple décrivant un atome de numéro atomique Z s'écrit, en unités atomiques :

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (\vec{\nabla}_i)^2 - Z \sum_{i=1}^N \frac{1}{r_i} + \sum_{i,j=1, i>j}^N \frac{1}{r_{ij}}. \quad (2.1)$$

Dans cette expression, nous avons posé $4\pi\epsilon_0 = 1$ et négligé :

(i) l'interaction de spin-orbite Λ et les autres interactions magnétiques (spin-spin, spin-other-orbit, etc.) et tous les autres effets d'origine relativiste (interaction de Breit),

(ii) le déplacement isotopique de masse, dû au fait que le noyau n'est pas fixe, mais se déplace plus s'il est léger que s'il est lourd,

(iii) le déplacement isotopique de volume,

(iv) la structure hyperfine, due aux interactions des éventuels moments magnétiques et moments électriques du noyau avec les électrons,

(v) les effets d'électrodynamique quantique (self-énergie, polarisation du vide, taille finie du noyau, recul du noyau).

Le Hamiltonien \hat{H} étant encore trop compliqué à cause de son dernier terme, l'interaction électrostatique entre électrons, Slater a eu l'idée en 1927 de l'écrire comme somme d'un Hamiltonien principal

$$\hat{H}_0 = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (\vec{\nabla}_i)^2 + \sum_{i=1}^N v(r_i) \quad (2.2)$$

et d'un Hamiltonien perturbateur

$$\hat{H}_1 = - \sum_{i=1}^N v(r_i) - Z \sum_{i=1}^N \frac{1}{r_i} + \sum_{i,j=1, i>j}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (2.3)$$

dans l'espoir que le potentiel $v(r)$ pourrait être choisi tel que les éléments de matrice de \hat{H}_1 soient assez petits pour qu'en s'arrêtant à son premier ordre de perturbation on ait déjà une description satisfaisante du système. Notons que $v(r)$ est arbitraire, mais que la solution du système ne dépendrait pas de ce choix si l'on poussait le calcul de perturbation jusqu'à l'infini.

L'équation

$$\hat{H}_0 \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, \sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N) = E \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, \sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N), \quad (2.4)$$

où \vec{r}_i est la position de l'électron i de spin σ_i , peut être séparée en N équations, une pour chaque électron. Ces N équations sont toutes les mêmes, c'est-à-dire :

$$\left[-\frac{1}{2} \vec{\nabla}^2 + v(r) \right] \psi(\vec{r}, \sigma) = \epsilon \psi(\vec{r}, \sigma) \quad (2.5)$$

où le numéro de l'électron a été omis. Cette dernière équation est du type "équation d'une particule dans un potentiel central" et ses solutions sont de la forme :

$$\psi_{n\ell m_s m_\ell}(\vec{r}, \sigma) = R_{n\ell}(r) Y_{\ell m_\ell}(\theta, \phi) \delta(\sigma, m_s) \quad (2.6)$$

où seule la fonction radiale dépend de la forme de $v(r)$ et où la fonction de spin δ est un simple facteur multiplicatif puisque H_0 ne dépend pas du spin. On voit que chaque solution correspond à un quadruplet de nombres quantiques $(n\ell m_s m_\ell)$. L'énergie propre correspondante est notée $\epsilon_{n\ell}$ et ne dépend que de la sous-couche $n\ell$. $R_{n\ell}(r)$ est la partie radiale de la fonction d'onde et obéit à l'équation

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} R_{n\ell}(r) + \left[\frac{\ell(\ell+1)}{2r^2} + v(r) \right] R_{n\ell}(r) = \epsilon_{n\ell} R_{n\ell}(r). \quad (2.7)$$

Les harmoniques sphériques $Y_{\ell m_\ell}$ sont définies par

$$Y_{\ell m_\ell}(\theta, \phi) = (-1)^{(m_\ell + |m_\ell|)/2} \left[\frac{(2\ell+1)(\ell - |m_\ell|)!}{4\pi(\ell + |m_\ell|)!} \right]^{1/2} P_\ell^{|m_\ell|}(\cos \theta) e^{im_\ell \phi}, \quad (2.8)$$

$P_\ell^{|m_\ell|}$ étant un polynôme de Legendre associé. On peut maintenant construire des "déterminants de Slater", qui sont des fonctions antisymétriques par rapport à l'échange de deux quelconques des N numéros d'électrons :

$$\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, \sigma_1, \dots, \sigma_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_a(1) & \psi_b(1) & \dots & \psi_n(1) \\ \psi_a(2) & \psi_b(2) & \dots & \psi_n(2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_a(N) & \psi_b(N) & \dots & \psi_n(N) \end{vmatrix}, \quad (2.9)$$

avec $a = n_a \ell_a m_{s_a} m_{\ell_a}$ et l'énergie propre $E = \epsilon_a + \epsilon_b + \epsilon_c + \dots$. Le principe de Pauli est une conséquence du fait que, si deux jeux de nombres quantiques sont identiques (par exemple $a = b$), le déterminant devient nul. L'ensemble infini des déterminants de Slater constitue une base complète pour décrire les états de l'atome, à condition que l'ensemble infini des fonctions radiales contienne l'ensemble infini continu des solutions d'énergie positive (celles du continuum).

2.2 Configuration électronique

L'ensemble des états déterminantaux correspondant au même jeu de nombres quantiques $n_a \ell_a, n_b \ell_b, n_c \ell_c, \dots$ est appelé configuration. Par exemple, la configuration non relativiste $C_0 = 1s^2 2s^2 2p^6 3s 3p^3 3d^2 4f^8$ correspond à un certain nombre d'états pour un système à 24 électrons et ces états sont dégénérés. La dégénérescence d'une configuration peut être calculée facilement en termes de coefficients du binôme. Pour une configuration $n\ell^N$, $g[n\ell^N] = \binom{4\ell + 2}{N}$ et pour la configuration $n_1 \ell_1^{N_1} \dots n_w \ell_w^{N_w}$:

$$g[n_1 \ell_1^{N_1} \dots n_w \ell_w^{N_w}] = \prod_{k=1}^w \binom{4\ell_k + 2}{N_k}. \quad (2.10)$$

Ainsi, la dégénérescence de la configuration C est égale à

$$g[C_0] = \binom{g_{3s}}{1} \binom{g_{3p}}{3} \binom{g_{3d}}{2} \binom{g_{4f}}{8} = \binom{2}{1} \binom{6}{3} \binom{10}{2} \binom{14}{8} = 5405400. \quad (2.11)$$

Pour traiter l'opérateur perturbateur \hat{H}_1 , dans un premier temps au premier ordre de perturbation, il faut diagonaliser sa matrice sur le sous-espace dégénéré de toute configuration C choisie. Comme cette matrice peut être d'ordre élevé et que la forme de l'opérateur \hat{H}_1 est complexe, on utilise le fait que deux opérateurs qui commutent possèdent au moins un ensemble de fonctions propres en commun. Etant donné que H_1 commute avec des opérateurs de moment cinétique simples : $\hat{S}_z, \hat{S}^2, \hat{L}_z$ et \hat{L}^2 , le premier travail consiste donc à déterminer les valeurs des nombres quantiques correspondants M_S, S, M_L et L pour tous les états de la configuration C . En fait les nombres quantiques associés à \hat{S} et \hat{L} sont des nombres quantiques approchés, mais ils permettent de décrire les niveaux d'énergie en couplage LS, c'est-à-dire lorsque l'énergie électrostatique domine toutes les autres contributions au Hamiltonien perturbateur, en particulier l'interaction spin-orbite. D'autres couplages sont parfois plus adaptés, comme le couplage jj , utile lorsque l'interaction spin-orbite domine les autres interactions. Les nombres quantiques exacts correspondent à des opérateurs qui commutent avec le Hamiltonien complet, plus compliqué que \hat{H} : M_J , valeur propre de $\hat{J}_z = \hat{L}_z + \hat{S}_z$, \hat{J} , moment cinétique total de l'atome, tel que \hat{J}^2 soit valeur

propre de \hat{J}^2 et π , la parité, qui vaut $+1$ ou -1 , valeur propre de l'opérateur parité qui change \vec{r}_i en $-\vec{r}_i$. La parité d'un état mono-électronique $(nlm_s m_\ell)$ est égale à $(-1)^\ell$, et celle de tous les états de la configuration $n_1 \ell_1^{N_1} \dots n_w \ell_w^{N_w}$ à

$$\pi \left[n_1 \ell_1^{N_1} \dots n_w \ell_w^{N_w} \right] = (-1)^{N_1 \ell_1 + N_2 \ell_2 + \dots + N_w \ell_w}. \quad (2.12)$$

Le problème consistant à déterminer le nombre de configurations d'une super-configuration est complexe, et il n'existe pas de formule simple. Pourtant, il s'agit d'un problème combinatoire bien posé : comment répartir Q boules dans N boîtes de tailles g_1, g_2, \dots, g_N . Il est cependant possible de calculer ce nombre par récurrence. Ainsi, si on considère une super-couche contenant N orbitales et Q électrons, on peut calculer le nombre de configurations $\mathcal{N}_Q(N)$ qu'elle représente par récurrence de la manière suivante :

$$\mathcal{N}_Q(N) = \sum_{q_N=0}^{\min(Q, g_N)} \mathcal{N}_{Q-q_N}(N-1). \quad (2.13)$$

Des algorithmes plus élaborés existent [147, 414], et nous avons récemment obtenu de nouvelles formules explicites, de nouvelles relations de récurrences et des formules approximatives fondées sur le théorie des moments [303].

2.3 Couplage intermédiaire et interaction de configurations

Pour une configuration de dégénérescence g , la matrice Hamiltonienne de dimensions $g \times g$ se scinde en blocs correspondant chacun à un couple (J, M_J) différent. En outre, la mécanique quantique nous apprend également que, si un opérateur commute avec un opérateur de moment cinétique \hat{J} , ses éléments de matrice sont indépendants de la valeur de la projection de \hat{J} sur l'axe extérieur choisi. Il suffit donc de considérer une matrice de couplage intermédiaire par valeur de J . Aller aux ordres supérieurs d'un problème de perturbations sur un système dégénéré signifie, dans la pratique, augmenter la base sur laquelle on doit diagonaliser le Hamiltonien perturbateur. Cela consiste, ici, à diagonaliser $\hat{H} + \hat{\Lambda}$ sur l'ensemble des états de plusieurs configurations, *i.e.* traiter le mélange (l'interaction) de configurations. Ces configurations doivent être toutes de même parité. Notons que, puisque $\hat{H} + \hat{\Lambda}$ ne contient que des opérateurs mono-électroniques et un opérateur bi-électronique, ses éléments non diagonaux sont nuls entre les états de configurations qui diffèrent de plus de deux orbitales.

Nous avons développé une approche globale qui permet d'aborder des calculs complexes d'interaction de configurations. La méthode est basée sur l'utilisation d'éléments de matrice moyennés sur les configurations, qui peuvent être exprimés sous une forme compacte comme une combinaison d'intégrales de Slater. A l'aide de quelques hypothèses, nous montrons que la matrice Hamiltonienne à diagonaliser peut être réduite à une taille équivalente au nombre de configurations dans l'ensemble de base. Cette approche peut être utilisée pour estimer le déplacement des énergies moyennes des configurations et les changements dans la force totale des faisceaux de transition. La méthode est également bien adaptée pour aborder des calculs difficiles d'interaction de configurations, de façon à déterminer l'ensemble minimal de configurations en interaction qui doit être utilisé dans un véritable calcul de structure fine [141].

Chapitre 3

Distribution des niveaux γJ et des termes LS

3.1 Niveaux γJ

3.1.1 Dénombrement par récurrence

Dans le cas de la configuration ℓ^N , nous avons montré que le nombre d'états de projection M_J donnée peut être obtenu par récurrence selon [138, 299] :

$$P_{n,k}(M_J) = P_{n,k-1}(M_J) + P_{n-1,k-1}(M_J - m_k) \quad (3.1)$$

$$P_{0,k}(M_J) = \delta_{0,k} \quad \forall k, \quad (3.2)$$

k variant de 1 à $4\ell + 2$ et n de 1 à N . La valeur de m_k (moment magnétique de l'état mono-électronique k) est donnée par :

$$m_k = \frac{2k - 4\ell - 3 + (-1)^k}{4} ; \quad 1 \leq k \leq 4\ell + 2. \quad (3.3)$$

Le nombre de niveaux de moment cinétique total J est donné par la relation de Condon et Shortley [81] :

$$Q(J) = \sum_{M_J=J}^{J+1} (-1)^{J-M_J} P(M_J) = P(J) - P(J+1). \quad (3.4)$$

Si $Q_A(J)$ et $Q_B(J)$ sont les distributions des niveaux de deux configurations A et B, le nombre de raies dipolaires électriques est donné par

$$N_{\text{lines}} = \sum_{J \neq 0} Q_A(J)Q_B(J) + \sum_J Q_A(J)Q_B(J+1) + \sum_J Q_A(J)Q_B(J-1) \quad (3.5)$$

qui peut être approché, si on dispose d'une représentation analytique de $Q_A(J)$ et $Q_B(J)$, par

$$N_{\text{lines}} \approx \int_{-1/2}^{\infty} Q_A(J) \left[3Q_B(J) + \frac{d^2 Q_B(J)}{dJ^2} \right] dJ. \quad (3.6)$$

Notons qu'il est également possible d'aborder le dénombrement des niveaux en utilisant les coefficients de parenté fractionnaire [302] (parfois appelés coefficients de parenté fractionnelle [109]).

3.1.2 Description statistique

Bauche et Bauche-Arnoult ont proposé de modéliser la distribution $P(M_J)$ par une Gaussienne [36]. Cependant, nous avons montré que cette distribution n'est pas appropriée dans le cas de grandes valeurs de ℓ , et que dans ce cas il vaut mieux utiliser la Gaussienne Généralisée (GG) définie par :

$$\text{GG}(E) = \frac{\Omega\nu}{\sigma} \frac{\exp(-|u/\lambda|^\nu)}{2\lambda \Gamma(1/\nu)} \quad \text{avec} \quad \lambda = \sqrt{\frac{\Gamma(1/\nu)}{\Gamma(3/\nu)}}, \quad (3.7)$$

où ν est un nombre réel positif, $u = (E - \mu_1)/\sigma$ et $\Gamma(x)$ est la fonction Gamma ordinaire [2]. Le moment d'ordre n de la distribution des projections M_J s'écrit :

$$\mu_n = \frac{1}{g_C} \sum_{\gamma} \langle \gamma | \hat{J}_z | \gamma \rangle, \quad (3.8)$$

la somme portant sur tous les états propres γ de la configuration C d'intérêt en couplage intermédiaire. La dégénérescence g_C est le nombre total de ces états propres. Le moment réduit d'ordre n est défini par

$$\alpha_n = \frac{\mu_n}{\mu_2^{n/2}}. \quad (3.9)$$

La distribution étant symétrique, l'écart-type σ vaut $\sqrt{\mu_2}$. Les moments réduits d'ordre pair d'une fonction GG s'écrivent

$$\alpha_{2k}(\text{GG}) = \lambda^{2k} \frac{\Gamma(\frac{1+2k}{\nu})}{\Gamma(\frac{1}{\nu})}, \quad (3.10)$$

alors que les moments d'ordre impair sont nuls, $\alpha_{2k+1}(P) = 0$, puisque la GG est symétrique. Le paramètre ν peut être obtenu en contraignant le kurtosis, et par conséquent en résolvant l'équation

$$\alpha_4 = \frac{\Gamma(1/\nu) \Gamma(5/\nu)}{\Gamma(3/\nu)^2}. \quad (3.11)$$

La GG est une simple fonction croissante (décroissante) pour $u < 0$ ($u > 0$). La Gaussienne ($\nu = 2$) et la distribution de Laplace ($\nu = 1$) sont des cas particuliers de fonctions GG avec un kurtosis égal à 3 et 6, respectivement. La largeur à mi-hauteur (FWHM) d'une fonction Gaussienne Généralisée est $2\sigma\lambda (\log 2)^{\frac{1}{\nu}}$. Par exemple, la formule ci-dessus donne FWHM = 2.35σ pour une Gaussienne ($\nu = 2$) et FWHM = 0.98σ pour une distribution de Laplace ($\nu = 1$). La racine de l'équation (3.11) peut être approchée par (voir figure 3.1) :

$$\nu = 1.62796 [\ln(\alpha_4 - 0.783143)]^{\frac{0.796349}{\alpha_4^2} - 1}. \quad (3.12)$$

On a donc [138] :

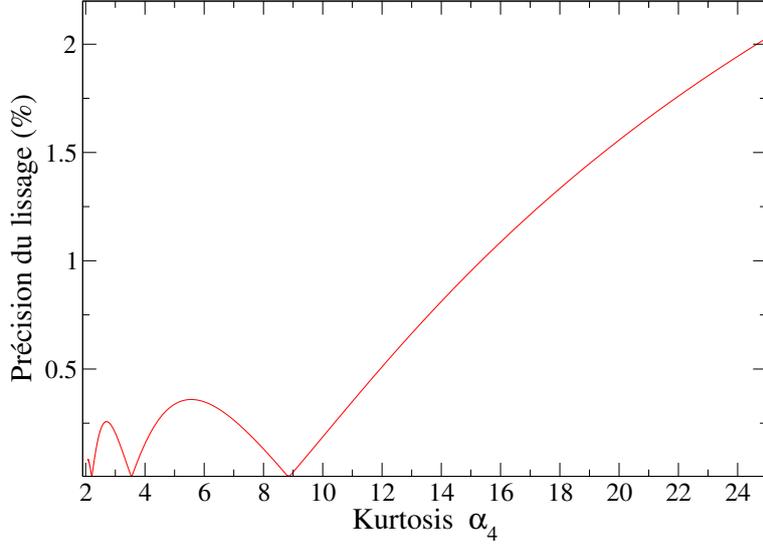


FIGURE 3.1 – Précision de la formule approchée donnant l'exposant ν de la Gaussienne Généralisée en fonction du kurtosis α_4 .

$$P_{GG}(M_J) = \frac{\nu(2\ell + 1)}{\lambda\sigma\Gamma(1/\nu)} \exp\left(-\left|\frac{M_J}{\lambda\sigma}\right|^\nu\right). \quad (3.13)$$

Par ailleurs, pour une sous-couche ℓ^N , on peut écrire

$$\sigma^2 = q(\ell^N) \frac{4\ell(\ell + 1) + 3}{12}, \quad (3.14)$$

ainsi que

$$\alpha_4 = 3 - \frac{q(\ell^N)}{\sigma^4} [a(\ell^N) + q(\ell^N)b(\ell^N)], \quad (3.15)$$

où

$$\begin{cases} q(\ell^N) = [N(4\ell + 2 - N)] / (4\ell + 1) \\ a(\ell^N) = (2\ell + 1) [8\ell^2(2\ell^2 + 1) + 24\ell(\ell^2 - 1) - 9] / [60(4\ell - 1)] \\ b(\ell^N) = [-16\ell^4 - 16\ell^3 + 88\ell^2 + 136\ell + 3] / [120(4\ell - 1)]. \end{cases} \quad (3.16)$$

Pour une configuration non relativiste quelconque, la variance de la distribution des M_J s'écrit

$$v\left(\ell_1^{N_1} \ell_2^{N_2} \ell_3^{N_3} \dots \ell_w^{N_w}\right) = v\left(\ell_1^{N_1}\right) + v\left(\ell_2^{N_2}\right) + v\left(\ell_3^{N_3}\right) + \dots + v\left(\ell_w^{N_w}\right), \quad (3.17)$$

et le kurtosis

$$\mu_4\left(\ell_1^{N_1} \ell_2^{N_2} \ell_3^{N_3} \dots \ell_w^{N_w}\right) = \sum_{i=1}^w \mu_4\left(\ell_i^{N_i}\right) + 6 \sum_{i,j=1, i < j}^w \mu_2\left(\ell_i^{N_i}\right) \mu_2\left(\ell_j^{N_j}\right). \quad (3.18)$$

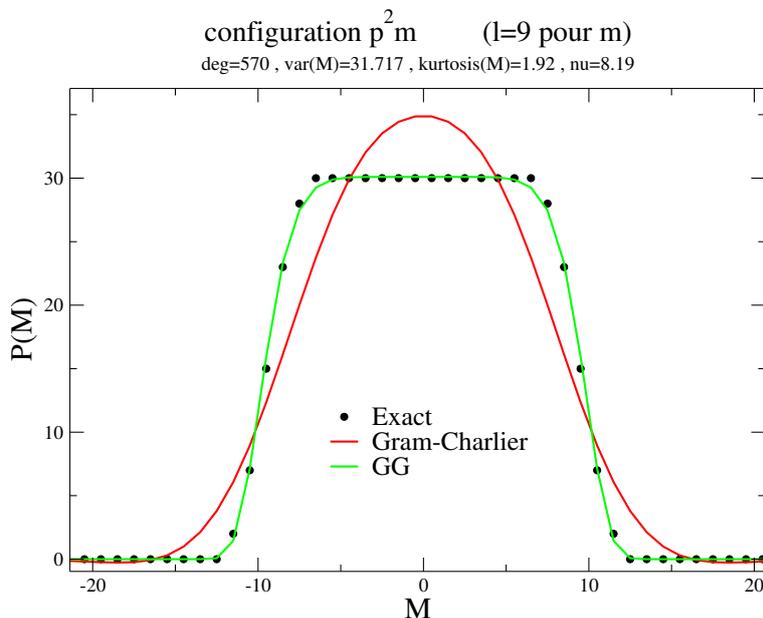


FIGURE 3.2 – Distribution des états $P(M_J)$ pour la configuration $p^2 m$ (une sous-couche m correspond à $\ell=9$) : calcul exact comparé aux modélisations Gram-Charlier d'ordre 4 et Gaussienne Généralisée (GG).

On peut voir sur la figure 3.2 que dans le cas de la configuration $p^2 m$ (une sous-couche m correspond à $\ell=9$), la Gaussienne Généralisée (GG) reproduit beaucoup mieux la distribution exacte que le développement de Gram-Charlier d'ordre 4, qui consiste en une Gaussienne multipliée par une combinaison linéaire de polynômes de Hermite dont les moments sont fixés par les moments de la distribution (voir paragraphe 4.2.1), c'est-à-dire ici les moments d'ordre 2 et 4.

Avec cette modélisation de la distribution, on obtient l'expression approximative suivante pour le nombre de raies E1 entre deux configurations A et B de dégénérescences respectives g_A et g_B :

$$N_{\text{lines}} = \frac{2^{1/\nu}(\nu-1)g_A g_B}{64\lambda^5 \sigma^5 \Gamma(1 + \frac{1}{\nu})^2} \left[12\lambda^2 \sigma^2 \Gamma\left(1 - \frac{1}{\nu}\right) + 2^{2/\nu} \nu(1-2\nu) \Gamma\left(2 - \frac{3}{\nu}\right) \right]. \quad (3.19)$$

Des exemples sont donnés dans le tableau 3.1.2.

Nous avons également utilisé le même type de technique pour estimer le nombre de raies E2 [290].

3.2 Termes LS

3.2.1 Dénombrement des termes LS par des méthodes récursives

Le problème de l'énumération des termes spectroscopiques apparaissant dans une configuration complexe peut être abordé (et résolu) par la théorie des groupes [67, 87, 198, 200, 416] (voir

Transition array	σ^2	α_4	N_{lines} [exact]	N_{lines} [GG]	Err. (%)
$p^3 - p^2s$	1.68	2.27	35	31	-11.4
$d^9 - d^8p$	3.58	2.25	60	60	0
$d^8 - d^7f$	6.75	2.51	721	732	+1.5
$d^8p - d^8d$	5.58	2.59	1554	1560	+0.4
$d^4 - d^3p$	6.08	2.60	1718	1726	+0.5
$f^3s^2 - f^3sp$	11.37	2.61	7402	7398	-0.1
$f^{13}d^2s - f^{13}dsp$	8.08	2.57	15821	15999	+1.1
$d^7f - d^6fp$	10.33	2.67	160887	160695	-0.1
$f^8 - f^7d$	16.98	2.74	277827	275714	-0.8
$d^6f - d^5f^2$	12.17	2.70	291521	290188	-0.5
$d^3h - d^2hp$	15.33	2.43	44821	46090	+2.8
$s^2g - sgp$	7.5	2.0	36	36	0
$pi - di$	15.83	2.03	130	136	+4.6
$p^3i - p^2is$	15.93	2.05	1306	1317	+0.8
$d^2l - dlp$	27.83	2.09	4336	4367	+0.7
$s^2m - spm$	30.83	1.86	36	45	-2.8

Annexe C). Le nombre de termes LS d'une configuration ℓ^N peut également être obtenu par la relation

$$Q(S, L) = a_N^{L,S} - a_N^{L+1,S} - a_N^{L,S+1} + a_N^{L+1,S+1}, \quad (3.20)$$

où $a_N^{L,S}$ est le coefficient du terme $x^L y^S$ dans la fonction génératrice $F_N(x, y)$ obtenue de

$$F_N(x, y) = \frac{1}{N!} \left. \frac{\partial^N F(x, y, z)}{\partial z^N} \right|_{z=0} \quad (3.21)$$

et

$$F(x, y, z) = \prod_{m=-\ell}^{\ell} (1 + z x^m \sqrt{y}) \left(1 + z \frac{x^m}{\sqrt{y}} \right) = \sum_{N=0}^{4\ell+2} z^N F_N(x, y). \quad (3.22)$$

La quantité $F_N(x, y)$ peut s'écrire sous la forme

$$F_N(x, y) = \sum_{k=0}^N G_k(x, y) G_{N-k} \left(x, \frac{1}{y} \right) \quad (3.23)$$

où

$$G_N(x, y) = \frac{1}{N!} \left. \frac{\partial^N}{\partial z^N} \prod_{m=-\ell}^{\ell} (1 + z x^m \sqrt{y}) \right|_{z=0}, \quad (3.24)$$

que l'on peut obtenir à partir de la relation de récurrence :

$$G_N(x, y) = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \left(\sum_{p=-\ell}^{\ell} \frac{(-1)^k (x^p \sqrt{y})^{k+1}}{k!} \right) G_{N-1-k}(x, y). \quad (3.25)$$

soit

$$G_N(x, y) = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \frac{(-1)^k}{k!} \left(\frac{\sqrt{y}}{x^\ell} \right)^{k+1} \frac{1 - x^{(k+1)(2\ell+1)}}{1 - x^{k+1}} G_{N-1-k}(x, y). \quad (3.26)$$

Les coefficients $Q(S, L)$ sont calculés en utilisant des relations de récurrence [138, 286] :

$$Q(S, L) = \sum_{M_S=S}^{S+1} \sum_{M_L=L}^{L+1} (-1)^{S-M_S+L-M_L} P(M_S, M_L) \quad (3.27)$$

et pour une configuration ℓ^N , on a :

$$P_N(M_S, M_L) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{4\ell+2} \sum_{k=1}^N (-1)^{k+1} P_{N-k} \left(M_S - k \frac{(-1)^i}{2}; M_L - km_i + \frac{(-1)^i}{2} \right), \quad (3.28)$$

la récurrence étant initialisée avec $P_0(M_S, M_L) = \delta(M_S) \delta(M_L)$ [286].

3.2.2 Modélisation statistique

Karwowski et Bancewicz [199] ont publié des formules générales compactes pour les expressions des moments d'ordre un et deux des énergies d'un Hamiltonien \hat{H} à un et deux électron(s) dans le sous-espace d'une configuration électronique ℓ^N correspondant à une valeur spécifique du spin total S (on parle de "spin-adapted subspace"). Choissant $\hat{H} = \hat{L}_z^2$, les deux premiers moments non nuls pour le nombre quantique M_L dans un sous-espace de spin adapté sont

$$\sigma^2(\ell^N, S) = (2\ell + 3)N(4\ell + 2 - N)/24 - (2\ell + 1)S(S + 1)/6 \quad (3.29)$$

et

$$\begin{aligned} \mu_4(\ell^N, S) &= a(\ell) [N(4\ell + 2 - N)]^2 + b(\ell)N(4\ell + 2 - N)S(S + 1) \\ &+ c(\ell) [S(S + 1)]^2 + d(\ell)N(4\ell + 2 - N) + e(\ell)S(S + 1), \end{aligned} \quad (3.30)$$

avec

$$\begin{cases} a(\ell) = (2\ell + 3)(5\ell + 8)/480 \\ b(\ell) = -(2\ell + 3)(5\ell + 4)/60 \\ c(\ell) = \ell(10\ell + 11)/30 \\ d(\ell) = -(2\ell + 3)(2\ell^2 + 4\ell + 3)/120 \\ e(\ell) = [8(\ell + 1)^3 - 1]/30. \end{cases} \quad (3.31)$$

La formule pour $Q(S, L)$ peut être déduite de

Faisceau de transition	Nombre de raies LS	Variance (eV ²)
$p^2 - sp$	8	26.05
$p^2s - ps^2$	9	25.30
$p^3 - p^2s$	19	37.40
$sp^2 - sps$	25	31.20
$d^9 - d^8p$	30	5.23
$d^8 - d^7p$	184	9.50
$d^3 - d^2p$	203	3.41
$d^8 - d^7f$	273	11.52
$p^2d^1 - p^1d^2$	316	31.42
$d^3p^6 - d^4p^5$	636	88.80
$d^4 - d^3p$	637	4.01
$d^8p - d^8d$	644	3.35
$d^8d - d^8f$	644	2.32
$p^3p^2 - p^3ps$	870	67.93
$d^3p - d^2p^2$	2120	3.92
$f^3s^2 - f^3sp$	2334	239.45
$p^3d^2 - p^2d^3$	6129	48.96
$p^3d^6 - p^2d^7$	21326	45.66
$p^4d^6 - p^3d^7$	21367	42.70
$d^5p^2 - d^5ps$	28368	4.33
$d^7f - d^6fp$	48892	14.22
$d^6f - d^5f^2$	85483	17.47
$p^5d^4 - p^5d^3f$	88492	26.30

TABLE 3.1 – Nombre de raies et variance de différents faisceaux de transition (classés par nombre de raies croissant).

$$Q(S, L) = \frac{\nu^2 g(\ell^N, S)}{2\lambda^2 \sigma^2(\ell^N, S) \Gamma(1/\nu)} \left(\frac{J+1/2}{\lambda \sigma(\ell^N, S)} \right)^{\nu-1} \exp \left(- \left[\frac{J+1/2}{\lambda \sigma(\ell^N, S)} \right]^\nu \right) \quad (3.32)$$

en évaluant la dégénérescence $g(\ell^N, S)$ à l'aide de la formule de Weyl-Paldus [304] :

$$g(\ell^N, S) = \frac{2S+1}{2\ell+2} \binom{2\ell+2}{N/2-S} \binom{2\ell+2}{N/2+S+1} \quad (3.33)$$

et la valeur de ν est fixée par celle du kurtosis. Dans le cas du couplage LS, le calcul du nombre de raies est un peu plus complexe. Chaque état atomique s'écrit maintenant $|\gamma SLJM\rangle$ et les règles de sélection sont plus restrictives qu'en couplage intermédiaire ; on doit satisfaire : $\Delta S = 0$, $\Delta L = \pm 1$ et toujours $\Delta J = 0$ en excluant $J = 0 \rightarrow J' = 0$. Le tableau 3.2.2 donne le nombre de raies en couplage LS et la variance de différents faisceaux de transition.

Chapitre 4

Distribution des raies spectrales

4.1 Calcul exact

Dans le modèle de champ central, nous avons vu que la distribution de probabilité de l'électron k est décrite par une fonction d'onde à un électron, aussi appelée une "spin-orbitale", de la forme

$$\psi_k = \frac{1}{r_k} y_{n_k \ell_k}(r_k) Y_{\ell_k m_k}(\theta_k, \phi_k) \chi_{m_{s_k}} \quad (4.1)$$

et la fonction d'onde anti-symétrisée pour l'atome à N électrons est construite comme combinaisons linéaires de produits de fonctions

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^\pi \psi_{i_1}(r_{i_1}) \psi_{i_2}(r_{i_2}) \cdots \psi_{i_N}(r_{i_N}), \quad (4.2)$$

où la somme porte sur les $N!$ permutations possibles de l'ordre normal $1, 2, 3, \dots, N$ et π est la parité de la permutation \mathcal{P} . En d'autres termes, la fonction d'onde Ψ peut se mettre sous la forme d'un déterminant de Slater. Les dépendances par rapport aux variables radiales et angulaires impliquent deux étapes : le calcul des fonctions radiales $R_{n\ell}(r) = y_{n\ell}(r)/r$ des spin-orbitales mono-électroniques et le calcul des éléments de matrice

$$H_{bb'} = \langle b' | H | b \rangle, \quad (4.3)$$

b et b' étant les fonctions de base et \hat{H} le Hamiltonien qui s'écrit, en unités atomiques :

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_k \nabla_k^2 - \sum_k \frac{Z}{r_k} + \sum_{k,j,k>j} \frac{1}{r_{kj}} + \sum_k \zeta_k(r_k) (\vec{\ell}_k \cdot \vec{s}_k), \quad (4.4)$$

où les termes successifs représentent, respectivement, de gauche à droite, les opérateurs cinétique, électron-noyau, électron-électron et spin-orbite que nous avons ajouté. Le calcul de la partie radiale des orbitales est effectué en utilisant la méthode Hartree-Fock [123]. L'étape suivante est le calcul de l'élément de matrice :

$$\langle ij | \frac{1}{r_{12}} | tu \rangle \quad (4.5)$$

dans lequel l'intégrale de Slater directe

$$F^k(ij) = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{r^k}{r^{k+1}} |y_i(r_1)|^2 |y_j(r_2)|^2 dr_1 dr_2 \quad (4.6)$$

et l'intégrale de Slater d'échange

$$G^k(ij) = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{r^k}{r^{k+1}} y_i^*(r_1) y_j^*(r_2) y_i(r_2) y_j(r_1) dr_1 dr_2 \quad (4.7)$$

sont des cas particulier des intégrales $R^k(ij, tu)$

$$F^k(ij) \equiv R^k(ij, ij) \quad (4.8)$$

et

$$G^k(ij) \equiv R^k(ij, ji). \quad (4.9)$$

L'intégrale de spin-orbite est donnée par

$$\zeta_i = \frac{\alpha^2}{2} \int_0^\infty \frac{1}{r} \left(\frac{dv}{dr} \right) |y_i(r)|^2 dr, \quad (4.10)$$

où α est la constante de structure fine. De manière à calculer la force de raie, il faut calculer l'intégrale dipolaire pour la transition $n\ell \rightarrow n'\ell'$ définie par

$$D_{\ell\ell'} = \delta_{\ell', \ell \pm 1} (-1)^{\ell + \ell'} \sqrt{\ell'} \int_0^\infty y_{n\ell}(r) y_{n'\ell'}(r) r dr, \quad (4.11)$$

où $\ell' = \max(\ell, \ell')$. En l'absence de mélange de configurations, les énergies des différents états sont données par les valeurs propres des blocs matriciels (un bloc pour chaque valeur de J , le moment cinétique total conservé en l'absence de champs extérieurs) dont les éléments, pour deux états b et b' , peuvent se mettre sous la forme

$$H_{bb'} = \delta_{bb'} E_{av} + \sum_{ijk} \left[f_k F^k(ij) + g_k G^k(ij) \right] + \sum_i d_i \zeta_i, \quad (4.12)$$

où E_{av} est l'énergie moyenne de la configuration. Les coefficients f_k , g_k et d_k sont indépendants de la partie radiale des fonctions d'ondes. Bien que d'un point de vue théorique, Les fonctions d'onde soient construites comme combinaisons linéaires de déterminants de Slater, l'évaluation des éléments de matrice est complexe en suivant l'approche originale. Les techniques mathématiques développées par Racah ont permis de s'épargner le recours aux fonctions déterminantales [104, 329–332, 368]. La diagonalisation du Hamiltonien nous donne les énergies des niveaux, et l'application des règles de sélection E1 permet d'en déduire les raies, dont nous pouvons calculer, à l'issue du calcul, les énergies et les forces.

4.2 Modélisation statistique des faisceaux de raies

Dans l'ouvrage de Kendall et Stuart [201], on peut lire, pp. 87-88 :

"... [Thus distributions which have a finite number of the lower moments in common will, in a sense, be approximations one to another. We shall encounter many cases where, although we

cannot determine a distribution function explicitly, we may ascertain its moments at least up to some order ; and hence we shall be able to approximate to the distribution by finding another distribution of known form which has the same lower moments. **In practice, approximations of this kind often turn out to be remarkably good, even when only the first three or four moments are equated.]...**"

Le calcul détaillé de toutes les raies dipolaires-électriques E1 (*i.e.* de leurs énergies et de leurs forces radiatives) est difficile et peut s'avérer, dans certains cas, inutile. En effet, lorsque la densité est suffisamment élevée pour que les mécanismes physiques (effet Stark, collisions électroniques, *etc.*) soient importants et/ou lorsque le nombre de raies dans une bande de fréquences devient élevé, les raies coalescent pour former des structures non résolues. Les méthodes statistiques sont fondamentales car, expérimentalement, certaines quantités ne peuvent pas être déterminées individuellement, mais seulement en tant que moyennes pondérées (c'est le cas par exemple des spectres d'absorption ou d'émission de plasmas partiellement ionisés). Par ailleurs, les calculs quantiques explicites peuvent s'avérer inappropriés, *e.g.* si les valeurs propres du Hamiltonien ne sont pas connues avec une précision suffisante. De plus, les méthodes globales peuvent révéler des propriétés physiques cachées par un traitement détaillé des niveaux et des raies ("l'arbre peut cacher la forêt") [40]. Un faisceau de transition [162] de raies E1 est caractérisé par une distribution spécifique de l'énergie photonique E :

$$I(E) = A(E) \otimes \Psi(E), \quad (4.13)$$

où la fonction $A(E)$ suppose que chaque raie est représentée par une fonction δ de Dirac :

$$A(E) = C_p \sum_{a,b} \frac{N_a}{g_a} (E_{ab})^p S_{ab} \delta(E - E_{ab}) \quad (4.14)$$

qui, avec le préfacteur approprié C_p , représente soit l'opacité ($p = 1$), soit l'émissivité de la source ($p = 4$). La somme parcourt les niveaux de départ et d'arrivée de chaque raie appartenant au faisceau de transition. La densité d'ions excités dans le niveau a est notée N_a , et g_a est la dégénérescence du niveau a . L'énergie de la raie $a \rightarrow b$ est

$$E_{ab} = E_b - E_a = \langle b | \hat{H} | b \rangle - \langle a | \hat{H} | a \rangle, \quad (4.15)$$

où \hat{H} est le Hamiltonien du système et la force de raie S_{ab} est égale à $|\langle a | \hat{Z} | b \rangle|^2$, où \hat{Z} est la composante selon z de l'opérateur dipolaire de transition. Le profil normalisé $\Psi(E - E_{ab})$ prend en compte l'élargissement de la raie dans le plasma dû à la durée de vie finie des niveaux (largeur naturelle), à l'effet Doppler, à l'effet Stark ionique, aux collisions électroniques, *etc.* Dans le formalisme UTA (Unresolved Transition Arrays) [32], la distribution discrète $A(E)$ peut être remplacée par une fonction continue (habituellement Gaussienne) qui préserve ses deux premiers moments. La densité N_a est supposée proportionnelle à son poids statistique g_a : $N_a \approx N g_a / g$, avec $N = \sum_a N_a$ et $g = \sum_a g_a$. De manière à éviter la somme sur le terme $(E_{ab})^p$ dans l'équation (4.14), l'énergie de raie E_{ab} est remplacée par le centre de gravité E_G du faisceau de transition, *i.e.* $(E_{ab})^p \approx (E_G)^p$. Ces hypothèses permettent d'exprimer les moments de cette distribution comme

$$\mu_n(A) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} A(E) E^n dE}{\int_{-\infty}^{\infty} A(E) dE} \approx \frac{\sum_{a,b} S_{ab} (E_{ab})^n}{\sum_{a,b} S_{ab}} \approx \frac{\sum_{a,b} [\langle b|\hat{H}|b\rangle - \langle a|\hat{H}|a\rangle]^n |\langle a|\hat{Z}|b\rangle|^2}{\sum_{a,b} |\langle a|\hat{Z}|b\rangle|^2}. \quad (4.16)$$

Il est possible de dériver des formules analytiques pour les moments $\mu_n(A)$ en utilisant l'algèbre de Racah et les techniques de seconde quantification de Judd [191]. De telles expressions, qui dépendent seulement d'intégrales radiales, ont été publiées par Bauche-Arnoult et coll. [31–35] pour les moments μ_n (avec $n \leq 3$) de plusieurs types de faisceaux de transition (relativistes ou non). Il est utile d'introduire les moments centrés réduits de la distribution définis par

$$\alpha_n(A) = \frac{1}{\Omega} \int_{-\infty}^{\infty} A(E) \left(\frac{E - \mu_1}{\sigma} \right)^n dE, \quad (4.17)$$

où μ_1 est le centre de gravité des énergies de raies pondérées par les forces, $\sigma = \sqrt{\mu_2 - \mu_1^2}$ est l'écart-type et $\Omega = \int_{-\infty}^{\infty} A(E) dE$ est l'aire de la distribution. L'utilisation de $\alpha_n(A)$ à la place de $\mu_n(A)$ permet d'éviter des problèmes numériques dus à l'apparition de grands nombres. Les premières valeurs sont $\alpha_0 = 1$, $\alpha_1 = 0$ et $\alpha_2 = 1$. La distribution $A(E)$ est par conséquent caractérisée par les valeurs de Ω , μ_1 , σ et des moments d'ordre élevé α_n avec $n > 2$. Les quatre premiers moments suffisent souvent à capturer la forme globale de la distribution $A(E)$. Les moments centrés réduits d'ordre trois et quatre notés α_3 et α_4 sont appelés *skewness* et *kurtosis*. Ils quantifient respectivement l'asymétrie et l'aspect plus ou moins piqué de la distribution. Le kurtosis est généralement comparé à la valeur $\alpha_4 = 3$ pour une Gaussienne. Cependant, le choix de la distribution ne joue aucun rôle dans la dérivation des moments.

4.2.1 Développement de Gram-Charlier

Afin d'étudier l'impact du skewness et du kurtosis, il est possible d'utiliser le développement de Gram-Charlier [201] :

$$GC_n(E) = \frac{\Omega}{\sigma} \frac{\exp\left(-\frac{u^2}{2}\right)}{\sqrt{2\pi}} \left(1 + \sum_{k=2}^n c_k \text{He}_k(u) \right), \quad (4.18)$$

avec

$$c_k = \sum_{j=0}^{\lfloor k/2 \rfloor} \frac{(-1)^j}{j!(k-2j)!2^j} \alpha_{k-2j}(A), \quad (4.19)$$

où $\lfloor x \rfloor$ représente la partie entière de x (plus grand entier n'excédant pas x), $u = (E - \mu_1)/\sigma$, n est l'ordre du moment et He_k est le polynôme d'ordre k vérifiant la relation de récurrence :

$$\text{He}_{n+1}(x) = x \text{He}_n(x) - n \text{He}_{n-1}(x), \quad (4.20)$$

avec $\text{He}_0(x) = 1$ et $\text{He}_1(x) = x$. Le développement de Gram-Charlier requiert les moments centrés réduits $\alpha_k(A)$ de la distribution discrète $A(E)$. Comme $\text{He}_2(x) = x^2 - 1$, $\text{He}_3(x) = x^3 - 3x$ et $\text{He}_4(x) = x^4 - 6x^2 + 3$, on trouve que le développement de Gram-Charlier à l'ordre 4 s'écrit :

$$GC_4(E) = \frac{\Omega}{\sigma} \frac{\exp\left(-\frac{u^2}{2}\right)}{\sqrt{2\pi}} \left[1 - \frac{\alpha_3}{2} \left(u - \frac{u^3}{3}\right) + \frac{(\alpha_4 - 3)}{24} (3 - 6u^2 + u^4) \right]. \quad (4.21)$$

L'un des principaux inconvénients du profil de Gram-Charlier est que dans certaines circonstances (voir figure 1 de la référence [283]), il présente des parties négatives.

Les niveaux d'une configuration électronique obéissent à des symétries approchées, appelées des couplages en spectroscopie atomique. En fait, des distributions de raies très asymétriques peuvent être obtenues dans le cas de grandes valeurs de l'intégrale de Slater d'échange G^1 . Cela peut se produire dans des faisceaux du type $\ell^{N+1} - \ell^N \ell'$, qui sont très nombreux, parce que dans les ions fortement chargés, les transitions vers la configuration fondamentale correspondent à des faisceaux de ce type. Le skewness (caractérisant l'asymétrie) augmente rapidement en fonction du numéro atomique Z le long d'une séquence iso-électronique. A l'approximation hydrogénoïde, les intégrales de Slater et de spin-orbite varient comme Z et Z^4 , respectivement. Il a été montré par Bauche et coll. [37] que dans ce cas α_3 varie *grosso modo* comme Z^6 . Ainsi, l'asymétrie est fortement prononcée pour des atomes lourds fortement ionisés. Cela peut aussi se produire dans des situations où les interactions de spin-orbite sont suffisamment importantes pour commencer à éclater le faisceau de transition, les composantes relativistes restant toutefois proches les unes des autres. Dans ce cas, la forme asymétrique du faisceau peut être restituée en considérant la superposition de sous-faisceaux relativistes symétriques. En fait, l'impact du skewness est habituellement faible dans les conditions typiques des expériences laser effectuées jusqu'à présent dans le cas de plasmas à l'ETL (densité de l'ordre de 0.01 g/cm³ et température de quelques dizaines d'eV). Il serait intéressant de tester cette modélisation dans l'interprétation de spectres en émission de plasmas hors ETL (voir par exemple [14–16, 120]).

4.2.2 Distribution “NIG” (Normal Inverse Gaussian)

Si on veut tout de même prendre en compte l'effet de l'asymétrie, cela peut être fait avantageusement en utilisant la distribution NIG (Normal Inverse Gaussian) [27, 283, 284] :

$$\text{NIG}(E) = \frac{\Omega}{\pi} \delta \alpha \frac{\exp\left[\delta\sqrt{\alpha^2 - \beta^2} + \beta(E - \mu)\right]}{\sqrt{\delta^2 + (E - \mu)^2}} K_1\left(\alpha\sqrt{\delta^2 + (E - \mu)^2}\right), \quad (4.22)$$

où K_1 est une fonction de Bessel modifiée du troisième type. Les quatre paramètres α , β , δ et μ sont obtenus directement à partir de la connaissance de μ_1 , σ , α_3 et α_4 . Les relations correspondantes tout comme le rôle des paramètres précédents sont présentés dans le tableau 4.1. Contrairement au développement de Gram-Charlier, la NIG ne peut pas avoir de valeurs négatives. De plus, le domaine de validité de la NIG est plus vaste que le domaine de positivité de la distribution Gram-Charlier comme on va le voir au paragraphe 4.2.4 (voir également la figure 4 de la référence [283]). La distribution NIG permet de modéliser des distributions symétriques ou asymétriques avec de longues ailes dans les deux directions.

4.2.3 Gaussienne Généralisée ou HyperGaussienne

La Gaussienne Généralisée (GG) s'avère être un choix intéressant pour étudier exclusivement les effets du kurtosis. Nous l'avons utilisée dans la partie 3.1.2 pour modéliser la distribution des

Paramètre	Expression	Rôle
α	$\frac{3\sqrt{3\tilde{\alpha}_4-4\alpha_3^2}}{\sigma(3\tilde{\alpha}_4-5\alpha_3^2)}$	“Poids” des ailes
β	$\frac{3\alpha_3}{\sigma(3\tilde{\alpha}_4-5\alpha_3^2)}$	Asymétrie
δ	$\frac{3\sigma\sqrt{3\tilde{\alpha}_4-5\alpha_3^2}}{3\tilde{\alpha}_4-4\alpha_3^2}$	Paramètre d'échelle
μ	$\mu_1 - \frac{\delta\alpha_3}{\sqrt{3\tilde{\alpha}_4-5\alpha_3^2}}$	Position

TABLE 4.1 – Paramètres de la distribution NIG. La quantité $\tilde{\alpha}_4 = \alpha_4-3$ représente le kurtosis d'excès.

moments M_J . La Gaussienne Généralisée ne prend pas de valeurs négatives contrairement au développement de Gram-Charlier. La discontinuité de la dérivée en 0 (point anguleux) disparaît après convolution par une autre fonction.

4.2.4 Comparaisons des distributions

La figure 4.1 montre une comparaison de la distribution des raies d'un faisceau de transition $3d^34p \rightarrow 3d^34d$ pour V II (vanadium +) calculé avec le code de Cowan, et modélisé par les distributions Gaussienne, GG et NIG. Le résultat de la distribution de Gram-Charlier d'ordre 4 n'est pas représenté car cette dernière présente des parties négatives. Toutes les distributions sont convoluées par une Gaussienne de largeur à mi-hauteur FWHM=0.2 eV. Nous pouvons voir que les deux distributions donnent des spectres légèrement différents, bien qu'elles soient caractérisées par les mêmes quatre premiers moments. Les différences sont la signature des moments d'ordre supérieur α_n ($n > 4$). En effet, les premiers moments contraints fixent *ipso facto* les moments non contraints d'ordre supérieur. Les fonctions GG et NIG sont contraintes par les moments d'ordre $k \leq 4$ de la distribution exacte. Les faisceaux de transition du type $\ell^N \ell' - \ell^N \ell''$ sont connus pour être beaucoup plus piqués qu'une Gaussienne, à cause des règles de sélection fortes sur le cœur ℓ^N . On peut voir que la largeur et la hauteur de la distribution ne sont pas bien décrites par la Gaussienne. Les distributions GG et NIG sont plus adaptées dans ce cas, la NIG donnant la meilleure représentation. La figure 4.2 montre le même type de comparaisons pour le faisceau $3d^44s \rightarrow 3d^44p$ de Co V avec convolution par une Gaussienne de largeur à mi-hauteur FWHM=0.1 eV. Dans ce cas également les distributions GG et NIG donnent un meilleur accord que la Gaussienne avec la distribution exacte. Cet accord visuel a été confirmé par des calculs d'écarts quadratiques moyens. Finalement, la figure 4.3 montre une comparaison des profils pour le faisceau $3d^34p \rightarrow 3d^34d$ de Co VI, les distributions étant convoluées par une Gaussienne de largeur à mi-hauteur FWHM=0.3 eV. Dans ce cas la distribution est asymétrique, et la NIG se révèle être la distribution la plus adaptée, mais la GG donne toujours de meilleurs résultats que la Gaussienne. Enfin, la figure 4.4 présente une comparaison entre le calcul Cowan et la NIG dans le cas du faisceau de transition très asymétrique [39] $3p^53d^4 \rightarrow 3p^53d^34f$ de Fe VI (46838 raies). L'accord est particulièrement satisfaisant. Nous pouvons conclure que la Gaussienne n'est pas une bonne représentation pour la plupart des faisceaux de transition et que la GG, la NIG étant généralement meilleure que GC pour prendre en compte le skewness et le kurtosis. Le domaine de validité de la NIG est donné par

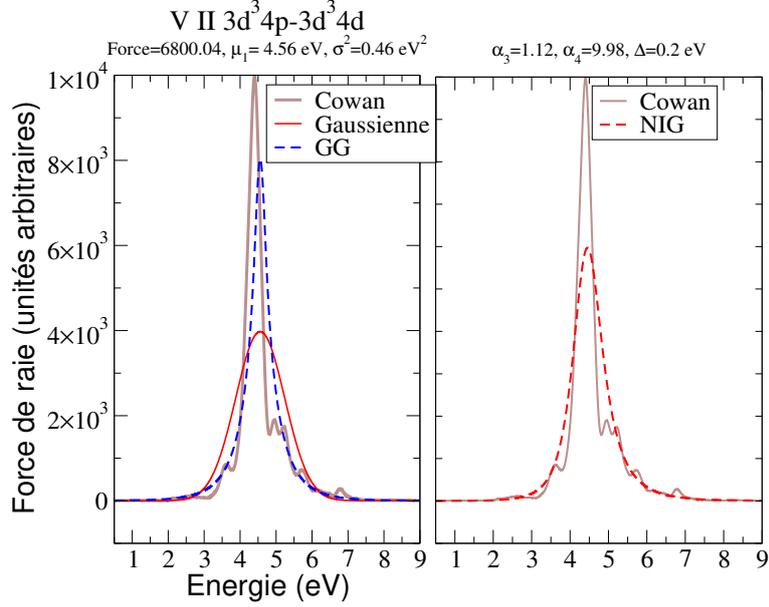


FIGURE 4.1 – Comparaison de distributions pour le faisceau de transition $3d^3 4p \rightarrow 3d^3 4d$ de V II (vanadium +) calculé avec le code de Cowan, et modélisé par les distributions Gaussienne, GG et NIG. Toutes les distributions sont convoluées par une Gaussienne de FWHM=0.2 eV. Le résultat de la distribution de Gram-Charlier d'ordre 4 n'est pas représenté car cette dernière présente des parties négatives.

$$3(\alpha_4 - 3) - 4\alpha_3^2 \geq 0. \quad (4.23)$$

et représenté sur la figure 4.5, ainsi que le domaine de positivité de la distribution de Gram-Charlier.

4.2.5 Confrontation à la mesure de transitions $2p \rightarrow 3d$

Le Z-pinch (dont le principe sera décrit au paragraphe 5.4.4) à SNL (Sandia National Laboratory) a été mis à profit par Bailey et coll. [21] pour mesurer l'absorption d'échantillons de NaBr. L'objectif principal de l'expérience était d'étudier les transitions $2p \rightarrow 3d$ du brome ionisé en couche M. La température électronique et la densité, obtenues à partir de l'analyse des raies du sodium (qui sont séparées des raies du brome), sont respectivement $50(\pm 4)$ eV et $3(\pm 1)10^{21}$ cm⁻³. La résolution spectrale est de l'ordre de 1.5 eV. Les interactions de spin-orbite séparent clairement les structures $2p_{1/2} \rightarrow 3d_{3/2}$ et $2p_{3/2} \rightarrow 3d_{5/2}$. La figure 4.6 montre le spectre expérimental et les spectres DCA (Detailed Configuration Accounting) calculés à $T=47$ eV obtenus avec une Gaussienne (pointillés) ou une fonction $GG_{\nu=1}$ (traits pleins) pour la forme des faisceaux de transition (le calcul de l'opacité sera décrit au paragraphe 5.1.2). Des détails des

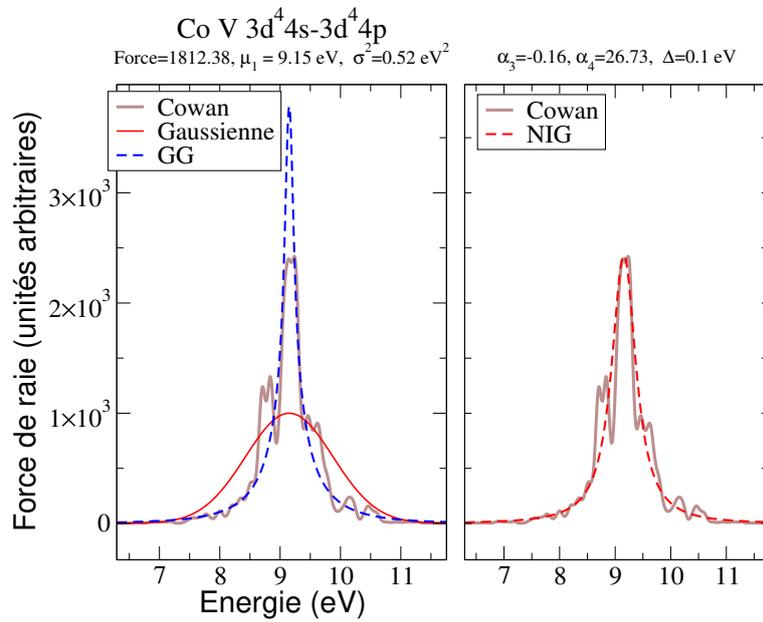


FIGURE 4.2 – Idem Fig. 4.1 pour le faisceau de transition $3d^4 4s \rightarrow 3d^4 4p$ de Co V avec une largeur Gaussienne de FWHM=0.1 eV. Le résultat de la distribution de Gram-Charlier d'ordre 4 n'est pas représenté car cette dernière présente des parties négatives.

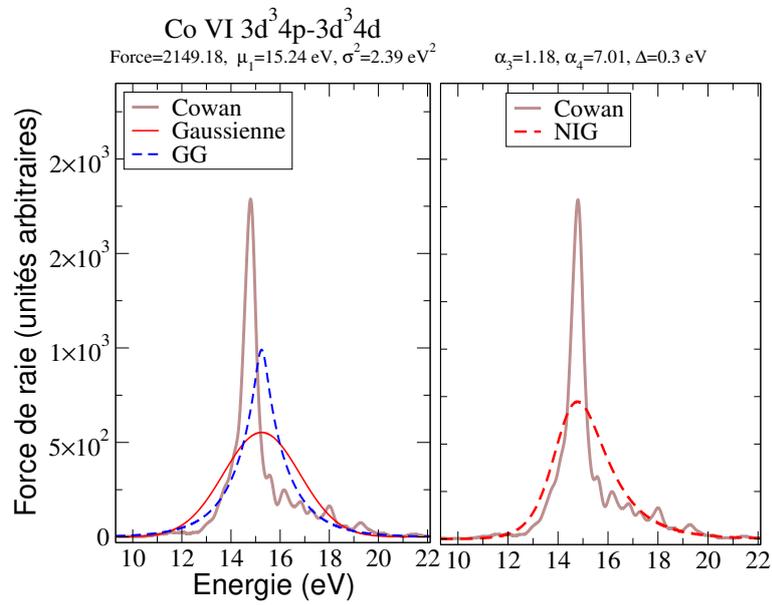


FIGURE 4.3 – Idem Fig. 4.1 pour le faisceau de transition $3d^3 4p \rightarrow 3d^3 4d$ de Co VI avec une largeur Gaussienne de FWHM=0.3 eV. Le résultat de la distribution de Gram-Charlier d'ordre 4 n'est pas représenté car cette dernière présente des parties négatives.

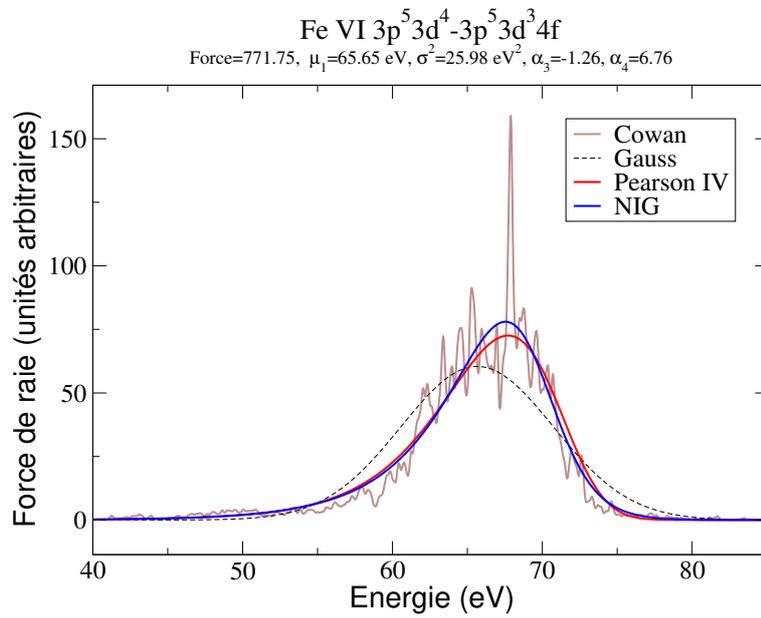


FIGURE 4.4 – Comparaison de distributions pour le faisceau de transition $3p^5 3d^4 \rightarrow 3p^5 3d^3 4f$ de Fe VI calculé avec le code de Cowan, et modélisé par les distributions Gaussienne et NIG. Toutes les distributions sont convoluées par une Gaussienne de FWHM=0.1 eV. Le résultat de la distribution de Gram-Charlier d'ordre 4 n'est pas représenté car cette dernière présente des parties négatives.

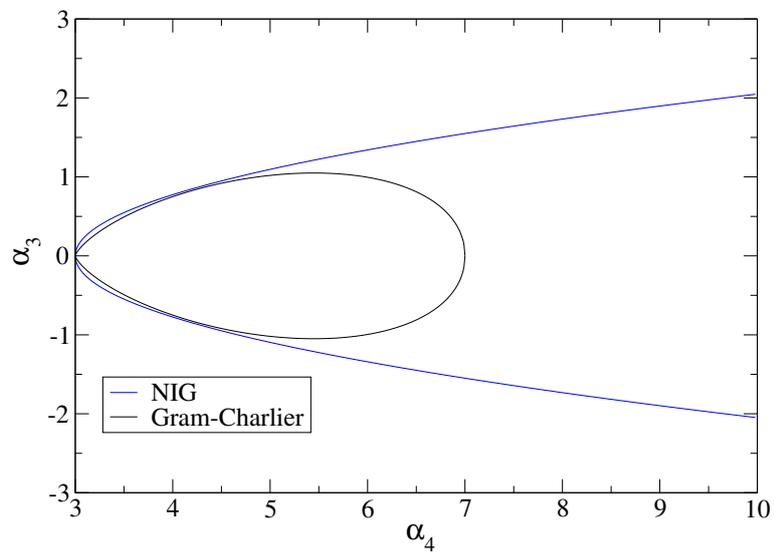


FIGURE 4.5 – Domaine de validité (délimité par les deux branches de parabole) des distributions NIG (en bleu) et domaine de positivité de la distribution de Gram-Charlier (intérieur du contour fermé, en noir). Remarque : on a toujours, quelle que soit la distribution, $\alpha_4 \geq \alpha_3^2 + 1$ [409].

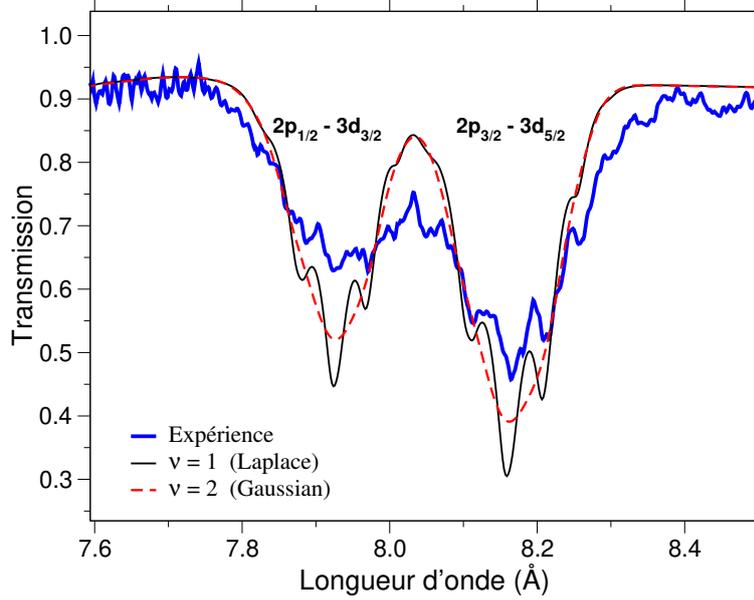


FIGURE 4.6 – Spectre de NaBr (transitions $2p \rightarrow 3d$ dans la gamme du brome à $T=47$ eV et $\rho=0.04$ g/cm³).

structures $2p \rightarrow 3d$, cachés dans la description Gaussienne, apparaissent clairement dans la nouvelle modélisation et donnent un meilleur accord avec l'expérience. Cela fournit non seulement une meilleure identification des structures spectrales, mais aussi un raffinement du diagnostic de température et densité.

4.2.6 Le calcul des moments d'ordre supérieur : un travail laborieux

Les moments μ_n définis dans l'équation (4.16) peuvent s'exprimer en termes de sommes impliquant des produits d'intégrales radiales. Une première difficulté est que le nombre de termes dans cette somme augmente très rapidement avec l'ordre. Par exemple, en faisant l'hypothèse que le faisceau de transition est caractérisé par q intégrales de Slater différentes (R) et r intégrales de spin-orbite différentes (ζ), le nombre de termes de la forme $\underbrace{R \cdots R}_{n \text{ termes}} \underbrace{\zeta \cdots \zeta}_{p \text{ termes}}$ est

$$N_{\max} = S_q(n) \times S_r(p), \quad (4.24)$$

où

$$S_t(v) = \binom{v+t-1}{t-1} = \frac{(v+t-1)!}{(t-1)!v!}. \quad (4.25)$$

Le tableau 4.2 donne N_{\max} pour chaque type de produit de telles intégrales et pour chacun des quatre premiers moments μ_n , $n=1, 2, 3$ et 4 . Evidemment, il ne s'agit que d'une borne supérieure puisque certains termes n'existent pas du fait des symétries sur les moments angulaires. En particulier, les termes du type $R \cdots R \zeta$ contenant seulement une intégrale ζ ne sont pas représentés parce que leur contribution est nulle du fait de la règle du centre de gravité de

Landé [32,86]. On peut voir que le nombre de termes augmente très vite en fonction de l'ordre du moment. La seconde difficulté est que la dérivation complète de chaque terme de la somme est très compliquée, du fait de l'algèbre complexe des moments angulaires. Uylings a montré [394] (voir Annexe A) que la trace d'un opérateur à k - électrons dans l'espace d'une configuration électronique ℓ^N est proportionnel à

$$\binom{4\ell + 2 - k}{N - k}. \quad (4.26)$$

En utilisant les techniques de seconde quantification de Judd [191], on trouve que le moment d'ordre 4 de $\ell^{N+1} \rightarrow \ell^N \ell'$ implique des opérateurs de 1 à 10 électrons et s'écrit par conséquent :

$$\mu_4 [\ell^{N+1} \rightarrow \ell^N \ell'] = \sum_{k=1}^{10} \binom{4\ell + 2 - k}{N + 1 - k} p_k, \quad (4.27)$$

où les coefficients p_k doivent être déterminés à partir de cas particuliers et de propriétés de symétrie (comme la complémentarité ou l'anti-complémentarité). Les cas particuliers sont difficiles à calculer lorsqu'on a plus de trois électrons (les coefficients de parenté fractionnaire sont alors indispensables pour prendre en compte le principe d'exclusion de Pauli). Mais le calcul est difficile même avec deux électrons ; par exemple, considérant le faisceau de transition $\ell^2 \rightarrow \ell \ell'$ (correspondant à $N=1$), on a :

$$\mu_4 [\ell^2 \rightarrow \ell \ell'] = \sum_{k_1, k_2, k_3, k_4} A_{k_1, k_2, k_3, k_4} F^{k_1}(\ell \ell) F^{k_2}(\ell \ell) F^{k_3}(\ell \ell) F^{k_4}(\ell \ell) + \dots, \quad (4.28)$$

avec

$$A_{k_1, k_2, k_3, k_4} \propto (2 - (-1)^L)(2L + 1) \left\{ \begin{matrix} \ell & \ell & k_1 \\ \ell & \ell & L \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \ell & \ell & k_2 \\ \ell & \ell & L \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \ell & \ell & k_3 \\ \ell & \ell & L \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \ell & \ell & k_4 \\ \ell & \ell & L \end{matrix} \right\}, \quad (4.29)$$

où $F^{k_i}(\ell \ell)$ est une intégrale de Slater directe décrivant l'interaction électrostatique entre deux électrons dans l'orbitale ℓ . La quantité A_{k_1, k_2, k_3, k_4} contient aussi le produit indépendant de L

$$\langle \ell || C^{(k_1)} || \ell \rangle \langle \ell || C^{(k_2)} || \ell \rangle \langle \ell || C^{(k_3)} || \ell \rangle \langle \ell || C^{(k_4)} || \ell \rangle^2, \quad (4.30)$$

où

$$\langle \ell || C^{(k)} || \ell \rangle = (-1)^\ell (2\ell + 1) \begin{pmatrix} \ell & k & \ell \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.31)$$

est l'élément de matrice réduit de l'opérateur symétrique sphérique $C^{(k)}$, avec la convention de phase de [86]. En utilisant la représentation graphique des symboles 6- j [189], un graphe compact est obtenu pour le produit de quatre 6- j intervenant dans A_{k_1, k_2, k_3, k_4} . La somme sur L conduit à un 12- j du deuxième type, et la somme sur L avec le facteur de phase $(-1)^L$ à un 12- j du premier type [396]. Ainsi, le calcul "direct" des moments est compliqué et le résultat final prendrait plusieurs pages. Cependant, des algorithmes ont été proposés afin d'évaluer ces moments d'ordre élevé. Karazija et coll. [195–197] ont exprimé les moments spectraux comme des moyennes de produits d'opérateurs et formulé une méthode diagrammatique basée sur la théorie des groupes pour les évaluer. Oreg et coll. [270] ont utilisé le fait que les moments s'obtiennent

Ordre	1	2	3	4
Produits impliqués	R	$RR, \zeta\zeta$	$RRR, R\zeta\zeta, \zeta\zeta\zeta$	$RRRR, RR\zeta\zeta, R\zeta\zeta\zeta, \zeta\zeta\zeta\zeta$
Nombre max. de termes	4	16	54	150

TABLE 4.2 – Nombre de termes impliquant des produits d'intégrales radiales dans les premiers moments du faisceau de transition $\ell^{N+1} \rightarrow \ell^N \ell'$.

à partir de moyennes configurationnelles d'opérateurs symétriques à n corps. Dans ce but, ils ont introduit le concept de moyenne sur une configuration minimale à n électrons, relative à la moyenne sur la véritable configuration à N électrons. Leur algorithme utilise les méthodes graphiques (routine NJGRAF [28]) pour obtenir la dépendance des moyennes par rapport aux nombres quantiques orbitaux en termes de diagrammes fermés.

4.2.7 Estimation du kurtosis

Considérons la distribution idéale suivante des énergies et amplitudes de raies [41, 136] :

$$D(\epsilon, a) = \frac{L}{\sqrt{2\pi v}} \exp\left(-\frac{\epsilon^2}{2v}\right) \frac{\lambda}{2} \exp(-\lambda|a|), \quad (4.32)$$

où v est la variance non pondérée des énergies de raies :

$$v = \frac{1}{L} \sum_{a,b} (E_{ab})^2 - \frac{1}{L^2} \left[\sum_{a,b} E_{ab} \right]^2, \quad (4.33)$$

ϵ et a étant respectivement l'énergie et l'amplitude de raie et L le nombre de raies. La valeur moyenne de la quantité $q(\epsilon, a)$ est donnée par

$$\langle q \rangle = \frac{1}{L} \int \int d\epsilon da D(\epsilon, a) q(\epsilon, a). \quad (4.34)$$

Suivant [41], la loi de corrélation entre les énergies de raies et leurs amplitudes est donnée par

$$v_a(\epsilon) = \frac{2}{\lambda^2} = \gamma \exp[-\beta|\epsilon|], \quad (4.35)$$

où v_a est la variance des amplitudes de raies, correspondant à la force moyenne entre deux niveaux. Les paramètres γ et β sont déterminés en imposant la conservation de la force totale $S = \sum_{a,b} S_{ab} = L\langle a^2 \rangle$ et de la variance pondérée v_w des énergies de raies :

$$v_w = \frac{1}{S} \sum_{a,b} S_{ab} (E_{ab})^2 - \frac{1}{S^2} \left[\sum_{a,b} S_{ab} E_{ab} \right]^2 = \frac{L}{S} \langle a^2 \times \epsilon^2 \rangle. \quad (4.36)$$

Le kurtosis est donné par

$$\alpha_4 = \frac{S \langle a^2 \times \epsilon^4 \rangle}{L \langle a^2 \times \epsilon^2 \rangle^2}, \quad (4.37)$$

ce qui conduit à l'expression suivante :

Faisceau de transition	kurtosis	
	exact	formule
Fe V $3d^4 \rightarrow 3d^3 4p$	4.1	3.8
Pd VII $4d^4 \rightarrow 4d^3 5p$	4.8	4.5
Sn XXIX $3d^4 \rightarrow 3d^3 4p$	5.9	5.1

TABLE 4.3 – Estimation du kurtosis par la distribution (4.32).

$$\alpha_4 = \frac{1}{\omega^2} [-2 + (5 + X^2) \omega], \quad (4.38)$$

où $\omega = v_w/v$, et X est racine de l'équation :

$$(1 + X^2 - \omega) \exp\left(\frac{X^2}{2}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{X}{\sqrt{2}}\right) - \sqrt{\frac{2}{\pi}} X = 0. \quad (4.39)$$

La corrélation énergie-amplitude est telle que, considérant le cas où l'interaction spin-orbite est faible, les raies les plus fortes sont plus proches du centre de gravité que les plus faibles. A cause de ces corrélations (loi de propension), on s'attend à ce que le faisceau de transition soit piqué. En d'autres termes, la variance des énergies de raies est toujours plus petite lorsqu'elle est calculée avec une pondération égale à la force de raie (voir équation (4.36)) que dans le cas contraire (voir équation (4.33)). L'équation (4.32) implique que la distribution des forces de raies en fonction de l'énergie $S(\epsilon)$ (*i.e.* la forme du faisceau de transition) peut s'écrire

$$S(\epsilon) = v_a(\epsilon) \frac{L}{\sqrt{2\pi}v} \exp\left(-\frac{\epsilon^2}{2v}\right), \quad (4.40)$$

ce qui signifie que, si l'équation (4.32) est valide, le profil résultant a nécessairement un kurtosis entre trois (Gaussienne) et six (Laplace). Le tableau 4.3 montre les valeurs de α_4 estimé d'après l'équation (4.38) comparées aux valeurs exactes (*i.e.* calculées par le code de Cowan).

4.2.8 Conclusion concernant la modélisation statistique des raies détaillées

Le formalisme UTA donne les deux premiers moments de la distribution des raies dipolaires électriques. Elle ne contient aucune hypothèse concernant la fonction de modélisation. Habituellement, c'est la Gaussienne qui est choisie (kurtosis $\alpha_4=3$), mais des calculs détaillés utilisant le code de Cowan montrent qu'elle n'est souvent pas la distribution la plus adaptée, puisqu'elle ne tient pas compte du skewness et du kurtosis. Nous avons étudié plusieurs autres distributions dans le but d'inclure les effets des moments d'ordre supérieur. Le développement de Gram-Charlier, qui consiste en une Gaussienne multipliée par une combinaison linéaire de polynômes de Hermite, peut présenter des valeurs négatives. La "Normal Inverse Gaussian" est bien adaptée pour prendre en compte l'asymétrie et l'aspect piqué. Cependant, l'impact de l'asymétrie est habituellement faible dans les conditions typiques des expériences de photo-absorption, et la Gaussienne Généralisée s'avère un choix judicieux pour prendre en compte l'effet spécifique du kurtosis [137,287]. Avec une telle modélisation, des structures plus détaillées apparaissent dans les spectres, conduisant à un meilleur accord avec des expériences d'absorption

$2p \rightarrow 3d$ et améliorant de cette manière les diagnostics de température et densité. Le calcul analytique des moments d'ordre élevé ($n \geq 3$) est possible (voir les travaux de Karazija [195–197] et Oreg et coll. [270]), mais difficile. Une méthode approchée, reposant sur une distribution réaliste des amplitudes et énergies de raies, a été proposée dans le but d'estimer le kurtosis. Nous avons également travaillé au calcul des moments STA d'ordre strictement supérieur à deux (voir Annexe E). Dans ce cas, il faut non seulement modéliser la distribution des raies associées à un saut mono-électronique donné, mais également la distribution des configurations (différentes valeurs possibles des populations des orbitales).

4.3 Propriétés intrinsèques des spectres atomiques complexes : régularités et symétries

Nous avons vu que les spectres atomiques complexes peuvent être étudiés par des méthodes statistiques (globales), particulièrement si on s'intéresse surtout à des propriétés générales ou des régularités. Le spectre atomique en tant que distribution de niveaux d'énergie ou de raies spectrales peut par exemple être décrit par ses moments, qui définissent son centre de gravité, sa largeur, son asymétrie, son aspect plus ou moins piqué ainsi que d'autres caractéristiques moyennes [201]. Un nombre limité de moments permet de modéliser simplement les faisceaux de transition [162], de révéler leurs propriétés statistiques, d'analyser l'influence relative des différentes interactions sur la structure d'un spectre, d'étudier les changements du spectre le long de séquences atomiques ou iso-électroniques dus au mélange de configurations, *etc.* Le problème principal est de trouver des expressions de ces caractéristiques moyennes [32, 195], sans effectuer le moindre calcul détaillé. Le second problème est le choix de la fonction de modélisation [137, 282]. Disposer de formules explicites pour un nombre limité de premiers moments permet de restituer l'enveloppe du spectre. Les études de variation de ces caractéristiques statistiques le long de séquences iso-électroniques donnent beaucoup d'informations sur les interactions intra-atomiques [352]. Cependant, une telle approche statistique ne fournit aucune information relative aux lois de corrélation internes d'un faisceau de transition. Elle ne donne aucune indication sur l'existence ou l'émergence de possible phénomènes chaotiques.

4.3.1 L'ensemble orthogonal Gaussien

Dans le modèle du champ central, le Hamiltonien est diagonalisé dans une base des états d'une ou plusieurs configuration(s) électronique(s). La distribution des éléments de matrice est si complexe qu'elle peut être considérée comme aléatoire. Dans la théorie des matrices aléatoires, tous les éléments d'une matrice symétrique réelle dans l'ensemble orthogonal Gaussien (GOE : Gaussian Orthogonal Ensemble) de Wigner sont des variables aléatoires indépendantes obéissant à une distribution Gaussienne. Les valeurs propres d'une matrice aléatoire sont fortement corrélées ; par exemple, deux valeurs propres adjacentes se repoussent. La distribution des valeurs propres elles-mêmes tend à devenir Gaussienne lorsque le nombre de particules en interaction augmente. *A contrario*, des nombres choisis aléatoirement ne sont pas corrélés. Plus précisément, sans corrélations, *i.e.* si les espacements de niveaux sont assimilés à une suite de nombres $x_{i+1} = x_i + u$ avec $x_1 = 0$ tels que u est une variable aléatoire [40], leur distribution suivrait une loi de Poisson :

$$P(u)du = \exp(-u) du. \quad (4.41)$$

En présence de corrélations aléatoires des éléments de matrice s de \hat{H} , les espacements de niveaux obéissent à la distribution de Wigner :

$$P(u)du = \frac{\pi}{2}u \exp\left(-\pi\frac{u^2}{4}\right) du, \quad (4.42)$$

qui est valable dans le GOE. En fait, le GOE représente un cas particulier d'une grande famille d'ensembles qui ont tous les mêmes caractéristiques spectrales. Rosenzweig et Porter [346] ont tracé la distribution empirique des espacements entre plus proches voisins pour les niveaux d'énergie de parité (-1) du hafnium neutre. La distribution de Wigner (4.42) a montré un excellent accord qualitatif avec la distribution empirique. Plus tard, Flambaum et coll. [114] ont étudié la distribution des espacements des niveaux $J^\pi = 4^+$ du cérium. Ils ont trouvé que les espacements de niveaux obtenus expérimentalement étaient en bon accord avec la distribution de Wigner (4.42). O'Sullivan et coll. [271] ont insisté sur le fait que la prise en compte de l'interaction de configurations était cruciale afin d'obtenir une distribution de Wigner pour les espacements des niveaux. Les états à un électron se mélangent et produisent un spectre de niveaux d'énergie analogue à celui des noyaux. En fait, si le rapport entre l'interaction Coulombienne moyenne non diagonale sur l'espacement moyen des niveaux est grand, le modèle à une particule cesse d'être adapté et les états se mélangent fortement de manière à ce que seuls le moment cinétique total J et la parité π soient des bons nombres quantiques. Il est intéressant de voir à quel point la distribution des espacements des niveaux adjacents diffère des distribution Poisson et de Wigner (dérivée d'une Gaussienne) [72, 108]. De plus, dans le GOE, la distribution de Porter-Thomas [325, 326] conduit à une distribution χ^2 pour la force des raies :

$$P(y) = \frac{L}{\langle S \rangle \sqrt{2\pi y}} \exp(-y/2), \quad (4.43)$$

avec $\int_0^\infty P(y)dy = L$, L étant le nombre de raies, et $y = S/\langle S \rangle$, $\langle S \rangle$ la force de raie moyenne. Alors que la position des raies d'absorption dépend des valeurs propres, leur force est déterminée principalement par les vecteurs propres. Dans un code de structure atomique, la plus grande partie du temps est consommée par la diagonalisation des matrices Hamiltoniennes et la construction de l'élément de transition dipolaire. L'essentiel de l'effort réside dans la construction des éléments non diagonaux des blocs de la matrice Hamiltonienne. Cela vient du fait que le Hamiltonien est construit non seulement à partir d'opérateurs à un corps (comme l'élément de transition) mais aussi à partir d'opérateurs Coulombiens à deux corps.

Wilson et coll. [410] ont calculé les termes diagonaux à l'aide du code de structure atomique de Cowan [86] et ont peuplé les éléments non diagonaux de manière statistique au-delà du GOE suivant une fonction de distribution bi-Gaussienne. Ils ont observé un nombre disproportionnellement grand d'éléments non diagonaux de faible amplitude et ont remarqué que les plus grands éléments de matrice connectent des états de base dont la couche parente est aussi de terme parent. L'analyse a montré que les plus grands éléments sont distribués selon les prédictions du GOE, alors que les plus petits sont distribués selon une Gaussienne de largeur bien plus petite ("bi-Gaussian surmise").

La théorie des matrices aléatoires ne décrit pas beaucoup de propriétés importantes de systèmes à N corps réalistes, ses prédictions étant limitées à la statistique sur les niveaux, les propriétés de localisation des états propres, *etc.* Le "Two-Body Random Interaction Model" (TBRIM) [63, 122] a été introduit comme une approche intermédiaire fondée sur un modèle

mathématique simple avec des interactions aléatoires qui, cependant, prend en compte les caractéristiques les plus importantes des systèmes à N corps : les orbitales, les interactions binaires et le principe d'exclusion de Pauli. Il consiste en un système de fermions (n fermions distribués dans m orbitales avec des énergies ϵ_i [115, 116, 133, 184] distribuées dans $[0, 1]$). Ainsi, tous les états possibles à n fermions sont construits : l'état k est caractérisé par $n_i^{(k)} = 0$ ou 1 , $i = 1, m$. La matrice Hamiltonienne est telle que

$$H_{kl} = \sum_{i=1}^m n_i^{(k)} \epsilon_i \delta_{kl} + V_{kl}, \quad (4.44)$$

où V_{kl} est distribué aléatoirement dans $[-V_0, V_0]$ et est fixé à 0 si les états k et l diffèrent par plus de deux orbitales. δ_{kl} est le symbole de Kronecker. Angom et coll. [12] ont montré, par une analyse statistique des valeurs propres et des fonctions propres du Sm I pour $J = 0^+$ et $J = 4^+$, que les atomes avec un nombre suffisamment grand d'électrons actifs, présentent des caractéristiques du TBRIM. La densité d'états prédite par le TBRIM est Gaussienne et une densité d'états Gaussienne a également été observée dans le spectre du Sm IX par O'Sullivan et coll. [271]. Certaines quantités peuvent être obtenues sans diagonalisation de la matrice Hamiltonienne. Cela peut s'avérer utile pour le calcul des taux de transition [117, 128].

4.3.2 Loi de Learner et nature fractale des spectres atomiques

Learner [219] a mis en évidence ce qu'il a appelé une "loi inattendue" (unexpected law) liée au nombre de raies faibles dans un spectre (voir figure 4.7). Le logarithme $\log(N_k)$ du nombre de raies dont les intensités sont comprises entre $2^k I_0$ et $2^{k+1} I_0$ est une fonction linéaire décroissante de k . Dans l'exemple de Learner (spectre du Fer I) la valeur de I_0 est choisie de manière à ce que la loi soit valide pour $1 \leq k \leq 9$ (9 octaves) lorsqu'à peu près 1500 raies sont considérées dans la gamme de $290 \text{ nm} \leq \lambda \leq 550 \text{ nm}$. Si p est la pente, on a $N_k = N_0 \cdot 10^{-kp}$. Le nombre de raies est divisé par 10^p lorsque la taille de l'intervalle est multipliée par deux. La dimension fractale correspondante d est donnée dans l'Annexe B.

Learner a remarqué que $p \approx \log_{10}(2)/2$. Dans ce cas, $d \approx -1/2$. Le lien entre le comportement fractal et la théorie des matrices aléatoires n'est pas évident, mais existe bel et bien [171]. Un excès de raies faibles est également observé dans ce cas, comme dans l'approche de Wilson et coll.. Bauche et coll. ont relié cet effet aux couplages [43] lorsqu'on est proche d'un couplage pur, et à des cicatrices de symétrie dans le cas contraire. Récemment, Fujii et Berengut ont publié un article [127] dans lequel ils prétendent avoir trouvé une explication à la loi de Learner, en combinant deux approximations : une variation des populations ioniques selon une loi de Boltzmann à une température effective, et une forme croissante exponentiellement de la densité d'états mise en évidence par Dzuba et Flambaum [99].

4.3.3 La loi des nombres anormaux

L'observation par Newcomb [267] que les premières pages des tables de logarithmes étaient plus usées que les dernières, a conduit à la conjecture que les chiffres significatifs de données relatives à la nature ne sont pas distribués de manière équi-probable, mais d'une manière qui favorise certains chiffres significatifs. Par exemple, le premier chiffre significatif (*i.e.* le premier chiffre différent de zéro) sera 6 plus fréquemment que 7 et les trois premiers chiffres significatifs seront 439 plus souvent que 462. Benford a proposé une fonction de distribution de probabilité

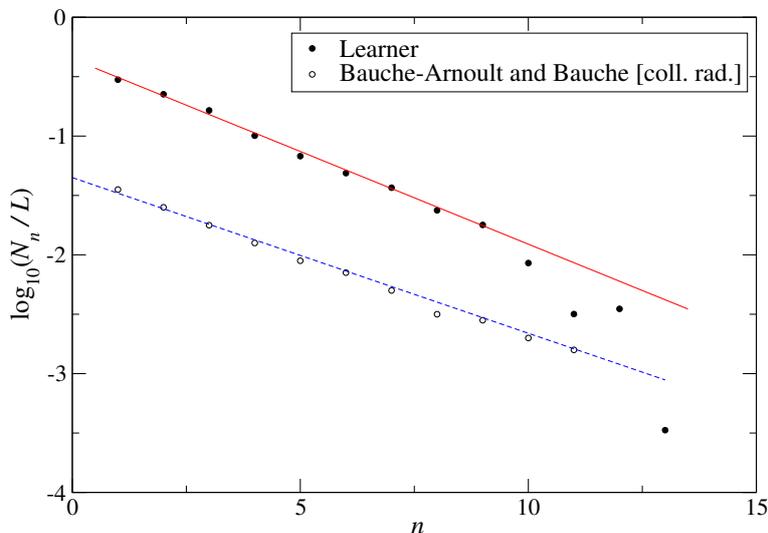


FIGURE 4.7 – Comparaison entre les prédictions de la loi de Learner et de calculs collisionnels-radiatifs en régime stationnaire [45] pour Fe I.

pour les chiffres significatifs, qui stipule que la probabilité que le premier chiffre significatif d_1 soit égal à k est donnée par [49] :

$$\mathcal{P}(d_1 = k) = \log_{10} \left(1 + \frac{1}{k} \right). \quad (4.45)$$

Nous avons noté [281, 293] que la distribution des raies dans un faisceau de transition donné suit très bien la loi logarithmique de Benford pour les chiffres significatifs (voir figures 4.8, 4.9 et 4.10). Ceci indique que la distribution des chiffres significatifs reflète les règles de sélection. Si les transitions étaient régies par des processus aléatoires non corrélés, chaque chiffre significatif serait équi-probable.

La loi de Benford n'est toujours pas complètement comprise sur le plan mathématique. Cependant, elle s'applique si le système est gouverné par des processus multiplicatifs [319]. En effet, un processus multiplicatif aléatoire correspond à un processus additif dans un espace logarithmique. Comme nous l'avons vu précédemment, dans la théorie des matrices aléatoires de Wigner, le Hamiltonien est défini dans le GOE par un ensemble de matrices symétriques réelles dont la distribution de probabilité est un produit des distributions pour les éléments de matrice individuels H_{kl} , considérés comme des variables stochastiques, et la variance de la distribution des éléments diagonaux est le double de celle des éléments non diagonaux. La force de raie S est proportionnelle à $|\langle i | \vec{D} | j \rangle|^2$, où \vec{D} est l'opérateur dipolaire et $|i\rangle$ et $|j\rangle$ sont les vecteurs propres du Hamiltonien. Ainsi, les forces de raie impliquent des quantités qui sont des produits de H_{kl} et on a

$$\log S = \log \zeta + \log S'. \quad (4.46)$$

Le théorème de la limite centrale stipule que la distribution de probabilité que la valeur de la $n^{\text{ième}}$ force est S sera une Gaussienne de variance $\propto n^{1/2}$. A la limite infinie, la distribution tend

vers une constante K , de sorte que l'on a

$$\int P(\log S) d(\log S) = K \int \frac{dS}{S}. \quad (4.47)$$

La probabilité \mathcal{P} que la premier chiffre significatif d_1 de S soit k en base 10 est donnée par

$$\mathcal{P}(d_1 = k) = \int_k^{k+1} \frac{dS}{S} / \int_1^{10} \frac{dS}{S} = \log_{10} \left(1 + \frac{1}{k} \right), \quad (4.48)$$

ce qui correspond exactement à l'Eq. (4.45). Cet argument repose sur l'idée que les fluctuations sont gouvernées par des processus multiplicatifs impliquant une variable stochastique. Les éléments de matrice du Hamiltonien sont des variables stochastiques corrélées et le produit de telles variables conduit à la distribution logarithmique de Benford des chiffres significatifs.

Un autre argument peut être invoqué pour comprendre la validité de la loi de Benford pour l'analyse des spectres atomiques complexes. Comme on l'a vu au paragraphe 4.3.1, Porter et Thomas ont montré que les amplitudes des raies entre tous les niveaux de deux matrices aléatoires suivent une distribution Gaussienne [325, 326], autrement dit les forces suivent la distribution

$$P(S) = \frac{L}{\sqrt{2\pi\langle S \rangle S}} \exp\left(-\frac{S}{2\langle S \rangle}\right), \quad (4.49)$$

où L et $\langle S \rangle$ sont respectivement le nombre de raies et la valeur moyenne de la force de raie S (la force est le carré de l'amplitude) au sein d'un ensemble (J, J') . Lorsque des nombres sont choisis dans une distribution exponentielle, ils suivent automatiquement la loi de Benford. Par conséquent, lorsque le terme exponentiel domine dans $P(S)$, ce qui est souvent le cas sauf au voisinage de l'origine $S = 0$ (*i.e.* pour des raies très faibles), la loi de Benford s'applique.

La théorie des matrices aléatoires contient des symétries approchées, qui ne sont pas suffisantes pour décrire la proximité des couplages de Russell-Saunders (LS) et jj [41, 42]. Cependant, nous avons trouvé que même lorsque la théorie des matrices aléatoires est supposée être inappropriée, *i.e.* à proximité d'un couplage pur, les forces de raies suivent toujours la loi de Benford. Cela s'explique par le fait que même si le nombre de raies faibles émergentes est important (lorsque le terme $1/\sqrt{S}$ domine dans la loi de Porter-Thomas (4.55)), le nombre de décades est suffisamment grand pour que le poids de ces raies faibles soit négligeable dans l'apparition des digits.

Etant donné que la loi de Benford est comprise dans le cas où la dynamique du système est pilotée par des processus stochastiques multiplicatifs, la théorie des matrices aléatoires est probablement une voie prometteuse pour le calcul de faisceaux de transition riches en raies et la loi de Benford peut aider à clarifier l'existence de différentes classes de variables stochastiques Gaussiennes. Par ailleurs, la loi de Benford peut de ce fait être considérée comme la signature de la loi de Porter-Thomas pour la distribution des raies.

Alors que les explications précédentes indiquent quel type de données est susceptible de se conformer à la loi de Benford, l'invariance d'échelle explique comment la formule peut être obtenue. Si les premiers chiffres significatifs d'un grand ensemble de données suit une distribution particulière, alors cette distribution doit être indépendante des unités dans lesquelles ces données sont mesurées et exprimées. Considérons que la variable x suive une distribution invariante d'échelle; alors

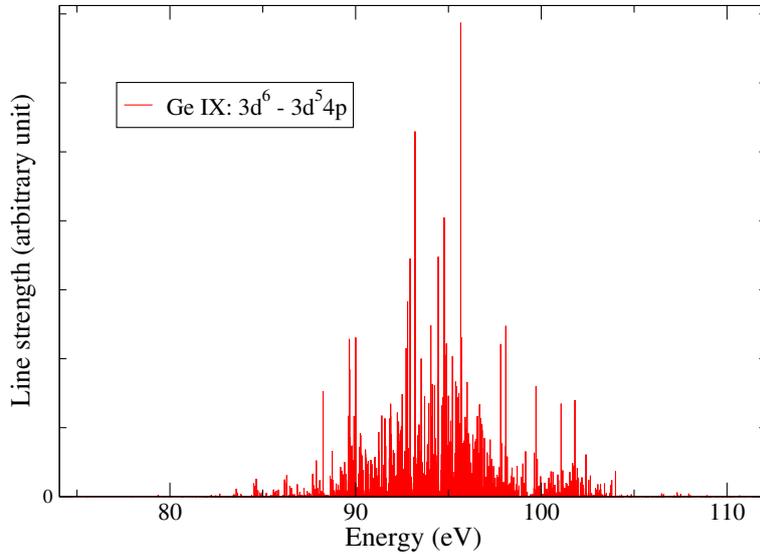


FIGURE 4.8 – Faisceau transition $3d^6 \rightarrow 3d^5 4p$ de l'ion Ge IX. Le nombre total de raies est 3245.

$$\frac{\mathcal{P}(1 \leq x \leq 2)}{\mathcal{P}(1 \leq x \leq 10)} = \frac{\mathcal{P}(10 \leq x \leq 20)}{\mathcal{P}(10 \leq x \leq 200)} = \frac{\mathcal{P}(100 \leq x \leq 200)}{\mathcal{P}(100 \leq x \leq 1000)} = \dots \quad (4.50)$$

On peut simplifier le calcul en faisant l'hypothèse que $1 \leq x \leq 10$. Si x est invariant d'échelle, la distribution ne change pas en multipliant x par une constante, i.e. le fait d'ajouter une constante à $\log_{10}(x)$ ne change pas la distribution. La seule distribution invariante par ajout d'une constante est la distribution uniforme U . En d'autres termes

$$\log_{10}(x) \approx U[\log_{10}(1), \log_{10}(10)]. \quad (4.51)$$

et ainsi, $\mathcal{P}(\log_{10}(x)) = 1$. De ce fait, nous avons

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(d = n) &= \mathcal{P}(n \leq x < n + 1) = \mathcal{P}(\log_{10}(n) \leq \log_{10}(x) < \log_{10}(n + 1)) \\ &= \int_{\log_{10}(n)}^{\log_{10}(n+1)} dy = \log_{10}\left(1 + \frac{1}{n}\right). \end{aligned} \quad (4.52)$$

4.3.4 Lien avec le chaos quantique

Bohigas, Giannoni et Schmidt [64] ont conjecturé que le spectre d'un système chaotique est fortement lié au spectre d'une matrice aléatoire. Plus précisément, ils ont trouvé que les fluctuations des niveaux du billard quantique de Sinai sont cohérentes avec les prédictions du GOE, ce qui confirme le fait que la théorie des matrices aléatoires est liée au chaos quantique et les lois de fluctuation sont universelles. En fait, pour des systèmes classiques, les processus non intégrables suivent la distribution de Wigner, alors que les propriétés des systèmes intégrables

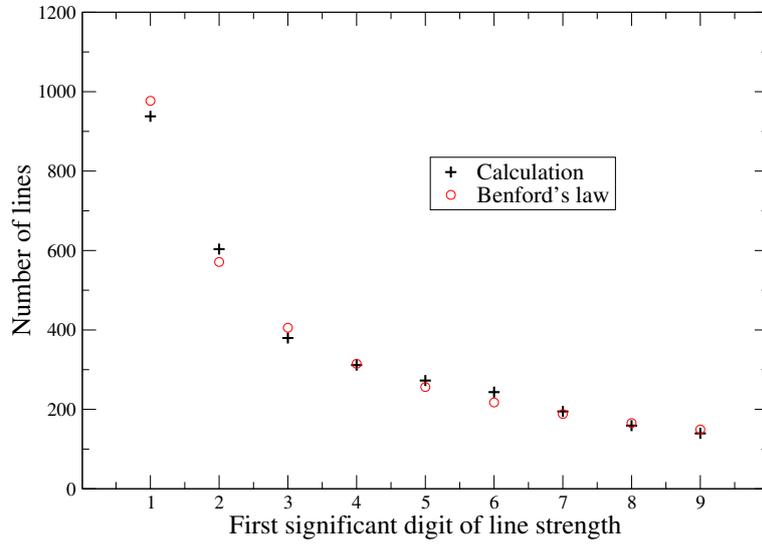


FIGURE 4.9 – Fraction de raies en fonction du premier chiffre significatif pour la transition $3d^6 \rightarrow 3d^5 4p$ de l'ion Ge IX. Le nombre total de raies est 3245.

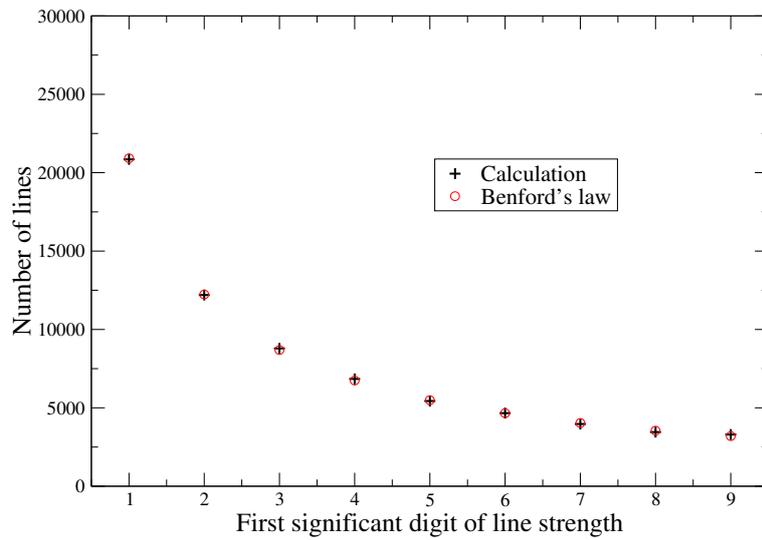


FIGURE 4.10 – Test de la loi de Benford pour les forces de raie du faisceau Fe VI $3p^3 3d^6 - 3p^2 3d^7$.

suivent une statistique Poissonnienne. L'extrapolation des systèmes chaotiques classiques aux quantiques a été discutée par exemple par Connerade et coll. [82, 83]. Tant que n et ℓ restent de bons nombres quantiques, le modèle des particules indépendantes et l'approximation de champ central sont valables et le chaos quantique n'apparaît pas. Il peut en fait émerger dans deux situations :

- (i) si l'approximation des électrons indépendants cesse d'être valable (en présence de corrélations fortes).
- (ii) si on a une distorsion de l'approximation de champ central (fort champ extérieur).

Le mélange (interaction) fort(e) de configurations rend les états multi-électroniques chaotiques.

4.3.5 Cicatrices des symétries

Dans les faisceaux de transition des spectres atomiques complexes, certains sous-ensembles bien définis de raies portent les signatures, appelées cicatrices, de leur disparition dans un ou plusieurs couplage(s) pur(s). Les symétries sont essentielles dans l'étude des systèmes à n particules. En physique atomique et moléculaire, des études courantes portent sur des situations complexes de basse symétrie. Par exemple, le fort degré de symétrie de l'atome d'hydrogène, lorsqu'il est brisé par un champ extérieur, peut conduire au chaos quantique. Cependant, dans ce système, Delande et Gay [92] ont montré que les effets de symétrie peuvent aussi être détectés, en tant que cicatrices dans la distribution conjointe des énergies de raies et des forces d'oscillateur. Dans leur article, Bauche et Bauche-Arnoult [42] ont présenté des cicatrices de symétries dans la distribution des intensités de raies dans les spectres atomiques complexes. Ils ont trouvé, par des calculs raie-par-raie, que dans les cas de deux faisceaux de transition particuliers $d^4 \rightarrow d^3p$ et $d^8 \rightarrow d^7p$, il est possible de définir des sous-ensembles de raies qui sont, en moyenne, nettement plus faibles ou plus fortes que les autres. Le fait qu'elles soient plus faibles est trivial lorsque le couplage des moments angulaires est proche d'un couplage pur dans lequel elles s'éteignent. Les auteurs ont noté qu'un tel phénomène peut persister très loin du couplage en question, ce qui était plutôt inattendu. De telles cicatrices sont les traces des structures mathématiques de la distribution des intensités, qui restent observable dans des situations extrêmement complexes. Les cicatrices correspondantes sont différentes de celles mises en évidence par Delande et Gay [92] puisqu'elles ne sont pas induites par un champ extérieur, elles sont observées dans la distribution d'intensité sans référence aux énergies des raies et apparaissent dans les systèmes atomiques à grand nombre d'électrons.

4.4 Force maximale

Connaître la plus grande force de raie S_{\max} d'un faisceau est utile, car cela permet de définir des raies "fortes" et des raies "faibles", en se donnant un critère particulier (par exemple on peut décider de considérer comme faibles toutes les raies dont la force est inférieure à $\epsilon \times S_{\max}$, ϵ étant petit). Cela peut s'avérer utile pour le développement de méthodes statistiques (les raies faibles pouvant être regroupées dans une "super-raie").

4.4.1 Force maximale pour la distribution de Porter et Thomas

Nous avons vu que Porter et Thomas ont montré que les amplitudes des raies entre tous les niveaux de deux matrices aléatoires sont bien décrites par une distribution Gaussienne [325,326].

$$P(a) = \frac{L}{\sqrt{2\pi v}} \exp\left(-\frac{a^2}{2v}\right). \quad (4.53)$$

La force étant le carré de l'amplitude, $S = a^2$, on a

$$P(S) dS = P(a) da + P(-a) da = 2P(a) da \quad (4.54)$$

qui conduit à une distribution de type χ^2 [40,46]

$$P(S) = \frac{L}{\sqrt{2\pi\langle S \rangle S}} \exp\left(-\frac{S}{2\langle S \rangle}\right), \quad (4.55)$$

où L et $\langle S \rangle$ représentent respectivement le nombre de raies et la valeur moyenne de la force de raie dans un paquet (J, J') . La variance des amplitude v n'est autre que la force moyenne $v = \langle S \rangle$. Le terme exponentiel domine dans $P(S)$ excepté au voisinage de l'origine (*i.e.* pour des raies très faibles).

Partant de l'hypothèse de Porter-Thomas que l'amplitude de raie dipolaire électrique entre deux ensembles $(\gamma J, \gamma' J')$ (considérés comme deux ensembles orthogonaux Gaussiens) suit une distribution Gaussienne, on peut faire appel à la théorie des valeurs extrêmes de Kendall et Stuart pour estimer la valeur de S_{\max} telle que, en moyenne, le nombre de forces dépassant S_{\max} est plus grand que 1/2.

$$\frac{L}{\sqrt{2\pi v}} \int_{S_{\max}}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{S}} \exp\left(-\frac{S}{2v}\right) dS = L \operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{S_{\max}}{2v}}\right) = \frac{1}{2} \quad (4.56)$$

Pour des grandes valeurs de z , on a la forme asymptotique

$$\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^{\infty} \exp(-t^2) dt \approx \frac{1}{\sqrt{\pi}z} \exp(-z^2). \quad (4.57)$$

La formule obtenue par Bauche et Bauche-Arnoult s'écrit [40] :

$$S_{\max} = v \left[2 \ln L - \ln(\ln L) - \ln\left(\frac{\pi}{4}\right) \right]. \quad (4.58)$$

En posant $u = \sqrt{\frac{S_0}{2v}}$, Eq. (4.56) peut se réécrire

$$\frac{2L}{\sqrt{\pi}} = u \exp(u^2), \quad (4.59)$$

ou, en d'autres termes

$$2u^2 \exp(2u^2) = \frac{8L^2}{\pi}, \quad (4.60)$$

dont la solution peut s'exprimer à l'aide de la fonction W de Lambert $2u^2 = W\left[\frac{8L^2}{\pi}\right]$ [69, 84, 285, 397] (voir figure 4.11) et finalement

$$S_{\max} = v.W \left(\frac{8L^2}{\pi} \right). \quad (4.61)$$

La fonction W de Lambert possède le développement suivant [79, 163, 185] :

$$W(x) = \ln x - \ln \ln x + \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} c_{km} \frac{(\ln \ln x)^m}{(\ln x)^{k+m}} \quad (4.62)$$

où

$$c_{km} = \frac{(-1)^k}{m!} S_{k+m}^{(k+1)}, \quad (4.63)$$

$S_{k+m}^{(k+1)}$ étant le nombre de Stirling du premier type [80, 251], défini comme

$$x(x-1) \cdots (x-n+1) = \sum_{i=0}^j S_i^{(j)} x^j \quad (4.64)$$

et pour lequel Karanicoloff a proposé une expression [193]. Nous suggérons d'utiliser Eq. (4.62) tronquée à l'ordre 2 :

$$W(x) = \ln x - \ln \ln x + \frac{\ln \ln x}{\ln x} + O \left[\left(\frac{\ln \ln x}{\ln x} \right)^2 \right]. \quad (4.65)$$

S_{\max} peut être approchée par

$$S_{\max} = v \left[\ln \left(\frac{8L^2}{\pi} \right) - \ln \ln \left(\frac{8L^2}{\pi} \right) + \frac{\ln \ln \left(\frac{8L^2}{\pi} \right)}{\ln \left(\frac{8L^2}{\pi} \right)} \right]. \quad (4.66)$$

L'hypothèse faite par Porter et Thomas est pertinente à l'intérieur des ensembles de raies $\gamma J, \gamma' J'$ d'un faisceau de transition. Si l'on s'intéresse à la force maximale sur l'ensemble d'un faisceau de transition, on peut considérer que la somme de plusieurs distributions Gaussiennes conduit à une distribution exponentielle décroissante pour les amplitudes de raies (voir par exemple [44, 45, 136]) :

$$D(a) = \frac{L\lambda}{2} \exp(-\lambda a), \quad (4.67)$$

où λ est défini par $v = 2/\lambda^2 = \langle S \rangle = S_{\text{tot}}/L$. En utilisant la relation (4.54), on obtient

$$P(S) = \frac{L\lambda}{2\sqrt{S}} \exp(-\lambda\sqrt{S}). \quad (4.68)$$

Le théorème des valeurs extrêmes permet de définir la force maximale d'un faisceau de transition par

$$\int_{S_{\max}}^{\infty} P(S) dS = L \exp(-\lambda\sqrt{S_{\max}}) = \frac{1}{2}, \quad (4.69)$$

qui conduit à la simple expression pour S_{\max} :

$$S_{\max} = \frac{v}{2} [\ln(2L)]^2. \quad (4.70)$$

4.4.2 Force maximale associée à la loi de Learner

Les observations de Learner impliquent que

$$\log_{10} \left(\int_{2^{n-1}S_0}^{2^n S_0} P(S) dS \right) \approx q_0 + p.n, \quad (4.71)$$

avec $P(S) \approx k.S^{-\alpha}$. L'équation (4.71) peut s'écrire

$$\begin{aligned} \log_{10} \left(\int_{2^{n-1}S_0}^{2^n S_0} P(S) dS \right) &\approx \log_{10} \left(k \frac{[S^{1-\alpha}]_{2^{n-1}S_0}^{2^n S_0}}{1-\alpha} \right) \\ &\approx \log_{10} \left(\frac{k S_0^{1-\alpha} (1-2^{\alpha-1})}{(1-\alpha)} \right) + (1-\alpha) \log_{10}(2).n. \end{aligned} \quad (4.72)$$

En identifiant Eq. (4.72) avec Eq. (4.71) on obtient $q_0 \equiv \log_{10} \left(\frac{k S_0^{1-\alpha} (2^{1-\alpha}-1)}{(1-\alpha)} \right)$ et $p \equiv (1-\alpha) \log_{10}(2)$. Etant donné que $p \approx -\frac{1}{2} \log_{10}(2)$, on trouve $\alpha = \frac{3}{2}$ et $P(S) \approx k.S^{-3/2}$, où

$$k \approx \frac{(1-\alpha)10^{q_0}}{S_0^{1-\alpha} (1-2^{\alpha-1})} \approx \frac{10^{q_0} \sqrt{S_0}}{2(\sqrt{2}-1)} \quad (4.73)$$

Le théorème des valeurs extrêmes conduit à

$$\int_{S_{\max}}^{\infty} P(S) dS = \frac{2k}{\sqrt{S_{\max}}} = \frac{1}{2}, \quad (4.74)$$

i.e.

$$S_{\max} \approx 16k^2 \approx \frac{4 \cdot 10^{2q_0} S_0}{(\sqrt{2}-1)^2}. \quad (4.75)$$

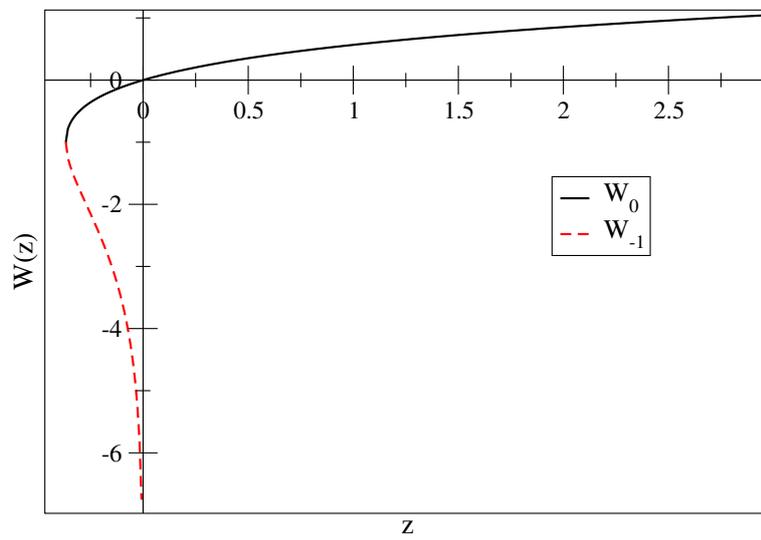


FIGURE 4.11 – Les deux branches réelles de la fonction de Lambert : W_0 et W_{-1} .

Chapitre 5

Calcul de l'opacité de plasmas à l'ETL : niveaux, configurations et super-configurations

“... Initial steps for this symposium began a few billion years ago. As soon as the stars were formed, opacities became one of the basic subjects determining the structure of the physical world in which we live...”, H. Mayer, in the introduction to the article “Opacity calculations : past and future” [241].

5.1 Définitions

5.1.1 L'équilibre thermodynamique local

L'équilibre thermodynamique complet correspond à une situation stationnaire idéale, où le plasma ne perd ni matière ni rayonnement. Il obéit alors à trois lois fondamentales :

- (i) La densité spectrale de rayonnement $d(\nu)$ est celle du corps noir (loi de Planck) :

$$d(\nu) = \frac{16\pi^2\nu^3\alpha^3}{\exp(2\pi\beta\nu) - 1}. \quad (5.1)$$

- (ii) La distribution $D(v)$ des vitesses (des électrons comme des ions) est donnée par une loi de Maxwell :

$$D(v) = D_0 \exp\left(-\beta\frac{v^2}{2}\right). \quad (5.2)$$

- (iii) Les populations relatives des niveaux d'énergie d'un ion sont données par la loi de Boltzmann :

$$p_i = p_j \frac{g_i}{g_j} \exp[-\beta(E_i - E_j)]. \quad (5.3)$$

Il est possible d'estimer les populations relatives des ions par la loi de Saha :

$$\frac{N_{q+1}}{N_q} = \frac{2}{n_e} \frac{U_{q+1}}{U_q} \left(\frac{1}{2\pi\beta} \right)^{3/2} \exp(-\beta I_q). \quad (5.4)$$

On a posé $\beta = 1/(k_B T)$. Les quantités N_i et N_j représentent les populations des niveaux i et j d'un ion, g_i et g_j leurs dégénérescences et E_i et E_j leurs énergies. N_q , U_q et I_q sont respectivement la population, la fonction de partition et le potentiel d'ionisation de l'ion de charge q . n_e est le nombre d'électrons libres moyen par unité de volume. La loi de Saha n'est pas une loi fondamentale car elle résulte d'une hypothèse sur la statistique des électrons libres. A l'équilibre thermodynamique complet, le plasma possède la propriété de micro-réversibilité : chaque processus atomique induit le transfert, par unité de temps, d'un niveau 1 vers un niveau 2, du même nombre d'électrons que du niveau 2 vers le niveau 1. Dans la réalité, cette situation idéale n'est jamais réalisée. Par contre, certains systèmes sont proches de l'ETL, défini par l'existence de l'équilibre thermodynamique à des températures différentes d'un point à l'autre du plasma. Dans notre modélisation, le plasma est considéré à l'ETL, déterminé par le fait que le libre parcours moyen des photons $\bar{\lambda}_{\text{photons}}$ est bien plus grand que la distance typique de variation de la température, elle-même bien plus grande que la distance moyenne électron-ion $d_{e\text{-ion}}$:

$$\bar{\lambda}_{\text{photons}} \gg \frac{T}{|\nabla T|} \gg d_{e\text{-ion}}. \quad (5.5)$$

L'ETL est parfois caractérisé par le critère suivant [355] :

$$\frac{n_e(\text{cm}^{-3})}{\sqrt{T(\text{eV})}} \geq 1.7 \cdot 10^{14} |\Delta E_{i,j}(\text{eV})|^3, \quad (5.6)$$

où i et j sont deux états d'un ion donné. Ce critère a été obtenu en cherchant les conditions pour lesquelles la recombinaison à trois corps l'emporte sur la recombinaison radiative. Un critère peut également être obtenu en considérant que l'excitation collisionnelle est plus probable que la désexcitation radiative. Certains physiciens introduisent parfois (c'est surtout le cas en physique des plasmas), les notions de températures ionique T_i , électronique T_e et radiative T_R . A l'ETL, ces températures sont égales : $T_i = T_e = T_R$.

5.1.2 Les différents processus

Les différents processus intervenant dans le calcul de l'opacité spectrale sont (voir figure 5.1) :

— la photo-excitation :

$$X_a^i(E_a) + \hbar\omega \rightarrow X_b^i(E_b) \quad (5.7)$$

— la photo-ionisation :

$$X_a^i(E_a) + \hbar\omega \rightarrow X_b^{i-1}(E_b) + \epsilon_b \quad (5.8)$$

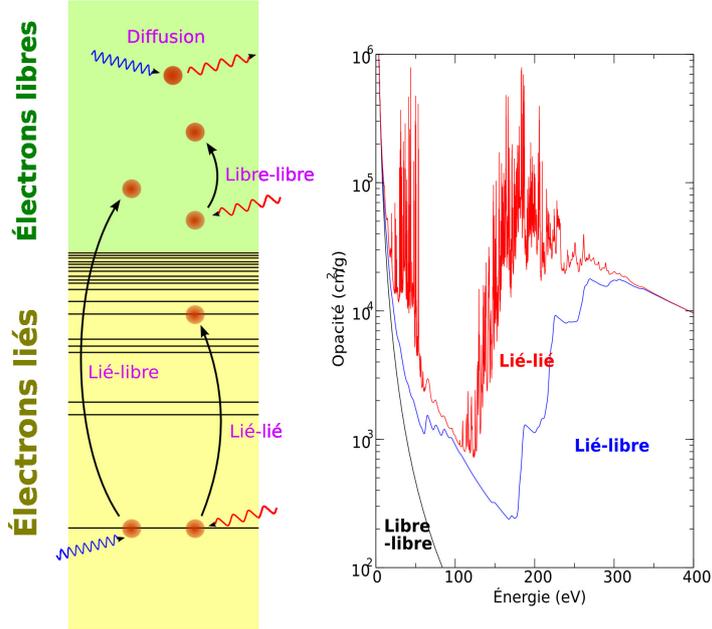


FIGURE 5.1 – A gauche : différents processus intervenant dans le calcul de l’opacité. A droite : opacité d’un plasma d’aluminium à $T=40$ eV et $\rho=10^{-2}$ g/cm³.

— l’effet Bremsstrahlung inverse :

$$X_a^i(E_a) + \epsilon_a + \hbar\omega \rightarrow X_b^i(E_b) + \epsilon_b \quad (5.9)$$

— la diffusion photon-électron (Compton ou Klein-Nishina pour les électrons libres et Rayleigh ou Raman pour les électrons liés).

La figure 5.3 montre les différentes composantes à l’opacité dans des conditions proches de celles de la base de la zone convective du Soleil ($T=192.91$ eV et $n_e = 10^{23}$ cm⁻³).

5.1.3 Des niveaux aux configurations

L’opacité spectrale totale s’écrit

$$\kappa(E) = \sum_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'} \kappa_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'}(E), \quad (5.10)$$

où les raies entre deux niveaux γJ (de la configuration de départ) et $\gamma' J'$ (de la configuration d’arrivée) sont notées $\gamma J \rightarrow \gamma' J'$ et

$$\kappa_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'}(E) = \frac{2\pi^2 \alpha \mathcal{N}_A}{A} f_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'} \mathcal{P}_{\gamma J} \Psi_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'}(E) \quad (5.11)$$

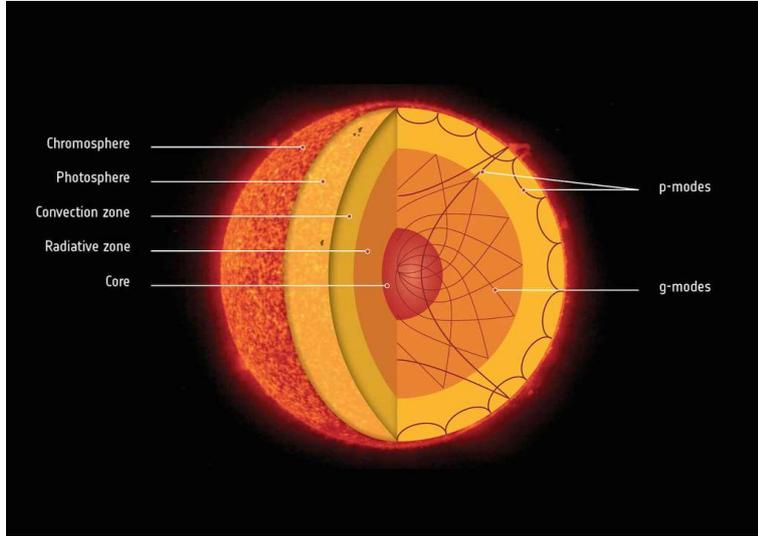


FIGURE 5.2 – Schéma simplifié de la structure interne du Soleil.

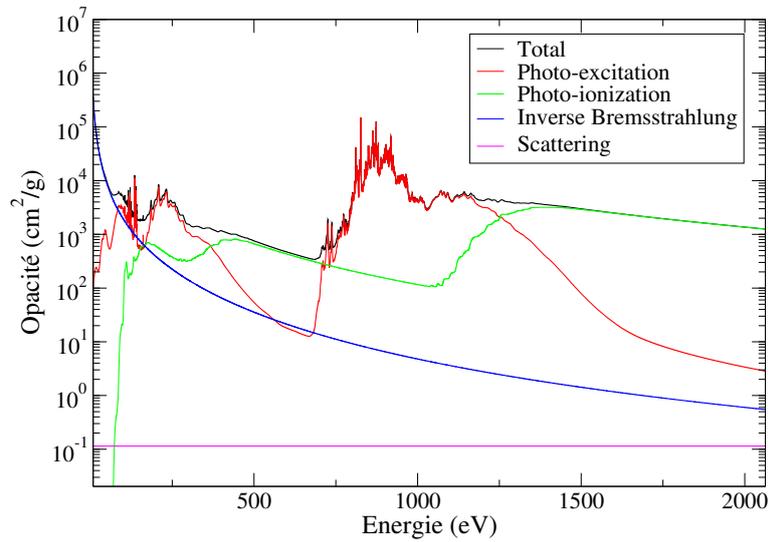


FIGURE 5.3 – Différentes contributions à l'opacité du fer calculées avec SCO-RCG dans les conditions de la base de la zone convective du Soleil, *i.e.*, $T=192.91$ eV et $n_e = 10^{23} \text{ cm}^{-3}$.

où \mathcal{N}_A est le nombre d'Avogadro, A la masse atomique, $f_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'}$ la force d'oscillateur, $\mathcal{P}_{\gamma J}$ la probabilité (ou population) du niveau γJ et $\Psi_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'}$ le profil de la raie $\gamma J \rightarrow \gamma' J'$. A l'ETL, la probabilité est donnée par la loi de Boltzmann :

$$\mathcal{P}_{\gamma J} = \frac{(2J+1) \exp[-\beta(E_{\gamma J} + E_{\text{bf+ff}} - E_{\text{ref}})]}{U_{\text{tot}}} \quad (5.12)$$

où $E_{\gamma J}$ est l'énergie du niveau, $E_{\text{bf+ff}}$ le décalage des énergies des niveaux dû aux effets de densité, U_{tot} la fonction de partition totale du plasma et E_{ref} une énergie de référence arbitraire.

On a

$$U_{\text{tot}} = \sum_{\gamma J} (2J+1) \exp[-\beta(E_{\gamma J} + E_{\text{bf+ff}} - E_{\text{ref}})]. \quad (5.13)$$

En configurations, l'opacité spectrale totale s'écrit

$$\kappa(E) = \sum_{C \rightarrow C'} \kappa_{C \rightarrow C'}(E), \quad (5.14)$$

les raies étant regroupées en faisceaux de transition (paires de configurations C et C') :

$$\kappa_{C \rightarrow C'}(E) = \frac{2\pi^2 \alpha \mathcal{N}_A}{A} \sum_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'} f_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'} \mathcal{P}_{\gamma J} \Psi_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'}(E). \quad (5.15)$$

Introduisons la moyenne pondérée au sein d'un faisceau de transition :

$$\langle X \rangle_w = \frac{\sum_{(\gamma J \in C) \rightarrow (\gamma' J' \in C')} w(\gamma J, \gamma' J') X(\gamma J, \gamma' J')}{\sum_{(\gamma J \in C) \rightarrow (\gamma' J' \in C')} w(\gamma J, \gamma' J')} \quad (5.16)$$

où w est une fonction de pondération, caractéristique de la moyenne. On a alors

$$\begin{aligned} \kappa_{C \rightarrow C'}(E) &= \frac{2\pi^2 \alpha \mathcal{N}_A}{A} \langle X \rangle_{f\mathcal{P}} \sum_{(\gamma J \in C) \rightarrow (\gamma' J' \in C')} f_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'} \mathcal{P}_{\gamma J} \\ &= \frac{2\pi^2 \alpha \mathcal{N}_A}{A} \langle X \rangle_{f\mathcal{P}} \langle \exp[-\beta(E_{\gamma J} + E_{\text{bf+ff}} - E_{\text{ref}})] \rangle_{g\mathcal{F}} \\ &\quad \times \frac{1}{U_{\text{tot}}} \sum_{(\gamma J \in C) \rightarrow (\gamma' J' \in C')} (2J+1) f_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'}. \end{aligned} \quad (5.17)$$

On pose

$$\Psi_{C \rightarrow C'}(E) = \langle \Psi_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'}(E) \rangle_{f\mathcal{P}} \quad (5.18)$$

le profil de raie et

$$g_C f_{C \rightarrow C'} = \sum_{(\gamma J \in C) \rightarrow (\gamma' J' \in C')} (2J+1) f_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'}, \quad (5.19)$$

ce qui donne

$$\begin{aligned} \kappa_{C \rightarrow C'}(E) &= \frac{2\pi^2 \alpha \mathcal{N}_A}{A} \frac{1}{\bar{U}_{\text{tot}}} g_C f_{C \rightarrow C'} \Psi_{C \rightarrow C'}(E) \\ &\times \langle \exp[-\beta(E_{\gamma J} + E_{\text{bf+ff}} - E_{\text{ref}})] \rangle_{gf}. \end{aligned} \quad (5.20)$$

5.1.4 Des configurations aux super-configurations

Le plasma tout entier est représenté par un atome imaginaire, caractérisé par la sphère de Wigner-Seitz (WS), contenant les électrons liés et libres. Le modèle bien connu de l'atome moyen permet de calculer la configuration électronique moyenne du plasma (le modèle sera décrit plus en détail dans la partie 7.1.2). Il a été proposé pour la première fois par Chandrasekhar [74] dans le contexte du calcul de la structure et des opacités stellaires. Un tel modèle donne les populations fractionnaires des orbitales et l'état d'ionisation moyen du plasma. Sur la base de ces résultats, les "véritables" configurations du plasma peuvent être obtenues. Malheureusement, le nombre de configurations d'électrons liés pertinentes (c'est-à-dire dont la probabilité est significative) dans un plasma peut être gigantesque, particulièrement lorsque le numéro atomique Z augmente. Il en est naturellement de même pour les raies. Par conséquent, il est judicieux de regrouper les sous-couches ordinaires (les orbitales) dont les énergies (calculées par le modèle de l'atome moyen) sont proches les unes des autres. Un tel ensemble s'appelle une super-couche. Une super-configuration [29] se compose de super-couches peuplées de toutes les manières possibles respectant le principe d'exclusion de Pauli. Ainsi, l'entité représentée par

$$\Xi = (1s2s2p)^{10}(3s3p)^7(3d)^2(4s4p4d4f5s)^9$$

est une super-configuration composée de quatre super-couches. Elle représente l'ensemble des configurations de la forme

$$\Xi = (1s)^a(2s)^b(2p)^c(3s)^d(3p)^e(3d)^2(4s)^f(4p)^g(4d)^h(4f)^i(5s)^j$$

avec $a + b + c = 10$, $d + e = 7$ et $f + g + h + i + j = 9$. Une configuration est un cas particulier de super-configuration dans laquelle chaque super-couche contient une orbitale unique. Un nombre raisonnable (quelques centaines) de super-configurations peut contenir un nombre considérable de configurations (particulièrement pour des grandes valeurs du numéro atomique Z). Ainsi, le complexe $K^2L^8M^{18}N^{15}O^1$ représente 1 super-configuration, 1100 configurations non relativistes, 75177 configurations relativistes et 2 142 046 400 niveaux !

En définissant et peuplant N_s super-couches, on se donne en fait l'espace fini et discret $[0, g_1] \times [0, g_2] \times \dots \times [0, g_s]$, g_i étant la dégénérescence de la super-couche i , dans lequel on va sélectionner les états, représentés par des points de cet espace. Il faut conserver une certaine cohérence [85] : la capacité de pouvoir passer d'un point sélectionné à un autre qui ne serait pas dans la même maille (au sens de la cristallographie) suivant une droite, repérée par les super-couches actives de la transition, passant par des points intermédiaires eux-mêmes sélectionnés. Pour conserver cette cohérence vis-à-vis d'un grand nombre de transitions, on ne peut choisir que des sous-espaces convexes. On a dans l'idée que les populations les moins pertinentes seront celles qui se situent à la surface de la région sélectionnée. Dans cette représentation du réseau, les états de même degré de charge sont dans un hyperplan perpendiculaire à la première bissectrice.

Le formalisme des "Super Transition Arrays" (STA) développé par Bar-Shalom et coll. [29] permet de calculer des spectres de photo-absorption dans l'approximation des super-configurations.

La précision pour le calcul de la photo-absorption spectrale peut être améliorée par raffinement des super-configurations, *i.e.* subdivision des super-couches. De plus, l'approximation des super-configurations rend possible le calcul de variables macroscopiques (comme la pression, l'énergie interne, l'énergie libre de Helmholtz, ...) en moyennant sur un nombre réduit de super-configurations (*i.e.* composées de grandes super-couches) [135,412]. Une super-couche est généralement notée σ et une super-configuration Ξ . En faisant l'hypothèse de l'ETL pour toutes les configurations contenues dans la super-configuration Ξ à Q électrons, il est possible d'écrire la probabilité d'une configuration C en utilisant la loi de Boltzmann :

$$\mathcal{P}_C^{(\Xi)} = \frac{G_C \exp[-\beta(E_C - \mu Q)]}{U_Q^{(\Xi)}}, \quad (5.21)$$

où G_C et E_C sont respectivement la dégénérescence et l'énergie de la configuration à Q électrons. Cette dernière s'écrit :

$$E_C = \sum_i q_i \epsilon_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} q_i (q_j - \delta_{ij}) V_{ij}, \quad (5.22)$$

où ϵ_i est l'énergie de l'orbitale i peuplée par q_i électrons et V_{ij} l'énergie d'interaction entre deux électrons appartenant aux orbitales i et j respectivement. La dégénérescence de la configuration C s'écrit :

$$G_C = \prod_i \binom{g_i}{q_i}, \quad (5.23)$$

et $U_Q^{(\Xi)}$ représente la fonction de partition de la super-configuration définie comme :

$$U_Q^{(\Xi)} = \sum_{C \in \Xi} G_C \exp[-\beta(E_C - \mu Q)]. \quad (5.24)$$

Le potentiel chimique μ est associé à la conservation du nombre d'électrons. La valeur de la grandeur thermodynamique A_Ξ pour la super-configuration Ξ est obtenue en moyennant la grandeur A_C sur toutes les configurations de la super-configuration :

$$A_\Xi = \langle A_C \rangle_{C \in \Xi} = \sum_{C \in \Xi} A_C \mathcal{P}_C^{(\Xi)}. \quad (5.25)$$

Dans la suite du manuscrit, la notion de moyenne $\langle \dots \rangle$ sans indice portera de manière implicite sur l'ensemble des configurations C appartenant à la super-configuration Ξ . En d'autres termes, on omet, pour des raisons de clarté, l'indice " $C \in \Xi$ ". Il est important de mentionner que la principale caractéristique de l'approximation des super-configurations consiste en une linéarisation de l'énergie d'une configuration par rapport aux populations des orbitales $\{q_s\}$:

$$E_C \approx E_C^{(0)} + \Delta E_\Xi \quad \text{avec} \quad E_C^{(0)} = \sum_{s \in C} q_s \epsilon_s \quad \text{et} \quad \Delta E_\Xi = \langle E_C - E_C^{(0)} \rangle_{C \in \Xi}. \quad (5.26)$$

Le terme ΔE_Ξ contient tous les termes quadratiques en populations moyennés sur les toutes les configurations de la super-configuration (voir Annexe D) à laquelle appartient la configuration considérée C . C'est précisément cette approximation qui nous permet de factoriser la fonction de partition orbitale par orbitale. En effet, de cette manière, on s'affranchit des termes du

Elément	Anciennes abondances	Nouvelles abondances
H	12	12
He	10.93	10.93
C	8.52	8.43
N	7.92	7.83
O	8.83	8.69
Fe	7.50	7.50

TABLE 5.1 – $A_x = \log_{10}(N_X/N_H) + 12$, où N_X est le nombre d’atomes de l’élément X (H, He, C, N, O et Fe).

type $q_i(q_j - \delta_{ij})$ dans l’expression Hartree-Fock de l’énergie d’une configuration. Il est alors possible d’évaluer les fonctions de partition par récurrence, soit en utilisant la relation de Bar-Shalom [29], soit une relation plus robuste [135]. L’approximation est justifiée si les configurations appartenant à la super-configuration sont proches les unes des autres. Une configuration moyenne peut alors être définie par ses nombres moyens d’occupation \bar{q}_s . Cette configuration moyenne fournit les fonctions d’onde et les énergies des orbitales qui seront utilisées lors des calculs ultérieurs, permettant ainsi d’éviter de calculer un jeu de fonctions d’onde par configuration.

5.2 Moyennes de Planck et Rosseland

Introduisons la variable réduite $u = h\nu/(k_B T)$. La moyenne de Planck s’écrit

$$\kappa_P = \int_0^\infty \kappa(u) W_P(u) du \quad (5.27)$$

où $W_P(u)$ est la fonction de pondération de Planck :

$$W_P(u) = \frac{15u^3 \exp(-u)}{\pi^4 [1 - \exp(-u)]} \quad (5.28)$$

et la moyenne de Rosseland :

$$\frac{1}{\kappa_R} = \int_0^\infty \frac{W_R(u)}{\kappa(u)} du \quad (5.29)$$

où

$$W_R(u) = \frac{15u^4 \exp[-u]}{4\pi^4 [1 - \exp(-u)]^2} \quad (5.30)$$

est la fonction de pondération de Rosseland.

5.3 Le code détaillé SCO-RCG

Les spectres d’absorption et d’émission de plasmas d’ions multi-chargés contiennent des faisceaux de transition avec un très grand nombre de raies dipolaires électriques coalescentes

(E1), qui sont bien décrites de manière globale par les formalismes UTA et SOSA. Cependant, certains faisceaux de transition montrent des structures détaillées dont la description nécessite la diagonalisation de la matrice Hamiltonienne. Nous avons développé, dans le cadre de la thèse de Quentin Porcherot, un modèle hybride, dénommé SCO-RCG, combinant approches statistiques et calculs de structure fine de manière “cohérente”. Les données requises pour le calcul des faisceaux de transition (configurations atomiques et intégrales radiales) sont calculées par le code SCO (*Super-Configuration Opacity*), qui traite les effets d’écrantage sur les fonctions d’onde. Les énergies des niveaux comme la position et la force des raies spectrales sont calculées par une version adaptée du code RCG de Cowan [86].

5.3.1 Principe

Prendre en compte les nombreuses raies spectrales dans la matière chaude et partiellement ionisée est important pour les calculs de l’opacité radiative [152] comme pour les diagnostics plasma. Ce serait Teller [240] qui le premier aurait reconnu l’importance de la contribution des raies à l’opacité des plasmas chauds. L’importance de la contribution de groupes de raies à l’opacité moyenne de Rosseland d’un plasma d’or partiellement ionisé a été démontrée par Nardi et Zinnamon [263]. Rozsnyai [349] a fourni une illustration quantitative de l’importance relative des opacités de raies et continue pour un plasma de fer. L’estimation théorique de la dispersion des groupe de raies due aux différents états de moment cinétique du système à plusieurs électrons a été effectuée par Bauche-Arnoult et coll. (voir par exemple [32, 35]), s’appuyant sur le travail de Moszkowski [257].

Le calcul numérique de l’opacité est important pour de nombreux aspects de la physique des plasmas : les spectres d’émission ou de transmission sont importants pour les diagnostics et les opacités moyennes pour le traitement du transfert radiatif. Ces deux applications nécessitent de calculer les spectres avec un pouvoir de résolution élevé, *i.e.* $h\nu/\Delta h\nu$ de l’ordre de quelques centaines, ce qui implique que la structure fine doit être prise en compte dans le calcul de la structure atomique et des spectres.

L’opacité est calculée par des codes reposant sur l’approximation DLA (Detailed Line Accounting) comme HULLAC [30] et FAC [158] ou, pour de meilleures performances en termes de temps de calcul, sur des méthodes statistiques fondées sur les formalismes UTA ou STA. L’approche DLA donne des énergies et des taux de transition suffisamment précis pour les calculs d’opacité spectrales et moyennes mais devient trop coûteuse lorsque les configurations deviennent complexes (dégénérescence $g_C \gtrsim 1000$). Cependant, seule l’approche DLA permet de prendre en compte l’effet de la température (via les populations de Boltzmann) sur les probabilités des niveaux dans une configuration, même s’il est possible d’inclure les effets de la température sur les méthodes statistiques [139]. L’approche DLA est également utile lorsque les élargissements physiques des raies (Doppler, Stark, collisions,...) sont petits.

D’un autre côté les méthodes statistiques permettent des calculs beaucoup plus rapides, parce qu’il est possible d’obtenir les moments d’ordre 1 et 2 sans diagonaliser la matrice Hamiltonienne. C’est le fondement de l’approche UTA (non relativiste) [32] et SOSA (relativiste) : Spin-Orbit Split Array [35]. Les formalismes UTA et SOSA s’appliquent pour la modélisation des raies entre des configurations ordinaires (DCA). Dans le cas d’un grand nombre de configurations, l’approche STA [29] permet un calcul plus rapide des opacités des plasmas, remplaçant les configurations par des super-configurations. Le code SCO [61] est capable d’effectuer des calculs STA et DCA. Cependant les confrontations aux spectres expérimentaux ont clairement montré

Ion	Faisceau de transition	Nombre de raies
Fe XIV at 150 eV	$2p^5 3s^2 3p 3d - 2p^4 3s^2 3p 3d^2$	20724
Cu IX at 40 eV	$2p^6 3p^4 3d^5 - 2p^5 3p^4 3d^6$	564 293
Gd VI at 40 eV	$4f^4 5d - 4f^3 5d 6d$	1 139 911

TABLE 5.2 – Nombre de raies de faisceaux de transition partant de configurations simplement ou doublement excitées.

que les approches statistiques ne permettent pas de reproduire le détail du spectre. Par ailleurs, les approches statistiques négligent l’effet de la température sur la distribution de probabilité des niveaux d’une configuration. Cette distribution de probabilité peut avoir un impact important sur la forme des faisceaux si la température du plasma est du même ordre de grandeur que la dispersion en énergie de la configuration, ou *zone réceptive*.

Cependant, il est intéressant d’étudier la pertinence des calculs détaillés de faisceaux de transition très complexes. Comme l’illustrent les exemples de la table 5.2, les faisceaux complexes avec des millions de raies se rencontrent dans des plasmas de Z intermédiaire à des températures modérées, *e.g.*, cuivre à 20 eV, pour des configurations doublement excitées, lorsque la sous-couche $3d$ est presque à moitié remplie. Dans les cas où une sous-couche f est partiellement ouverte, même les configurations simplement excitées ont une structure complexe. Etant donné que les approches statistique et détaillée sont toutes deux utiles pour une description précise des spectres sur une large gamme de température, densité et numéro atomique, un modèle combinant les deux approches devrait améliorer de manière substantielle la qualité des opacités calculées, sans nécessiter trop de ressources.

Les spectres obtenus par ces méthodes globales sont composés de structures non résolues qui ne sont pas suffisamment détaillées dans certains cas. A basse densité, beaucoup de faisceaux de transition ne sont plus “lisses”, mais révèlent des variations (signature des raies) ainsi que des lacunes (absence localisée de raies). L’opacité moyenne de Rosseland est très sensible aux creux dans le spectre dont la porosité rend le plasma transparent à certaines fréquences. La prise en compte de ces raies peut donc jouer un rôle important dans la modélisation du transfert de rayonnement. Cependant, elle nécessite la mise en oeuvre de codes coûteux numériquement reposant sur une description détaillée de la physique atomique, *i.e.* procédant à la diagonalisation de la matrice Hamiltonienne. Une solution consiste à construire une base de données et à ne conserver que les raies les plus intenses, les autres (plus faibles) étant traitées de manière statistique. Une telle approche (appelée MUTA pour Mixed-UTA [244]) fonctionne seulement à proximité d’un couplage pur (voir figure 5.4) et ne prend pas en compte les effets de densité. Nous avons par conséquent décidé de développer le code hybride de calcul d’opacité SCO-RCG [324]. Le code a vocation à être un outil pour le diagnostic et l’interprétation d’expériences de spectroscopie à l’ETL ainsi que pour l’étude des propriétés intrinsèques des spectres atomiques complexes. Il doit assurer la cohérence thermodynamique, nécessiter des ressources informatiques limitées, et obéir à une exécution automatique, pré-requis indispensable pour la génération de tables. SCO-RCG combine les approches statistiques STA [29] et UTA avec des calculs de structure fine. Il implique la définition de critères afin de décider si un traitement détaillé des raies est nécessaire et de déterminer la validité des méthodes statistiques. Dans ces formalismes statistiques, la distribution choisie est généralement Gaussienne, mais cela implique une asymétrie (skewness) et un aplatissement (kurtosis) du faisceau de transition qui ne sont pas toujours réalistes, comme nous l’avons vu au paragraphe 4.2. Nous avons mené une étude de l’impact

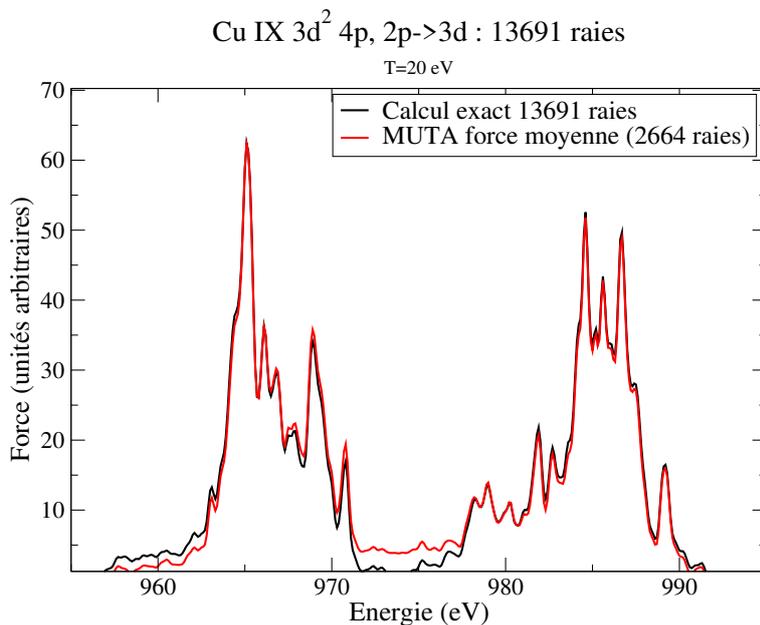


FIGURE 5.4 – Représentation du faisceau Cu IX $2p^6 3d^2 4p \rightarrow 2p^5 3d^3 4p$ (13691 raies) par la méthode MUTA (2664 raies “fortes”) à une température de 20 eV.

des moments d’ordre > 2 en suggérant d’autres distributions (Generalized Gaussian ou Normal Inverse Gaussian) [282]. Une telle modélisation a également été appliquée au calcul des pertes radiatives (RPL) [50–52]. Les méthodes globales ne décrivent pas les raies dipolaires-électriques individuelles à l’intérieur d’un faisceau de transition. Cependant, certains faisceaux de transition sont traités de manière détaillée, *i.e.* raie par raie. Les données requises pour le calcul détaillé des faisceaux de transition (intégrales de Slater, de spin-orbite et intégrales dipolaires) sont calculées par SCO, qui fournit une description précise des effets d’écrantage du plasma sur les fonctions d’onde. Ensuite les niveaux et les raies (position et force) sont calculées par une routine RCG de Cowan [86] adaptée. Cela nous a encouragés à développer des algorithmes récursifs “efficaces” pour la détermination des termes spectroscopiques et des niveaux γJ [138] (voir chapitre 3). L’estimation du nombre de raies appartenant un faisceau de transition est un ingrédient clé (avec les mécanismes d’élargissements physiques : Doppler, Stark, etc.) pour anticiper la coalescence potentielle des raies. Le nombre de niveaux de moment angulaire J fixé représente la taille d’un bloc de la matrice Hamiltonienne.

Dans le code SCO-RCG, l’interaction de configuration interaction est limitée à l’interaction électrostatique entre sous-configurations relativistes (orbitales nlj) d’une configuration non relativiste (orbitales nl) ; on la nomme “interaction de configurations relativistes”. En ce qui concerne la partie détaillée du spectre, l’interaction de configurations relativistes est prise en compte de manière exacte, à travers la diagonalisation du Hamiltonien. Pour ce qui est de la partie statistique du spectre, elle est prise en compte de manière approximative par un modèle reposant sur la définition, dans un faisceau de transition, de deux groupes de raies en considérant seulement une orbitale relativiste (celle ayant la plus grande intégrale de spin-orbite dans la transition). Les corrections à l’énergie et à la force des deux structures sont dérivées par une théorie

des perturbations au premier ordre, de manière à inclure les effets électrostatiques entre les niveaux des sous-faisceaux. Chaque faisceau de transition est représenté par deux distributions dont les caractéristiques (énergie moyenne, force et nombre de raies) change continûment du couplage LS (où un sous-faisceau s'annule) au couplage jj [136].

5.3.2 Description d'un calcul SCO-RCG

La première étape de l'exécution du code a pour objet la génération de la liste de configurations à prendre en compte (cette liste peut également être modifiée ou même entrée à la main). Dans SCO-RCG, une super-configuration Ξ peut être réduite à une configuration ordinaire. Les autres super-configurations sont dénommées super-configurations "non DCA". Pour chaque super-configuration Ξ dans la liste de départ, SCO procède au calcul auto-cohérent de la structure de la structure atomique, incluant des corrections relativistes à l'approximation de Pauli et l'écrantage des ions par les électrons libres. La relaxation d'orbitales est prise en compte selon la référence [314]. Puis, SCO calcule tous les faisceaux de transition issus de Ξ . Seuls les faisceaux de transition partant de configurations ordinaires peuvent être détaillés. SCO traite des UTA, SOSA et STA, et passe à la procédure RCG modifiée les faisceaux qui doivent être détaillés, en fonction des critères choisis. L'opacité spectrale totale est la somme des opacités partielles, pondérées par leurs probabilités respectives. Le code RCG ne calcule pas seulement les forces et les énergies des raies à l'aide des intégrales radiales calculées par SCO pour la configuration détaillée C , il calcule aussi d'autres caractéristiques des faisceaux de transition, comme les moments pondérés par les forces de la distribution des raies. La fonction de partition U_C de la configuration de départ est également calculée selon Eq. (5.31) par la sous-routine RCG modifiée. La contribution à l'opacité de chaque faisceau de transition partant de C est alors pondérée par U_C . Rappelons que l'expression générale de la fonction de partition de la configuration C est

$$U_{C,\text{det}} = \sum_{\gamma J \in C} (2J + 1) \exp(-\beta E_{\gamma J}), \quad (5.31)$$

où γJ est un niveau de C . Cette fonction de partition est utilisée dans SCO-RCG lorsqu'il existe au moins un faisceau de transition détaillé qui en part. Si tous les faisceaux de transition issus de C sont traités de manière statistique, alors C n'est pas détaillée. Le traitement statistique des configurations et faisceaux de transition repose sur l'hypothèse que chaque niveau γJ ne dépend pas de la température. Ainsi, la fonction de partition de C dépend uniquement de la population w_s de la sous-couche s caractérisée par son moment angulaire ℓ_s :

$$U_{C,\text{stat}} = \sum_{\gamma J \in C} (2J + 1) \exp(-\beta E_C) = G_C \exp(-\beta E_C), \quad (5.32)$$

avec

$$G_C = \sum_{\gamma J \in C} (2J + 1) = \prod_s \binom{4\ell_s + 2}{w_s}. \quad (5.33)$$

Ainsi, l'opacité totale peut s'écrire

$$\kappa(h\nu) = \frac{2\pi^2 \alpha \mathcal{N}_A}{A} \sum_{X \rightarrow X'} f_{X \rightarrow X'} \mathcal{P}_X \Psi_{X \rightarrow X'}(h\nu), \quad (5.34)$$

où la somme $X \rightarrow X'$ porte sur les UTAs, SOSAs ou STAs de chaque ion présent dans le plasma. Le point délicat est le calcul de la probabilité de X (qui peut être un niveau γJ , une configuration C ou une superconfiguration Ξ), parce que X peut être le point de départ de différentes transitions (DLA, UTA, SOSA, STA). De manière à assurer la normalisation des probabilités, nous introduisons trois ensembles disjoints : \mathcal{D} (niveaux détaillés γJ), \mathcal{C} (configurations C trop complexes pour être détaillées) et \mathcal{S} (super-configurations qui ne sont pas réduites à de simples configurations). La fonction de partition totale s'écrit alors :

$$U_{\text{tot}} = U(\mathcal{D}) + U(\mathcal{C}) + U(\mathcal{S}) \quad \text{with} \quad \mathcal{D} \cap \mathcal{C} \cap \mathcal{S} = \emptyset, \quad (5.35)$$

expression dans laquelle chaque terme est une trace sur les états quantiques de la forme

$$\text{Tr} \left\{ \exp \left[-\beta \left(\hat{H} - \mu \hat{N} \right) \right] \right\}, \quad (5.36)$$

\hat{H} étant le Hamiltonien, \hat{N} l'opérateur nombre, μ le potentiel chimique. On peut écrire

$$U_{\text{tot}} = \sum U_{C,\text{det}} + \sum U_{C,\text{stat}} + \sum U_{\Xi}, \quad (5.37)$$

Ξ étant une super-configuration qui ne se réduit pas à une configuration ordinaire. Les probabilités des différentes espèces d'un ion à N électrons sont [295] :

$$\mathcal{P}_{\gamma J} = \frac{1}{U_{\text{tot}}} (2J + 1) \exp [-\beta (E_{\gamma J} - \mu N)] \quad (5.38)$$

pour un niveau appartenant à \mathcal{D} ,

$$\mathcal{P}_C = \frac{1}{U_{\text{tot}}} \sum_{\gamma J \in C} (2J + 1) \exp [-\beta (E_{\gamma J} - \mu N)] \quad (5.39)$$

pour une configuration qui peut être détaillée,

$$\mathcal{P}_C = \frac{1}{U_{\text{tot}}} g_C \exp [-\beta (E_C - \mu N)] \quad (5.40)$$

pour une configuration qui ne peut pas être détaillée (*i.e.* appartenant à \mathcal{C}) et

$$\mathcal{P}_{\Xi} = \frac{1}{U_{\text{tot}}} \sum_{C \in \Xi} \exp [-\beta (E_C - \mu N)] \quad (5.41)$$

pour une super-configuration.

5.3.3 Processus physiques d'élargissement des structures

Dans un calcul de photo-absorption, chaque STA est convolué avec les élargissements physiques individuels. L'effet Doppler et l'effet Stark ionique à l'approximation quasi-statique sont décrits par un profil Gaussien et l'effet des collisions inélastiques avec les électrons est décrit, comme la largeur naturelle, par un profil Lorentzien. La convolution des profils Gaussien et Lorentzien donne un profil de Voigt.

L'élargissement Stark dans un plasma correspond à l'effet statistique des électrons et des ions du milieu sur le profil spectral des raies d'émission ou d'absorption. Il est de ce fait important pour le calcul des opacités ou plus généralement pour la spectroscopie des plasmas.

Le traitement de l'effet Stark ionique a été proposé par Rozsnyai en 1977 ; il est décrit dans la référence [348]. Les élargissements de l'état initial et de l'état final sont supposés indépendants, et l'élargissement d'un état (initial ou final) s'écrit

$$\gamma_{\text{Stark}} = m \frac{\Delta\epsilon_{\ell,\ell\pm 1}}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\Delta\epsilon_{\ell,\ell\pm 1})^2 + 4V_{\ell,\ell\pm 1}^2}. \quad (5.42)$$

Il dépend donc :

- du nombre quantique magnétique m ($-\ell \leq m \leq \ell$),
- de la différence d'énergie entre l'état considéré (initial ou final) et les états tels que $\Delta n = 0$ et $\Delta\ell = \pm 1$ ($\Delta\epsilon_{\ell,\ell\pm 1} = \epsilon_{>} - \epsilon_{<}$, où $\epsilon_{<}$ et $\epsilon_{>}$ désignent respectivement la plus petite et la plus grande des énergies $\epsilon_{n,\ell}$ et $\epsilon_{n,\ell\pm 1}$), et
- d'un potentiel perturbateur donné par la formule suivante :

$$V_{\ell,\ell\pm 1} = -F_2 D_{\ell,\ell\pm 1} \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{\min(\ell, \ell \pm 1) + 1}{[(2 \min(\ell, \ell \pm 1) + 1)(2 \min(\ell, \ell \pm 1) + 2)]^{1/2}}, \quad (5.43)$$

où $D_{\ell,\ell\pm 1}$ est l'intégrale radiale et

$$F_2 = \sqrt{\frac{3}{\Gamma}} \frac{Z^*}{r_i^2} \exp\left(-\frac{r_i}{\lambda_{\text{TF}}}\right). \quad (5.44)$$

$r_i = r_{\text{ws}} + r_c$, r_{ws} étant le rayon de Wigner-Seitz, r_c le rayon de cœur de l'atome, c'est-à-dire le rayon moyen de la fonction d'onde associée à la couche demi-remplie, et λ_{TF} la longueur d'onde d'écran Thomas-Fermi (TF) :

$$\lambda_{\text{TF}} = \sqrt{\frac{\pi}{2\sqrt{2}T^{1/2}I_{-1/2}(\beta\mu)}}. \quad (5.45)$$

Cette dernière peut s'écrire

$$\lambda_{\text{TF}} = \lambda_{\text{TF}_0} \sqrt{\frac{[12I_{1/2}(\beta\mu)]^{1/3}}{I_{-1/2}(\beta\mu)}}. \quad (5.46)$$

avec

$$\lambda_{\text{TF}_0} = \left(\frac{\pi}{12Z^*}\right)^{1/3} r_{\text{ws}} r_s^{-1/3} I_{-1/2}(\beta\mu), \quad (5.47)$$

où r_s est le rayon moyen de la sphère occupée par un électron $r_s = r_{\text{ws}}/(Z^*)^{1/3}$. La longueur d'onde de Thomas-Fermi à température nulle correspond au cas de plasmas très denses et froids dans lesquels les électrons sont totalement dégénérés. Il ne faut pas confondre cette valeur avec la constante d'écran de Debye-Hückel correspondant au cas des plasmas cinétiques chauds et peu denses :

$$\lambda_{\text{DH}} = \sqrt{\frac{1}{4\pi\beta n_e}}. \quad (5.48)$$

Le coefficient multiplicatif $\frac{3}{\Gamma}$ dans l'équation (5.44) tient compte d'un résultat bien connu du modèle de plasma à une composante.

Pour les ions hydrogénoïdes et héliumoïdes, nous utilisons un modèle plus sophistiqué d’effet Stark [143, 296]. C’est indispensable pour l’étude de l’intérieur du Soleil par exemple, ou pour les expériences de spectroscopie de couche K, comme les expériences d’interaction laser-cible de Z faible ou les expériences d’implosion. Le mélange d’un traceur spectroscopique (en général de l’argon) avec le DT dans un micro-ballon a été imaginé comme moyen de mesure de la compression atteinte dans les expériences d’implosion. Dans ce cadre, la correspondance entre la densité du milieu et la largeur des raies nécessite un modèle précis pour l’élargissement des raies du traceur spectroscopique.

Les collisions électroniques sont traitées selon une approche proposée par Dimitrijevic et Konjevic [96, 97]. Cette formulation repose sur l’expression de Baranger pour la largeur d’une raie isolée, dont les différentes contributions sont pondérées par un facteur de Gaunt inélastique qui dépend du rapport entre l’énergie thermique des électrons libres et de l’énergie de transition. Notons pour information que Rozsnyai propose également une approche de l’élargissement par impact électronique dans la référence [348]. Dans cette méthode, la section efficace d’ionisation par impact électronique est calculée par la formule de Lotz, corrigée par un facteur multiplicatif tenant compte de la restitution de résultats expérimentaux. Cette section efficace est moyennée sur une distribution maxwellienne des électrons libres, pour donner la largeur associée. Rozsnyai propose également de prendre en compte les collisions élastiques (qui ne sont pas prises en compte dans notre travail).

5.3.4 Modélisation des états très excités

Dans les plasmas d’ions multichargés, un nombre significatif d’électrons est susceptible d’occuper des orbitales de haute énergie. Ces électrons de “Rydberg”, lorsqu’ils sont spectateurs d’une transition, sont responsables de l’apparition de raies satellites, conduisant à un élargissement sur l’aile rouge de la raie de résonance. La contribution de ces raies satellites peut être importante, à cause de la grande dégénérescence des configurations excitées qui conduit à des populations de Boltzmann (poids statistiques) élevé(e)s. Cependant, il s’avère généralement difficile de prendre en compte ces configurations car elles sont souvent à l’origine d’un nombre considérable de raies. Nous proposons de modéliser la perturbation induite par les spectateurs d’une manière similaire à l’approche PRTA (Partially Resolved Transition Array) publiée par Iglesias [178–180]. Cela consiste en un calcul DLA partiel dans lequel les électrons de Rydberg sont d’abord omis (ce qui réduit la complexité du calcul détaillé et le rend faisable), puis inclus *via* un décalage et un élargissement, exprimés en termes de fonctions de partition canoniques, qui sont des ingrédients importants de l’approche des super-configurations. Cette méthode peut être utilisée dans n’importe quel code d’opacité détaillé.

Dans SCO-RCG [294, 324], les orbitales sont traitées individuellement jusqu’à une certaine limite au-delà de laquelle toutes les orbitales restantes sont rassemblées dans une grande super-couche σ , nommée abusivement “super-couche de Rydberg”. Les orbitales qui en font partie interagissent peu avec les orbitales de cœur :

$$(1s)^{p_1} (2s)^{p_2} \dots (n_{k-1} \ell_{k-1})^{p_{k-1}} \sigma^{p_k} \quad (5.49)$$

où

$$\sigma = \left(\prod_{i=k}^N n_i \ell_i \right). \quad (5.50)$$

T (K)	n_e (cm ⁻³)	ρ (g/cm ⁻³)	OP (cm ² /g)	ATOMIC “Full” (cm ² /g)	SCO-RCG (cm ² /g)
125 800	10 ¹⁷	1.35 10 ⁻⁶	25	64	63
177 827	3.16 10 ¹⁷	3.44 10 ⁻⁶	358	683	674
199 473	10 ¹⁷	9.52 10 ⁻⁷	354	487	500
251 190	10 ¹⁸	8.85 10 ⁻⁶	1270	1359	1313
295 553	3.16 10 ¹⁷	2.44 10 ⁻⁶	232	131	122

TABLE 5.3 – Valeurs de l’opacité moyenne de Rosseland calculée par OP, ATOMIC et SCO-RCG dans des conditions typiques des enveloppes stellaires.

La dernière orbitale de la super-couche σ correspond à la dernière orbitale prédite par le modèle d’atome moyen. Cela correspond à la limite d’ionisation par pression au-delà de laquelle les orbitales se fondent dans le continuum. La première orbitale de σ peut aussi être fixée par l’utilisateur. Dans ce dernier cas, il est utile de disposer d’une estimation, au moins de la valeur de n . Pour la série de Lyman des atomes hydrogénoïdes, la raie de plus haute énergie qui peut être résolue a été calculée par Inglis et Teller [181] en faisant l’hypothèse d’un élargissement Stark. L’expression du nombre quantique correspondant n_{\max} a été déterminée par Inglis et Teller à partir d’un modèle simplifié d’écrantage dans un plasma d’hydrogène très dilué, et a été étendue à des systèmes non hydrogénoïdes par Alaterre [4] :

$$\log_{10} n_e = 23.26 + 4 \log_{10} Z^* - 7.5 \log_{10} n_{\max} \quad (5.51)$$

qui donne

$$n_{\max} \approx (1.8197 \cdot 10^{23} Z^{*4} / n_e [\text{cm}^{-3}])^{2/15}. \quad (5.52)$$

Cette formule diffère légèrement de celle proposée par Griem [157] ($4 \log_{10} Z^*$ à la place de $4.5 \log_{10} Z^*$ dans l’équation (5.51)). Griem a considéré le microchamp ionique à la place du micro-champ électronique. Si la population Q de la super-couche de Rydberg σ est égale à zero, le calcul d’opacité implique seulement des configurations dont la contribution à l’opacité peut être détaillé et donc se compose uniquement d’UTAs, SOSAs ou DLAs. En effet, un saut mono-électronique à partir d’une orbitale ($n\ell$) donne naissance à des faisceaux de transition qui peuvent être détaillés ou non. Afin de décider si un calcul raie-par-raie s’avère nécessaire et de déterminer la validité des méthodes statistiques, il peut être intéressant de quantifier la porosité (absence locale de raies) des faisceaux [129, 130].

Les calculs ATOMIC [77, 119] en mode “Full” reposent sur des calculs détaillés en mode “une configuration à la fois”, c’est à dire ne prenant pas en compte l’interaction de configurations, hormis entre sous-configurations relativistes d’une même configuration non relativiste. Cela permet d’inclure plusieurs milliers de configurations dans le calcul. Un second type de calculs ATOMIC a également été effectué en utilisant une liste réduite de configurations. Ces calculs ont été conus ($h\nu$ inférieur à 250 eV), $\Delta n=0, 1, 2$ et $n_{\max} = 5$, dénommées “n5”. On observe que les moyennes de Rosseland ATOMIC Full et ATOMIC n5 diffèrent parfois de 20 %, les valeurs n5 étant les plus petites. SCO-RCG, qui n’est pas limité à $n \leq 5$, est généralement plus proche d’ATOMIC Full (voir Figs. 5.5 et 5.6, ainsi que les tables 5.3.4 et 5.3.4) [393], ce qui est cohérent avec le fait que l’interaction de configuration joue un rôle moins important que l’exhaustivité dans le cas présent. Les valeurs OP (Opacity Project) sont généralement plus faibles. La figure 5.7 présente

T (eV)	ρ (g/cm ³)	ATOMIC Full (cm ² /g)	ATOMIC n5 (cm ² /g)	SCO-RCG (cm ² /g)
21	$2 \cdot 10^{-3}$	19 266	14 361	17 853
22	$2 \cdot 10^{-3}$	19 613	14 910	18 435
23	$2 \cdot 10^{-3}$	19 508	15 205	18 510
25	$2 \cdot 10^{-3}$	18 384	15 094	17 550

TABLE 5.4 – Opacités moyennes de Rosseland calculées avec deux versions du code ATOMIC et SCO-RCG dans des conditions atteignables expérimentalement (laser). Ces conditions sont intéressantes car elles correspondent à une ionisation moyenne typique de certaines enveloppes stellaires.

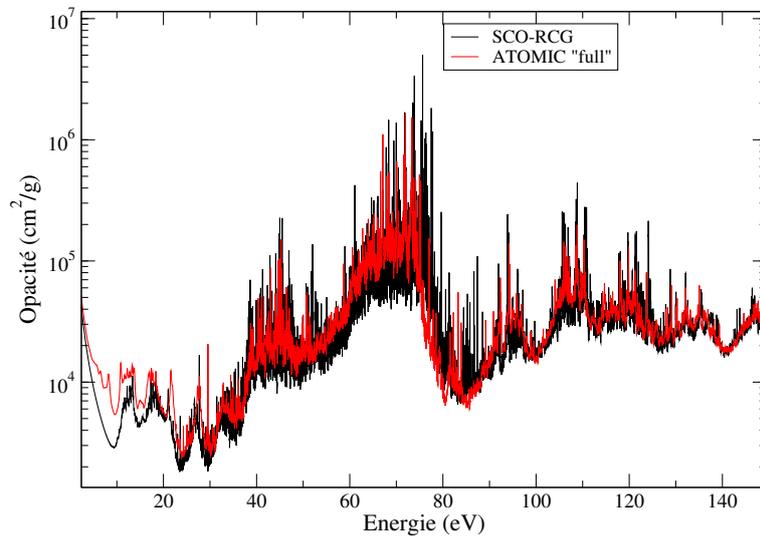


FIGURE 5.5 – Opacité du fer à $T=23$ eV et $\rho=2$ mg/cm³. Comparaison entre SCO-RCG et ATOMIC “Full”. Le calcul ATOMIC nous a été transmis par J. Colgan.

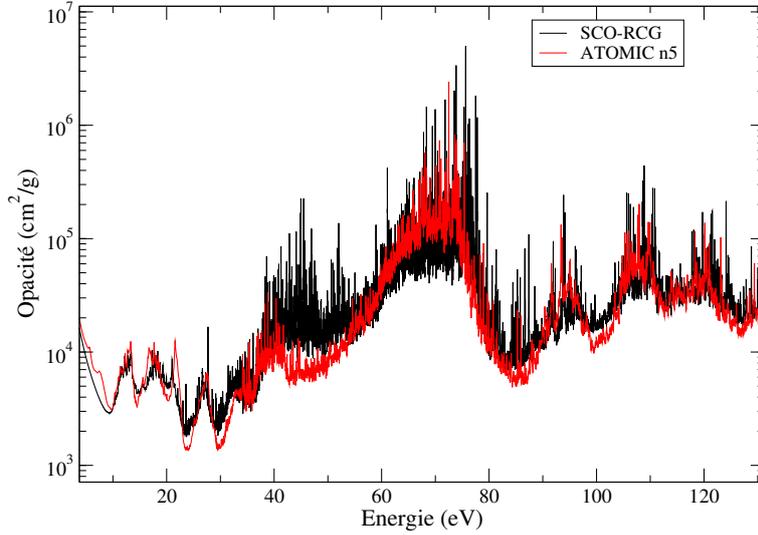


FIGURE 5.6 – Opacité du fer à $T=23$ eV et $\rho=2$ mg/cm³. Comparaison entre SCO-RCG et ATOMIC “n5”. Le calcul ATOMIC nous a été transmis par J. Colgan.

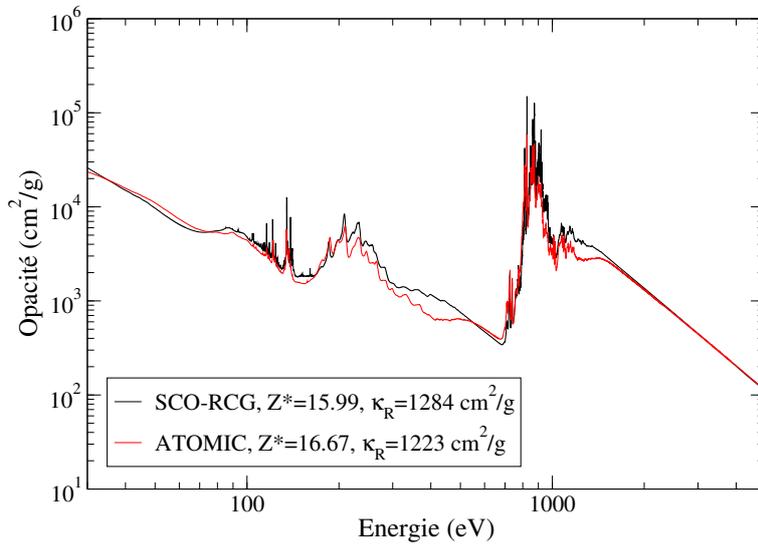


FIGURE 5.7 – Comparaison entre les opacités SCO-RCG et ATOMIC [77, 119] à $T=192.91$ eV et $n_e=10^{23}$ cm⁻³. Les calculs ATOMIC m’ont été transmis par J. Colgan. Les opacités moyennes de Rosseland SCO-RCG et ATOMIC sont respectivement de 1284 et 1292 cm²/g. L’opacité moyenne de Rosseland OP dans ces conditions est bien plus faible et égale à 854 cm²/g.

une comparaison entre les opacités SCO-RCG et ATOMIC [77,119] à $T=192.91$ eV et $n_e=10^{23}$ cm^{-3} . Les calculs ATOMIC m'ont été transmis par J. Colgan. On peut noter que les opacités moyennes de Rosseland SCO-RCG et ATOMIC sont respectivement de 1284 et 1292 cm^2/g et l'opacité moyenne de Rosseland OP dans ces conditions est bien plus faible et égale à 854 cm^2/g .

5.3.5 Limites actuelles du modèle

Les limitations de SCO-RCG sont de deux types : les premières sont de nature informatique, et les secondes sont dues au modèle. Ainsi l'approche DLA est limitée aux faisceaux ayant moins de 800 000 raies. Pour un faisceau de transition, la taille des blocs correspondant à une valeur de J donnée dans la matrice Hamiltonienne est limitée à 4000. Cependant, cette limitation est bien moins restrictive que celle portant sur le nombre maximal de raies. De plus, le nombre de sous-couches ouvertes est limité à 8 pour une configuration. A cause des coefficients de parenté fractionnaire, on ne peut avoir que 1, 2, 17 ou 18 électron(s) dans une orbitale g .

Les calculs détaillés sont naturellement beaucoup plus coûteux que les calculs UTA or STA. Pour la plupart des faisceaux de transition, une grande partie des ressources informatiques est consommée par la convolution des transitions avec les profils de raie physiques. La première solution que nous avons expérimentée consiste à regrouper toutes les raies d'un faisceau de transition en bandes d'énergie dans laquelle les forces de raies sont ajoutées. Dans SCO-RCG, on fait l'hypothèse que toutes les raies d'un faisceau donné ont les même élargissements qui sont les même que ceux calculés par SCO si le faisceau est traité de manière statistique [97]. Même si l'échantillonnage réduit les ressources informatiques requises pour un seul faisceau de transition comportant un grand nombre de raies, le nombre de raies calculé pour le spectre global est très important. L'efficacité de l'échantillonnage pourrait être améliorée si on autorisait de regrouper des raies proches non seulement au sein d'un faisceau mais aussi entre plusieurs faisceaux de transition.

Abdallah et coll. [1] ont montré que cette approche conduit à des spectres insuffisamment précis, en ce sens que la moyenne de Rosseland change de 1 ou 2 % par rapport à un calcul procédant d'une convolution raie-par-raie. Cependant, leur approche consistant à définir deux ensembles d'élargissements par bande d'énergie - un pour les raies fines et un pour les raies larges - donne des résultats beaucoup plus précis, avec des différences dans le spectre quasiment invisibles à l'oeil nu et conduisant à une variation de la moyenne de Rosseland de 0.01 %; cependant, leur approche nécessite de parcourir deux fois la liste des raies : une première fois pour le calcul des élargissements moyens et la délimitation des ensembles, et une seconde pour remplir les blocs en fonction des élargissements et des énergies.

5.3.6 Effets des moments d'ordre 3 et 4 sur la modélisation des faisceaux

Etant donné qu'il combine calculs détaillés et statistiques, SCO-RCG permet d'étudier les moments d'ordre 3 et 4 des faisceaux de transition, ainsi que leurs conséquences pour le spectre. Dans la plupart des codes mettant en oeuvre l'approche UTA, la distribution des raies dans les faisceaux de transition est modélisée par une distribution Gaussienne. Cependant, même si la séparation spin-orbite est faible, la distribution des raies est rarement symétrique et ni le pic central, ni les ailes ne sont correctement décrites par la Gaussienne, comme l'illustre la figure 5.8. La prise en compte des moments d'ordre 3 et 4 est susceptible d'améliorer de manière

significative la modélisation des faisceaux de transition dans les modèles statistiques [282]. On voit que la prise en compte de l'asymétrie et du kurtosis améliore la modélisation des faisceaux de transition lorsque l'interaction spin-orbite est faible. C'est la distribution NIG reproduit le mieux les ailes du faisceau, ce qui peut avoir un impact important sur la moyenne de Rosseland.

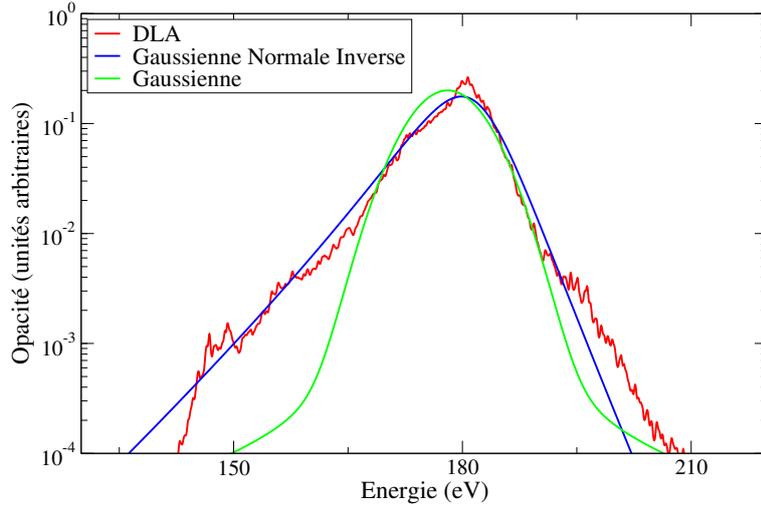


FIGURE 5.8 – Faisceau de transition $3p^5 3d^5 \rightarrow 3p^4 3d^5 4p$ de Ge XII avec un élargissement de 0.1 eV et une température de 50 eV. Comparaison DLA/UTA-Gaussien/NIG.

La figure 5.9 montre que la plupart des faisceaux de transition, même ceux qui contribuent le plus à l'opacité, sont asymétriques et peuvent avoir des kurtosis très différents. Les faisceaux de transition semblent tendre vers des formes non Gaussiennes lorsque n croît. Ceux qui partent de la sous-couche $1s$ ont tendance à se concentrer près de $(\alpha_3, \alpha_4) = (+0.8, 2.5)$.

La prise en compte des moments d'ordre 3 et 4 moments peut nettement améliorer la modélisation de certains faisceaux de transition ayant un aspect “piqué” ou “pointu”. Ces moments peuvent être obtenus à l'issue d'un calcul détaillé, sachant que pour les faisceaux de transition comportant un grand nombre de raies, une grande partie du temps de calcul est consommée par la convolution de raies par les profils de Voigt.

5.3.7 Effets de la température sur l'énergie moyenne et la variance

La température a un effet significatif sur la forme des faisceaux de transition. Nous avons montré [139] un impact important de la température sur le coefficient d'absorption d'un faisceau de transition, même à des températures supérieures à la largeur statistique du faisceau. Les études de l'effet de la température sur l'énergie moyenne et la dispersion des faisceaux montrent que l'énergie moyenne ne dépend pas beaucoup de la température, parce que toutes les raies sont dans un domaine limité. Le pouvoir de résolution requis pour un calcul précis est de l'ordre de 1000, alors que l'impact de la température sur l'énergie moyenne d'un faisceau de transition est de l'ordre de 10 % pour certains faisceaux de transition.

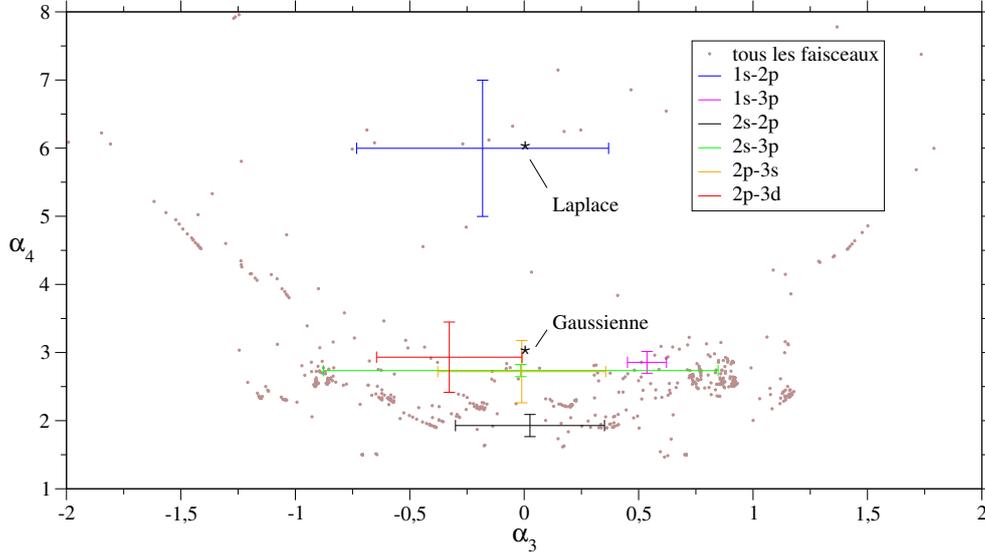


FIGURE 5.9 – Répartition des moments d’ordre 3 et 4 moments des faisceaux présents dans un calcul correspondant aux conditions de l’expérience de Davidson.

Cet effet est plus important sur la variance, ce qui peut en partie s’expliquer par le fait qu’à basse température, seules les raies partant du niveau fondamental de la configuration de départ jouent un rôle significatif. Cela occasionne une réduction de la dispersion du faisceau. Les moments des faisceaux de transition du type $\ell^{N+1} \rightarrow \ell^N \ell'$, ne sont pas beaucoup affectés par la température, contrairement aux faisceaux issus de configurations ayant deux sous-couches ouvertes. Cela s’explique par une extension plus grande en énergie du faisceau.

5.3.8 Effet du nombre maximum de raies par faisceau de transition sur les opacités moyennes

En tant que moyenne harmonique, l’opacité moyenne de Rosseland est sensible à la présence et au traitement des raies spectrales lorsque les processus d’élargissement physique ne les fusionne pas avec d’autres structures. Avec notre nouveau code hybride, nous avons commencé à étudier l’effet des raies détaillées sur la moyenne de Rosseland. Nous nous sommes concentrés sur un cas intéressant : le cuivre à $T=20$ eV et $\rho=10^{-4}$ g.cm⁻³. A cette température, l’opacité moyenne de Rosseland est extrêmement sensible au nombre de faisceaux détaillés. Entre un calcul détaillé au maximum et un calcul complètement statistique, la moyenne de Rosseland diffère de 20 %, comme le montre la figure 5.10.

La figure 5.10 montre que l’opacité moyenne de Rosseland ne converge vers $\kappa_\infty=2.135$ cm²/g que si des faisceaux de transition avec plus de 100 000 raies sont traités de manière détaillée. Bien que κ_∞ semble être atteinte en-deçà de 10 000 raies par faisceau de transition, des structures du spectre lié-lié, particulièrement dans la région des $3p \rightarrow 3d$ autour de 60 eV ne sont pas

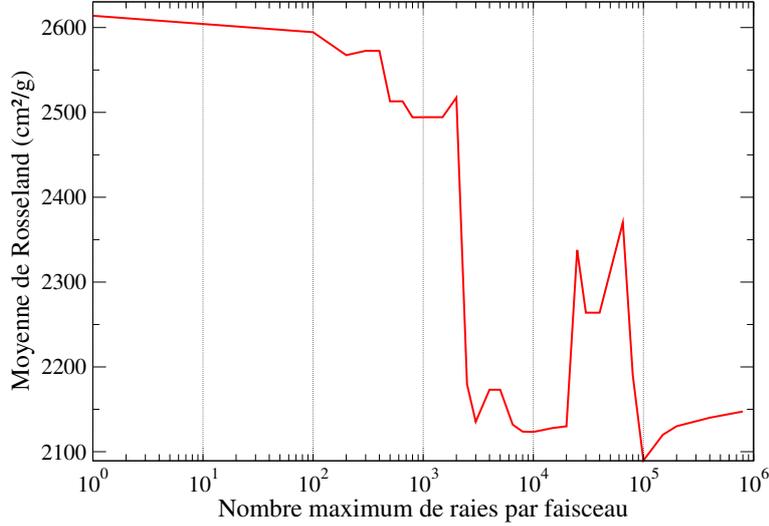


FIGURE 5.10 – Opacité moyenne de Rosseland pour un plasma de cuivre à $T=20$ eV et $\rho=10^{-4}$ g.cm $^{-3}$ en fonction du nombre maximum de raies par faisceau de transition.

convergées avec un tel nombre de raies par faisceau. En comparaison, un test similaire sur un plasma d'aluminium montre que la convergence de l'opacité moyenne de Rosseland est atteinte pour un maximum de 100 raies par faisceau. La figure 5.11 donne la force des faisceaux de transition en fonction de leur nombre de raies.

5.3.9 Conclusion concernant le code SCO-RCG

Le code hybride SCO-RCG [324], qui combine les approches statistiques UTA, SOSA et STA avec des calculs de structure fine, fournit des opacités précises, requises pour les études liées à l'astrophysique ou la fusion par confinement inertiel ainsi que les propriétés des spectres atomiques complexes. Il inclut les effets d'environnement plasma, nécessite des ressources informatiques limitées, et se conforme à une utilisation automatique, ce qui permet d'envisager la production de tables. Il s'avère utile pour le diagnostic et l'interprétation d'expériences de spectroscopie des plasmas chauds à l'équilibre thermodynamique local tels ceux obtenus au LULI (Laboratoire pour l'Utilisation des Lasers Intenses) [227] ou au Sandia National Laboratory sur la machine Z [23].

5.4 Interprétation d'expériences

La modélisation des propriétés radiatives des plasmas chauds et denses, dans lesquels le transport de l'énergie est essentiellement dominé par le transfert radiatif, est extrêmement sensible à l'opacité spectrale de la matière (section efficace d'absorption de photons par unité de masse). Pour mettre à l'épreuve les modèles, il est nécessaire de disposer de mesures quantita-

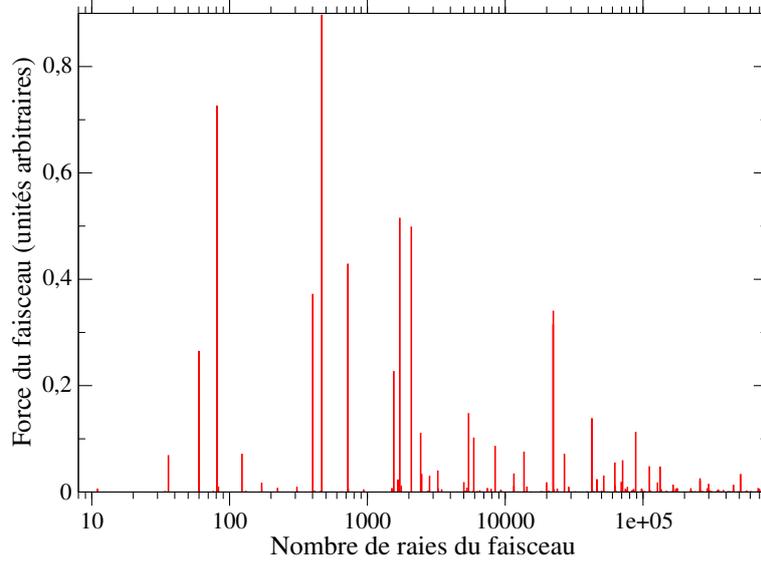


FIGURE 5.11 – Force des faisceaux de transition en fonction de leur nombre de raies pour un plasma de cuivre à $T=20$ eV et $\rho=10^{-4}$ g.cm $^{-3}$.

tives dans un plasma aussi homogène que possible spatialement et temporellement en densité et température. Les expériences de spectroscopie d’absorption occupent une place particulière dans l’étude des propriétés électroniques et radiatives de ces plasmas. Elles ont toujours eu un impact important sur les méthodes mises en œuvre dans les codes de calcul d’opacité. Ces expériences permettent de mesurer la transmission spectrale d’un échantillon à partir de laquelle on peut accéder, via la loi de Beer-Lambert (c’est-à-dire en négligeant les processus de diffusion et de réabsorption), à l’opacité du matériau.

Nous avons analysé quelques spectres expérimentaux en transmission, obtenus auprès d’installations laser et Z-pinch, en nous concentrant sur les spectres que les codes statistiques avaient échoué à reproduire. Les spectres mesurés auprès d’installations laser concernent l’aluminium - lasers HELEN à AWE (Aldermaston Weapons Establishment) au Royaume-Uni [91] et ASTERIX à Garching en Allemagne - et le cuivre au LULI à l’Ecole Polytechnique [227]. Concernant le Z-pinch, nous discutons l’analyse des spectres du fer mesurés par Bailey aux Laboratoires Sandia et publiés en 2007 (configuration “Anchor 1”) et en 2015 (configuration “Anchor 2”).

5.4.1 Transmission et profondeur optique

Le code permet également de calculer des spectres en transmission. La transmission $T(\nu)$ est donnée par

$$T(\nu) = \exp(-\kappa(\nu)\rho L), \quad (5.53)$$

$\kappa(\nu)$ étant l’opacité spectrale (en cm 2 /g), ρ la densité (en g/cm 3) et L l’épaisseur du plasma (en

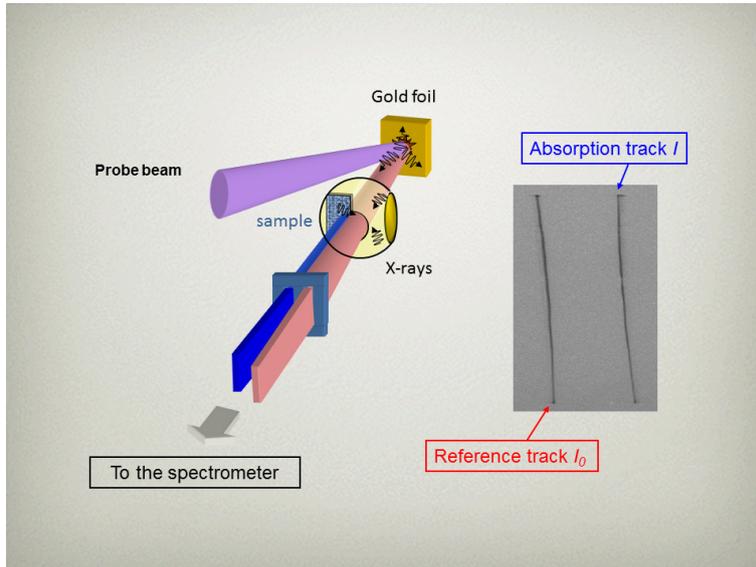


FIGURE 5.12 – Schéma de principe d’une expérience de spectroscopie d’absorption. I est le signal atténué, I_0 le signal de référence, et le rapport I/I_0 donne la transmission $T(h\nu)$ reliée à l’opacité par la loi de Beer-Lambert $T(h\nu) = \exp[-\rho L\kappa(h\nu)]$, où ρ représente la densité de matière et L l’épaisseur de l’échantillon. I et I_0 sont déterminés par une mesure densitométrique sur chacune des traces (horizontal : spatial, vertical : spectral).

cm). Le code permet également le calcul de la profondeur optique :

$$e(\nu) = -\ln \left[\int h_T(\nu - \nu') \exp[-\kappa(\nu') \rho L] d\nu' \right] = -\ln \left[\int h_T(\nu - \nu') T(\nu') d\nu' \right], \quad (5.54)$$

h_T étant la fonction de transfert instrumentale (du spectrographe). Dans notre code, elle est choisie Gaussienne. La largeur instrumentale l_i est généralement de l’ordre de l’eV. h_T est donnée par

$$h_T(\nu) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}l_i} \exp\left(-\frac{\nu^2}{2l_i^2}\right). \quad (5.55)$$

Cette notion est très importante, car dans de nombreuses situations, l’élargissement instrumental des raies l’emporte sur les élargissements statistiques ou physiques. Il peut ainsi arriver que l’on dispose d’un code de calcul très élaboré du point de vue des élargissements physiques des raies, mais que les effets soient absorbés par la largeur instrumentale. L’élargissement par impact électronique est important surtout à haute densité, et l’élargissement par effet Doppler à haute température.

La figure 5.12 représente le schéma de principe d’une expérience de spectroscopie d’absorption. I est le signal atténué, I_0 le signal de référence, et le rapport I/I_0 donne la transmission $T(h\nu)$ reliée à l’opacité par la loi de Beer-Lambert $T(h\nu) = \exp[-\rho L\kappa(h\nu)]$, où ρ représente la densité de matière et L l’épaisseur de l’échantillon.

5.4.2 Transmission de l'aluminium auprès du laser HELEN

L'échantillon est une feuille mince collée sur une cavité en or, dont le chauffage est assuré par la conversion en rayonnement X de l'énergie d'un faisceau laser d'impulsion nano-seconde. Puis, le plasma est radiographié par le rayonnement X émis par une feuille d'or (backlighter), sur laquelle est focalisé un faisceau laser d'impulsion ultra-brève pico-seconde. Le point important dans ces expériences est que le rayonnement sonde X ou XUV est absorbé pendant un temps relativement court par rapport au temps caractéristique d'expansion de la cible, ce qui permet de limiter les variations temporelles de température et densité dans l'échantillon. Des tampons transparents au rayonnement sonde sont accolés des deux côtés de la cible plane permettant de contrôler sa géométrie et de confiner son expansion hydrodynamique. En mesurant l'absorption de ce rayonnement de référence par le plasma chaud, nous pouvons comparer nos mesures aux prédictions des modèles théoriques de plasmas à l'équilibre thermodynamique local (ETL) pour une valeur de la température et une valeur de la densité données. Dans ces mesures, les températures sont typiquement de l'ordre de quelques dizaines d'eV et les densités de matière de 10^{-3} à 10^{-2} g/cm³.

Pour l'expérience de spectroscopie d'absorption sur HELEN (voir figure 5.13), la température du plasma a été estimée à 40 eV et la densité à 0.01 g.cm⁻³ [91]. La transmission expérimentale montre des structures résolues qu'aucun code "statistique" n'est parvenu à reproduire. L'interprétation avec SCO-RCG donne un bien meilleur accord à température de 40 eV si les effets de densité ne sont pas pris en compte, et de 36 eV dans le cas contraire. Les différences observées autour de 1530 eV sont encore incompréhensibles, mais ne peuvent être dus aux effets de gradients (inhomogénéités) ou de variations temporelles de densité et de température dans le plasma.

La figure 5.14 représente la transmission d'un plasma d'aluminium mesurée par l'équipe de K. Eidmann [413]. Le calcul SCO-RCG a dû être moyenné entre 18 et 24 eV pour simuler la présence de gradients (le spectre totale est la somme des spectres à 18, 20, 22 et 24 eV pondérés de 1/4 chacun).

5.4.3 Transmission du cuivre auprès du laser LULI 2000

Ancien schéma

En ce qui concerne les expériences LULI nous nous concentrons principalement sur le tir 31 effectué en 2008 [227] (voir figure 5.15). Le tir 31 correspond à une échantillon de cuivre chauffé à 16 eV et dont la densité est de $5 \cdot 10^{-3}$ g/cm³. La masse surfacique est de 40 μ g.cm⁻².

Même si l'accord obtenu avec SCO est satisfaisant, le rapport entre les sous-structures relativistes $2p_{1/2} \rightarrow 3d_{3/2}$ et $2p_{3/2} \rightarrow 3d_{5/2}$ à 12.8 et 13.1 Å n'est pas reproduit par le modèle complètement statistique. En revanche, SCO-RCG, comme les autres codes détaillés, donne un bon accord avec l'expérience. Il s'agit d'un effet lié à l'interaction Coulombienne entre configurations relativistes. Cependant, un modèle développé récemment par Gilleron et coll. [136] permet d'obtenir le bon rapport entre les sous-structures relativistes.

Nous avons également mesuré récemment des spectres en transmission dans le domaine XUV pour des éléments de Z intermédiaire [321]. Ces expériences sont difficiles, car il faut bien distinguer l'émission parasite des cavités en or du signal du backlighter. Cela implique de disposer d'une bonne résolution temporelle, obtenue grâce à une caméra à balayage de fente.

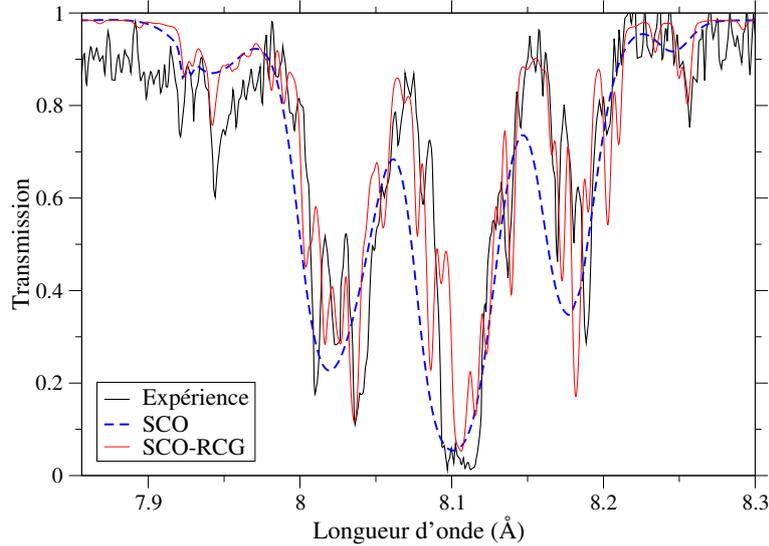


FIGURE 5.13 – Spectre d’aluminium mesuré par Davidson et calculs SCO et SCO-RCG. Transitions $1s - 2p$ et $1s - 3p$.

Nouveau schéma

Le spectre X en transmission (transitions $2p \rightarrow 3d$ du fer a été mesuré au “Laboratoire d’Utilisation des Lasers Intenses” (LULI) auprès de l’installation LULI2000 avec un schéma amélioré (deux cavités de chauffage pour améliorer l’homogénéité de l’échantillon) en attaque indirecte [98] figure 5.16. L’échantillon se trouve entre deux cavités en or chauffées par des faisceaux laser délivrant 300 J à 2ω et d’impulsion nanoseconde. Un troisième faisceau est focalisé sur une feuille en or pour créer une source de rayonnement X (backlighter) utilisée pour sonder l’échantillon. La figure 5.17 montre une interprétation d’un spectre d’un échantillon multi-couches : C (70 nm)/Al (38 nm)/Cu (12 nm)/Al (38 nm)/C (70 nm).

5.4.4 Transmission de fer sur machine Z-pinch

Les machines Z-pinch (machines à striction axiale) constituent une des voies pour le contrôle de la fusion nucléaire, avec le projet ITER de fusion magnétique à Cadarache et le Laser Mégajoule pour la fusion inertielle par laser à Bordeaux. Lors d’une forte décharge électrique dans une cage à fils de tungstène (impulsion de courant de l’ordre de 25 méga-ampères et d’une durée de 100 ns), ces fils se transforment en plasma (voir Fig. 5.18). Les forces de Lorentz entraînent la striction du plasma sur son axe z (d’où la dénomination Z-pinch) jusqu’à une phase de stagnation, où le plasma s’arrête brutalement. L’énergie cinétique du plasma est alors convertie en rayonnement X qui peut être utilisé pour comprimer une capsule contenant le combustible dans le cas d’une expérience dédiée à la fusion, ou pour chauffer et irradier un échantillon et accéder à son opacité dans le cas qui nous intéresse ici.

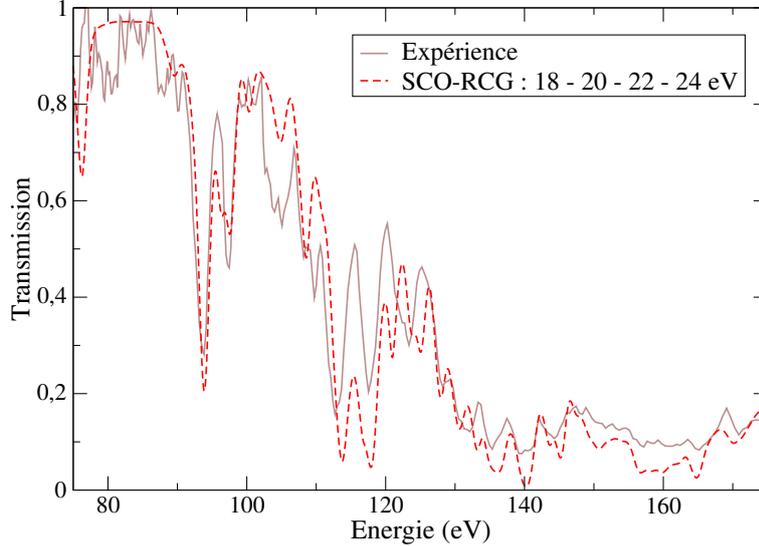


FIGURE 5.14 – Transmission d’un plasma d’aluminium mesurée par l’équipe de K. Eidmann. Le calcul SCO-RCG a dû être moyenné entre 18 et 24 eV pour simuler la présence de gradients.

Du fait de sa contribution importante à l’opacité, le fer a naturellement été choisi pour cette campagne expérimentale. Mélangés à du magnésium (les raies du magnésium sont exploitées pour les diagnostics de température et densité) et tamponnés par des couches d’éléments légers (plastique ou béryllium) pour limiter la détente et conserver une densité élevée et homogène, des échantillons de fer ont pu être portés à des densités électroniques (n_e) et à des températures élevées, grâce à un chauffage radiatif assuré par le rayonnement X intense délivré par le Z-pinch. Les échantillons de fer/magnésium sont chauffés pendant 10 ns pendant la phase de compression et radiographiés pendant 3 ns par le rayonnement du pinch à la stagnation (5.18). Le rayonnement “planckien” impose l’ETL aux populations.

En 2007, Bailey et coll. ont effectué des mesures de l’opacité du fer à $T=156$ eV et $n_e=6.9 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ dans la gamme spectrale $h\nu \approx 800\text{-}1800$ eV [22]. Seuls les codes fondés sur des calculs de structure fine permettent d’obtenir un bon accord avec le spectre expérimental (voir *e.g.* PrismSPECT [230]). La figure 5.19 représente la comparaison avec SCO-RCG). Le meilleur accord avec SCO-RCG est obtenu pour $T=150$ eV et $\rho=58 \text{ mg.cm}^{-3}$. Les structures autour de 12.4 \AA n’ont été reproduites par aucun des codes sollicités et l’étude des spectres par degré de charge montrent que les écarts ne sont pas imputables à la distribution ionique.

5.4.5 L’expérience énigmatique relative à l’opacité du fer

La récente réévaluation des abondances de C, N et O dans le mélange solaire a accru le désaccord entre les mesures héliosismiques et les prédictions du Modèle Solaire Standard (Standard Solar Model). Afin de réconcilier les observations et les prédictions théoriques, une solution serait d’augmenter l’opacité de 5 à 20 %.

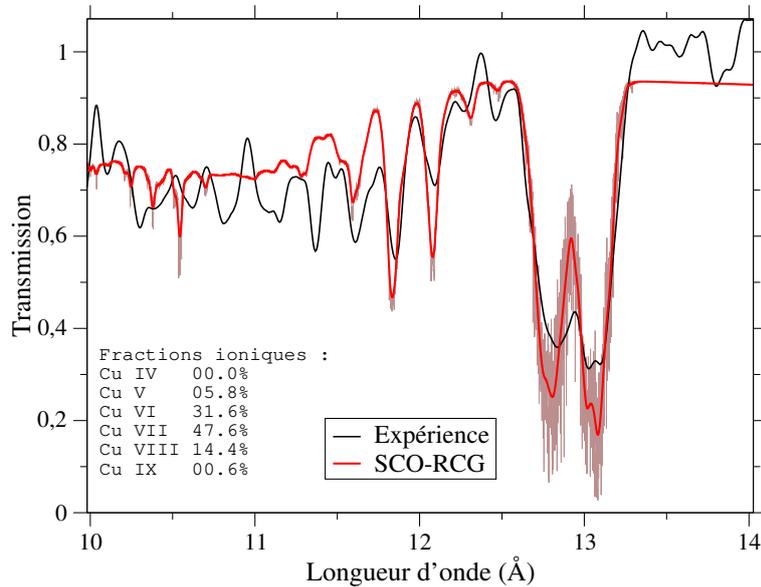


FIGURE 5.15 – Spectre de transmission du cuivre obtenu au cours du tir 31 [227] et spectre théorique obtenu à l’aide du code SCO-RCG. Le spectre détaillé (en brun) représente le calcul SCO-RCG avant prise en compte de la largeur instrumentale par convolution.

Cela a incité J. Bailey et coll. à mesurer l’opacité du fer dans des conditions plus proches de celles de la base de la zone convective du Soleil (température proche de 190 eV et densité proche de 0.2 g/cm³) [24]. Ils ont observé un désaccord très important entre la mesure et les calculs (voir figures 5.20, 5.21 et 5.22). Ce désaccord a suscité de nombreux efforts de la part des théoriciens.

Depuis, les théoriciens tentent de comprendre ce qui peut manquer dans les calculs. Un certain nombre de points étranges ont été soulevés, comme le fait que pour les faibles longueurs d’onde, dans une gamme où l’absorption est dominée par le continuum, l’opacité est plus élevée que celle de matériau à température ambiante (voir figure 5.23).

Recemment, Nahar et Pradhan ont publié des calculs intensifs R-matrix d’une complexité sans précédent pour l’ion Fe XVII et ont trouvé une augmentation importante de leur section efficace de photo-ionisation accompagnée de résonances PEC (photo-excitation-of-core) [262]. Cela dit [59], leurs sections efficaces étaient déjà beaucoup plus faibles que celles des autres codes (utilisant pour la plupart l’approche Distorted Wave). Les nouveaux développements n’ont fait que les ramener (à peine) au niveau des autres codes, et n’explique en aucun cas le désaccord avec l’expérience (voir figure 5.24 et table 5.5).

Nous avons travaillé sur la prise en compte des états très excités, dans l’espoir que leur contribution comble des creux dans le spectre (voir paragraphe 5.4.3), mais cela n’explique en rien le désaccord.

Afin de progresser dans la compréhension de ce désaccord, les auteurs ont également mesuré la transmission du chrome ($Z=24$) et du nickel ($Z=28$) dans les mêmes conditions (configuration

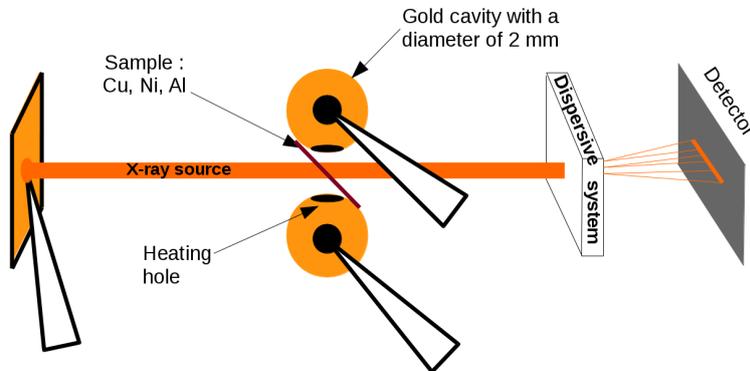


FIGURE 5.16 – Schéma à double cavité (nouvelle configuration expérimentale) [98].

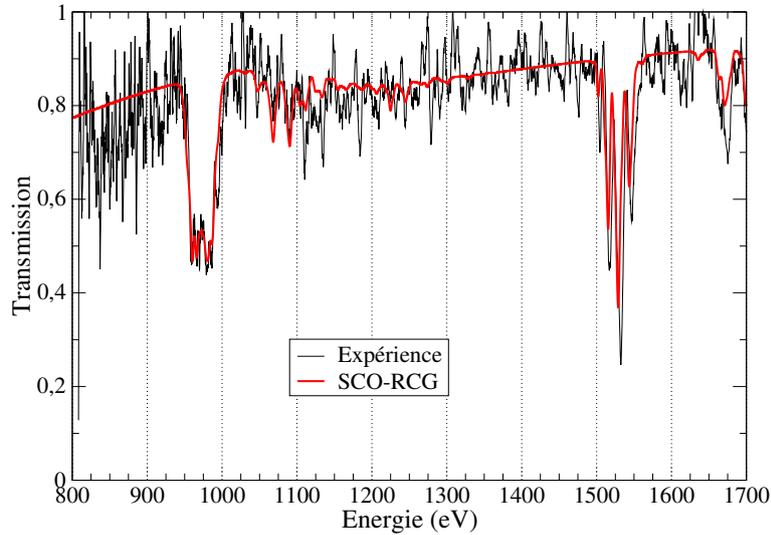


FIGURE 5.17 – Structures d'absorption correspondant à des transitions $2p \rightarrow nd$, $n = 3, 4 \dots$ du cuivre (autour de 975 eV, 1075 eV, ...) et $1s \rightarrow np$, $n = 2, 3, \dots$ (autour de 1530 eV, 1675 eV, ...) mesurées par Dozières et coll. après de l'installation LULI2000 [98]. Comparaison entre le spectre expérimental et notre calcul SCO-RCG à $T = 27$ eV et $\rho = 0.01$ g/cm³. La masse surfacique du cuivre est égale à 15 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ et celle de l'aluminium à 14 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$.

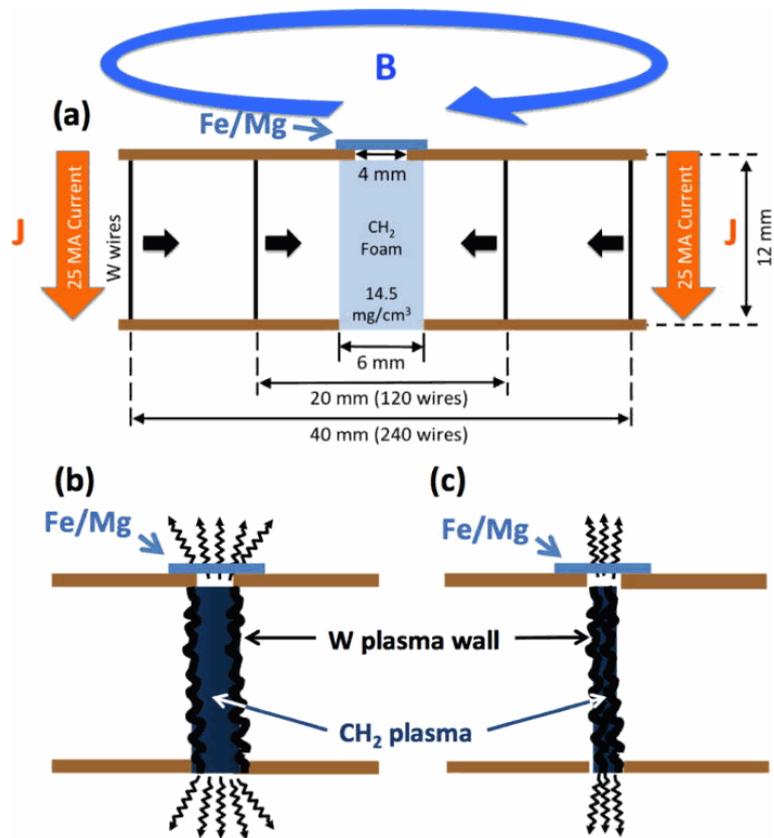


FIGURE 5.18 – Principe de fonctionnement du Z-pinch de SNL.

expérimentale dite “Anchor 2”). Les résultats sont surprenants : l’accord théorie est relativement bon pour le nickel, mais pas vraiment pour le chrome. On pourrait être tenté de relier cela à la structure électronique des éléments (en particulier à la population de la couche L) ; pour Ni, elle est complète, pour Fe, elle présente une lacune, et pour Cr, elle présente trois lacunes. Malheureusement, les choses ne sont pas si simples, car le désaccord théorie-expérience dans le cas du chrome n’est pas aussi prononcé que dans le cas du fer...

5.4.6 Contribution de l’absorption multi-photonique à l’opacité

L’expérience des laboratoires Sandia a maintenant été répétée à plusieurs reprises. L’examen des données expérimentales révèle un écart persistant pour les cibles de Fe à haute température (autour de 180 eV). Les expériences sur d’autres matériaux (Ni, Cr) montrent des divergences moins importantes [260] mais peuvent aussi être en désaccord avec certains modèles d’opacité dans la gamme spectrale considérée. Hormis pour la diffusion élastique des rayons X, les codes d’opacité habituels omettent les processus à deux photons. Si les sections efficaces à deux photons sont suffisamment grandes, elles peuvent expliquer en partie les résultats expérimentaux de Sandia et conduire à une meilleure estimation de l’opacité dans les conditions des intérieures

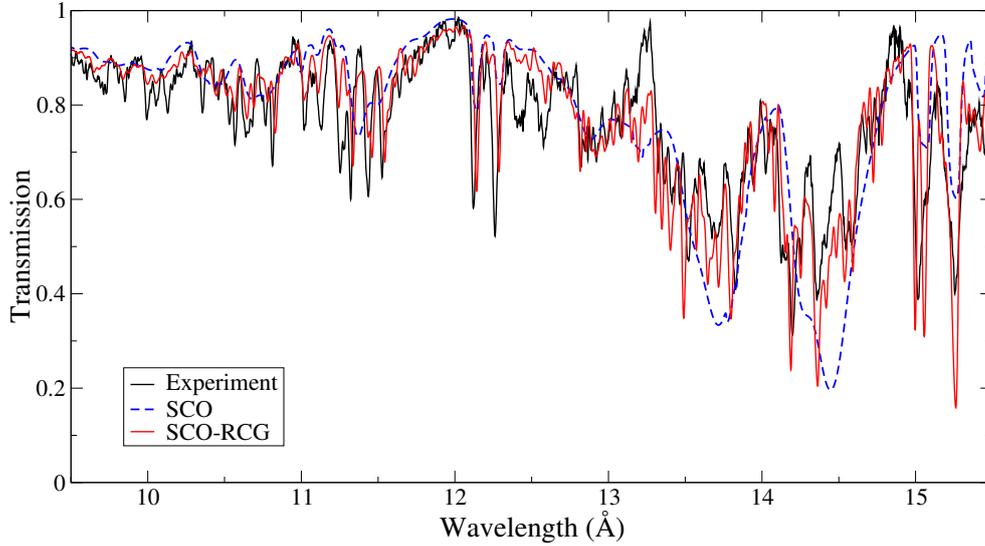


FIGURE 5.19 – Spectre de fer obtenu par Bailey et calculs SCO et SCO-RCG.

stellaires à haute température, ce qui devrait avoir des conséquences importantes pour la diffusion microscopique (accélération radiative). Un phénomène en particulier pourrait être affecté : l’effet dit de “saturation”. Lorsque la densité de matière augmente, le nombre d’ions par unité de volume augmentant, le nombre de photons disponibles susceptibles de produire l’accélération diminue. L’utilisation de lois d’échelle fondées sur l’approximation hydrogénoïde suggèrent que les processus à deux photons sont d’autant plus importants que la température est élevée et que les ions possèdent beaucoup d’électrons liés.

La théorie des processus à deux photons s’est développée aux débuts de la mécanique quantique avec la recherche de Maria Goeppert-Mayer [150, 151]. En 1939, Breit et Teller ont appliqué la théorie des perturbations au second ordre pour calculer l’émission à deux photons à partir

Source	κ_R Relative to Experiment
OP [359, 360]	0.51
R-matrix [261, 262]	0.60
ATOMIC [77, 119]	0.70
OPAS [58, 223, 252]	0.64
SCO-RCG [294]	0.77
SCRAM [306]	0.62
TOPAZ [175, 176]	0.75
Cold [165]	0.59

TABLE 5.5 – Opacité moyenne de Rosseland calculée par différents codes d’opacité et ramenée à la mesure.

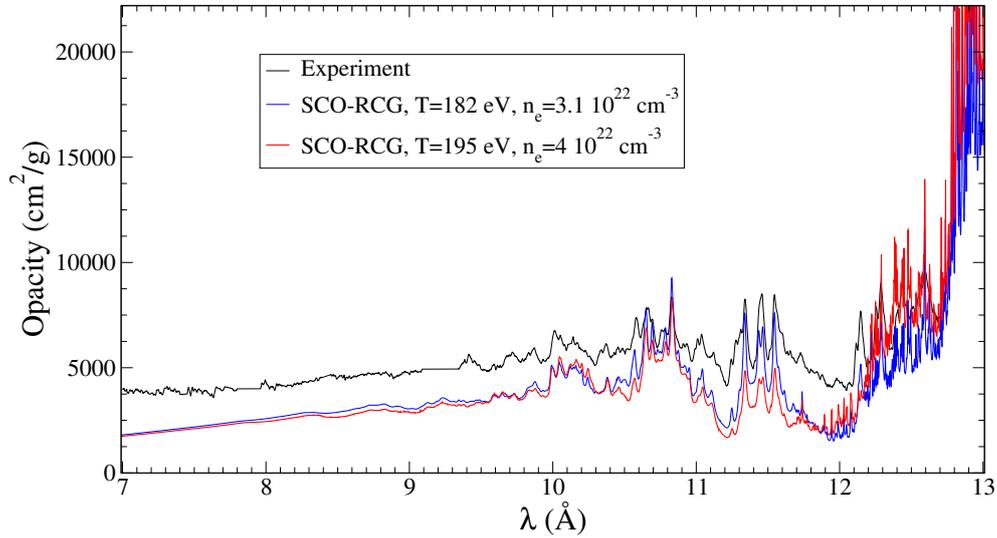


FIGURE 5.20 – Opacité déduite de l’expérience de SNL dans les conditions “Anchor 2” (hautes température et densité) comparée à deux calculs SCO-RCG à $T=182$ eV et $n_e=3.1 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ (courbe bleue) et à $T=195$ eV et $n_e=4 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ (courbe rouge).

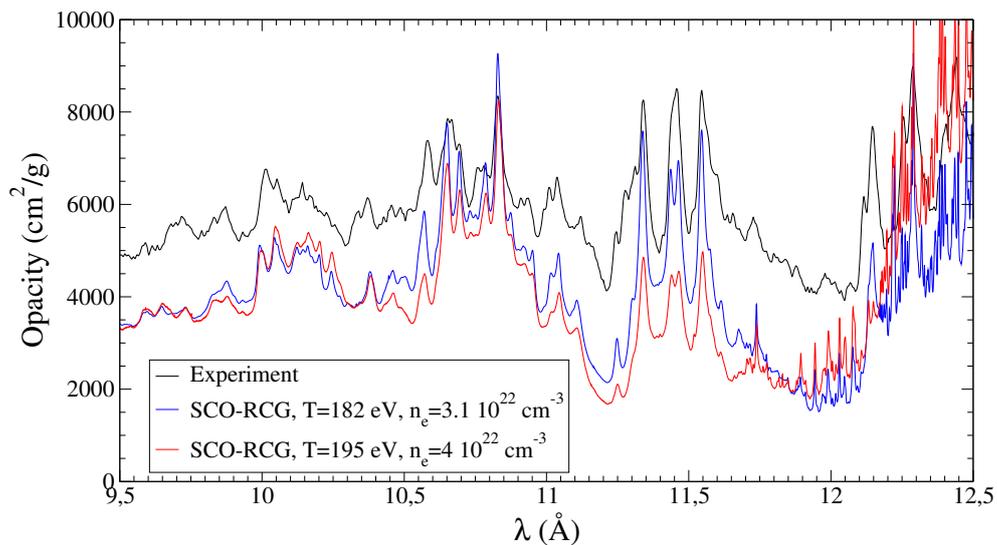


FIGURE 5.21 – Zoom de la figure précédente entre 9.5 et 12.5 Å.

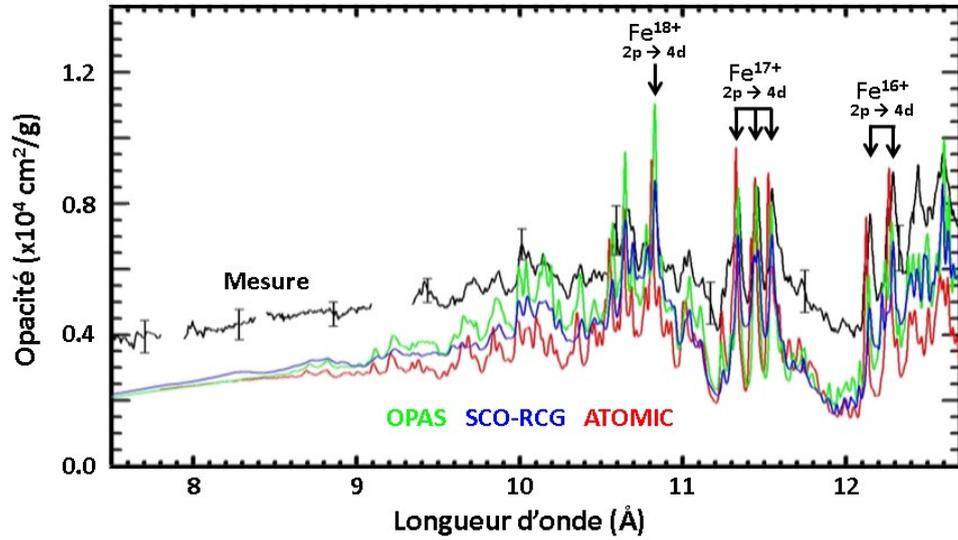


FIGURE 5.22 – Opacité déduite de l’expérience de SNL dans les conditions “Anchor 2” comprise à des calculs ATOMIC [77, 119], OPAS [58] et SCO-RCG [294] à $T=182$ eV et $n_e = 3.1 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$.

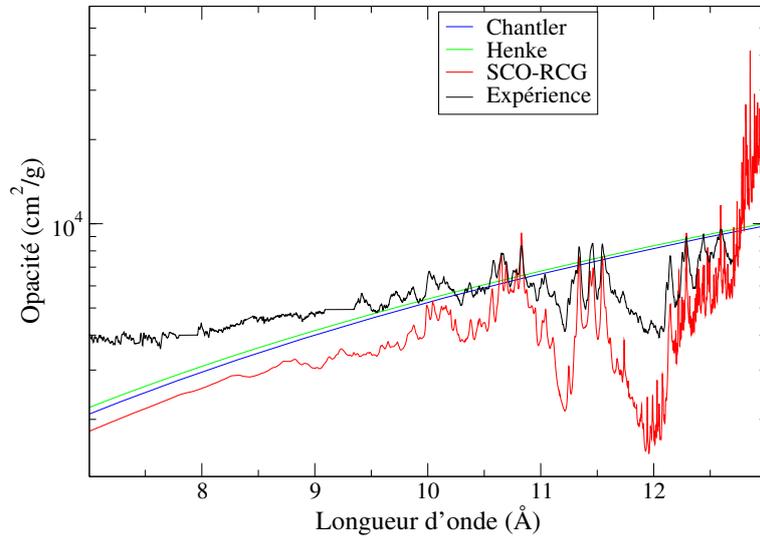


FIGURE 5.23 – Comparaison entre les opacités froides publiées par Henke et coll. [165] et Chantler [75] et le spectre expérimental [24]. L’opacité SCO-RCG à $T = 182$ eV et $n_e = 3.1 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ est également représentée.

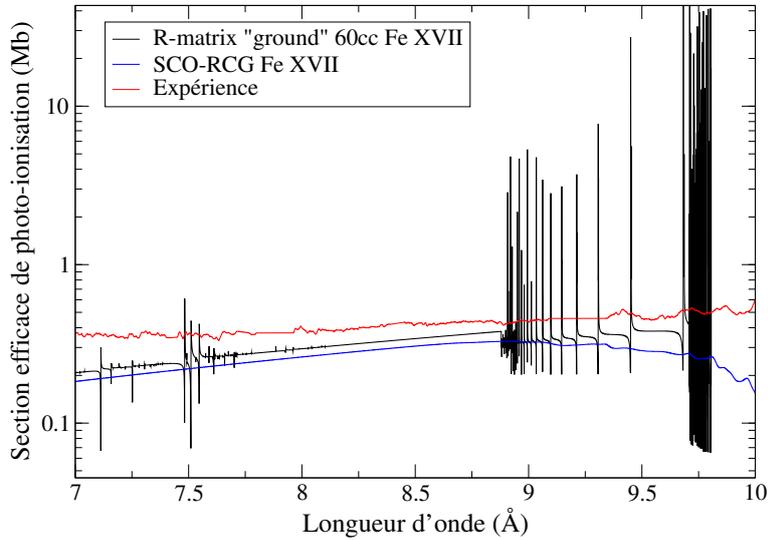


FIGURE 5.24 – Comparaison entre le calcul SCO-RCG (distorted-wave) en bleu et la section efficace R-matrix de photo-ionisation [262] (courbe noire) [59]. Le spectre expérimental est également représenté (courbe rouge). Les résonances dans la courbe noire (PEC : photo-excitation of core) sont la signature de transitions vers un état couplé au continuum (elles sont aussi appelées résonances d’auto-ionisation de Beutler-Fano [86]).

de l’état métastable $2s$ de l’hydrogène [68]. Leur formule pour le taux d’émission à deux photons a été vérifiée à environ 1% dans des expériences de spectroscopie effectuées sur de grands accélérateurs [236]. Au cours de ces expériences, il a été constaté que d’autres processus sont susceptibles de contribuer à la désintégration des états excités métastables. L’absorption multiphotonique et les effets Raman s’observent facilement avec une lumière visible intense (lasers optiques), et sont au cœur d’une branche de la physique du laser aujourd’hui appelée optique non linéaire. Les effets optiques non linéaires ont de nombreuses applications décrites dans les manuels de Shen [363] et New [266]. On peut s’attendre à des phénomènes non linéaires similaires pour les rayons X à haute intensité. Des processus d’absorption à deux photons et de diffusion Raman sont susceptibles d’être observés lors d’expériences mettant en œuvre les lasers à électrons libres nouvellement développés. C’est probablement la complexité de la théorie qui a dissuadé les chercheurs d’inclure les processus à deux photons dans codes de calcul d’opacité. Le comportement singulier des éléments de matrice dipolaires [211, 212, 231, 398] est problématique, et il est nécessaire d’inclure de nombreux processus d’absorption pour obtenir ne serait-ce qu’une estimation de l’effet sur l’opacité. Les processus à deux photons comprennent l’effet Raman bien connu dans lequel un photon est absorbé et un autre (d’une fréquence différente) est émis. L’opacité Raman aux rayons X est également généralement omise des calculs d’opacité des plasmas chauds, à l’origine des tables utilisées en astrophysique. Il existe également une difficulté liée au spectre d’énergie des états excités ; l’utilisation d’un simple modèle d’atome moyen donne des différences d’énergie irréalistes, ce qui conduit à une dépendance exagérée des sections efficaces à deux photons en fonction de la fréquence.

Contrairement à la situation des processus à un photon, l’absorption à deux photons est un processus continu dans tous les cas. Cela a déjà une conséquence pratique importante : les

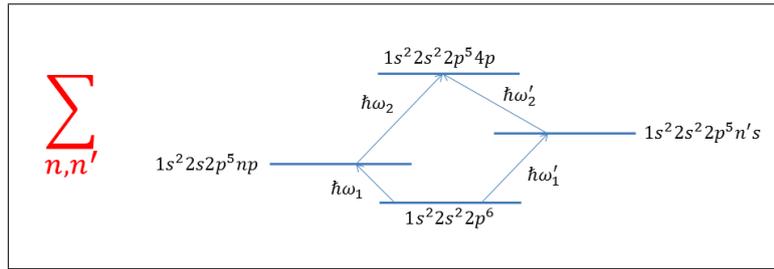


FIGURE 5.25 – Exemple de processus à deux photons. Les configurations initiale et finale sont connectées par deux familles de canaux, caractérisés par les états intermédiaires $1s^2 2s^2 2p^5 nd$ et $1s^2 2s^2 2p^5 n's$. Les sommes portent sur les nombres quantiques principaux n (pour le premier groupe) et n' (pour le second groupe).

processus à deux photons peuvent combler les creux entre les raies spectrales où ils ne sont en compétition qu'avec les processus de Bremsstrahlung inverse et de diffusion Compton dont la contribution à l'opacité est faible.

Plusieurs chercheurs ont tenté d'estimer l'importance des processus à deux photons en supposant que deux des photons identiques sont absorbés [214, 298] (“one-color” two-photon absorption). Si les deux photons sont identiques, alors ils ont exactement la moitié de l'énergie d'excitation et cela ne se produit que par accident. Nos calculs montrent que ce cas donne lieu à une petite section efficace, pouvant être jusqu'à six ordres de grandeur plus faible que les processus impliquant deux photons d'énergies différentes (two-color absorption). L'absorption à une couleur pourrait s'avérer utile pour des expériences futures sur le laser X avec des rayons X monochromatiques très collimatés, si l'étalement du faisceau laser peut être négligé.

Nous avons notamment étudié l'absorption à deux photons (voir figure 5.25) en résolvant l'équation de Schrödinger dépendant du temps (code AC-Stark, AC pour Alternative Current) [256], en introduisant des paquets d'onde Gaussiens pour les impulsions de rayons X. Le code AC-Stark requiert un million de pas de temps par section efficace. Les temps de calcul sont prohibitifs pour calculer des opacités mais peut servir de référence pour tester les calculs fondés sur la théorie des perturbations. La principale limitation du code AC-Stark est l'absence de couplage avec le continuum : les états du continuum ne sont pas inclus, ni comme états finals, ni comme états intermédiaires. Le bon accord obtenu dans les conditions que nous avons testées nous a conforté sur la qualité et la prédictibilité de l'approche perturbative.

Nous avons travaillé sur les singularités des éléments matriciels dipolaires libre-libre, qui interviennent dans la section efficace de photo-ionisation à deux photons, dans le cas où l'état intermédiaire est dans le continuum. On a alors en effet besoin de deux éléments de matrice : un élément lié-libre (état initial vers état intermédiaire) et un élément de matrice libre-libre (état intermédiaire vers état final), et le calcul de ce dernier nécessite un soin particulier [131, 256, 398].

Chapitre 6

Contribution à l'étude des profils de raie

6.1 Le code ZEST (Zeeman- Stark)

Les profils de raie sont des ingrédients clés des codes d'opacité et d'émissivité, car ils servent souvent de diagnostics de plasmas astrophysique ou de laboratoire. En effet, les profils contiennent des informations sur les champs électriques locaux produits par des perturbateurs électroniques et ioniques (conduisant à la levée de dégénérescence Stark), sur l'environnement magnétisé (effet Zeeman), sur les variables macroscopiques du plasma (densité et température), sur les phénomènes collectifs, *etc.*. Quand on considère le transfert radiatif dans des plasmas optiquement épais, il est bien connu que les opacités moyennes de Rosseland sont sensibles aux profils des raies, en particulier en raison des ailes de ces fonctions [177]. Plus généralement, il existe un lien étroit entre profils de raie, transfert radiatif et populations atomiques décrivant les états microscopiques du plasma [143]. Une telle relation est illustrée par exemple par le formalisme des facteurs d'échappement [182], qui est souvent utilisé dans les modèles collisionnels-radiatifs de plasmas hors ETL. L'idée est de prendre en compte l'effet de l'opacité sur la population des états. En s'appuyant sur le fait que les photons dans les ailes de raies peuvent s'échapper du plasma plus facilement que les photons proches du centre des raies, des facteurs de réduction effectifs sont introduits dans le calcul des transitions radiatives, et sont ensuite utilisés dans les équations cinétiques pour obtenir la population des états. Ces facteurs d'échappement dépendent étroitement des profils de forme de raie I_ν , avec des intégrales du type

$$\int d\nu I_\nu \exp\left(-\tau_0 \frac{I_\nu}{I_0}\right), \quad (6.1)$$

où τ_0 est la profondeur optique au centre de la raie. Il est bien souvent important d'inclure l'élargissement Stark dans le calcul de ces facteurs, bien que ce ne soit pas une tâche facile [233]. Le calcul des profils de raie élargies simultanément par effets Zeeman et Stark est un sujet ancien et complexe [26, 157], mais toujours d'actualité [112, 373, 374]. Une description correcte des processus physiques d'élargissement [372] requiert un traitement simultané des effets Stark et Zeeman, ce qui a été effectué par Ferri et coll. [111] dans le contexte du modèle de "fluctuation de fréquence" (FFM : Frequency Fluctuation Model [70]). Le code ZEST (nom abrégé de ZEeman-STark) a été développé récemment pour servir de référence à d'éventuels modèles simplifiés et

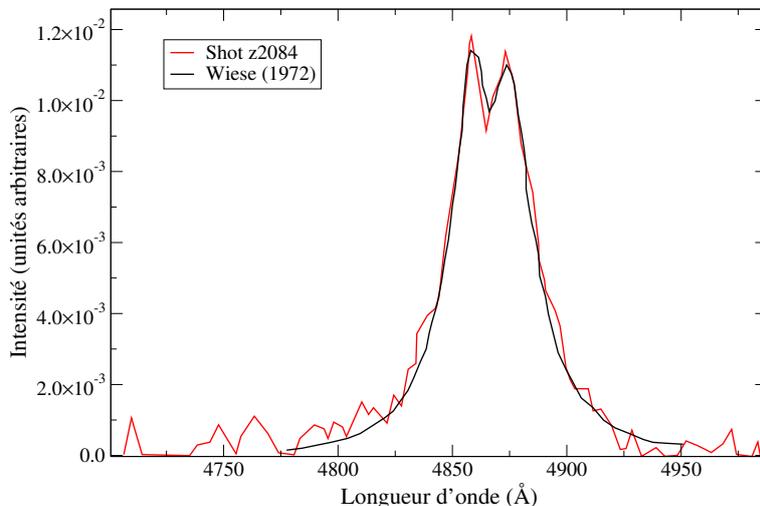


FIGURE 6.1 – Comparaison entre le profil H_β mesuré par Wiese à $T = 1.15$ eV et $n_e = 8.3 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ et le résultat expérimental obtenu à SNL à $n_e = 5.76 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ et une densité de protons $n_H = 1.55 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ (Tir z2084).

	κ_P (cm ² /g)	κ_R (cm ² /g)
Avec Stark ionique	1685	273.5
Sans Stark ionique	1719	285.3

TABLE 6.1 – Opacités moyennes de Planck et Rosseland d’un plasma d’oxygène à $T=192.91$ eV et $n_e=10^{23} \text{ cm}^{-3}$.

disposer d’un outil de spectroscopie pour le diagnostic de température et densité électroniques, en l’associant à nos codes de physique atomique des plasmas ETL [296] ou hors ETL [140]. Le code a été présenté et utilisé pour la première fois au quatrième atelier de comparaison des codes de profils de raie dans les plasmas, qui s’est tenu du 20 au 24 mars 2017 à Baden en Autriche. Le code est basé sur la théorie standard : les ions sont quasi statiques pendant la durée du processus d’émission, alors que les électrons sont traités dans le cadre d’une théorie de relaxation de collision binaire. Cette simplification permet d’effectuer des calculs très rapides, tout en gardant une précision raisonnable. Une description générale du modèle se trouve dans la référence [142], dans laquelle nous donnons des détails sur les différentes hypothèses retenues pour la fonction d’auto-corrélation dipolaire, l’opérateur d’élargissement, la mise en œuvre de l’effet Zeeman, le calcul de la distribution des micro-champs statiques ioniques et le traitement des effets de la dynamique des ions à l’aide du modèle rapide de fluctuation de fréquence (FFM pour Frequency Fluctuation Model) [70].

La cosmochronologie permet de connaître l’histoire de la formation des étoiles dans notre galaxie. Elle s’appuie notamment sur l’âge des naines blanches les plus froides, à travers la mesure relative des profils des raies H_β , H_γ et H_δ dans les conditions photosphériques et atmosphériques des naines blanches (voir figures 6.2 et 6.1).

Le code ZEST nous sert de référence pour développer des modèles simplifiés d’effet Stark

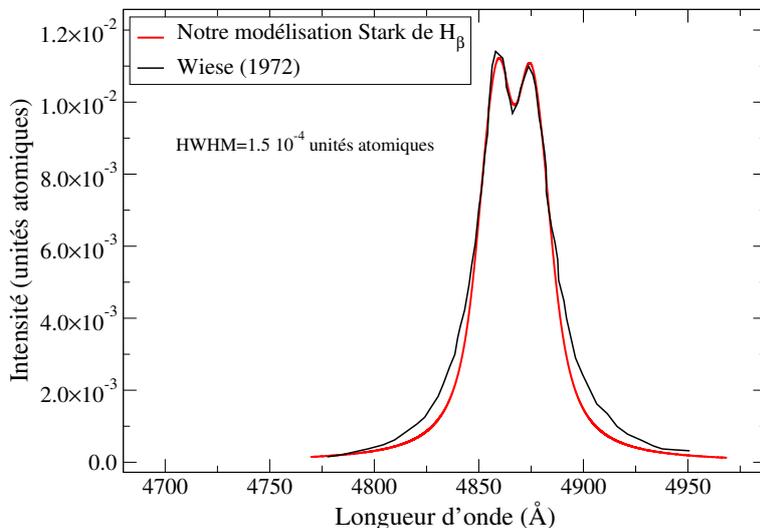


FIGURE 6.2 – Calcul avec notre code de profil de raie (le champ électrique est choisi égal à $2 \cdot 10^{-5}$ unités atomiques et le profil est convolué avec une Lorentzienne de $\text{HWHM} = 1.5 \cdot 10^{-4}$ unités atomiques. Le spectre de Wiese est également présenté.

destinés à être utilisés dans le code d’opacité SCO-RCG (voir figure 6.1).

6.2 Modélisation statistique de l’effet Stark

Bien que l’atome d’hydrogène isolé soit un système atomique assez simple, bien compris en mécanique quantique, les complications surviennent lorsque l’on considère les interactions avec les perturbateurs chargés environnants du plasma (électrons et ions). On doit traiter un problème dynamique à plusieurs corps qui ne peut pas être facilement résolu [26]. Des simulations d’élargissement de raies, basées sur la dynamique moléculaire, sont impossibles si le système est trop dégénéré (la limite $n \leq 20$ pour l’hydrogène est donnée dans la référence [371]). Une simplification est la “théorie standard” des profils de raie [157], dans laquelle les ions sont supposés être quasi-statiques lors de l’émission, alors que les électrons sont traités à l’approximation des impacts. Les interactions entre émetteurs et perturbateurs peuvent ensuite être estimées de manière classique, hypothèse donnant une approche quasi-analytique des formes de raies basée sur la connaissance des états de radiateur pour chaque intensité de champ statique. En principe, les états propres d’un atome d’hydrogène dans un champ électrique statique et uniforme peuvent être obtenus analytiquement si nous négligeons tout écart par rapport à l’effet Stark linéaire, en utilisant des fonctions d’onde et des éléments de matrice exprimés en coordonnées paraboliques [54, 166]. Cependant, des résultats plus précis (tenant compte de la structure fine, des effets multipolaires, etc.) nécessitent de résoudre numériquement l’équation de Schrödinger. Le coût numérique peut augmenter considérablement lorsqu’on considère les transitions radiatives des états de Rydberg très dégénérés et il devient difficile de coupler des calculs de profils de raie avec des simulations de transfert radiatif (pour les plasmas optiquement épais) et avec des effets hors ETL sur les populations des état [248]. L’approche statistique est une technique puissante qui permet de simplifier de tels problèmes complexes en caractérisant les

nombreux niveaux ou lignes par une seule distribution continue avec un nombre réduit de paramètres fixés par la connaissance exacte des moments. Habituellement, les premiers moments de la distribution (centre de gravité, variance, asymétrie et kurtosis) suffisent pour capturer la forme de la distribution. Par exemple, des techniques statistiques peuvent être utilisées pour estimer la largeur de raie moyenne dans le régime d'impact [134, 156, 377, 405], pour mesurer l'effet d'un champ magnétique externe [73] ou pour évaluer la durée de vie des atomes de Rydberg [167, 226]. Dans des études récentes [371, 373], une approche analytique simple a été suggérée pour la modélisation des transitions de l'hydrogène en présence d'effet Stark, basée sur l'approximation quasi-contiguë (QC pour Quasi-Contiguous). Pour une valeur donnée de l'intensité du champ ionique statique, cette méthode exploite le fait que le spectre de la transition $n \rightarrow n'$ avec $\Delta n \gg 1$ présente approximativement une forme rectangulaire si l'élargissement homogène (Doppler ou collisions) suffit à fusionner les raies. Cette approche statistique permet de grandes simplifications dans un calcul de profil de raie réaliste comprenant la moyenne sur la distribution quasi statique de microchamp et les effets dynamiques [375]. De plus, le modèle est assez simple et rapide pour être couplé à des simulations de transfert radiatif et à des calculs hors ETL.

Nous avons étendu l'approche de QC en dérivant une distribution de raies au-delà de la forme rectangulaire, de manière à pouvoir modéliser n'importe quelle transition $n \rightarrow n'$ (non limitée à $n \gg 1$) avec plus de détails spectraux (permettant des creux dans le centre du profil, par exemple). Cette distribution continue dépendante de la fréquence peut être construite en calculant exactement les moments des énergies de raies pondérées par leur force. Bien que les moments puissent être évalués dans une base d'états atomiques arbitraire en utilisant des techniques de seconde quantification, la dérivation est plus facile en utilisant les coordonnées paraboliques, si on ne considère que l'effet Stark linéaire. En utilisant la théorie des perturbations pour l'énergie des composantes Stark et les formules analytiques de Gordon [153] pour leurs intensités, il est possible de déduire les moments de toute transition $n \rightarrow n'$ sous une forme compacte. Nous avons appliqué cette méthode à la détermination des moments des séries de Lyman (voir table 6.2) et Balmer (voir table 6.3). Les moments sont ensuite utilisés dans un développement de Gram-Charlier pour la modélisation du profil de raie. La résolution du spectre est contrôlée par l'ordre de troncature de la série et donc par le nombre de moments inclus dans la distribution. Avec un changement de variable approprié, nous avons montré également que le profil de raie peut être représenté par des fonctions universelles de n et n' , indépendantes du numéro atomique et de l'intensité du champ (voir figure 6.3). Cette propriété permet des calculs d'élargissement Stark rapides et quasi-statiques dans lesquels le profil de raie est moyenné sur une distribution de micro-champs électrique statique.

6.2.1 Série de Lyman

Les moments centrés réduits s'écrivent, pour la série de Lyman :

$$\alpha_p = \left(\frac{12}{n^2 - 3} \right)^{\frac{p}{2}} \frac{(1 + (-1)^p)}{n(n^2 - 1)} \left(n^2 \frac{B_{p+1}(\frac{n}{2})}{p+1} - 4 \frac{B_{p+3}(\frac{n}{2})}{p+3} - 4 \frac{B_{p+3}(\frac{1-n}{2})}{p+3} \right), \quad (6.2)$$

$B_p(x)$ étant le polynôme de Bernoulli d'ordre p .

Ordre	Moment centré
2	$\frac{1}{3}n^2 (n^2 - 3) (\gamma F)^2$
4	$\frac{1}{15}n^4 (3n^4 - 22n^2 + 45) (\gamma F)^4$
6	$\frac{1}{21}n^6 (3n^6 - 39n^4 + 199n^2 - 357) (\gamma F)^6$
8	$\frac{1}{45}n^8 (5n^8 - 100n^6 + 914n^4 - 4116n^2 + 6975) (\gamma F)^8$
10	$\frac{1}{33}n^{10} (3n^{10} - 85n^8 + 1202n^6 - 9754n^4 + 41561n^2 - 68409) (\gamma F)^{10}$

TABLE 6.2 – Premiers moments centrés d'ordre pair de la série de Lyman. Notation : $\gamma = \frac{3}{2Z}$.

ordre	moment centré
2	$\frac{1}{3} (n^4 - 9n^2 + 12) (\gamma F)^2$
4	$\frac{(15n^{10} - 302n^8 + 2027n^6 - 4780n^4 + 4080n^2 - 960)}{15(5n^2 - 4)} (\gamma F)^4$
6	$\frac{(45n^{16} - 1491n^{14} + 19851n^{12} - 128009n^{10} + 403268n^8 - 639072n^6 + 500864n^4 - 177408n^2 + 21504)}{21(3n^2 - 4)(5n^2 - 4)} (\gamma F)^6$

TABLE 6.3 – Premiers moments centrés d'ordre pair de la série de Balmer. Notation : $\gamma = \frac{3}{2Z}$.

6.2.2 Série de Balmer ($n \rightarrow 2$)

Les moments centrés réduits s'écrivent, pour la série de Balmer et à la limite des grandes valeurs de n :

$$\alpha_p \approx \frac{(\sqrt{3})^p 2^{p+1} (1 + (-1)^p)}{15n^{p+5}} \left(S_p + \frac{1}{2} n^{-2} T_p \right) \approx \frac{(\sqrt{3})^p (1 + (-1)^p)}{2(p+1)},$$

avec

$$S_p = (-5n^4 + 12n^2 - 8)f_{p+1} + 16n^2 (3f_{p+3} + 2g_{p+3}) - 128 (f_{p+5} + g_{p+5}) \quad (6.3)$$

et

$$T_k \text{ pair} = -n^6 f_{k+1} + 4n^2 (n^2 - 4)^2 g_{k+1} + 16(n^4 + 8n^2 - 16)f_{k+3} + 16(n^2 + 4)(3n^2 - 4)g_{k+3} - 256n^2 (f_{k+5} + g_{k+5}) \quad (6.4)$$

avec la notation $f_k = \frac{1}{k} B_k \left(\frac{1-n}{2} \right)$ et $g_k = \frac{1}{k} B_k \left(\frac{n}{2} \right)$.

6.3 Modélisation statistique de l'effet Zeeman

En astrophysique, l'observation de la séparation de raies spectrales dans les domaines visible et UV pour quelques naines blanches [18] a confirmé l'existence de champs magnétiques intenses (0.1 - 10⁴ MG, où 1 G vaut 10⁻⁴ teslas) prédits par Blackett [25]. L'influence d'un champ magnétique sur un atome modifie ses raies d'émission et d'absorption. Grâce à cette propriété, connue sous le nom d'effet Zeeman, la détection de champs magnétiques est possible à grandes distances, à travers la mesure du rayonnement. Les effets Zeeman linéaire et quadratique expliquent la séparation des raies spectrales et permettent de déterminer la valeur du

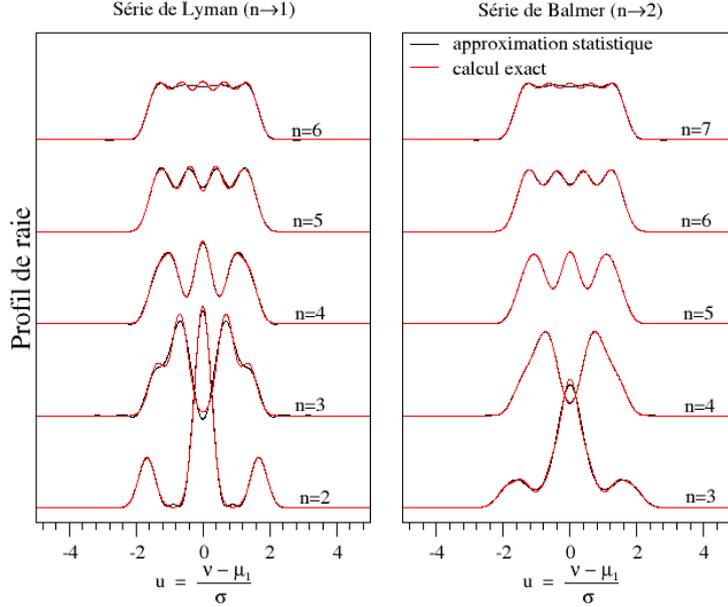


FIGURE 6.3 – Spectres en émission (transition $n \rightarrow n'$) d'un système atomique à un électron lié, de numéro atomique Z , placé dans un champ électrique constant d'intensité F . On note que les distributions statistiques (courbes noires), modélisées à partir des moments calculés analytiquement pour les séries de Lyman ($n'=1$, à gauche) et de Balmer ($n'=2$, à droite), sont en bon accord avec les calculs exacts raie par raie (courbes rouges). En tenant compte d'une loi d'échelle, les fréquences de photons ν sont centrées et adimensionnées avec $\mu_1 = \frac{Z^2}{n'^2} - \frac{Z^2}{n^2}$ et $\sigma = \frac{3F^2}{4Z^2} \left[(n^2 - n'^2)^2 - n^2 - n'^2 \right]$.

champ magnétique. De la même manière, des pulsars des étoiles à neutrons ayant des champs magnétiques encore plus intenses ($10^5 - 10^8$ MG) ont été découverts grâce à leur spectre dans le domaine des radio-fréquences et des rayons X. Les applications astrophysiques sont nombreuses, qu'elles soient directes ou indirectes, et nécessitent parfois une modélisation théorique sophistiquée. Les méthodes diffèrent selon la nature des objets étudiés (voir table 6.5), l'intensité et la géométrie des champs magnétiques, et la qualité de l'observation en terme de sensibilité et de résolution spatiale. De plus, les variations du champ magnétique des étoiles pendant leur rotation apportent des informations quant à leur géométrie globale. Les méthodes "spectropolarimétriques" exploitent l'enregistrement supplémentaire de la polarisation circulaire avec la longueur d'onde. Cela permet d'obtenir une cartographie détaillée du champ [353] à travers une séparation de ses composantes parallèle ou perpendiculaire à la ligne de visée.

On rencontre également de forts champs magnétiques, par exemple, en fusion magnéto-inertielle [225]. Appliquer un champ magnétique dans des capsules de fusion par confinement inertiel avant la compression [202] présente l'avantage de supprimer les pertes par conduction thermique électronique et de mieux contrôler le dépôt d'énergie par les particules α . Les champs

magnétiques générés dans une cavité peuvent atteindre quelques MG.

Le Hamiltonien Zeeman s'écrit :

$$\hat{H}_Z = \mu_B B (\hat{L}_z + g_s \hat{S}_z), \quad (6.5)$$

où B est l'intensité du champ magnétique le long de l'axe z $\vec{B} = B \vec{u}_z$, μ_B le magnéton de Bohr, $g_s = 2.0023192$ est le rapport gyromagnétique anormal pour le spin de l'électron, et \hat{L}_z et \hat{S}_z respectivement les projections des moments cinétiques orbital et de spin du système. Pour des valeurs suffisamment faibles du champ B , les éléments de matrice non diagonaux de \hat{H}_Z qui connectent des états de base de différentes valeurs de J (module du moment cinétique total du système $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$) seront négligeables par rapport aux contributions des interactions Coulombiennes et de spin-orbite dans l'énergie. Il devient alors raisonnable de négliger le mélange des états de base de différentes valeurs de J . La matrice des énergies se scinde en blocs selon la valeur de J (comme en l'absence de champ) et la contribution du champ magnétique à l'énergie peut être calculée comme une simple perturbation. L'expression suivante pour l'élément de matrice diagonal de H_Z pour l'état $|\gamma JM\rangle$

$$\langle \gamma JM | \hat{L}_z + g_s \hat{S}_z | \gamma JM \rangle = g_{\gamma J} \langle \gamma JM | \hat{J}_z | \gamma JM \rangle = g_{\gamma J} M, \quad (6.6)$$

où $J_z = \hat{L}_z + \hat{S}_z$, définit le facteur de Landé $g_{\gamma J}$ du niveau γJ [218, 334] (théorème de projection). On peut grossièrement considérer que l'approximation Zeeman cesse d'être valable lorsque l'intensité du champ magnétique multipliée par le magnéton de Bohr devient du même ordre de grandeur que la contribution de spin-orbite (voir table 6.4) :

$$B_c = \frac{Z^* \alpha^2}{\mu_B}. \quad (6.7)$$

Dans ce cas, un traitement Paschen-Back [305] est nécessaire.

Elément	$B_c(MG)$
H (Z=1)	0.0078
Al (Z=13)	1.30
Ni (Z=28)	6.10
Nb (Z=41)	13.10
Sm (Z=62)	30.00
Po (Z=84)	55.00
Np (Z=93)	67.50

TABLE 6.4 – Valeur critique du champ magnétique pour lequel l'interaction spin-orbite devient du même ordre de grandeur que l'interaction magnétique. Cela donne une estimation de la valeur critique du champ pour laquelle l'approche Paschen-Back est plus appropriée.

Dans le cas d'un atome (ion) ayant plusieurs sous-couches ouvertes, le nombre de raies dipolaires électriques peut s'avérer immense le spectre Zeeman est une superposition de nombreux profils. Lorsqu'on a affaire à des profils enregistrés simultanément, il devient nécessaire de caractériser le profil de raie par un nombre limité de paramètres, et d'imposer des contraintes

Champ magnétique B (MG)	“Objet” astrophysique
$10^5 - 10^8$	Etoile à neutrons ou pulsar
$10^{-1} - 10^4$	Naine blanche
$10^{-4} - 10^{-2}$	Etoile “chaude” magnétique
$0 - 10^{-6}$	Planètes du système solaire
$10^{-13} - 10^{-11}$	Nuage interstellaire

TABLE 6.5 – Ordres de grandeurs de champs magnétiques rencontrés en astrophysique (1 MG=10⁶ G=100 T).

permettant la détermination de ces paramètres. En faisant l’hypothèse que le milieu est optiquement “passif” (*e.g.* il n’y a pas de rotation de Faraday), l’intensité, détectée avec un angle d’observation θ , est donnée par [149] :

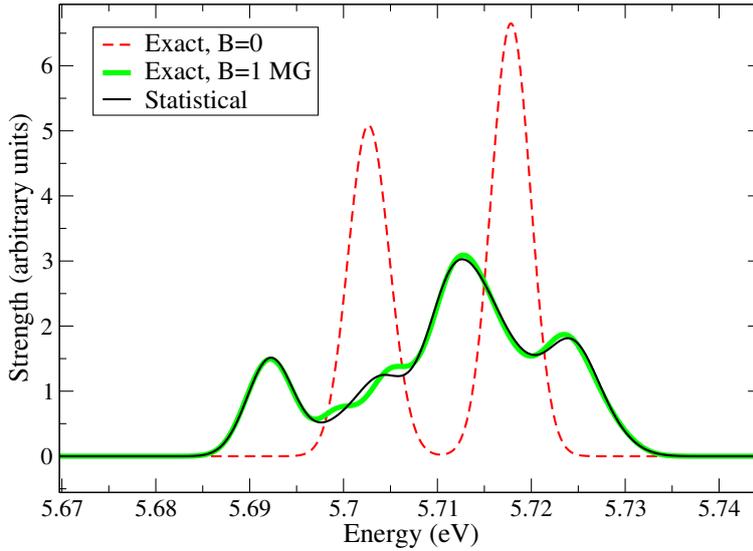


FIGURE 6.4 – Effet d’un champ magnétique de 1 MG sur le faisceau de transition C V $1s^1 2s^1 \rightarrow 1s^1 2p^1$ avec une largeur de convolution de 0.005 eV. L’angle d’observation θ est tel que $\cos^2(\theta)=1/3$.

$$I_{\theta}(E) = \left[\frac{1 + \cos^2(\theta)}{4} \right] [I_{+1}(E) + I_{-1}(E)] + \frac{\sin^2(\theta)}{2} I_0(E). \quad (6.8)$$

Chaque raie $\gamma J \rightarrow \gamma' J'$ se scinde en trois composantes associées aux règles de sélection $M' = M + q$, où la polarisation q est égale à 0 pour la composante π et à ± 1 pour les composantes σ_{\pm} . I_q représente l’intensité de la composante q de la raie E1 $\gamma J \rightarrow \gamma' J'$. Dans le cas d’un faisceau de transition, le profil Zeeman d’une raie peut être représenté par un développement de Gram-Charlier d’ordre 4 :

$$\Psi_Z(E - E_{\gamma J, \gamma' J'}) = \sum_{q=-1}^1 \frac{\exp\left(-\frac{y_q^2}{2}\right)}{\mu_B B \sqrt{2\pi \mathcal{M}_{2,c}^{[q]}}} \left(1 - \frac{\alpha_3^{[q]}}{2} \left[y_q - \frac{y_q^3}{3} \right] + \frac{(\alpha_4^{[q]} - 3)}{24} (3 - 6y_q^2 + y_q^4) \right), \quad (6.9)$$

où $y_q = (E - E_{\gamma J, \gamma' J'} - q g_e \mu_B B) / (\mu_B B \sqrt{\mathcal{M}_{2,c}^{[q]}})$, g_e étant le coefficient de Landé. La variance $\mathcal{M}_{2,c}^{[q]}$ a été calculée par Bauche et Oreg [38]. Les moments centrés réduits d'ordre 3 et 4 sont donnés dans les tables 6.6 et 6.7 respectivement.

σ_+	$J' = J$	$J' = J + 1$	$J' = J - 1$
α_3	0	$\frac{2\sqrt{5}}{3\sqrt{3}} \frac{J+1}{\sqrt{J(J+2)}}$	$-\frac{2\sqrt{5}}{3\sqrt{3}} \frac{J}{\sqrt{J^2-1}}$
α_4	$\frac{5}{7} \left(\frac{12J(J+1)-17}{4J(J+1)-3} \right)$	$\frac{5}{21} \left(\frac{13J(J+2)-4}{J(J+2)} \right)$	$\frac{5}{21} \left(\frac{13J^2-17}{1-J^2} \right)$

TABLE 6.6 – Valeurs de α_3 et α_4 de la composante σ_+ des raies E1.

π	$J' = J$	$J' = J + 1$	$J' = J - 1$
α_4	$\frac{25}{7} \left(\frac{3\{(J+2)J^2-1\}J+1}{\{1-3J(J+1)\}^2} \right)$	$\frac{5}{7} \left(\frac{3J(J+2)-2}{J(J+2)} \right)$	$\frac{5}{7} \left(\frac{3J^2-5}{J^2-1} \right)$

TABLE 6.7 – Valeur de α_4 de la composante π des raies E1 ($\alpha_3=0$ puisque la composante π est symétrique).

La figure 6.4 représente l'effet d'un champ magnétique de 1 MG sur le faisceau de transition C V $1s^1 2s^1 \rightarrow 1s^1 2p^1$ avec une largeur de convolution de 0.005 eV. L'angle d'observation θ est tel que $\cos^2(\theta)=1/3$.

6.4 Sur les collisions électroniques

6.4.1 Contribution à l'étude des collisions pénétrantes

Les collisions par des électrons du plasma pénétrant l'extension des fonctions d'onde liées (voir figure 6.5) sont importantes à forte densité, lorsque les interactions à courte portée deviennent dominantes. De telles collisions ne sont habituellement pas prises en compte correctement dans la théorie standard des profils de raie, reposant sur l'approximation dipolaire et donc à longue portée. Le formalisme des collisions pénétrantes pour l'hydrogène repose sur l'introduction d'un certain type d'intégrales calculées par récurrence. Nous avons montré que de telles intégrales sont calculables analytiquement comme une somme finie impliquant des coefficients du binôme et des fonctions de Bessel du troisième type. La formule explicite nous a permis d'obtenir une forme analytique approximative simple et précise de l'opérateur de collision en présence de collisions pénétrantes, facilitant la mise en œuvre numérique et l'interprétation physique [300]. L'opérateur de collision que nous avons obtenu s'exprime exclusivement à l'aide de la fonction :

$$G(x) = \frac{\gamma_E}{2} - \frac{1}{2}E_1(x^2) + E_1\left(\frac{x^2}{2}\right) + \ln\left(\frac{x}{2}\right), \quad (6.10)$$

où γ_E est la constante d'Euler-Mascheroni et E_1 l'exponentielle intégrale :

$$E_1(x) = \int_x^\infty t^{-1} \exp(-t) dt. \quad (6.11)$$

La figure 6.6 représente le rapport de l'élargissement électronique en couche $n = 4$ de l'hydrogène prenant en compte (STP : Standard Theory with Penetration) ou non (ST : Standard Theory) l'effet de pénétration de l'électron libre dans le cortège électronique de l'émetteur. Les calculs sont tracés en fonction de la longueur de Debye λ_D représentant la portée effective de l'interaction électron-ion dans un plasma. Les 3 courbes correspondent à l'élargissement des niveaux 4ℓ ($\ell=0,1,2$) par les canaux collisionnels $4\ell - 4\ell'$ (avec $\ell' = \ell \pm 1$). L'effet de pénétration est susceptible de diminuer la largeur de 25 % dans ce cas.

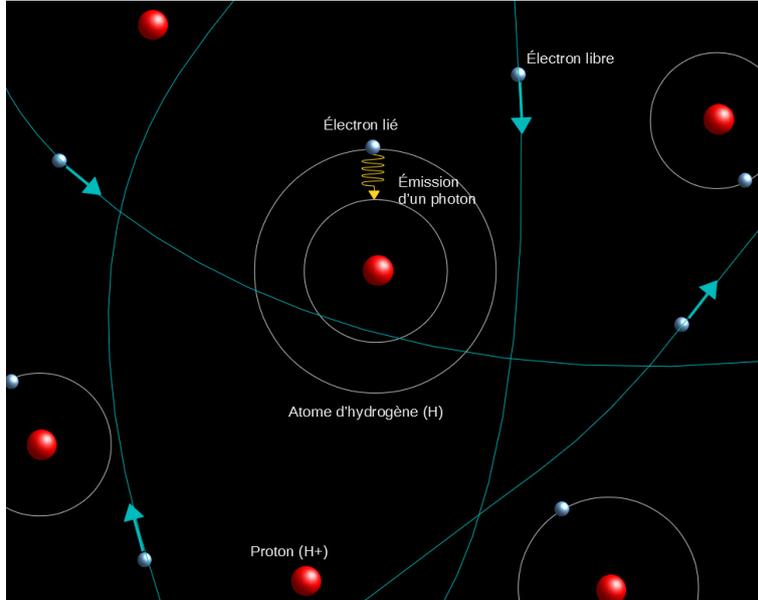


FIGURE 6.5 – Dans un plasma d'hydrogène, chaque émetteur de rayonnement est soumis aux champs électriques quasi statiques des protons (en rouge) et aux champs électriques dynamiques des électrons (trajectoires classiques représentées en cyan). L'électron libre peut parfois pénétrer l'extension spatiale de l'émetteur (au centre de l'image), ce qui a tendance à diminuer la largeur d'impact par rapport à un calcul ne prenant pas en compte cet effet.

6.4.2 Processus d'excitation collisionnelle

Nous discutons ici de mesures de sections efficaces d'excitation collisionnelle pour les ions héliumoides de xénon réalisées auprès de l'installation EBIT (Electron Beam Ion Trap). Ces sections mesurées se sont avérées plus faibles que les prédictions théoriques. Dans une publication récente ([76]), les auteurs trouvent un effet significatif de l'interaction de Breit entre les électrons

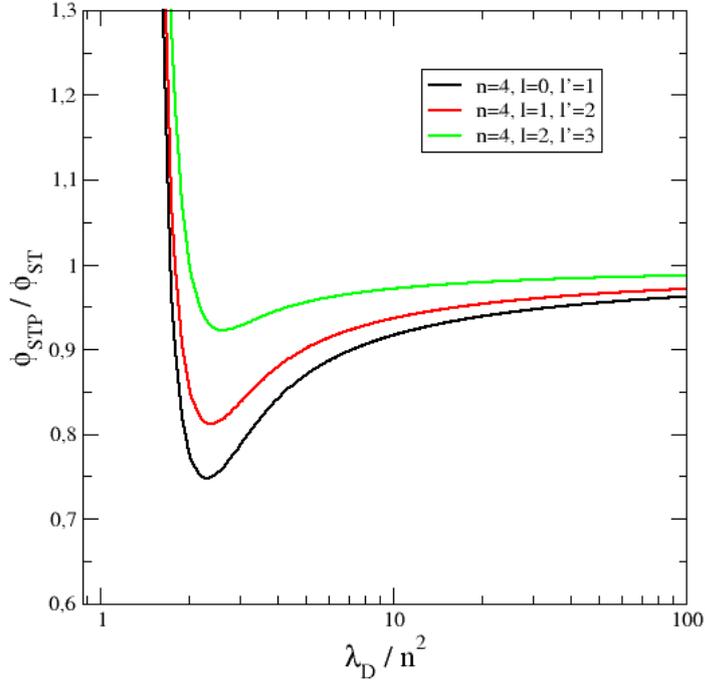


FIGURE 6.6 – Rapport de l’élargissement électronique en couche $n = 4$ de l’hydrogène prenant en compte (STP) ou non (ST) l’effet de pénétration de l’électron libre dans le cortège électronique de l’émetteur. Les calculs sont tracés en fonction de la longueur de Debye λ_D représentant la portée effective de l’interaction électron-ion dans un plasma. Les 3 courbes correspondent à l’élargissement des niveaux 4ℓ ($\ell=0,1,2$) par les canaux collisionnels $4\ell - 4\ell'$ (avec $\ell' = \ell \pm 1$). L’effet de pénétration peut diminuer la largeur de 25 % dans ce cas.

liés et libres dans le processus d’excitation du xénon héliumoïde. Ils soutiennent que l’accord entre les valeurs mesurées et calculées des sections efficaces n’est possible qu’en introduisant l’interaction de Breit généralisée dans les calculs. Nous avons effectué de nouveaux calculs avec un code multi-configurations Dirac-Fock [78] ainsi qu’avec la suite de codes de l’université Penn State et nos conclusions sont que la contribution de l’interaction de Breit est beaucoup plus faible que celle trouvée dans les calculs cités plus haut. En fait, nos prédictions sont deux fois plus importantes que les valeurs expérimentales. Nous les avons publiées dans l’espoir de motiver de nouvelles études expérimentales [301].

Chapitre 7

Equations d'état des plasmas chauds et denses

7.1 Effets de la structure en couches sur les adiabatiques dynamiques (courbes de Hugoniot)

Pour étudier en laboratoire les propriétés associées aux hautes pressions, on dispose de techniques statiques et dynamiques. Ces deux approches diffèrent dans la manière de générer et de mesurer la pression ainsi que dans la nature de la matière comprimée finale. Dans les expériences statiques, l'échantillon est comprimé entre deux enclumes. La température, dans ce cas, dépasse rarement la centaine de degrés Celsius. Les pressions atteintes dépassent difficilement le Mbar, cette limitation étant due à la résistance du matériau étudié. Les études de compression par choc permettent d'obtenir des températures et des pressions élevées en propageant une impulsion rapide dans une substance grâce à la détonation d'un explosif, à l'impact d'un projectile à grande vitesse ou à la propagation et l'absorption d'une impulsion laser intense. De telles méthodes sont indispensables pour mesurer certaines variables dynamiques permettant la détermination de la pression, de la densité et de l'énergie. Dans une expérience de compression par onde de choc, le temps de passage du choc est court comparé au temps de démantèlement de l'échantillon. Ainsi, les pressions que l'on peut espérer atteindre sont limitées uniquement par la quantité d'énergie du "générateur de choc". Des explosifs chimiques ont été utilisés pour atteindre des pressions jusqu'à 1 Mbar dans des liquides et 13 Mbar dans des métaux, avec des températures de dizaines de milliers de degrés K. Des pressions finales comprises entre 20 et 158 Mbar ont été mesurées lors d'explosions nucléaires souterraines. Dans des études par confinement inertiel, des cellules de deutérium (D_2) liquide sont soumises à des pressions dynamiques pouvant atteindre 1 Gbar et des températures pouvant dépasser 10^7 K.

Ainsi, les pressions maximales atteintes de nos jours au cours d'expériences laser en laboratoire sont de l'ordre de la centaine de mégabars et même plus pour de nombreux matériaux. De telles pressions sont trois ordres de grandeur plus élevées que la pression au centre de la Terre et proches de celle de l'intérieur du Soleil. Par conséquent, le besoin d'équation d'état (EE) de la matière chaude et dense devient crucial. La thermodynamique et l'hydrodynamique de tels systèmes ne peuvent pas être prédites sans une connaissance précise de l'équation d'état qui décrit la manière dont un matériau donné réagit à la pression. Jusqu'à présent, la plupart des études sur les plasmas concernaient des plasmas idéaux, dont la densité est relativement basse

et la température élevée, ou le paramètre de couplage

$$\Gamma = \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{1/3} \beta Z^{*2} n_i^{1/3}, \quad (7.1)$$

rapport de l'énergie d'interaction Coulombienne et de l'énergie d'agitation thermique, est bien plus petit que l'unité. Tout au long de ce document, les quantités physiques sont exprimées en unités atomiques (u.a.). n_i représente la densité de matière (nombre de particules par unité de volume), Z^* l'ionisation moyenne du plasma, k_B la constante de Boltzmann et T la température. Dans ces plasmas les électrons sont traités comme des gaz idéaux. Les effets d'écrantage statique peuvent être traités par des théories perturbatives (du type Debye). Dans ce travail nous considérons un régime plus complexe, identifié comme les plasmas fortement couplés (non idéaux), $\Gamma \geq 1$, caractérisés par des densités élevées et/ou des basses températures. Dans de tels plasmas, les ions sont fortement corrélés, les électrons sont partiellement dégénérés et la longueur d'onde de De Broglie de l'électron est du même ordre de grandeur que la distance inter-particulaire :

$$n_i \bar{\lambda}_e^3 \approx 1 \text{ avec } \bar{\lambda}_e = \frac{1}{\sqrt{2\pi\beta}}. \quad (7.2)$$

Un matériau soumis à une forte onde de choc est comprimé, chauffé et ionisé. Lorsque la force du choc initial est variée pour un état initial donné, la collection des états finals "pression-densité" derrière le choc, ou courbe de Rankine-Hugoniot, dépend de l'équation d'état de la matière.

7.1.1 Relations de Rankine-Hugoniot

L'état initial du plasma est caractérisé par une densité ρ_0 , une température T_0 , une pression P_0 , et une énergie interne E_0 . D est la vitesse de choc, u la vitesse matière, P et E sont respectivement la pression et l'énergie interne derrière le front de choc. Puisque la conservation de la masse doit être assurée, la densité du gaz comprimé ρ vérifie la relation [419] :

$$\rho_0 D = \rho(D - u). \quad (7.3)$$

La résultante des forces agissant sur le gaz comprimé est égale à la différence de la pression du choc et de la pression du fluide non perturbé [419], c'est-à-dire

$$P - P_0 = \rho_0 D u. \quad (7.4)$$

L'augmentation de la somme des énergies interne et potentielle du gaz comprimé est égale au travail effectué par la force extérieure agissant sur le front de choc [419], *i.e.*

$$\rho_0 D \left(E - E_0 + \frac{u^2}{2} \right) = P u. \quad (7.5)$$

En remaniant ces équations, on obtient [419] :

$$\frac{1}{2} (P + P_0) \left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho} \right) = E - E_0, \quad (7.6)$$

connue sous le nom de relation de Rankine-Hugoniot.

7.1.2 Calcul auto-cohérent de la structure électronique : les modèles d'atome moyen quantique

En principe, l'équation d'état et les propriétés de la matière à pression élevée peuvent être déterminées d'après la théorie. En pratique, les limitations des calculs *ab initio* sont intimement liées à la difficulté de résoudre le problème à N corps. Par conséquent, il s'avère nécessaire d'introduire des approximations dans les équations fondamentales. Le prix de la simplification qui en résulte, cependant, est naturellement de rendre moins général le modèle théorique qui, de fait, ne peut décrire qu'une partie du diagramme thermodynamique. La détermination de la densité moyenne de charge électronique repose souvent sur le modèle de Thomas-Fermi de la matière dense [113], qui contient certaines caractéristiques essentielles à la description des matériaux pour des densités et des températures très élevées (distribution de Fermi, potentiel électrostatique décrivant les interactions électron-électron et électron-noyau, ...) [124, 125]. Le modèle de Thomas-Fermi [113] est généralement considéré comme valide dans des conditions extrêmes de température et densité, dans lesquelles l'impact de la structure électronique est faible. On estime qu'il faut que le matériau soit à moitié ionisé [311]. Malgré l'omission de la structure quantique, le modèle Thomas-Fermi prédit des densités électroniques acceptables en tant que moyennes des résultats exacts. Lorsque la pression ou la température augmentent, les couches électroniques sont successivement délocalisées, ce qui induit des discontinuités dans l'équation d'état qui sont représentées en moyenne par ce modèle. Kirzhnitz et coll. [203, 204], puis Zink [421], ont tenté d'introduire de manière approchée les effets de la structure en couches dans le modèle Thomas-Fermi. L'objectif de leur approche était de prendre en compte les effets quantiques tout en conservant la simplicité de mise en œuvre numérique d'une approche semi-classique. Malheureusement, le modèle Thomas-Fermi ainsi modifié entraîne des transitions de phase probablement irréalistes (non physiques) pour des densités correspondant à la dissolution d'états liés dans le continuum (ionisation par pression). Pour des pressions de choc intermédiaires, lorsque le matériau devient partiellement ionisé, l'équation d'état dépend de l'état quantique de la matière, *i.e.* de la structure électronique en couches. Ainsi, la physique des états liés suscite un grand intérêt et les modèles auto-cohérents quantiques remplacent progressivement l'approche Thomas-Fermi. Cependant, il existe plusieurs types de calculs auto-cohérents quantiques, reposant sur la théorie de la fonctionnelle densité (DFT : Density Functional Theory) [169, 209].

Notre approche vise ici à tenter de comprendre comment l'environnement plasma modifie à la fois la structure de l'"atome" et les propriétés du plasma. Les hypothèses fondamentales de notre modélisation sont la symétrie sphérique de la distribution électronique continue autour de l'ion central, et le caractère indépendant du temps des fonctions d'onde décrivant à la fois les électrons liés et les électrons libres. Nous faisons l'hypothèse que la densité électronique est suffisamment élevée pour que les effets dynamiques puissent être ignorés (il est intéressant de noter que Murillo et Weisheit [258] ont proposé une méthode pour les inclure).

Nous considérons des plasmas dont le paramètre de couplage est compris entre 1 et 10, que nous appelons des plasmas fortement couplés corrélés, dans lesquels la dynamique microscopique des ions et des électrons est dominée par des interactions intenses qui proscrivent toute théorie perturbative. Des plasmas gazeux aux plasmas fortement couplés, les états électroniques, incluant le potentiel d'ionisation, l'énergie de liaison et la mobilité, changent considérablement. Ainsi, il est très difficile d'établir un modèle qui peut décrire les états électroniques de plasmas dans des conditions très différentes. Dans [61], une description simplifiée de la composante

électronique de l'environnement plasma a été utilisée, reposant sur un traitement quantique des électrons liés tandis que les électrons libres sont décrits dans le cadre du modèle Thomas-Fermi. A forte densité de matière, un tel traitement "mixte" peut conduire à des discontinuités dans les fonctions thermodynamiques lorsqu'un état lié disparaît dans le continuum (ionisation par pression). Il est indispensable de renoncer à la description hybride des électrons et de les traiter tous dans le cadre d'un formalisme quantique.

Dans les modèles d'atome moyen (voir par exemple [243,320,347,407,411]) que nous considérons, l'équation de Schrödinger est résolue à l'approximation de Pauli [60,62], dans laquelle seules des corrections relativistes du premier ordre sont incluses :

$$\left[-\frac{1}{2} \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] + v_{\text{scf}} + v_{\text{mv}} + v_{\text{D}} \right] y_{\epsilon,\ell}(r) = \epsilon y_{\epsilon,\ell}(r), \quad (7.7)$$

où v_{mv} est le terme de masse-vélocité et v_{D} le terme de Darwin. $y_{\epsilon,r}(r)$ est la partie radiale de la fonction d'onde multipliée par r . Le potentiel se scinde en deux parties $v_{\text{scf}}(r) = v_{\text{el}}(r) + v_{\text{xc}}(r)$, où v_{xc} représente la contribution d'échange-corrélation, évaluée à l'approximation de la densité locale [172] (LDA : Local Density Approximation), et v_{el} la partie électrostatique. A l'extérieur de la sphère de Wigner-Seitz (WS), *i.e.* au-delà du rayon r_{ws} , une fonction d'onde liée est donnée par :

$$y_{n\ell}(r) = A_{n\ell} r \kappa_{\ell}(-iKr), \quad \text{avec } K = \left[2\epsilon \left(1 + \frac{\epsilon}{2E_0} \right) \right]^{1/2}, \quad (7.8)$$

où κ_{ℓ} est une fonction de Bessel sphérique du troisième type et $A_{n\ell}$ une constante fixée par la condition au limite de la fonction d'onde à r_{ws} et la normalisation. Au-delà de r_{ws} , une fonction d'onde libre s'écrit :

$$y_{\epsilon,\ell}(r) = \left[\frac{2K}{\pi} \left(1 + \frac{\epsilon}{E_0} \right) \right]^{1/2} r [\cos[\delta_{\ell}(k)] j_{\ell}(Kr) - \sin[\delta_{\ell}(k)] n_{\ell}(Kr)], \quad (7.9)$$

où j_{ℓ} et n_{ℓ} sont respectivement les fonctions de Bessel sphériques des premier et second type, E_0 est l'énergie de repos de l'électron, et $\delta_{\ell}(k)$ est le déphasage, donné par

$$\tan[\delta_{\ell}(k)] = \frac{k j'_{\ell}(kr_{\text{ws}}) - \xi j_{\ell}(kr_{\text{ws}})}{k n'_{\ell}(kr_{\text{ws}}) - \xi n_{\ell}(kr_{\text{ws}})}, \quad (7.10)$$

où ξ est la dérivée logarithmique de la fonction radiale $y_{\epsilon,r}(r)/r$.

Dans cette partie, nous utilisons deux modèles pour calculer la contribution thermique électronique à l'équation d'état à travers deux calculs auto-cohérents quantiques : l'atome confiné et l'atome dans un jellium [315] (voir figure 7.1). Dans les deux cas, les électrons liés comme les électrons libres sont décrits dans le cadre de la mécanique quantique et les effets d'échange-corrélation à température finie ont été pris en compte [172]. Dans le modèle de l'atome confiné, tous les électrons sont contenus dans la sphère de Wigner-Seitz. Dans le modèle de l'atome dans le jellium, les fonctions d'onde liées peuvent s'étendre à l'extérieur de la sphère, où le plasma est représenté par une densité électronique uniforme (jellium ou gaz d'électrons) neutralisée par un fond continu de charges positives, représentant les ions. Dans le modèle de l'atome confiné utilisé ici, les électrons libres sont décrits à l'approximation semi-classique Thomas-Fermi, et dans notre modèle de l'atome dans le jellium, les électrons libres sont traités de manière quantique (et non plus semi-classique), ce qui nécessite de prendre en compte les résonances de forme dans

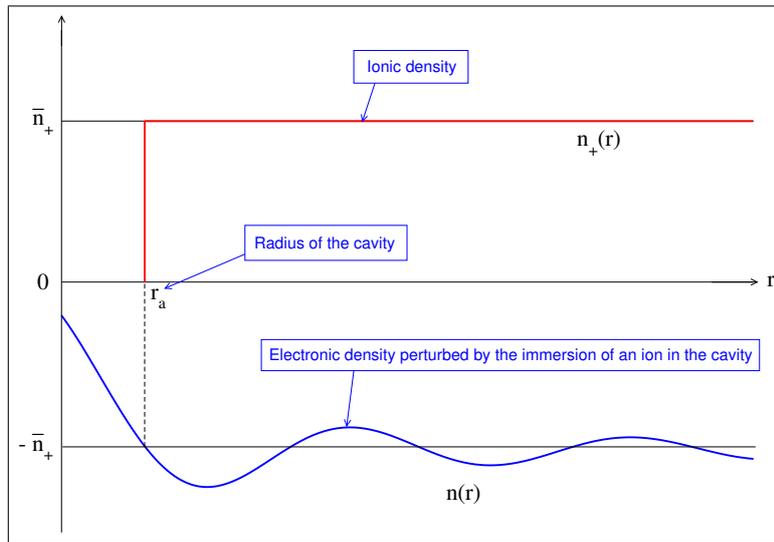


FIGURE 7.1 – Densités ionique et électronique dans le modèle de jellium.

la densité d'états libres (voir figure 7.2). Cela s'avère indispensable afin d'assurer la cohérence thermodynamique et de décrire correctement les effets de densité (ionisation par la pression) comme l'indique la figure 7.3.

7.1.3 Effet des orbitales

Nos modèles permettent d'étudier de manière plus particulière le domaine où la courbe de Hugoniot dépend fortement de la structure électronique, *i.e.* au-delà de quatre fois la densité du solide où les "bosses" (deux dans le cas de Al) correspondent à l'ionisation successive des orbitales. La courbe de Hugoniot tend vers la limite classique égale à quatre fois la densité du solide à très haute pression, ou typiquement $T > 10$ keV. Ces bosses (nous utiliserons le terme "oscillations" dans la suite) sont associées à la compétition entre le dégagement d'énergie stockée sous forme d'énergie interne dans les orbitales et la pression due aux électrons libres. Lorsque l'ionisation commence, l'énergie du choc est utilisée principalement pour dépeupler les couches pertinentes et le matériau est très compressible. Cependant, la pression des électrons libres en nombre croissant domine à nouveau et le matériau devient plus difficile à comprimer. Tous les modèles ont des maxima de compression dans le domaine $5\rho_0 - 6\rho_0$. Dans cette région, les électrons de cœur sont ionisés. La densité de choc augmente au-delà de la pression infinie correspondant à l'asymptote $4\rho_0$ dans la région d'ionisation parce que cette dernière induit une augmentation de la chaleur spécifique sans augmentation de la pression. Lorsque l'ionisation est complète, le plasma est un gaz parfait d'ions et d'électrons et la densité approche la densité du solide quadruple $4\rho_0$.

Les orbitales électroniques successives sont bien représentées et sont ionisées lorsque $k_B T$ est égal à leurs potentiels d'ionisation respectifs. Pour Al (figure 7.4), il y a deux maxima (un local et un global) correspondant aux couches K et L . Pour Fe (figure 7.5), on voit des maxima ou inflexions correspondant aux couches K , L et M . L'ionisation de la couche L donne la déviation la plus importante. Dans le cas de Fe (figure 7.5), les modèles atome confiné et

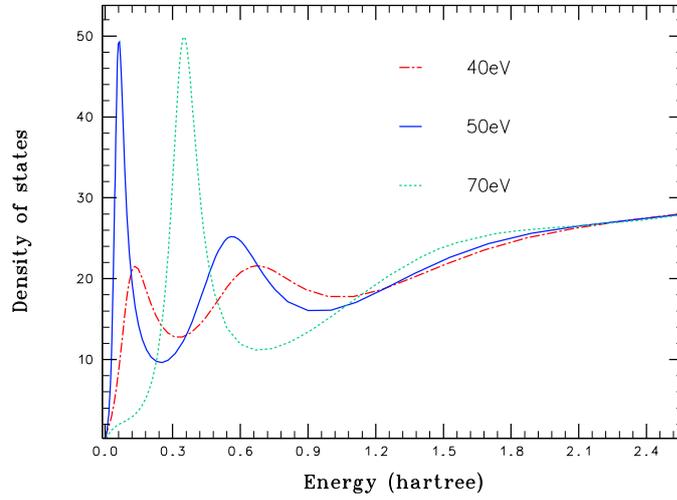


FIGURE 7.2 – Densité d'états de l'aluminium à $\rho=2.7 \text{ g/cm}^3$ et trois températures.

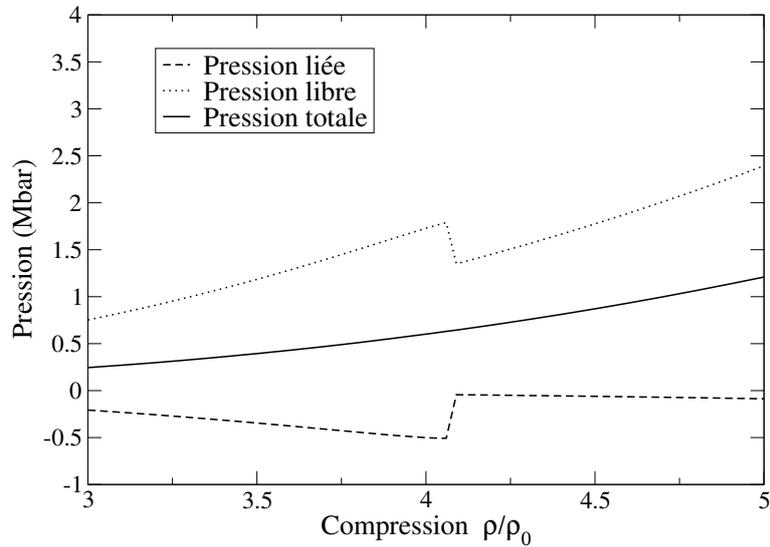


FIGURE 7.3 – Pression des électrons liés, des électrons libres et pression totale pour un plasma d'argon à $T=2.72 \text{ eV}$ et $\rho=1.4 \text{ g/cm}^3$.

jellium hybride montrent une discontinuité autour de 32 g/cm^3 , due à l'ionisation par pression de l'orbitale $2p$. Une telle augmentation brutale de la pression n'existe pas dans le modèle du jellium quantique, parce que dans celui-ci la pression est obtenue rigoureusement comme dérivée de l'énergie libre, et les résonances de forme sont prises en compte dans la densité d'états libres. De telles caractéristiques conduisent à une disparition progressive d'un état lié dans le continuum, comme l'ont prédit Kohn et Majumdar [232]. Ce n'est pas le cas du modèle d'atome confiné. Dans le cadre de ce modèle, nous avons essayé d'éclater ces niveaux en bandes et d'appliquer une formule simple de réduction de dégénérescence ; cela rend la discontinuité sensiblement moins abrupte mais ne résout pas le problème à proprement parler. Seule une recherche soignée des résonances de forme, associée à un calcul variationnel de la pression (s'il existe dans le modèle de l'atome moyen!) permettrait de corriger cet artefact. L'énergie interne aussi reflète les oscillations dues à la structure en couches, tout comme le chemin thermodynamique (ρ, T) . En fait, le caractère non monotone des variables thermodynamiques provient des énergies propres des orbitales elles-mêmes, qui présentent également les oscillations. La première densité pour laquelle la décompression se produit sera appelée dans la suite "point de rebroussement" [277–279].

Les différences sur la pressions apportées par la théorie quantique ainsi que le caractère oscillant au voisinage du point de rebroussement, peuvent s'expliquer ou du moins s'interpréter en étudiant la chaleur spécifique électronique prédite par les théories le long de la courbe de Hugoniot. A basse température la chaleur spécifique électronique dépend du nombre d'électrons qui peuvent être excités au voisinage de l'énergie de Fermi. La théorie Thomas-Fermi induit une augmentation douce puisque la densité d'états dans ce modèle est une fonction monotone de l'énergie. Ainsi, la chaleur spécifique électronique (que nous avons voulu réduite, *i.e.* divisée par $k_B T$) :

$$C_v^{\text{elec}} = \frac{1}{3k_B/2} \frac{\partial [E(\rho, T) - E_i(\rho, T)]}{\partial T} \quad (7.11)$$

est un indicateur intéressant de l'ionisation des couches successives et indirectement du dégagement d'énergie. E_i représente l'énergie interne ionique. La figure 7.6 représente C_v^{elec} le long de la courbe de Hugoniot dans les modèles Thomas-Fermi et d'atome moyen confiné pour Al. Les deux théories illustrent l'effet du potentiel attractif Coulombien du noyau, représenté par le pic autour de 300 eV pour la théorie Thomas-Fermi et 100 eV pour le modèle d'atome moyen confiné.

Après le point de rebroussement, il y a 11 électrons libres et 2 électrons liés restant dans l'orbitale $1s$ (couche K), qui est loin du continuum (1.5 keV à 100 eV). Ce phénomène est connu sous le nom d'anomalie Schottky [358], et est nettement visible dans la chaleur spécifique. Tant que la température n'est pas suffisante pour ioniser ces deux électrons, la chaleur spécifique tend vers une asymptote correspondant à un gaz parfait de 11 particules indépendantes. Lorsque tous les électrons $1s$ sont ionisés (à partir d'une température "seuil"), on voit une cassure dans la chaleur spécifique, qui tend vers un gaz parfait de 13 particules indépendantes. Le phénomène est moins prononcé pour les états liés $2s$ et $2p$ (couche L), étant donné que leurs énergies ne sont pas aussi éloignées du continuum (quelques dizaines d'eV). La figure 7.7 représente la chaleur spécifique électronique le long de la courbe de Hugoniot dans l'approche Thomas-Fermi et dans le modèle d'atome moyen confiné pour le fer ; dans ce cas, après deux anomalies Schottky (correspondant aux couches K et L), la partie électronique de la chaleur spécifique tend vers un gaz parfait de 26 électrons.

L'effet du numéro atomique Z sur les courbes de Hugoniot est illustré sur la figure 7.8.

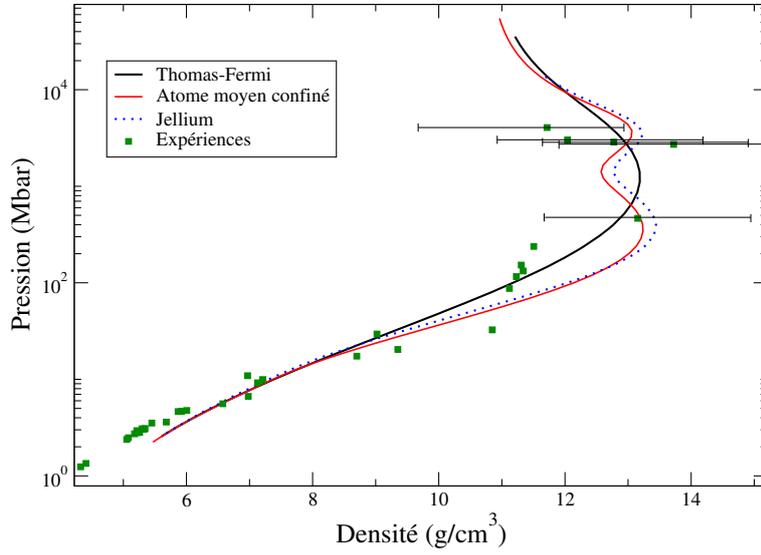


FIGURE 7.4 – Fonction de Hugoniot \mathcal{H} en fonction de la densité et de la pression pour l'aluminium.

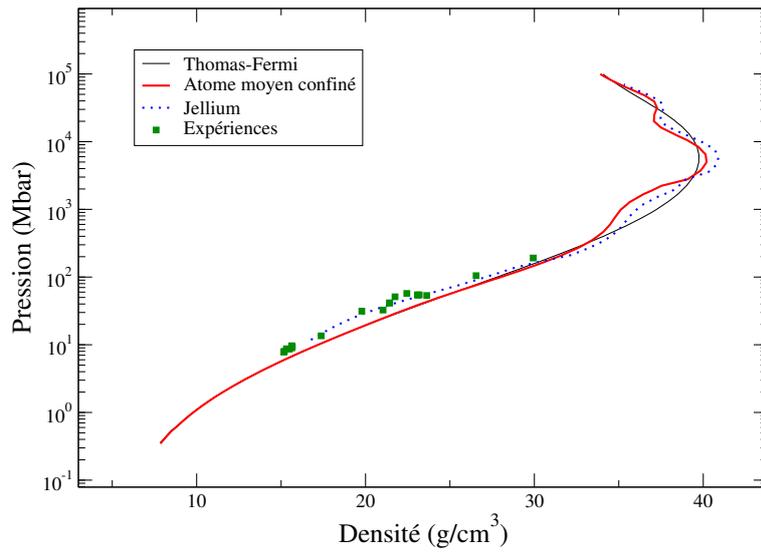


FIGURE 7.5 – Fonction de Hugoniot \mathcal{H} en fonction de la densité et de la pression pour le fer.

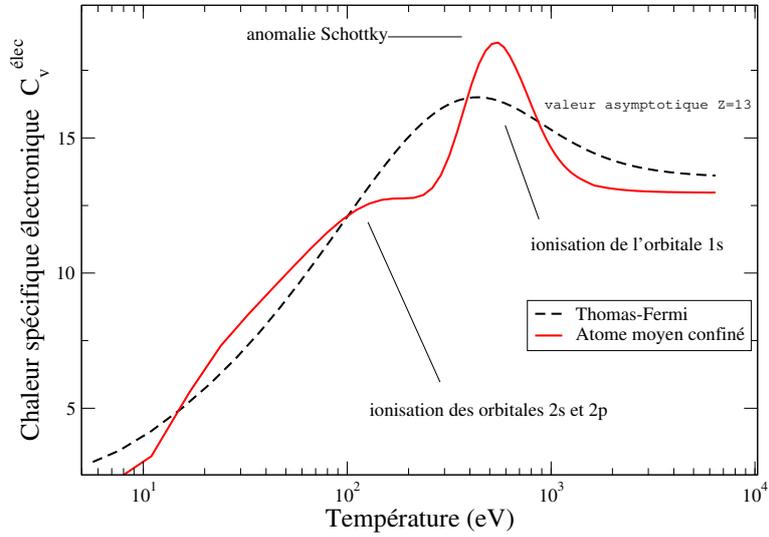


FIGURE 7.6 – Chaleur spécifique à volume constant le long de la courbe de Hugoniot \mathcal{H} pour l'aluminium.

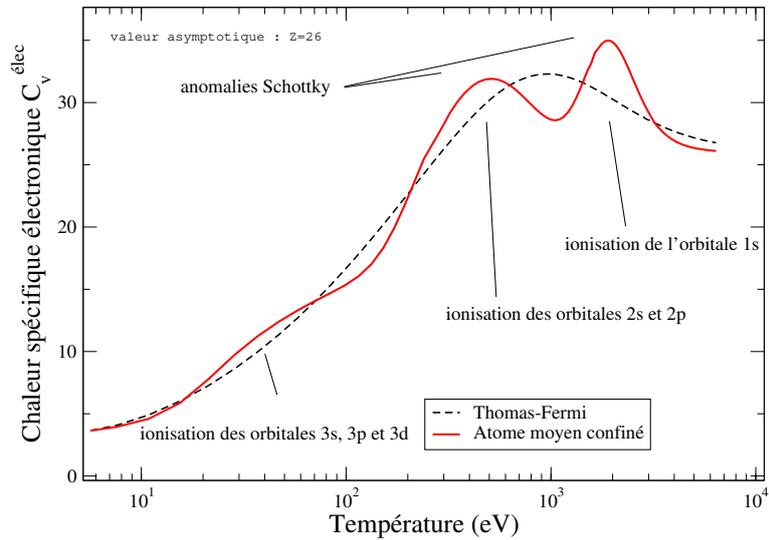


FIGURE 7.7 – Chaleur spécifique à volume constant le long de la courbe de Hugoniot \mathcal{H} pour le fer.

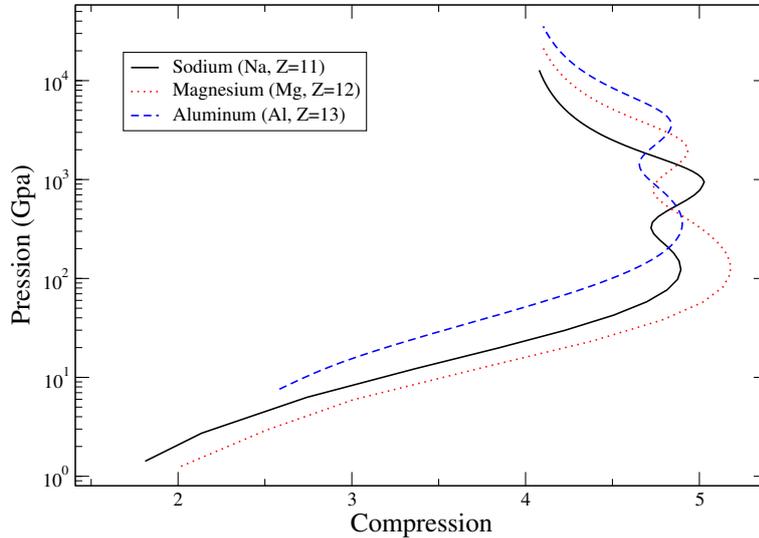


FIGURE 7.8 – Courbes de Hugoniot pour le sodium, le magnésium et l’aluminium. Illustration de l’effet du numéro atomique Z .

7.1.4 Comparaisons avec des données expérimentales

Des données expérimentales pour Be [183, 237, 264, 335, 404], B [237], C [159, 237, 265], Al [9, 17, 206, 322, 336, 366, 387, 400, 402], Fe [10, 336], [6, 7, 10, 11, 213, 382–385] et Cu [6, 9, 183, 336, 385], [5, 8, 148, 210, 250, 381, 382, 386] ont été collectées pour effectuer des comparaisons avec les modèles d’équation d’état présentés plus haut. Plusieurs techniques expérimentales ont été utilisées pour générer des chocs bien définis : canons à gaz pour des pressions jusqu’à 5 Mbar, implosions sphériques amorcées par explosif et chocs laser pour des pressions jusqu’à 10 Mbar. Les lasers de forte puissance sont capables de générer des chocs de plusieurs mégabars dans des petites cibles soit par irradiation directe, soit indirectement, en disposant la cible dans une cavité dans laquelle les lasers sont focalisés. L’attaque indirecte présente des avantages par rapport à l’attaque directe. Il est en effet possible d’utiliser plusieurs faisceaux afin d’obtenir des pressions plus élevées dans une symétrie sphérique. Si les chocs avaient été caractérisés très précisément, nous devrions obtenir une courbe de Hugoniot “lisse”. Nous sommes bien évidemment loin de cette situation idéale. Les pressions maximales atteintes dans les expériences sont approximativement : 18 Mbar pour Be, 4000 Mbar pour Al, 191 Mbar pour Fe et 204 Mbar pour Cu. Il s’avère difficile de discriminer les modèles car il y a peu de données expérimentales disponibles dans la zone qui nous intéresse (typiquement au-dessus de 100 Mbar). Les barres d’erreur associées aux valeurs expérimentales pour Al sont bien trop grandes pour autoriser la moindre conclusion concernant l’existence des effets des orbitales. Pour Fe et Cu, les résultats du jellium quantique semblent être en meilleur accord avec les premiers points interprétables que les modèles hybrides (atome confiné et jellium hybride). L’imprécision des mesures rend les résultats expérimentaux inutilisables dans l’optique de raffiner les modèles théoriques. Par conséquent,

il n'est pas légitime de tenter de relier les mesures dynamiques avec une discussion des effets quantiques. De plus, les différences entre les modèles théoriques et les points expérimentaux ne peuvent pas être expliquées uniquement par les effets des couches ; en effet, dans la zone où la grande majorité des points expérimentaux est disponible, le rôle de l'isotherme 0 K est important, alors que les effets quantiques commencent à jouer un rôle significatif après que la matière a été comprimée ($\eta \approx 4$) et commence à chauffer. Notre isotherme 0 K est calculée en combinant des calculs APW (Augmented Plane Waves) [228] à la forme analytique de Vinet [399].

7.1.5 Evaluation simple du taux de compression maximal

La compression maximale que l'on peut espérer atteindre par la propagation d'un choc simple est plus grande que 4 et se produit pour une valeur finie de la pression. Ce phénomène est dû au fait que l'énergie interne se répartit dans les degrés de liberté internes, *via* l'ionisation. Nous proposons une expression analytique pour la compression maximale atteignable dans n'importe quel matériau à partir de n'importe quel état initial, excepté pour les éléments gazeux dans les conditions ambiantes. L'énergie totale peut s'écrire comme la somme des énergie cinétique E_k et potentielle E_p . Négligeant la contribution d'échange-corrélation, le théorème du Viriel permet de relier la pression, l'énergie cinétique et l'énergie potentielle :

$$3\frac{P}{\rho} = 2E_k + E_p. \quad (7.12)$$

Le taux de compression $\eta = \rho/\rho_0$ pour la courbe de Hugoniot standard ($P_0 = 0$, ρ_0 densité du solide et $T_0=300$ K) peut s'écrire

$$\eta = 4 + \frac{3}{1 + 2\frac{E_k - E_{k0}}{E_p - E_{p0}}} = 4 + \frac{3}{1 + 2\frac{\Delta E_k}{\Delta E_p}}. \quad (7.13)$$

A forte compression, en faisant l'hypothèse que $E_k \gg E_{k0}$, si on considère que tous les électrons ont été ionisés et que tous les électrons ont une énergie cinétique égale à l'énergie de Fermi, on peut écrire :

$$\Delta E_k = Z\frac{1}{2} \left(3\pi^2 Z \rho \frac{\mathcal{N}_A}{A} \right)^{2/3} a_0^2, \quad (7.14)$$

où a_0 est le rayon de Bohr exprimé en cm, ρ est en g/cm³, et le nombre de masse A en g. C'est l'approximation la plus délicate de cette approche. En effet, la compression maximale est atteinte dans la région où l'effet des couches est justement le plus important, comme nous l'avons illustré précédemment. Pour améliorer le modèle, on peut remplacer Z par Z^* (ionisation moyenne) dans la formule (7.14) :

$$\Delta E_k = Z\frac{1}{2} \left(3\pi^2 Z^* \rho \frac{\mathcal{N}_A}{A} \right)^{2/3} a_0^2, \quad (7.15)$$

et estimer Z^* de manière approchée, par exemple en utilisant le lissage de More [254]. Cependant, ce lissage dépend bien évidemment de la compression, et on ne dispose plus d'une expression analytique explicite. A forte compression, on peut estimer l'énergie potentielle d'excès comme l'énergie d'interaction Coulombienne entre deux sphères ioniques

$$\Delta E_p = \frac{1}{2} \frac{Z^2}{r_{ws,a}} \quad \text{et} \quad r_{ws,a} = \left[\frac{3A}{4\pi\mathcal{N}_A} \right]^{1/3} \rho^{-1/3}. \quad (7.16)$$

r_{ws} est le rayon de WS égal au rayon r_a de la cavité. Les équations (7.14) et (7.16) correspondent à un gaz fortement couplé d'électrons dégénérés. Il est important de faire une distinction entre l'énergie cinétique E_k et l'énergie cinétique macroscopique $u^2/2$ du plasma. Pendant le choc, l'augmentation d'énergie interne est presque égale à $u^2/2$ (équipartition de l'énergie), étant donné que

$$E - E_0 = \frac{1}{2}u^2 + \frac{P_0u}{\rho_0D}, \quad (7.17)$$

avec $P_0u \ll \rho_0D$. L'énergie cinétique E_k n'est absolument pas égale à l'énergie potentielle E_p *a priori*. Par conséquent, en utilisant les équations (7.14) et (7.16), le taux de compression maximal vérifie l'équation suivante

$$\eta = 4 + \frac{3}{1 + \gamma(\rho_0, Z, A)\eta^{1/3}}, \quad (7.18)$$

avec

$$\gamma(\rho_0, Z, A) = 3\pi(2\mathcal{N}_A)^{1/3}a_0 \left(\frac{\rho_0}{ZA} \right)^{1/3}, \quad (7.19)$$

où ρ_0 la densité normale en g/cm³, Z le numéro atomique et A la masse atomique. Les variables intermédiaires $X = \eta^{1/3}$ obéissent à l'équation du quatrième degré suivante

$$\gamma X^4 + X^3 - 4\gamma X - 7 = 0 \quad \text{avec} \quad X = \eta^{1/3}. \quad (7.20)$$

La solution peut être obtenue en utilisant l'algorithme de Ferrari pour la résolution des équations du 4^{ième} degré :

$$\eta = \left[\frac{-1 - 2\gamma\sqrt{h(\gamma)}}{4\gamma} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{4\gamma^2} - h(\gamma) - \frac{32\gamma^3 - 1}{4\gamma^3\sqrt{h(\gamma)}}} \right]^3 \quad (7.21)$$

si $\gamma \leq 0.314980262473$, et

$$\eta = \left[\frac{-1 + 2\gamma\sqrt{h(\gamma)}}{4\gamma} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{4\gamma^2} - h(\gamma) + \frac{32\gamma^3 - 1}{4\gamma^3\sqrt{h(\gamma)}}} \right]^3 \quad (7.22)$$

si $\gamma \geq 0.314980262473$, et où

$$h(\gamma) = \frac{1}{4\gamma^2} - \frac{2^{10/3}}{\Delta^{1/3}(\gamma)} + \frac{\Delta^{1/3}(\gamma)}{2^{1/3}\gamma}, \quad (7.23)$$

et

$$\Delta(\gamma) = -7 + 16\gamma^3 + \sqrt{49 + 1824\gamma^3 + 256\gamma^6}. \quad (7.24)$$

La formule reposant sur les équations (7.21) et (7.22) ne s'applique pas à des éléments gazeux dans les conditions standard ambiantes (H, He, N, O, F, Ne, Cl, Ar, Kr, Xe, Rn). Négligeant

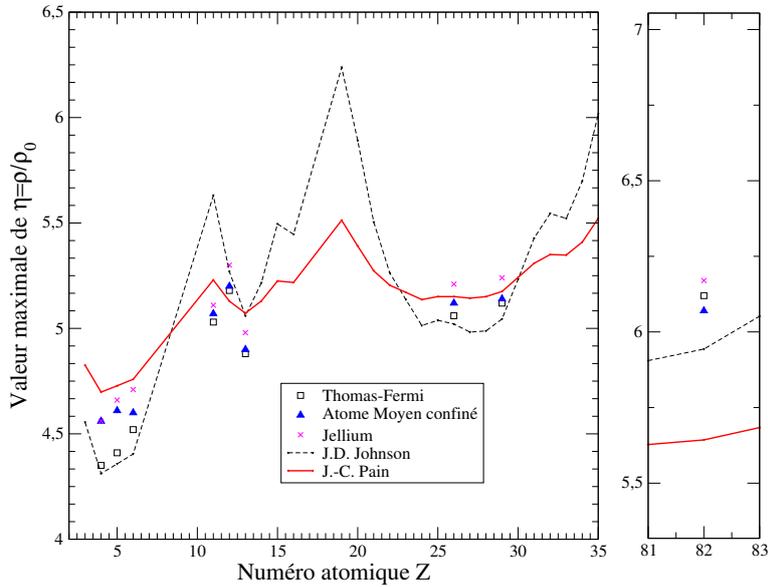


FIGURE 7.9 – Comparaison entre les taux de compression maximale obtenu avec un modèle Thomas-Fermi, un modèle d’atome moyen confiné, un modèle de jellium, le formule analytique de Johnson et notre formule.

les énergies de cohésion et de dissociation, et utilisant des lissages pour les énergies d’ionisation, Johnson [188] a également proposé une formule analytique pour le taux de compression maximal. La figure 7.9 représente le taux de compression maximal pour Be, B, C, Na, Mg, Al, Fe et Cu calculé par le modèle Thomas-Fermi, par le modèle de l’atome confiné, par le modèle du jellium hybride, par le modèle du jellium quantique par notre formule analytique (voir équations (7.21) et (7.21)) et par l’estimation publiée dans la référence [188]. Nous pouvons vérifier que la compression maximale est toujours plus petite que 7 [188], et fortement dépendante de la densité ρ_0 . Tous les modèles statistiques quantiques donnent une compression maximale supérieure à celle prédite par le modèle Thomas-Fermi. Il semble difficile, cependant, de départager l’approche de Johnson de la nôtre. En effet, la dispersion des valeurs est parfois aussi grande que la différence entre le modèle de Johnson et le nôtre. Cependant, le présent calcul n’impose pas de forme particulière à l’équation d’état et ne nécessite aucune hypothèse concernant les énergies d’ionisation comme dans [188]. Au contraire de la formule proposée dans [188], la compression maximale prédite par notre modèle est plus grande pour Fe que pour Al, ce qui est cohérent avec les résultats présentés dans [350]. Cependant, dans [350] les auteurs écrivent que la compression maximale semble augmenter avec Z , même s’ils reconnaissent ne pas avoir d’explication pour cela. Nous pensons qu’il s’agit seulement d’une tendance globale, et nous avons montré que la compression maximale, évaluée soit par le modèle de Johnson, soit par nos formules (7.21) et (7.22), ne varie pas de manière monotone avec le numéro atomique Z .

7.1.6 Conclusion concernant les courbes de Rankine-Hugoniot

L’application des ondes de choc à la physique des plasmas rend possible la génération en laboratoire de conditions correspondant à des densités énergétiques gigantesques typiques de l’état

de la matière quelques microsecondes après la création de l'Univers et d'objets astrophysiques comme les étoiles et les planètes géantes. Les informations physiques obtenues de cette manière étendent notre connaissance fondamentale des propriétés physiques du plasma à une vaste partie du diagramme de phase jusqu'à des pressions neuf ordres de grandeur plus élevées que la pression atmosphérique et des températures six ordres de grandeur plus élevées que la température du corps humain à la surface de la Terre [121]. Nous avons proposé une étude qualitative et quantitative des effets des orbitales sur l'adiabatique dynamique standard (ou principale) pour différents éléments et deux modèles auto-cohérents quantiques : l'atome cellulaire sphérique et l'atome dans un jellium. Dans les représentations (P, ρ) , (E, ρ) et (ρ, T) , les effets quantiques conduisent à des oscillations correspondant à l'ionisation d'orbitales successives. De telles oscillations sont également visibles dans la chaleur spécifique électronique, à travers les anomalies de Schottky, et dans les énergies des orbitales elles-mêmes. Le modèle du jellium dispose d'un meilleur traitement de l'ionisation par pression, puisqu'il repose sur un traitement totalement quantique des électrons. Une estimation de la compression maximale, donnant des valeurs réalistes, a été proposée. La prochaine étape consistera à vérifier si les oscillations existent toujours au-delà du modèle de l'atome moyen, *i.e.* si les configurations électroniques (ou les super-configurations) les plus probables sont prises en compte [275, 276]. Nous pensons qu'elles existeront toujours, car les configurations dominantes (celles qui ont les probabilités de Boltzmann les plus élevées) sont proches de la configuration moyenne de l'atome moyen. L'amplitude des oscillations, cependant, devrait être plus petite. La principale difficulté résiduelle des modèles existants provient de l'impossibilité de représenter de manière simple et réaliste l'influence de l'environnement plasma sur un ion spécifique. En effet, un tel environnement fluctue ; le nombre, la localisation dans l'espace et la structure des ions voisins peut changer considérablement. En principe, il serait nécessaire de calculer un grand nombre de configurations géométriques du système (positions des ions dans l'espace), puis leur moyenne thermodynamique. Une telle approche ne peut être mise en oeuvre numériquement, sauf pour des atomes de faible numéro atomique dans un domaine restreint de température et densité, par exemple en effectuant des simulations de dynamique moléculaire [71]. Le modèle de pseudo-atome neutre (NPA : Neutral Pseudo Atom) [57, 310, 312] prend en compte l'environnement ionique par le calcul de la distribution radiale des ions donnant le nombre moyen d'ions présents à une certaine distance de l'ion central. Une telle approche pourrait être utilisée dans nos modèles. Il faut cependant être conscient des difficultés théoriques (définition de la charge, localisation des électrons) et numériques (extension du potentiel, comportements à l'infini, couplage entre les calculs de structure électronique et ionique) qu'elle pose et qui sont pour la plupart inhérentes aux approches de type HNC (HyperNetted Chain). Une des questions centrales du traitement des ions est de savoir s'il faut effectuer la moyenne sur les ions après le calcul (dynamique moléculaire) ou avant (HNC).

7.2 Plasmas de mélange

Le modèle présenté repose sur l'idée que, à l'ETL, toutes les espèces ioniques ont le même comportement vis-à-vis de l'environnement ("bain" d'électrons libres). Au paragraphe 7.2.1, nous montrons que la minimisation de l'énergie libre totale du plasma implique l'égalité de la pression électronique au bord de toutes les sphères ioniques. Cette pression est calculée simultanément aux volumes ioniques (désormais tous différents) de manière auto-cohérente et égalisée par une procédure itérative de Newton-Raphson multi-dimensionnelle.

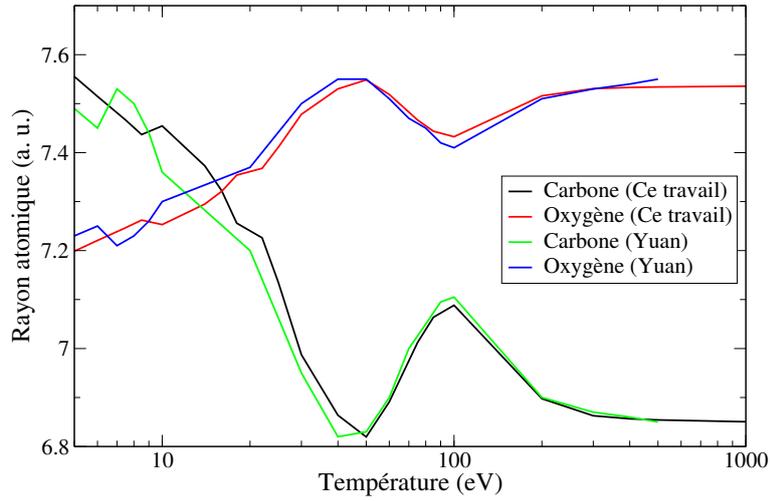


FIGURE 7.10 – Variation des rayons atomiques du carbone et de l’oxygène en fonction de la température et comparaison avec les résultats de Yuan [417, 418]. La non-monotonie illustre la compétition entre les structures électroniques des deux atomes.

T (eV)	Pression totale Potekhin et Chabrier (Mbar)	Pression totale Ce travail (Mbar)
50	2.22	1.86
100	5.06	4.46
500	27.16	27.17

TABLE 7.1 – Pression totale d’un plasma de CO_2 à $\rho_t=0.1 \text{ g/cm}^3$. Comparaison avec les valeurs du modèle chimique de Potekhin et Chabrier [327].

On peut voir sur la figure 7.10 la variation des rayons atomiques du carbone et de l'oxygène en fonction de la température, avec notre modèle et celui de Yuan [417,418]. La non-monotonie illustre la compétition entre les structures électroniques des deux atomes. Le tableau 7.1 donne les pressions totales d'un plasma de CO₂ à la densité de mélange $\rho_t=0.1$ g/cm³ et des températures de 50, 100 et 500 eV, comparées aux valeurs du modèle chimique de Potekhin et Chabrier [327].

7.2.1 Minimisation de l'énergie libre totale

Toutes les espèces ioniques et donc toutes les super-configurations doivent avoir le même environnement électronique (voir figure 7.11). La préservation du volume total ($\sum_{\Xi} W_{\Xi} V_{\Xi} = V$, associée au multiplicateur de Lagrange P) et la normalisation des probabilités des super-configurations ($\sum_{\Xi} W_{\Xi} = 1$, associée au multiplicateur de Lagrange B) doivent être assurées. De plus, le fait que chaque super-couche soit affectée d'un nombre entier d'électrons liés N_{σ} (équation (7.25)) implique l'introduction de multiplicateurs de Lagrange μ_{σ} tels que

$$\sum_{k \in \sigma} g_k \frac{1}{1 + \exp[\beta(\epsilon_k - \mu_{\Xi} - \mu_{\sigma})]} = N_{\sigma}. \quad (7.25)$$

L'énergie libre contrainte s'écrit ainsi

$$\tilde{F} = \sum_{\Xi} W_{\Xi} F_{\Xi} + B \left[\sum_{\Xi} W_{\Xi} - 1 \right] + P \left[\sum_{\Xi} W_{\Xi} V_{\Xi} - V \right] + \frac{1}{\beta} \sum_{\Xi} W_{\Xi} \ln W_{\Xi}. \quad (7.26)$$

La variation par rapport aux volumes V_{Ξ} donne

$$P_{\Xi} \doteq - \left. \frac{\partial F}{\partial V_{\Xi}} \right|_T = P. \quad (7.27)$$

La variation par rapport aux probabilités W_{Ξ} donne

$$W_{\Xi} \propto \exp[-\beta(F_{\Xi} + PV_{\Xi})]. \quad (7.28)$$

L'égalité (7.27) signifie que toutes les super-configurations ont la même pression et qu'il est nécessaire d'inclure un terme de travail PV_{Ξ} dans le facteur de Boltzmann. Ce terme a une valeur non négligeable et joue un rôle crucial [272, 273] dans la forme et la position des distributions ioniques. Toutes les pressions sont calculées de manière auto-cohérente et égalisées par une méthode de Newton-Raphson multi-dimensionnelle. La pression totale d'une super-configuration se compose de trois parties

$$P_{\Xi} = P_{\text{libres}} + P_{\text{liés}} + P_{\text{xc}}. \quad (7.29)$$

et la pression d'échange-corrélation P_{xc} est naturellement calculée dans l'approximation de la densité locale par les formules d'Iyetomi et coll. [172]. Afin de limiter la taille des matrices et des vecteurs, il est commode de regrouper ensemble toutes les super-configurations de même charge pour former les ions. La pression au bord d'un ion de charge i s'écrit alors

$$P_{\text{ion de charge } i} = \sum_{\Xi \text{ de charge } i} W_{\Xi} P_{\Xi}. \quad (7.30)$$

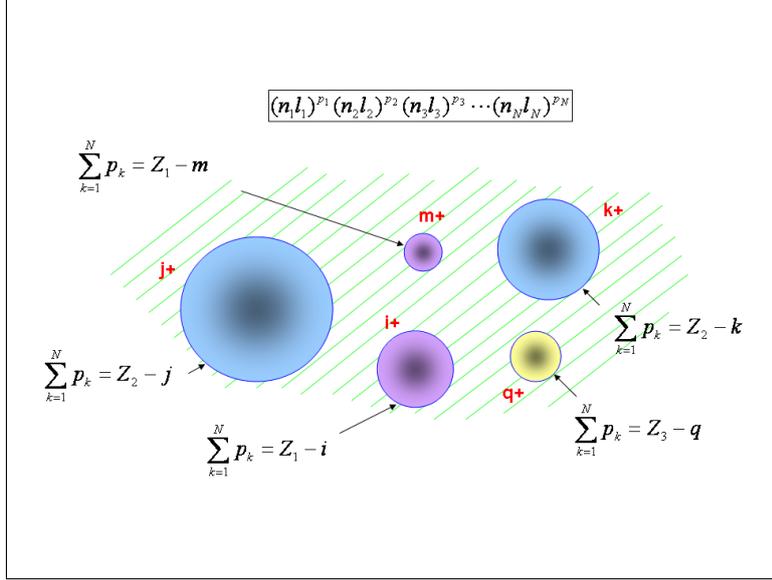


FIGURE 7.11 – Illustration schématique du modèle de mélange “statistique”.

7.2.2 Probabilités des espèces ioniques et quantités thermodynamiques moyennes

La valeur moyenne de la quantité thermodynamique X pour l’ion i de l’élément e , notée $X_{i(e)}$, est donnée par

$$X_{i(e)} = \frac{\sum_{\Xi \in i(e)} W_{\Xi} X_{\Xi}}{\sum_{\Xi \in i(e)} W_{\Xi}}, \quad (7.31)$$

où W_{Ξ} représente la probabilité de la super-configuration Ξ . La probabilité de l’ion $i(e)$ (ion i de l’élément e) s’exprime par

$$\tilde{W}_{i(e)} = \frac{\sum_{\Xi \in i(e)} W_{\Xi}}{\sum_{\Xi} W_{\Xi}}. \quad (7.32)$$

La valeur moyenne $\langle X \rangle$ d’une quantité X s’écrit

$$\langle X \rangle = \sum_{e=1}^E \sum_{i(e)=1}^{N_e} \tilde{W}_{i(e)} X_{i(e)} = \frac{\sum_{e=1}^E \sum_{i(e)=1}^{N_e} \sum_{\Xi \in i(e)} W_{\Xi} X_{\Xi}}{\sum_{\Xi} W_{\Xi}}, \quad (7.33)$$

N_e étant le nombre de degrés de charge (ions) de l’élément e .

7.2.3 Système d’équations

Dans le présent travail, on impose que la pression électronique soit la même à la frontière de toutes les sphères ioniques de tous les éléments. Cela explique pourquoi, de la même manière

que dans le cas à un élément [272–274], il est intéressant d’écrire le système d’équations sous la forme matricielle suivante

$$\vec{S} = \begin{pmatrix} P_{1(1)} - P_{2(1)} \\ P_{2(1)} - P_{3(1)} \\ \vdots \\ \vdots \\ P_{N_1(1)} - P_{1(2)} \\ P_{1(2)} - P_{2(2)} \\ \vdots \\ \vdots \\ P_{N_{E-1}(E-1)} - P_{1(E)} \\ P_{1(E)} - P_{2(E)} \\ \vdots \\ \vdots \\ P_{N_{E-1}(E)} - P_{N_E(E)} \\ \sum_{e=1}^E x_e M_e \sum_{i(e)=1}^{N_e} \frac{\tilde{W}_{i(e)}}{\rho_{i(e)}} - \frac{\sum_{e=1}^E x_e M_e}{\rho_{\text{tot}}} \end{pmatrix} = \vec{0}, \quad (7.34)$$

où $P_{i(j)}$ représente la pression à la frontière de l’ion i de l’élément j . La densité partielle de cet ion est $\rho_{i(j)}$, i variant de 1 à N_j , nombre de degrés de charge de l’élément j . La dernière ligne correspond à la conservation de la quantité de matière

$$\sum_{e=1}^E \frac{x_e M_e}{\rho_e} = \frac{\sum_{e=1}^E x_e M_e}{\rho_{\text{tot}}}, \quad (7.35)$$

x_e étant la proportion de l’élément e (stoechiométrie du mélange) et ρ_{tot} la densité de matière totale du mélange.

7.2.4 Application au centre du soleil

Le flux de neutrinos solaires prédit par un modèle solaire donné dépend de l’opacité moyenne de Rosseland du matériau au centre du soleil [388]. L’opacité a un impact sur les réactions nucléaires et par conséquent sur la luminosité solaire et le flux de neutrinos. L’héliosismologie fournit un grand nombre de fréquences d’oscillation des modes d’oscillation de type p , mesurées avec une bonne précision (0.01 %). Ces modes sont reliés à l’équation d’état du plasma solaire. La température est choisie égale à $T_e=1.3621$ keV, la densité à $\rho_t=157.02$ g/cm³ et les abondances des différents éléments sont celles du mélange bien connu de Grevesse [155]. La pression électronique prédite par notre modèle est 1.4 Mbar et la pression totale 2.43 Mbar (si les ions sont considérés comme un gaz parfait) et 2.46 Mbar (si des corrections “One Component Plasma” sont incluses [161, 269, 292]). Les ionisations et densités partielles résultantes sont présentées dans la table 7.2, et des comparaisons avec les calculs OPAL [342–344] et avec les résultats de Quantum Langevin Molecular Dynamics (QLMD) de Dai et coll. [88] dans la table 7.3. L’équation d’état OPAL appartient à la catégorie des “modèles physiques”, et est fondé sur un développement en puissances de l’activité. Les états liés sont décrits par la fonction de

partition de Planck-Larkin, et le développement systématique en “grappes” permet de prendre en compte la contribution du continuum (états de diffusion) [89]. Le modèle solaire constitue un bon test pour nos modèles : par exemple de très petites quantités de fer et de nickel contribuent notablement (voire majoritairement) à l’opacité.

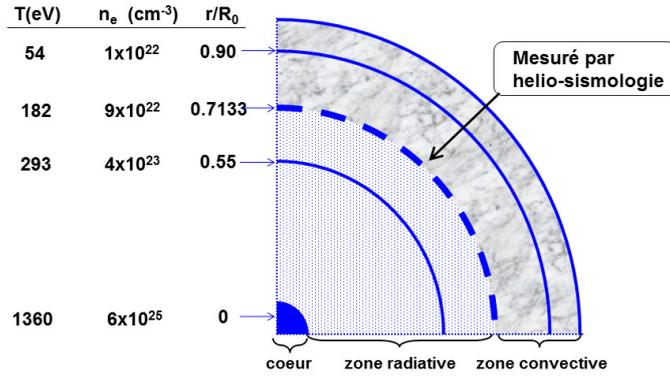


FIGURE 7.12 – Coupe de l’intérieur du Soleil.

Le tableau 7.2 contient les ionisations partielles Z^* et densités ρ (en g/cm³) obtenues avec notre modèle de mélange avec la composition de Grevesse [155]. P_e représente la pression de chaque élément avant d’appliquer la procédure de mélange. Le tableau 7.3 montre une comparaison des pressions dans des conditions de température (T) et densité (ρ) typiques du centre du soleil entre notre approche, l’équation d’état OPAL [342–344] et des résultats issus de simulations de dynamique moléculaire quantique “Langevin” (QLMD : Quantum Langevin Molecular Dynamics [88]).

7.2.5 Opacité et équation d’état d’un plasma de mélange

Opacité

Le libre parcours moyen des photons dans le plasma peut se mettre sous la forme

$$\frac{1}{l} = n_{\text{tot}}\sigma_{\text{tot}} = \rho_{\text{tot}}\kappa_{\text{tot}} = \sum_{e=1}^E n_e\sigma_e = \sum_{e=1}^E \rho_e \frac{V_e}{V} \kappa_e \quad (7.36)$$

où n_{tot} représente la densité totale de matière (en nombre d’atomes par unité de volume), σ_{tot} la section efficace de photo-absorption totale, ρ_{tot} la masse volumique (en g/cm³), et κ_{tot} l’opacité totale. $n_e, \sigma_e, \rho_e, \kappa_e$ et V_e représentent respectivement la densité de matière, la section efficace de

Element	Z^*	ρ	P_e (Mbar)	Elément	Z^*	ρ	P_e (Mbar)
H	1	105.81	$2.10 \cdot 10^5$	P	13.84	248.12	$8.50 \cdot 10^4$
He	2	211.74	$1.03 \cdot 10^5$	S	14.62	243.73	$8.67 \cdot 10^4$
C	5.69	228.02	$9.64 \cdot 10^4$	Cl	14.63	269.70	$8.29 \cdot 10^4$
N	6.62	229.25	$9.63 \cdot 10^4$	Ar	15.29	291.31	$7.78 \cdot 10^4$
O	7.57	229.68	$9.61 \cdot 10^4$	Ca	16.86	265.98	$8.47 \cdot 10^4$
Ne	9.47	233.11	$9.47 \cdot 10^4$	Ti	18.52	290.34	$7.77 \cdot 10^4$
Na	10.41	242.45	$9.11 \cdot 10^4$	Cr	20.23	289.58	$7.77 \cdot 10^4$
Mg	11.33	236.13	$9.35 \cdot 10^4$	Mn	21.09	293.99	$7.62 \cdot 10^4$
Al	12.23	243.33	$9.01 \cdot 10^4$	Fe	21.95	287.63	$7.76 \cdot 10^4$
Si	13.13	236.62	$9.20 \cdot 10^4$	Ni	23.21	281.42	$7.73 \cdot 10^4$

TABLE 7.2 – Ionisations partielles Z^* et densités ρ (en g/cm^3) obtenues avec notre modèle de mélange avec la composition de Grevesse [155]. P_e représente la pression de chaque élément avant d’appliquer la procédure de mélange.

ρ_t (g/cm^3)	T (eV)	modèle d’EOS	P (Mbar)
141.25	989.45	OPAL	$1.6162 \cdot 10^5$
		QLMD	$1.6090 \cdot 10^5$
		Ce travail	$1.6217 \cdot 10^5$
141.25	1189.58	OPAL	$1.9337 \cdot 10^5$
		QLMD	$1.9122 \cdot 10^5$
		Ce travail	$1.9403 \cdot 10^5$
152.70	1352.64	QLMD ^a	$2.3525 \cdot 10^5$
		Ce travail ^a	$2.3584 \cdot 10^5$
		QLMD ^b	$2.2575 \cdot 10^5$
		Ce travail ^b	$2.2629 \cdot 10^5$
		QLMD ^c	$2.2328 \cdot 10^5$
		Ce travail ^c	$2.2532 \cdot 10^5$

TABLE 7.3 – Comparaison des pressions dans des conditions de température (T) et densité (ρ) typiques du centre du soleil entre notre approche, l’équation d’état OPAL [342–344] et la dynamique moléculaire quantique “Langevin” (QLMD : Quantum Langevin Molecular Dynamics [88]). (^a) correspond aux fractions massiques de H, He et C suivantes : $X=0.3387$, $Y=0.6613$ et $Z=0$, (^b) correspond aux fractions massiques de H, He et C : $X=0.3125$, $Y=0.6406$ et $Z=0.0469$ et (^c) correspond aux fractions massiques de H, He et O : $X=0.3077$, $Y=0.6308$ et $Z=0.0615$.

photo-absorption, la masse volumique, le volume et l'opacité de l'élément e . La relation (7.36) nous permet d'écrire l'opacité totale sous la forme

$$\kappa_{\text{tot}} = \sum_{e=1}^E \rho_e \frac{V_e}{\rho_{\text{tot}} V} \kappa_e = \sum_{e=1}^E \frac{m_e}{m} \kappa_e = \sum_{e=1}^E \frac{x_e M_e}{\sum_{e'} x_{e'} M_{e'}} \kappa_e, \quad (7.37)$$

où m_e et M_e représentent la masse totale et la masse molaire de l'élément e . La relation (7.37) peut encore s'écrire

$$\kappa_{\text{tot}} = \sum_{e=1}^E f_e \kappa_e \quad \text{avec} \quad f_e = \frac{x_e M_e}{\sum_{e'} x_{e'} M_{e'}} \quad (7.38)$$

- Remarque :

Par conséquent, la moyenne de Planck du mélange est la somme des moyennes de Planck pondérées des différents éléments, et la moyenne de Rosseland du mélange est supérieure ou égale à la somme des moyennes de Rosseland pondérées des différents éléments

$$\kappa_e^P = \sum_{e=1}^E f_e \kappa_e^P \quad \text{et} \quad \kappa_e^R \geq \sum_{e=1}^E f_e \kappa_e^R. \quad (7.39)$$

Equation d'état

Dans l'approche Thomas-Fermi "standard" des mélanges, l'énergie interne du mélange et la pression du mélange se construisent de la manière suivante :

$$E_{\text{tot}} = \sum_{e=1}^E x_e E_e \quad \text{et} \quad P_{\text{tot}} = \sum_{e=1}^E x_e P_e, \quad (7.40)$$

E_e et P_e étant respectivement l'énergie interne et la pression de l'élément e . Dans notre approche, une telle hypothèse de linéarité n'est pas du tout indispensable. Le calcul auto-cohérent fournit directement la pression et l'énergie interne du mélange.

Cependant, il est important de préciser que nous ne calculons ici que la contribution électronique à la pression, et que les corrélations ioniques, bien que partiellement prises en compte par la description de la sphère ionique prohibant l'interpénétrabilité des sphères, sont insuffisantes ici. Il reste donc deux difficultés à résoudre afin de calculer effectivement des équations d'état par ce modèle :

- Traiter le phénomène d'ionisation par pression [60, 255] afin de disposer d'une composante électronique à la pression continue en fonction du volume (ou de la densité de matière). Les modèles d'atomes dans un jellium s'avèrent *a priori* de bons candidats pour cela.

- Prendre en compte les corrélations ioniques afin d'aller au-delà de la simple expression "gaz parfait" pour la pression ionique. Une solution à ce problème pourrait être de coupler une description fluide des ions, faisant intervenir des fonctions de corrélation ion-ion, avec l'écrantage électronique.

7.2.6 Conclusion concernant le traitement des mélanges

Une nouvelle approche thermodynamique des plasmas chauds et denses a été présentée, ainsi que son application à l'étude des plasmas de mélange. Les électrons liés sont traités par la mécanique quantique alors que les électrons libres sont décrits par le modèle Thomas-Fermi. Un tel modèle permet de tenir compte de la structure en couches, qui a un impact sur les densités partielles des différents éléments du mélange. La cohérence thermodynamique réside dans le fait que la pression électronique est égalisée au bord de toutes les sphères ioniques de tous les éléments du mélange. Ainsi, chaque espèce ionique a son volume (ou densité partielle) propre (déterminé(e) de manière auto-cohérente). Cette idée a également été mise en oeuvre dans le cadre des modèles chimiques par Massacrier et coll. [239], et pour des "mélanges d'atomes moyens" (MAAM : Multi-Average-Atom Model) [403]. Le modèle présenté ici permet de disposer d'une bonne description thermodynamique des plasmas de mélange et constitue un outil d'investigation performant pour la compréhension de la localisation des électrons et de la physique des systèmes Coulombiens fortement couplés. Il permet notamment de prendre en compte l'écrantage par les électrons libres et constitue une approche pertinente des effets de densité sur le calcul de l'opacité.

7.3 Instabilité de D'yakov

Les instabilités de choc se produisent lorsque de petites perturbations du front de choc croissent exponentiellement au cours de la propagation du choc (premier type), ou lorsque ces perturbations sont à l'origine de l'émission spontanée d'ondes de choc et d'ondes de vortex entropique, qui emportent l'énergie de l'onde de choc et conduisent à sa décroissance (deuxième type). Le premier type peut être réduit en minimisant les perturbations initiales dans le système. Le second type, qui a la forme d'un battement à la surface de l'onde de chocs sans croissance ni décroissance des perturbations, dépend principalement des propriétés du matériau, et en particulier des conditions thermodynamiques, et donc de l'équation d'état. L'instabilité de D'yakov (aussi appelée instabilité de D'yakov-Kontorovich) se produit lorsque le rapport de la pente de l'Hugoniot à la pente de la droite de Rayleigh prend certaines valeurs. L'apparition de cette instabilité est fortement liée aux changements de concavité de la courbe d'Hugoniot. Dans les plasmas que nous considérons, les changements de concavité de l'Hugoniot dus aux "effets de couches" (ionisation successive des couches K, L, M, *etc.*) est susceptible d'engendrer l'instabilité de D'yakov, à des températures très élevées (plusieurs dizaines voire centaines de millions de degrés, et des densités de l'ordre de quatre fois la densité du solide ou plus. L'apparition de telles instabilités, qui peuvent constituer un frein à l'ignition en fusion par confinement inertiel, est dépendant de la contribution du champ de rayonnement à l'équation d'état, et donc de l'opacité du matériau considéré.

c_s étant la vitesse du son dans la matière comprimée, le nombre de Mach s'écrit

$$M^2 = \left(\frac{D - u}{c_s} \right)^2 \quad (7.41)$$

et le paramètre de D'yakov-Kontorovich

$$h = -(D - u)^2 \left. \frac{d\rho}{dP} \right|_{\mathcal{H}}. \quad (7.42)$$

L'instabilité de D'yakov-Kontorovich se produit si

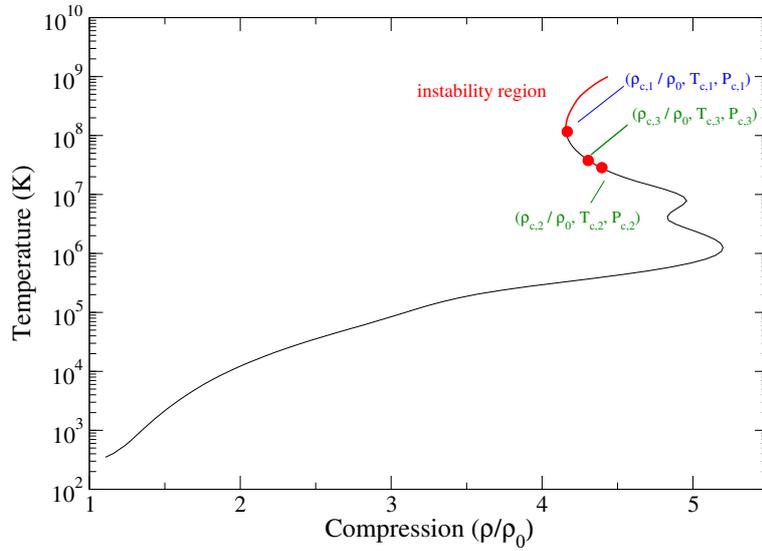


FIGURE 7.13 – Température et compression le long de l’Hugoniot principal du silicium. La région d’instabilité ($h > h_c$) est indiquée en rouge.

$$\frac{1 - (\zeta + 1)M^2}{1 + (\zeta - 1)M^2} < h < 1 + 2M. \quad (7.43)$$

où $\zeta = \rho/\rho_0$ représente la compression du matériau. L’inégalité $h < 1 + 2M$ est toujours largement satisfaite dans les cas que nous avons considérés. Selon Landau et Lifshitz [217], l’instabilité de D’yakov-Kontorovich n’est pas une instabilité au sens littéral : la perturbation (ondulations) créée à la surface, continue indéfiniment à émettre des ondes sans être atténuée ni amplifiée. C’est pourquoi certains auteurs qualifient les fronts de choc de D’yakov-Kontorovich de “neutrally stable”, par opposition aux fronts de choc absolument stables (*e.g.* dans un gaz parfait) dans lequel toutes les perturbations initiales décroissent rapidement dans le temps. La figure 7.13 représente les parties de la courbe d’Hugoniot pour lesquelles l’instabilité de D’yakov peut se produire [406].

Chapitre 8

Résistivités électriques statiques

“... [The critical reader should by now have revolted against this simple-minded use of quasi-classical concepts to describe the behaviour of a quantum-mechanical system. Can one really ignore interference between electron wave-packets in this cavalier fashion?].” (J.M. Ziman, *Principles of the Theory of Solids* (second edition, Cambridge University Press, Cambridge, 1972), p. 214-215.

L'étude des propriétés atomiques des plasmas dégénérés fortement couplés, souvent dénommés “matière dense et tiède”, est importante en astrophysique, puisque ce régime thermodynamique se rencontre par exemple dans l'intérieur des planètes Joviennes. L'un des enjeux les plus importants concerne le calcul d'équations d'état et de coefficients de transport précis. La formulation de Ziman a été largement utilisée pour le calcul de la résistivité électrique statique (DC). Habituellement, les calculs sont fondés sur les fonctions d'onde du continuum évaluées dans le potentiel auto-cohérent dépendant de la densité et de la température d'un atome fictif, représentant l'ionisation moyenne du plasma (modèle de l'atome moyen). Dans ce chapitre, nous présentons tout d'abord des calculs de la résistivité électrique d'un plasma dans le formalisme des super-configurations et à l'approximation quasi-relativiste. Dans cette modélisation, la contribution de toutes les configurations électroniques est prise en compte. Il est possible d'obtenir toutes les situations intermédiaires entre deux cas limites : les configurations détaillées (une super-couche est une simple orbitale) et les ions détaillés (toutes les orbitales sont rassemblées dans la même super-couche). Les ingrédients nécessaires au calcul sont évalués de manière auto-cohérente pour chaque super-configuration, en utilisant une description des électrons dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle densité. L'échange-corrélation électronique est décrit à l'approximation de la densité locale. Les sections efficaces de transfert de quantité de mouvement sont calculées en utilisant les déphasages des fonctions d'onde électroniques du continuum, dans le potentiel de chaque super-configuration, par résolution de l'équation de Schrödinger avec corrections

relativistes (approximation de Pauli). Des comparaisons avec des points expérimentaux sont également présentées. Ensuite, nous exposons des résultats obtenus récemment [408] à l'aide du code d'atome moyen relativiste PARADISIO. Dans une seconde partie, nous proposons une manière cohérente de calculer la conductivité électrique de la matière dense, applicable de l'état solide jusqu'au plasma chaud [408]. Notre approche, qui s'inscrit dans le cadre de la théorie de Ziman consiste à soustraire la contribution de la diffusion élastique aux facteurs de structure du solide et du liquide. Les quantités requises pour le calcul des résistivités sont obtenues à partir de notre modèle d'atome moyen, incluant le facteur de structure total HNC utilisé de l'état liquide au plasma. Nous appliquons une correction à la résistivité de manière à prendre en compte l'ordre à longue portée transitoire dans le liquide et améliorons ce-faisant considérablement l'accord avec les simulations de dynamique moléculaire et les conductivités de l'aluminium issues de mesures expérimentales isobares et isochores. Nos résultats suggèrent que l'ordre à longue portée dans l'aluminium liquide pourrait se traduire par une structure cristalline cfc (cubique faces centrées) "comprimée". Nous avons également analysé deux séries d'expériences ultra-rapides sur l'aluminium, la première par Milchberg et coll. [249] mettant en œuvre des lasers à impulsions courtes, et la seconde par Sperling et coll. effectuée auprès de l'installation LCLS (Linac Coherent Light Source) [369, 370].

8.1 Généralités

La résistivité électrique statique (DC) est importante pour la caractérisation du plasma. A haute densité, lorsque la théorie de Spitzer cesse d'être valide, une théorie multi-particulaire cohérente s'avère nécessaire pour évaluer les coefficients de transport. La formule de Ziman étendue [420] de la résistivité électrique des métaux liquides est fondée sur la théorie de la réponse linéaire, où les électrons libres d'un métal sont uniformément accélérés jusqu'à ce qu'ils entrent en collision avec un ion et soient diffusés. Dans la formulation "matrice t " d'Evans [103], la résistivité s'écrit [309, 316, 351] :

$$\eta = -\frac{k^4}{3\pi^2 Z^{*2} n_i} \int_0^\infty \frac{\partial f}{\partial \epsilon}(\epsilon, \mu) \sigma^M(\epsilon) d\epsilon, \quad (8.1)$$

où $n_i = \rho \mathcal{N}_A / A$ est la densité de matière en cm^{-3} , ρ la densité de matière en g.cm^{-3} , Z^* l'ionisation moyenne du plasma, A la masse atomique en g et \mathcal{N}_A le nombre d'Avogadro. La distribution de Fermi-Dirac et sa dérivée s'écrivent respectivement :

$$f(\epsilon, \mu) = \frac{1}{1 + \exp[\beta(\epsilon - \mu)]} \quad \text{et} \quad \frac{\partial f}{\partial \epsilon}(\epsilon, \mu) = -\beta f(\epsilon, \mu) [1 - f(\epsilon, \mu)], \quad (8.2)$$

où μ est le potentiel chimique. La section efficace de transfert d'impulsion s'écrit :

$$\sigma^M(\epsilon) = \frac{\pi}{k^4} \int_0^{2k} \sigma(q) S(q) q^3 dq. \quad (8.3)$$

où $k^2 = 2\epsilon$. La quantité $S(q)$ est le facteur de structure ionique et $\sigma(q)$ représente la section efficace de diffusion, $q^2 = 2k^2(1 - \chi)$ et $\chi = \cos(\theta)$, où $\theta = (\vec{k}, \vec{k}')$, \vec{k} et \vec{k}' étant les impulsion de l'électron de conduction respectivement avant et après le processus de diffusion. En termes de déphasages et de polynômes de Legendre, on obtient :

$$\begin{aligned}
\sigma^M(k) &= \frac{\pi}{k^6} \sum_{\ell} \sum_{\ell'} (2\ell + 1) (2\ell' + 1) \exp [i [\delta_{\ell}(k) - \delta_{\ell'}(k)]] \sin [\delta_{\ell}(k)] \sin [\delta_{\ell'}(k)] J_{\ell, \ell'}(k) \\
&= \frac{\pi}{k^6} \sum_{\ell} \left\{ (2\ell + 1)^2 \sin^2 [\delta_{\ell}(k)] J_{\ell \ell}(k) \right. \\
&\quad \left. + 2 \sum_{\ell' > \ell} (2\ell + 1)(2\ell' + 1) \cos [\delta_{\ell}(k) - \delta_{\ell'}(k)] \sin [\delta_{\ell}(k)] \sin [\delta_{\ell'}(k)] J_{\ell, \ell'}(k) \right\},
\end{aligned} \tag{8.4}$$

où

$$J_{\ell, \ell'}(k) = \int_0^{2k} P_{\ell} \left(1 - \frac{q^2}{2k^2} \right) P_{\ell'} \left(1 - \frac{q^2}{2k^2} \right) q^3 S(q) dq. \tag{8.5}$$

Lorsque $S(q) \equiv 1$ (diffusion par un seul centre ionique),

$$J_{\ell, \ell}(k) = \int_0^{2k} P_{\ell} \left(1 - \frac{q^2}{2k^2} \right) P_{\ell} \left(1 - \frac{q^2}{2k^2} \right) q^3 dq = \frac{4k^4}{2\ell + 1}, \tag{8.6}$$

et

$$J_{\ell, \ell+1}(k) = \int_0^{2k} P_{\ell} \left(1 - \frac{q^2}{2k^2} \right) P_{\ell+1} \left(1 - \frac{q^2}{2k^2} \right) q^3 dq = -\frac{4k^4(\ell + 1)}{(2\ell + 1)(2\ell + 3)}. \tag{8.7}$$

Dans ce cas particulier ($S(q) \equiv 1$), on obtient l'expression bien connue :

$$\sigma^M(k) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell} (\ell + 1) \sin^2 [\delta_{\ell}(k) - \delta_{\ell-1}(k)]. \tag{8.8}$$

Ainsi, on a :

$$I(\epsilon) = 2\pi \int_{-1}^1 S \left(\sqrt{2k^2(1 - \chi)} \right) |a(k, \chi)|^2 (1 - \chi) d\chi, \tag{8.9}$$

où $a(k, \chi)$, définie par $\sigma(q) = |a(k, \chi)|^2$, est l'amplitude de diffusion. En fait, la résistivité prend maintenant une forme de type "Drude"

$$\eta = \frac{1}{n_e \tau} \tag{8.10}$$

où $n_e = Z^* n_i$ représente la densité électronique. Le temps de relaxation τ est tel que

$$\frac{1}{\tau} = \frac{k^4}{3\pi^2 Z^*} \langle \sigma^M \rangle_{\epsilon} \quad \text{où} \quad \langle \sigma^M \rangle_{\epsilon} = -\frac{k^4}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\partial f}{\partial \epsilon}(\epsilon, \mu) I(\epsilon) d\epsilon. \tag{8.11}$$

Notons qu'un modèle qui décrirait les états du continuum à l'approximation Thomas-Fermi ne donnerait pas une densité d'états acceptable et ne décrirait pas correctement les effets des interactions électron-électron dans les déphasages [280]. Un tel modèle n'est pas réaliste pour l'évaluation de la section efficace de diffusion. Le modèle procède du calcul auto-cohérent totalement quantique (pour les états liés et libres) décrit au chapitre 7.1.2.

8.2 Section efficace de diffusion électron-ion

La section efficace électron-ion de transfert d'impulsion s'écrit

$$\sigma(q) = |a(k, \chi)|^2 = \frac{1}{k^2} \left| \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \exp[i\delta_\ell(k)] \sin[\delta_\ell(k)] P_\ell(\chi) \right|^2, \quad (8.12)$$

où $P_\ell(\chi)$ sont les polynômes de Legendre. Il est utile de séparer la somme sur ℓ en deux parties dans l'Eq. (8.12) : la première somme allant de 0 à ℓ_0 (typiquement égal à 30) et la seconde de (ℓ_0+1) à ∞ . Cette dernière peut être approchée par l'expression classique de la section efficace d'une charge écrantée (sommée de 0 à ∞) à laquelle on soustrait les valeurs pour $\ell \leq \ell_0$. En faisant l'hypothèse, pour de grandes énergies électroniques, d'une section efficace classique pour un potentiel écranté $\sigma(q) \approx B^2/(q^2 + \lambda^2)^2$, cela consiste à écrire [309]

$$\begin{aligned} \frac{1}{k} \sum_{\ell=\ell_0+1}^{\infty} (2\ell + 1) \exp[i\delta_\ell(k)] \sin[\delta_\ell(k)] P_\ell(\chi) &= \frac{B}{2k^2} \left[\sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) Q_\ell(\zeta) P_\ell(\chi) \right. \\ &\quad \left. - \sum_{\ell=0}^{\ell_0} (2\ell + 1) Q_\ell(\zeta) P_\ell(\chi) \right] \\ &= \frac{B}{2k^2} \left[\frac{1}{\zeta - \chi} - \sum_{\ell=0}^{\ell_0} (2\ell + 1) Q_\ell(\zeta) P_\ell(\chi) \right], \end{aligned} \quad (8.13)$$

avec $B = 2Z^*$ et $\zeta = 1 + \lambda^2/2k^2$, où λ est une longueur d'écran. La quantité $Q_\ell(\zeta)$ représente une fonction de Legendre, évaluée par des relations de récurrence pour les petites valeurs de x et par une représentation intégrale (voir Ref. [154], p. 1017, § 8.821) pour $x \geq 1.02^1$ On obtient

$$a(k, \chi) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\ell_0} (2\ell + 1) P_\ell(\chi) \left[\sin[\delta_\ell(k)] \exp[i\delta_\ell(k)] - \frac{B}{2k} Q_\ell(\zeta) \right] + \frac{B}{2k^2} \frac{1}{\zeta - \chi}. \quad (8.15)$$

Puisque $\exp[2i\delta_\ell(k)] - 1 \approx 2i\delta_\ell(k) = iB Q_\ell(z)/k$ [309], et puisque $\delta_\ell(k)$ est connu, pour $\ell=0, \dots, \ell_0$, on ajuste le rapport $\delta_{\ell_0}(k)/\delta_{\ell_0-1}(k)$ à $Q_{\ell_0}(z)/Q_{\ell_0-1}(z)$ de manière à déterminer z ainsi que $\lambda^2 = 2k^2(z - 1)$. De cette manière, λ est une fonction de k . Il peut s'avérer coûteux numériquement de résoudre cette équation pour les nombreuses valeurs de k . Afin d'accélérer la procédure, on peut utiliser la forme asymptotique $Q_n(z) \approx 2^n (n!)^2 / [(2n)!(2n+1)z^{n+1}]$, qui conduit à $Q_{n+1}(z)/Q_n(z) \approx (n+1)/[(2n+3)z]$, *i.e.*, pour $n = 30$, $z \approx 0.492063 \delta_{29}/\delta_{30}$. L'énergie maximale du continuum est prise égale à $\epsilon_m = \mu + 40 k_B T$. Ainsi, à haute température, il peut s'avérer pertinent d'ajouter la correction suivante à la résistivité :

$$\Delta\eta = \frac{1}{3\pi} \frac{n_i}{n_e^2} f(\epsilon_m, \mu) \int_0^{\sqrt{8\epsilon_m}} q^3 S(q) \sigma(q) dq. \quad (8.16)$$

1. Remarque : On a également (see Ref. [154], p. 1017, § 8.820) :

$$Q_\nu(z) = \frac{\Gamma(z)\Gamma(1/2)z^{-\nu-1}}{2^{\nu+1}\Gamma(\nu+3/2)} {}_2F_1 \left[\begin{matrix} \frac{\nu+2}{2}, \frac{\nu+1}{2} \\ \frac{2\nu+3}{2} \end{matrix} ; \frac{1}{z^2} \right]. \quad (8.14)$$

8.3 Facteur de structure

Le facteur de structure est relié à la fonction de distribution radiale $g(r)$ par

$$S(k) = 1 + 4\pi n_i \int_0^\infty [g(r) - 1] \frac{\sin(kr)}{kr} r^2 dr. \quad (8.17)$$

Les relations d'Ornstein-Zernike s'écrivent :

$$h(r) = g(r) - 1 \quad (8.18)$$

et

$$h(r) = c(r) + n_i \int c(|\vec{r} - \vec{r}'|) h(r') dr', \quad (8.19)$$

où $c(r)$ est la fonction de corrélation directe, $g(r)$ la fonction de corrélation de paire et $h(r)$ la fonction de corrélation totale. La relation de fermeture de Percus-Yevick s'écrit :

$$g(r) = \exp[-\bar{v}(r)] [1 + h(r) - c(r)] \quad (8.20)$$

où $\bar{v}(r)$ est le potentiel d'interaction entre deux ions. La relation de fermeture HNC, quant à elle, se présente sous la forme suivante :

$$g(r) = \exp[-\bar{v}(r) + h(r) - c(r)]. \quad (8.21)$$

8.4 Comparaisons avec des valeurs expérimentales (technique du fil explosé)

Les mesures de résistivité des plasmas chauds sont rares, ce qui fait qu'une approche théorique constitue dans de nombreux cas l'unique outil disponible dans de telles études. La mesure de résistivité le long d'un chemin thermodynamique allant du point de fusion dans les conditions normales à un état correspondant à une compression 0.03 à $T=26.5$ eV pour l'aluminium a été effectuée à Los Alamos par Benage et coll. [48] par la technique du fil explosé. La figure 8.1 montre qu'on obtient un bon accord. La précision des résultats expérimentaux est généralement à peu près d'un facteur 2, ce qui est du même ordre que le désaccord typique entre théorie et expérience. Il est important de bien comprendre que l'expression (8.9) néglige les processus de diffusion multiple, pouvant conduire à une différence d'un facteur 1.5 dans les valeurs théoriques [316]. Nos valeurs sont plus basses que les résultats de Perrot et Dharma-Wardana [309], de Faussurier et Blancard [105] (voir figure 8.1) et que les résultats du modèle de "réponse-densité" de Kitamura et Ichimaru [205]. Nous avons utilisé le facteur de structure de Rinker [339]. Pour les densités intermédiaires, nos résultats présentent un bon accord avec le modèle de Lee et More [220], ce qui était assez inattendu.

8.5 Effet des fluctuations de populations

Les électrons liés sont en réalité répartis dans des configurations électroniques. Nous avons vu au chapitre précédent que lorsque les configurations pertinentes dans un plasma sont trop

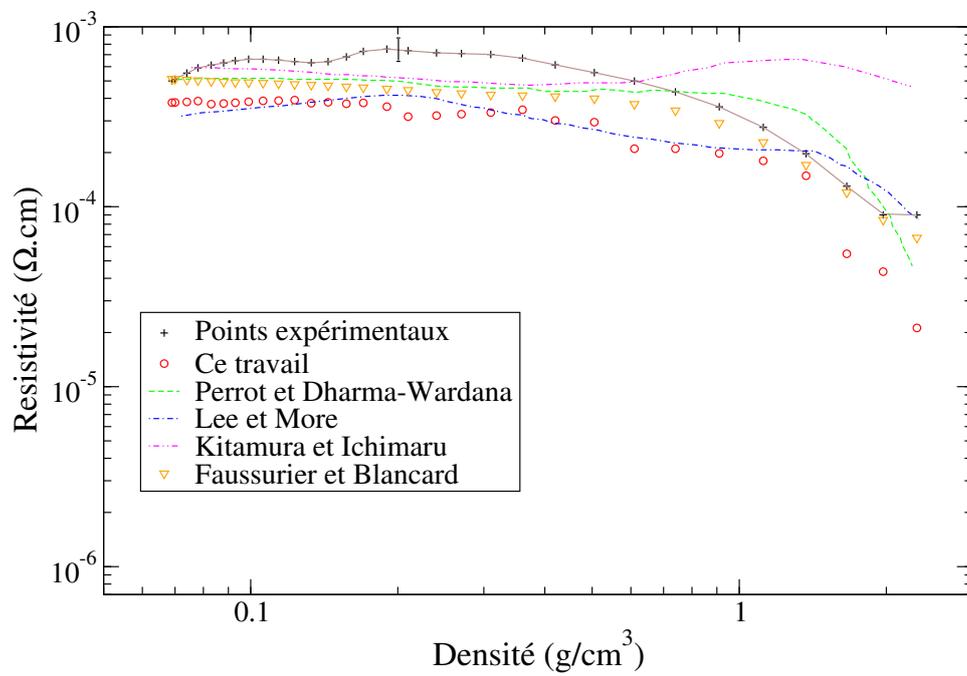


FIGURE 8.1 – Comparaisons entre les points expérimentaux de Benage et coll. et différents modèles théoriques.

nombreuses, notamment lorsque le numéro atomique Z augmente, les configurations peuvent être regroupées en super-configurations. Une configuration est une super-configuration particulière dans laquelle chaque super-couche contient une seule orbitale. Dans une description de la structure électronique du plasma par les super-configurations, la valeur de la quantité thermodynamique X est donnée par

$$\langle X \rangle = \sum_{\Xi} W_{\Xi} X_{\Xi}, \quad (8.22)$$

où W_{Ξ} est la probabilité de la configuration Ξ et $\sum_{\Xi} W_{\Xi} = 1$. Un calcul auto-cohérent similaire à celui décrit dans la section 7.1.2 est effectué pour chaque super-configuration.

Une correction est requise dans l'utilisation de Z^* plutôt que Z_{Ξ} puisque la dépendance est en Z_{Ξ}^2 dans la section efficace de diffusion. En fait, il faut utiliser $\langle Z_{\Xi}^2 \rangle$ plutôt que $\langle Z_{\Xi} \rangle^2$. Les fluctuations de Z_{Ξ} sont intimement liées aux fluctuations des densités ioniques et électroniques du plasma. En faisant l'hypothèse que le temps caractéristique des fluctuations ioniques est trop élevé pour leur permettre de suivre les fluctuations de densité électronique qui déterminent les configurations électroniques et les processus de diffusion d'électrons, on considère les fluctuations dans le sous-système des électrons uniquement. On a

$$\langle Z_{\Xi}^2 \rangle = \langle Z_{\Xi} \rangle^2 \left(1 + n_i \frac{\chi_e}{\beta} \right), \quad (8.23)$$

où la compressibilité du gaz d'électrons en interaction à température finie χ_e peut s'obtenir à l'aide de la fonction réponse du gaz d'électrons grâce au facteur de structure puisque $\langle Z_{\Xi} \rangle n_i \chi_e = \beta S_{ee}(q=0)$.

Concernant le préfacteur dans la formule de Ziman, puisqu'on a $\langle 1/Z_{\Xi}^2 \rangle \geq \langle 1/Z_{\Xi} \rangle^2$ (inégalité de convexité de Jensen) et faisant l'hypothèse que cette dépendance l'emporte sur celle de la section efficace de diffusion, on s'attend à ce que la résistivité moyennée sur les super-configurations soit plus grande que celle obtenue par le modèle de l'atome moyen. Cependant, il est important de garder à l'esprit le fait que ce dernier préfacteur ne doit pas être $1/\langle Z_{\Xi}^2 \rangle$ mais plutôt $\langle 1/Z_{\Xi} \rangle / \langle Z_{\Xi} \rangle$, ce qui pourrait avoir un impact sur les résultats. Cela est lié à la remarque de Rinker [340] précisant que $1/Z^{*2}$ est en fait $1/(Z_0 Z_i)$ où Z_0 , intervenant dans le temps de relaxation, peut être identifié à Z^* sur des fondements variationnels (équation de Boltzmann), ce qui n'est pas le cas de Z_i , nombre de porteurs de charge, intervenant en facteur de l'inverse du temps de relaxation dans l'expression de la résistivité.

8.6 Travaux récents : rôle des diffusions élastiques

Nous proposons une manière cohérente de calculer la conductivité électrique de la matière dense, applicable de l'état solide jusqu'au plasma chaud [408]. Notre approche s'inscrit dans le cadre de la théorie de Ziman et repose sur une procédure unique, consistant à retirer la contribution de la diffusion élastique aux facteurs de structure du solide et du liquide. Le facteur de structure du solide est calculé par un développement "multi-phonons". La partie élastique, qui correspond aux pics de Bragg, constitue le terme à "zéro phonon" amorti par le facteur d'atténuation de Debye-Waller. Pour le liquide, une contribution similaire au facteur de structure résulte d'un ordre à longue portée persistant pendant le temps caractéristique de diffusion électron-ion. Toutes les quantités requises pour le calcul des résistivités sont obtenues à partir

de notre modèle d'atome moyen, incluant le facteur de structure total HNC utilisé de l'état liquide au plasma. Nous n'avons recours à aucune interpolation entre les deux facteurs de structure limites. Nous déterminons la correction à appliquer à la résistivité de manière à prendre en compte l'ordre à longue portée transitoire dans le liquide et montrons que cela améliore considérablement l'accord avec les simulations de dynamique moléculaire et les conductivités de l'aluminium issues de mesures expérimentales isobares et isochores. Nos résultats suggèrent que l'ordre à longue portée dans l'aluminium liquide pourrait se traduire par une structure cristalline cfc "comprimée". Nous avons également considéré deux séries d'expériences ultrarapides sur l'aluminium, la première par Milchberg et coll. [249] mettant en œuvre des lasers à impulsions courtes, et la seconde par Sperling et coll. effectuée auprès de l'installation LCLS et impliquant un chauffage par rayonnement X. Nos tentatives pour expliquer cette dernière en faisant l'hypothèse d'un état liquide initial à une température ionique beaucoup plus petite que la température électronique suggère qu'avant le chauffage principal, le matériau n'est ni un solide parfait ni un liquide *stricto sensu*.

8.6.1 Le facteur de structure ion-ion

Cas du solide

La formule de Ziman, telle qu'elle est donnée plus haut, a été initialement établie pour les liquides. Baym [47] a étendu son domaine d'application aux solides, en montrant que le facteur de structure ionique $S(k)$ devait être remplacé par

$$\bar{S}(\vec{k}) = \int \frac{\beta\hbar\omega}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} S(\vec{k}, \omega) d\omega, \quad (8.24)$$

soit l'intégrale du facteur de structure dynamique $S(\vec{k}, \omega)$, pondéré par $\beta\hbar\omega/(1 - e^{-\beta\hbar\omega})$. A haute température ($k_B T \gg \hbar\omega$), ce poids tend vers 1, $\bar{S}(\vec{k}) \simeq S(\vec{k})$ et on retrouve (après avoir effectué la moyenne sur les orientations du vecteur \vec{k}) la formule de Ziman faisant intervenir le facteur de structure statique, pour lequel on dispose, à ces températures, de méthodes de calcul éprouvées. Ce n'est pas le cas pour les solides. L'intégrale doit être calculée, ce qui nécessite de prendre en compte l'absorption et l'émission de phonons lors de l'interaction entre ions. C'est faisable à très basse température tant que le mécanisme d'absorption-émission n'impliquant qu'un seul phonon prédomine [364]. Pour les solides à température intermédiaire, où les processus à plusieurs phonons ne peuvent plus être négligés, Rosenfeld et Stott [345] ont proposé de remplacer le facteur de structure pondéré $\bar{S}(\vec{k})$ par un facteur effectif

$$S_{\text{eff}}(\vec{k}) = S(\vec{k}) - e^{-2W(k)} S_0(\vec{k}), \quad (8.25)$$

où $S(\vec{k})$ désigne le facteur de structure statique

$$S(\vec{k}) = \int S(\vec{k}, \omega) d\omega, \quad (8.26)$$

auquel on retranche le facteur de structure statique $S_0(\vec{k})$ du cristal à $T = 0$ K, atténué par le facteur de Debye-Waller $e^{-2W(k)}$. W est lié à l'amplitude quadratique moyenne $\langle u^2 \rangle_T$ d'oscillation de l'ion en équilibre thermique à la température T (les crochets désignent la moyenne thermique) :

$$W = \frac{k^2}{6} \langle u^2 \rangle_T. \quad (8.27)$$

Cela revient à retrancher les pics de Bragg, associés aux processus élastiques n'impliquant aucun phonon, du facteur de structure statique total, après les avoir atténués par les facteurs Debye-Waller.

Développement multi-phonons du facteur de structure

Mangin et coll. donnent le développement suivant [235]

$$S(k) = \left[A_0(k) + \sum_{n \geq 1} \frac{[2W(k)]^n}{n!} A_n(k) \right] e^{-2W(k)}, \quad (8.28)$$

où $A_n(k)$ désigne la contribution de processus impliquant l'absorption ou l'émission de n phonons et $A_0(k)$ correspond à la contribution élastique (sans absorption ni émission de phonons). Dans le cadre du modèle de Debye, $2W(k)$ est donné par

$$2W(k) = \frac{3\hbar^2 k^2 T^2}{m_i k_B \theta_D^3} \int_0^{\theta_D/T} \left[\frac{1}{e^z - 1} + \frac{1}{2} \right] z dz, \quad (8.29)$$

où m_i désigne la masse de l'ion et θ_D la température de Debye, valant 428 K pour l'aluminium [318]. L'intégrale peut être calculée analytiquement à l'aide de l'égalité suivante impliquant les fonctions spéciales polylogarithmes Li_n :

$$\frac{N}{x^N} \int_0^x \frac{t^N}{e^t - \alpha} dt = \frac{N\Gamma(N+1)}{\alpha x^N} \left[\text{Li}_{N+1}(\alpha) - \sum_{i=0}^N \text{Li}_{N+1-i}(\alpha e^{-x}) \frac{x^i}{i!} \right], \quad (8.30)$$

Γ représentant la fonction d'Euler usuelle et

$$\text{Li}_n(z) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^n}. \quad (8.31)$$

En prenant N et α égaux à 1, et en utilisant les égalités $\text{Li}_2(1) = \pi^2/6$, $\Gamma(2) = 1$ et $\text{Li}_1(x) = -\ln(1-x)$, on obtient

$$\int_0^{\theta_D/T} \frac{t}{e^t - 1} dt = \frac{\pi^2}{6} - \text{Li}_2(e^{-\theta_D/T}) + \frac{\theta_D}{T} \ln(1 - e^{-\theta_D/T}). \quad (8.32)$$

La fonction dilogarithme $\text{Li}_2(z)$ s'écrit, pour $|z| < 1$ ($z \in \mathbb{C}$)

$$\text{Li}_2(z) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{z^i}{i^2}. \quad (8.33)$$

Toujours dans le cadre du modèle de Debye, on peut établir la relation de récurrence suivante pour les fonctions A_n

$$A_n(\vec{k}) = \frac{\int_0^{q_D} q(2n_q + 1) dq \int A_{n-1}(\vec{k} + \vec{q}) d\Omega}{\int_0^{q_D} q(2n_q + 1) dq d\Omega}, \quad (8.34)$$

où n_q désigne la fonction de distribution des phonons

$$n_q = \frac{1}{e^{\frac{\theta_D}{T} \frac{q}{q_D}} - 1}, \quad (8.35)$$

avec

$$q_D = (6\pi^2 n_i)^{1/3}. \quad (8.36)$$

Pour initier la chaîne de calcul des $A_n(k)$, il nous faut préciser l'expression de $A_0(\vec{k})$. Pour le solide cristallin

$$A_0(\vec{k}) = \sum_{\vec{G}} \delta(\vec{k} - \vec{G}), \quad (8.37)$$

où les \vec{G} sont les vecteurs du réseau réciproque. La fonction $A_1(k)$ est alors obtenue par

$$A_1(k) = \frac{\int_0^{q_D} q(2n_q + 1) dq \int A_0(\vec{k} + \vec{q}) d\Omega}{\int_0^{q_D} q(2n_q + 1) dq d\Omega}, \quad (8.38)$$

où

$$A_0(\vec{k} + \vec{q}) = \sum_{\vec{G}} \delta(\vec{k} + \vec{q} - \vec{G}). \quad (8.39)$$

Après avoir regroupé les vecteurs réciproques en "couronnes" de $N(G)$ vecteurs de même longueur G

$$\sum_{\vec{G}} \delta(\vec{k} + \vec{q} - \vec{G}) = \sum_G N(G) \delta(|\vec{k} + \vec{q}|^2 - G^2), \quad (8.40)$$

et introduit le cosinus χ de l'angle entre les vecteurs \vec{k} et \vec{q} , on obtient

$$\int A_0(\vec{k} + \vec{q}) d\Omega = \sum_G N(G) \int_{-1}^1 \delta(k^2 + q^2 + 2kq\chi - G^2) d\chi. \quad (8.41)$$

La première contribution inélastique (celle impliquant un seul phonon) A_1 s'écrit alors

$$A_1(k) = \frac{\int_0^{q_D} (2n_q + 1) q dq \sum_G N(G) \int_{-1}^1 \delta(k^2 + q^2 + 2kq\chi - G^2) d\chi}{4\pi \int_0^{q_D} (2n_q + 1) q dq}. \quad (8.42)$$

La relation de récurrence est ensuite appliquée pour obtenir les contributions $n \geq 2$

$$A_n(k) = \frac{\int_0^{q_D} (2n_q + 1) q dq \int_{-1}^1 A_{n-1}(k^2 + q^2 + 2kq\chi) d\chi}{2 \int_0^{q_D} (2n_q + 1) q dq}. \quad (8.43)$$

L'aluminium solide à la densité normale $\rho_0 = 2.7 \text{ g/cm}^3$ cristallise dans la structure cfc (cubique faces centrées). L'Annexe F donne les dix premières couronnes de vecteurs réciproques \vec{G} . A la densité ρ_0 , $q_D = 0.8$, $2k_F = 1.85$ et $2\pi/a = 0.821$ (en unités atomiques), a désignant la largeur de la maille cfc. La somme sur les vecteurs \vec{G} doit inclure les vecteurs tels que $G \leq$

$2k_F + q_D = 2.65$, soit les trois premières couronnes de vecteurs réciproques. Mangin et coll. décrivent trois approximations pour le calcul des fonctions $A_n(k)$, dont celle de Meisel-Cote-Debye [246, 247] considérée comme la plus appropriée au calcul des résistivités électriques.

L'approximation de Meisel-Cote-Debye

Cette approximation consiste à admettre que toutes les fonctions $A_n(k)$ sont égales à la première contribution inélastique A_1 , qui est donc la seule à devoir être calculée

$$A_1(k) = A_2(k) = \dots = A(k). \quad (8.44)$$

Le facteur de structure total est alors donné par

$$S(k) = A_1(k) + [A_0(k) - A_1(k)]e^{-2W(k)}. \quad (8.45)$$

Après soustraction de la contribution élastique $A_0(k)e^{-2W(k)}$, le facteur de structure inélastique s'écrit

$$S_{\text{inel}}^{(1)}(k) = A_1(k)(1 - e^{-2W(k)}), \quad (8.46)$$

où l'exposant signifie que cette expression du facteur de structure correspond au calcul du seul terme $A_1(k)$. Cela est suffisant tant que les contributions inélastiques faisant intervenir un seul phonon prédominent. Lorsque la température augmente, le nombre de phonons absorbés ou émis augmente, et le calcul de fonctions $A_n(k)$ avec $n \geq 2$ est requis. Nous proposons d'étendre l'approximation de Meisel-Cote-Debye en calculant, à l'aide de la relation de récurrence (8.43), n fonctions $A_1(k), A_2(k), \dots, A_n(k)$, et d'approcher celles d'indice $i > n$ par $A_i(k) = A_n(k)$ (l'approximation d'origine [246, 247] est retrouvée avec $n = 1$). Les facteurs de structure inélastiques $S_{\text{inel}}^{(n)}(k)$ obtenus en calculant n termes A_n sont reliés par la relation de récurrence

$$S_{\text{inel}}^{(n)}(k) - S_{\text{inel}}^{(n-1)}(k) = (A_n(k) - A_{n-1}(k)) \left(1 - e^{-2W} \sum_{i=0}^{n-1} \frac{[2W(k)]^i}{i!} \right). \quad (8.47)$$

Nous imposons le critère de convergence suivant

$$\int_0^{2k_F} \left(\frac{S_{\text{inel}}^{(n)}(k) - S_{\text{inel}}^{(n-1)}(k)}{S_{\text{inel}}^{(n)}(k)} \right)^2 dk \leq 10^{-6}. \quad (8.48)$$

Concrètement, pour l'aluminium à la densité normale et à la température de fusion, il est réalisé en calculant $n = 5$ fonctions A_n . A la même densité mais à température ambiante, la convergence est obtenue avec $n = 3$ termes. L'effort en termes de calcul reste très raisonnable puisque relativement peu de fonctions $A_n(k)$ sont requises pour converger vers le facteur de structure inélastique.

Cas du liquide

L'hypothèse émise par Baiko et coll. [20] selon laquelle un ordre à longue portée persiste dans les matériaux fortement corrélés (le paramètre de corrélation Γ sera défini plus loin par l'Eq. (8.57)) s'appuie sur diverses études numériques (les auteurs citent plus particulièrement celle par Dynamique Moléculaire Quantique - DMQ - publiée par Schmidt et al. [357]). Selon

ces auteurs, l'ordre à longue portée serait préservé le temps de la diffusion des électrons par les ions, entraînant la formation de bandes électroniques temporaires comparables à celles de l'état solide, et des effets de diffusion élastique qui doivent être retranchés du facteur de structure total, comme pour le solide. Si on applique cette idée, le facteur de structure $S(k)$ du liquide doit être remplacé dans la formule de Ziman par

$$S_{\text{inel}}(k) = S_{\text{tot}}(k) - S_{\text{el}}(k). \quad (8.49)$$

Mangin et coll. proposent d'écrire la contribution élastique sous la forme suivante [235]

$$S_{\text{el}}(k) = A_0(k)e^{-2W(k)} = \sum_G N(G)\delta(k-G)e^{-2W(k)}. \quad (8.50)$$

Pour le présent travail, le facteur de structure total $S_{\text{tot}}(k)$ a été calculé à l'approximation HNC appliquée aux sphères chargées [341], le processus itératif étant initié avec la fonction de corrélation de paires semi empirique $g(r)$ de Held et Pignolet [164]. Soustraire la contribution élastique $S_{\text{el}}(k)$ produit l'effet suivant sur la résistivité

$$\eta = \eta_{\text{tot}} - \delta\eta_{\text{el}}, \quad (8.51)$$

où η_{tot} est la valeur calculée avec le facteur de structure total et $\delta\eta_{\text{el}}$ la correction

$$\delta\eta_{\text{el}} = \frac{1}{3\pi Z^{*2} n_i} \int_0^\infty \left(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon} \right) I_{\text{el}}(\epsilon) d\epsilon. \quad (8.52)$$

Avec l'aide de l'équation (8.50)

$$I_{\text{el}}(\epsilon) = \int_0^{2k} q^3 S_{\text{el}}(q) \sigma(q) dq = \sum_G N(G) e^{-2W(G)} \times 2k^4 \int_{-1}^1 (1-\chi) |a(k, \chi)|^2 \delta(G - k\sqrt{2(1-\chi)}) d\chi, \quad (8.53)$$

et

$$\delta\eta_{\text{el}} = \frac{1}{3\pi Z^{*2} n_i} \sum_G N(G) e^{-2W(G)} \times \int_{G/2}^\infty \left(-\frac{\partial f}{\partial k} \right) 2k^4 \frac{G^2}{2k^2} \times \left| a(k, 1 - \frac{G^2}{2k^2}) \right|^2 dk. \quad (8.54)$$

Pour le calcul du facteur de Debye-Waller du liquide, susceptible de varier fortement dans la gamme de températures considérée dans ce travail, nous avons utilisé l'expression analytique de Baiko et Yakovlev [19]

$$W(k) = \alpha_1 (u_{-1} e^{-9.1\tau} + 2\tau u_{-2}) / 4, \quad (8.55)$$

avec $u_n = \langle (\omega/\omega_{pi})^n \rangle_{ph}$ où $\omega_{pi} = (4\pi Z^{*2} n_i / m_i)^{1/2}$ (on rappelle que m_i désigne la masse de l'ion) est la fréquence d'oscillation des ions. Les crochets signifient la moyenne sur les fréquences de phonon ω . Les moments u_{-1} et u_{-2} valent respectivement $u_{-1} = 2.8$ et $u_{-2} = 13$ pour le réseau cubique centré (cc) [323]. Potekhin et coll. [328] affirment que les facteurs de structure pour le réseau cfc sont quasiment identiques à ceux du réseau cc, et préconisent d'utiliser ces valeurs des

moments également pour les facteurs de structure de réseaux cfc. Le paramètre τ est le rapport $\tau = T/T_p$ où $T_p = \hbar\omega_{pi}/k_B$ (i.e. ω_{pi} avec les unités atomiques utilisées dans ce travail). Enfin

$$\alpha_1 = \alpha_0 \frac{k^2}{4k_F^2}, \text{ avec } \alpha_0 = \frac{4k_F^2 R_{WS}^2}{3\Gamma\tau}, \quad (8.56)$$

où

$$\Gamma = \frac{Z^{*2}}{(k_B T) R_{WS}} \quad (8.57)$$

désigne le paramètre de corrélation ion-ion du plasma. On rappelle que $R_{WS} = (3/4\pi n_i)^{1/3}$ est le rayon de la sphère de Wigner-Seitz. L'expression analytique (8.55) a été ajustée sur des calculs à des densités comprises entre 10^3 et 10^{11} g/cm³ où les plasmas sont totalement ionisés, mais serait, selon les références [19, 328], valable à des densités plus basses (jusqu'à 1 g/cm³) en utilisant la charge effective Z^* de l'ion à la place du numéro atomique Z (comme présenté dans l'article de Baiko et coll. [19]), ce que nous avons fait dans les expressions de Γ et ω_{pi} .

8.6.2 Conductivités isochores

La figure 8.2 regroupe la plupart des données expérimentales (symboles pleins) et théoriques (symboles vides) relatives à la conductivité électrique de l'aluminium à la densité ρ_0 et à $300 \text{ K} \leq T \leq 100 \text{ eV}$. Pour l'aluminium solide ($T \leq T_{\text{melt}} \approx 930 \text{ K}$), les valeurs expérimentales sont celles de Desai et coll. [93] (cercles pleins noirs) et celles de Brandt et Neuer [66] (carrés rouges pleins). Pour l'aluminium liquide, les valeurs publiées par Desai et coll. [93] (cercles noirs pleins au-delà de 0.1 eV) et celles de Gathers [132] (losanges bleus pleins) ont été retenues. Ces dernières sont celles de la colonne 5 de la table II de son article, et prolongent les valeurs mesurées pour le liquide par Desai et coll. [93]. Comme le signalent un certain nombre d'auteurs [95, 401, 415], ces données sont issues d'expériences isobares et non isochores. Les résistivités mesurées par Gathers pour l'aluminium liquide correspondent à des densités comprises entre 2.4 g/cm³ et 1.7 g/cm³. Par contre, pour l'aluminium solide, les densités s'écartent assez peu de la valeur normale ρ_0 . Selon Leitner et coll. [222], on a $\rho = 2.514 \text{ g/cm}^3$ juste avant la température de fusion, soit un écart de 7 %. Aussi, nous avons fait le choix de retenir ces conductivités expérimentales pour l'aluminium solide en vue de comparaisons avec des calculs effectués à la densité ρ_0 . Le cas des conductivités isobares de Gathers sera abordé à part. Au-delà du dernier point mesuré par Gathers, quelques uns des résultats de Milchberg et coll. [249] issus d'expérience de chauffage isochore par laser de forte intensité sont également présentés (triangles noirs pleins avec barres d'erreur). Les symboles vides correspondent aux résultats théoriques obtenus pour $\rho_0 = 2.7 \text{ g/cm}^3$, essentiellement par la DMQ associée à l'approximation de Kubo-Greenwood. Les cercles vides rouges sont les calculs de Knyazev et coll. [207], les losanges verts vides ceux de Witte et coll. [415] et les triangles bleus vides ceux de Starrett et coll. [376]. Les carrés noirs vides sont issus du travail de Sjoström et coll. [367], qui diffère des études précédentes par l'utilisation de la dynamique moléculaire sans orbitales.

Les courbes correspondent à nos calculs pour l'aluminium à la densité normale où on a utilisé les quantités issues du code PARADISIO. Pour l'aluminium solide ($T \lesssim 0.08 \text{ eV}$), l'accord entre nos résultats à la densité ρ_0 (courbe verte) et les expériences (cercles pleins rouges et noirs) est plutôt satisfaisant. Les quelques écarts constatés peuvent être expliqués. Près de la fusion, ils sont cohérent avec le fait que la densité expérimentale diffère légèrement de ρ_0 . Selon Leitner

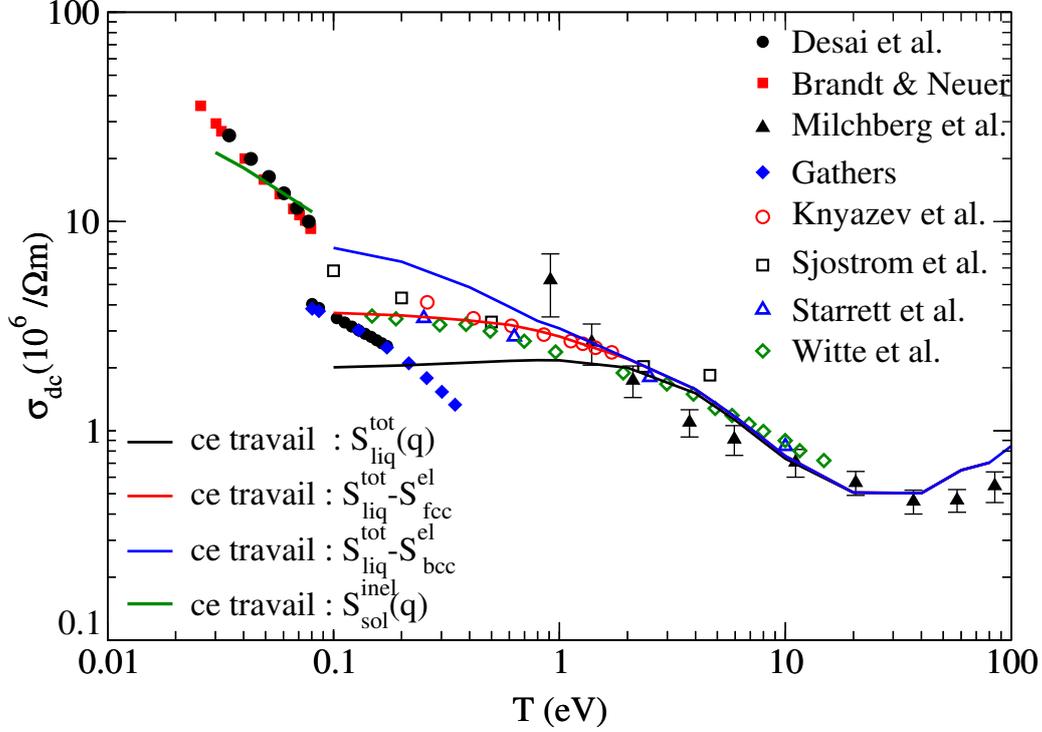


FIGURE 8.2 – Conductivité électrique de l’aluminium à la densité $\rho_0 = 2.7 \text{ g/cm}^3$. Symboles pleins : expériences, d’après Desai et coll. [93] (cercles pleins noirs), Brandt et Neuer [66] (carrés pleins rouges), Gathers [132] (losanges pleins bleus) et Milchberg et coll. [249] (triangles pleins noirs). Symboles vides : DMQ, d’après Knyazev et coll. [207] (cercles vides rouges), Sjostrom et coll. [367] (carrés vides noirs), Starrett et coll. [376] (triangles bleus vides) et Witte et coll. [415] (losanges verts vides). Lignes : nos résultats. Ligne noire : avec le facteur de structure $S(q)$ HNC total. Lignes rouge et bleue : les contributions élastiques ont été retranchées de $S(q)$, considérant respectivement un ordre temporaire à longue portée de type cfc ou cc dans l’aluminium liquide.

et coll. [222], la densité de l’aluminium y est 7% plus basse que ρ_0 . Au voisinage de la fusion, nous calculons $\sigma = 11.12 (\mu\Omega.m)^{-1}$. Comme $\sigma \propto 1/n_i \propto 1/\rho$, on peut évaluer grossièrement la valeur “corrigée” de la conductivité à $\sigma_{\text{correc}} \approx 10.34 (\mu\Omega.m)^{-1}$, ce qui nous rapproche de la valeur expérimentale $\sigma_{\text{exp}} \approx 9.46 (\mu\Omega.m)^{-1}$ reportée par Desai et coll. [93]. A température ambiante, la densité expérimentale est ρ_0 , et l’écart entre la valeur mesurée et notre calcul peut s’expliquer par le fait qu’à basse température ($T \ll \theta_D$), le facteur de structure pondéré $\bar{S}(q)$, qu’il convient d’utiliser dans la formule de Ziman, ne tend pas vers le facteur de structure statique $S(q)$. L’expression de Mangin et coll. [235] correspond à un facteur statique (i.e. l’intégrale du facteur de structure dynamique non pondéré), aussi son utilisation pour le calcul de la résistivité devient-elle discutable aux températures $T \ll \theta_D$.

Nous présentons trois calculs au-delà de la température de fusion ($T \gtrsim 0.08 \text{ eV}$). La courbe noire a été obtenue en utilisant le facteur de structure HNC total dans la formule de Ziman, et les courbes rouge et bleue en appliquant la correction $\delta\eta_{\text{el}}$ (Eq. 8.54), considérant deux types d’ordre à longue portée. On constate que ces corrections ont une incidence importante sur les conducti-

vités électriques, et qu'elles sont sensibles au type d'ordre à longue portée considéré pour le calcul des contributions élastiques au facteur de structure. La courbe rouge correspond à un ordre de type cfc et la courbe bleue à un ordre de type cc. L'accord avec les autres résultats théoriques est meilleur avec l'ordre cfc, soit la structure cristallographique de l'aluminium solide à la densité ρ_0 , ce qui peut être vu comme un signe encourageant. Cependant, juste au-delà de la fusion, la courbe rouge semble trop basse en comparaison des valeurs expérimentales de Gathers, qui sont elles-mêmes inférieures aux conductivités à la densité normale. Aux températures proches de la fusion, la courbe bleue, après correction des effets de densité, pourrait mieux reproduire les points de Gathers. Ce point sera examiné un peu plus bas (section 8.6.3).

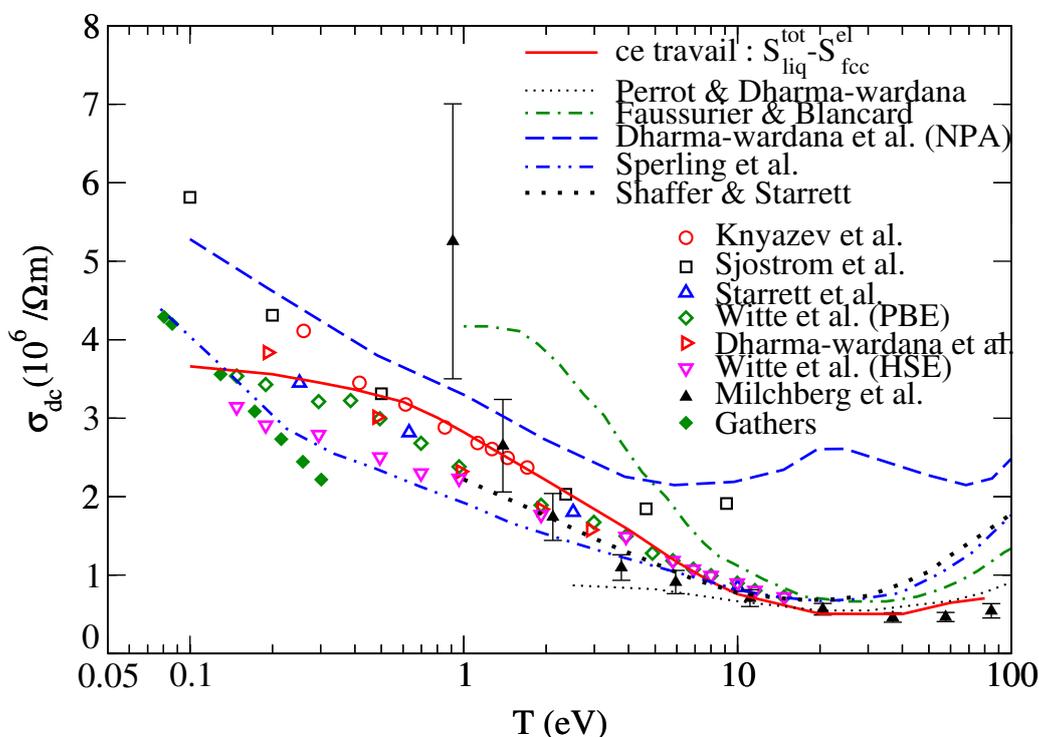


FIGURE 8.3 – La figure reprend les données présentées dans la figure 8.2 précédente, en se centrant sur l'état liquide et plus généralement la matière dense et tiède. Les résultats de quelques autres études y ont été ajoutés. Triangles magenta pointant vers le bas : Witte et coll., avec une autre fonctionnelle d'échange-corrélation (i.e. HSE) [415]. Triangles rouges pointant vers la droite : valeurs DMQ de Dharma-wardana et coll. [95]. Ligne rouge : notre calcul, avec correction des effets élastiques liés à un ordre à longue portée de type cfc dans le liquide. Fins pointillés noirs : calculs d'atome moyen de Perrot et Dharma-wardana [316]. Les points et tirets verts : calculs d'atome moyen de Faussurier et Blancard [107]. Doubles points et tirets bleus : résultats de Sperling et coll. [370], tirets courts noirs : récent calcul de Schaffer et Starrett [362] et tirets bleus : modèle du pseudo-atome neutre (NPA) [95].

La figure 8.3 se concentre sur les états liquide et plasma et présente les conductivités sur une échelle linéaire. Les valeurs expérimentales de Gathers et celles de Milchberg et coll., de même que les résultats des études DMQ de la figure 8.2 y sont repris, et complétés par d'autres conductivités théoriques. Les résultats de Witte et coll. de la figure 8.2 (losanges verts) corres-

pondent à des calculs avec l’approximation de Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) pour l’échange-corrélation (XC) [308] dans le cadre de la GGA (Generalized Gradient Approximation). La figure 8.3 montre également (triangles magenta pointant vers le bas) les calculs des mêmes auteurs utilisant l’approximation GGA de Heyd-Scuseria-Ernzerhof (HSE) [168] et ceux de Dharma-wardana et coll. [95] (triangles rouges pointant vers la droite) également basés sur l’échange-corrélation PBE. Sjostrom et coll. (cercles rouges) et Knyazev et coll. (carrés noirs) ont utilisé l’approximation de Perdew-Zunger (PZ) dans le cadre de la LDA [307], et Starrett et coll. [376] l’approximation GGA-PBE. On peut observer que toutes les courbes basées sur la GGA sont proches l’une de l’autre, et qu’il en est de même pour celles obtenues avec la LDA. Les fonctionnelles d’échange-corrélation LDA prédisent des conductivités plus élevées que les GGA, et parmi ces dernières la fonctionnelle HSE donne des valeurs plus basses que la PBE. Le code PARADISIO utilise l’échange-corrélation LDA de Karasiev et coll. [194], et nos propres conductivités (courbe rouge) [408] calculées avec les quantités qui en sont issues sont en accord avec les résultats de Sjostrom et coll. [367] et de Knyazev et coll. [207] également basés sur la LDA. Les calculs de Sperling et coll. [370] sont représentés par la courbe bleue doubles points-tiret. Pour $S(q)$ compris entre $0.08 \text{ eV} < T < 6 \text{ eV}$, les auteurs proposent une interpolation entre l’approximation de Percus-Yevick appropriée à l’état liquide et l’approximation CHNC (“classical-map hypernetted-chain”), applicable au dessus de 6 eV . Un pseudo-potential électron-ion à quatre paramètres, dont deux pondèrent le potentiel de Coulomb de longue portée et la répulsion de Pauli, a été utilisé. La valeur des paramètres peut être obtenue à partir des relations de dispersion des modes de phonons (les auteurs ont utilisé les données expérimentales). Il leur reste cependant un paramètre libre noté a , introduit pour piloter la dépendance en température du pseudo-potential. La figure montre le résultat obtenu avec $a = 2$, soit une valeur proche de celle $\pi^2/4 \approx 2.47$, attendue dans le cadre de la LDA. La courbe suit de près les premiers points bruts de Gathers, c’est-à-dire les valeurs déduites des résistances électriques expérimentales, non corrigées des effets de dilatation thermique (nous reviendrons sur ce point dans la section 8.6.3). Les tirets courts noirs correspondent au récent calcul de Schaffer et Starrett [362] associant la version quantique de l’équation Landau-Fokker-Planck et la méthode “mean force scattering”, et dont le résultat est proche des calculs DMQ de Witte et coll.. Pour compléter cet aperçu, nous avons également représenté les résultats très singuliers obtenus par Dharma-wardana et coll. avec la méthode du pseudo-atome neutre (NPA) [95] (tirets bleus). Alors que les modèles d’atome moyen habituelles, et plus particulièrement le modèle INFERNO de Liberman, confinent les électrons à l’intérieur de la sphère ionique, le modèle NPA élargit, pour les électrons libres, ce volume à une “sphère de corrélation”, dont le rayon est celui pour lequel toute corrélation avec l’ion central s’annule. La description NPA des états électroniques libres et des processus d’ionisation permet ainsi de lever l’ambiguïté sur le calcul de la charge ionique Z^* . Elle conduit aussi à des conductivités très différentes dans le domaine de températures où les expériences de Milchberg et coll. [249] montrent un minimum de la conductivité. Au lieu de cela, la courbe bleue correspondant aux calculs NPA affiche un premier minimum vers 6 eV , suivi d’un maximum aux alentours de 25 eV , et d’un second minimum vers 70 eV , traduisant la compétition entre différents processus d’ionisation, dont la description est hors de portée des modèles basés sur la sphère ionique. Cette zone du minimum de conductivité a été l’objet d’un bon nombre d’études [94, 95, 106, 316, 362], donnant lieu à différentes interprétations. Nous n’entrons pas dans les détails de ces discussions, mais retenons cependant la suggestion de la référence [94] d’utiliser un formalisme bi-température pour le calcul des conductivités dans le contexte des expériences de Milchberg et coll. (voir section 8.6.4).

8.6.3 Conductivités isobares

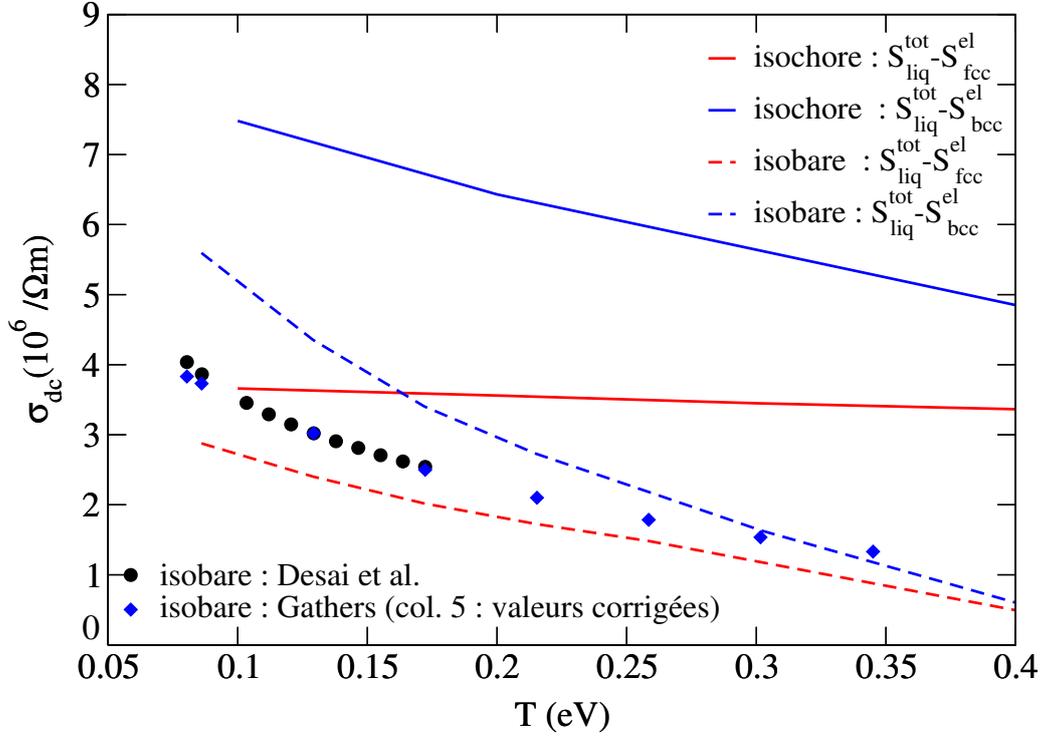


FIGURE 8.4 – Conductivités isobares de l'aluminium liquide. Losanges bleus : valeurs issues de la colonne 5 (valeurs finales après correction des effets de dilatation) de la table II de l'article de Gathers [132]. Cercles noirs : valeurs publiées par Desai et coll. [93]. Nos précédents résultats pour l'isochore ρ_0 sont rappelés par les courbes continues rouge et bleue. Tirets : nos conductivités isobares, considérant un ordre temporaire cfc (tirets rouges) ou cc (tirets bleus) dans le liquide.

Les données publiées par Gathers pour l'aluminium liquide sont issues de mesures isobares, et sont reportées dans les colonnes 4 et 5 de la table II de son article [132]. L'une de ces colonnes correspond aux valeurs brutes, les valeurs retenues pour les résistivités électriques isobares finales, qui tiennent compte de la dilatation thermique de l'échantillon, étant données dans l'autre. Le problème est l'existence d'une certaine incohérence entre le texte de l'article et les labels de ces colonnes, qui a notamment mené Witte et coll. [415] et Dharma-wardana et coll. [95] à deux interprétations différentes de ces expériences. Notre propre analyse nous porte à rejoindre le point de vue de Witte et coll., à savoir que les résistivités électriques isobares sont celles données dans la colonne 5 [415]. On constate (voir la figure 8.4) qu'elles sont cohérentes avec les valeurs publiées par Desai et coll. [93]. Les courbes représentées sur la figure 8.4 correspondent à nos calculs. Les lignes continues rappellent nos conductivités isochores, avec deux hypothèses pour l'ordre à longue portée persistant dans l'aluminium liquide (ordres cfc et cc). Les courbes en pointillés sont leurs équivalents pour les densités et températures précisées dans le tableau 8.1. Ces deux dernières courbes encadrent les données expérimentales, la courbe correspondant à l'ordre cfc, soit celui de la structure cristallographique de l'aluminium solide, étant cependant plus proche. Néanmoins, on ne dispose d'aucun argument, théorique ou expérimental, pour

affirmer que c'est exactement le réseau de l'état solide qui doit persister dans le liquide. Nos calculs suggèrent plutôt une déformation de ce dernier. Les structures cfc et cc sont en fait des structures tétraogonales centrées particulières, avec respectivement des rapports $c/a = 1$ et $c/a = 1/\sqrt{2}$. Aussi, les valeurs expérimentales semblent cohérentes avec une faible compression de la maille cfc le long de l'axe vertical du cube.

T (K)	933	1000	1500	2000	2500	3000	3500	4000
ρ (g/cm ³)	2.42	2.41	2.29	2.18	2.08	1.97	1.87	1.77

TABLE 8.1 – Températures et densités de l'aluminium dans les conditions expérimentales des expériences isobares de Gathers.

8.6.4 Conductivités bi-température

Sperling et coll. ont mesuré des conductivités électriques étonnamment faibles pour la densité ρ_0 de l'aluminium solide à $T \approx 0.2$ eV et $T \approx 6$ eV, auprès de l'installation LCLS [369]. Ces expériences sont interprétées, dans la référence [95], comme des expériences ultra-rapides, au cours desquelles l'échantillon est chauffé et la mesure réalisée dans un laps de temps suffisamment court devant le temps nécessaire à la thermalisation des ions. Seuls les électrons sont portés à haute température T_e , celle T_i des ions restant à une certaine valeur $T_0 \ll T_e$, correspondant à celle de l'échantillon avant l'impulsion principale. Les expériences de Milchberg et coll. [249] avec des impulsions laser courtes entrent également dans cette catégorie des expériences ultra-rapides [94]. La figure 8.5 présente ces deux expériences, les carrés rouges correspondant aux valeurs de Sperling et coll. et les triangles noirs aux expériences laser de Milchberg et coll., réexaminées par Dharma-wardana et Perrot [94]. Les courbes représentent les conductivités électriques théoriques. Notre résultat dans les conditions $T_i = T_e$ (calcul mono-température) est rappelé en rouge. Les longs tirets noirs représentent le calcul NPA bi-température de la référence [95] pour $0.1 \text{ eV} \lesssim T_e \lesssim 10 \text{ eV}$, et $T_0 = 0.06 \text{ eV}$. Le calcul n'a pas été étendu au delà de 10 eV, où on a des mesures ultra-rapides réalisées par Milchberg et coll. Nous reportons, pour ce domaine de températures $T_e > 10 \text{ eV}$, les calculs d'atome moyen bi-températures de Dharma-wardana et Perrot [94]. Les pointillés noirs représentent les conductivités bi-températures statiques qui se situent sensiblement au-dessus des valeurs expérimentales. Les auteurs de la référence [94] obtiennent un meilleur accord avec les conductivités bi-températures dynamiques $\sigma(\omega)$ (tirets magenta, avec $\hbar\omega = 4.026 \text{ eV}$, la fréquence du laser valant $\lambda = 308 \text{ nm}$). Bien qu'elle ait été obtenue avec une méthode d'atome moyen moins sophistiquée, le raccord de cette dernière courbe avec les résultats NPA au voisinage de $T_e \approx 10 \text{ eV}$ est presque réalisé.

Les deux autres courbes bleues correspondent à nos propres calculs, basés sur le formalisme bi-température de Ziman. Dans ce dernier, la résistivité s'écrit [94, 317]

$$\eta_{2T} = -\frac{1}{3\pi} \frac{n_i(T_i)}{n_e(T_e)^2} \int_0^\infty d\epsilon \frac{\partial f}{\partial \epsilon}(\epsilon, \mu, T_e) I(\epsilon, T_i, T_e), \quad (8.58)$$

la densité électronique à T_e et celle des ions à T_i étant reliées par

$$n_e(T_e) = Z^* n_i(T_i). \quad (8.59)$$

L'intégrale bi-température $I(\epsilon, T_i, T_e)$ est donnée par

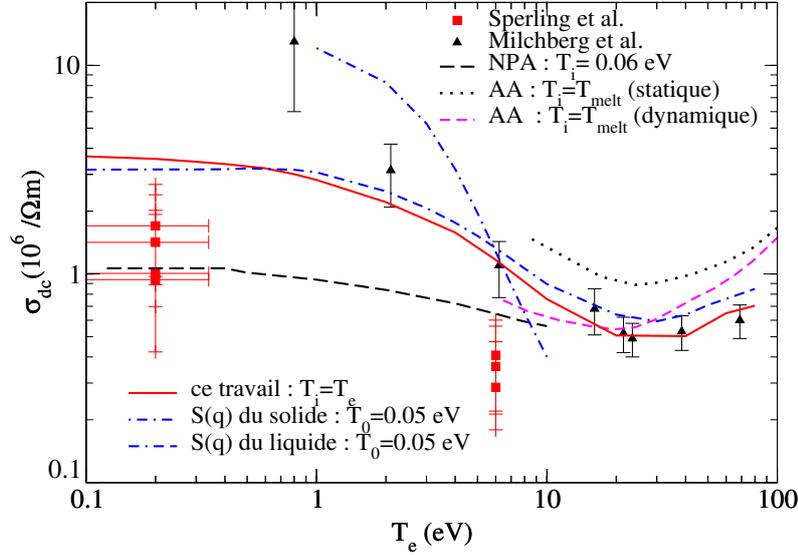


FIGURE 8.5 – Conductivité électrique de l’aluminium par chauffage ultra-rapide. Carrés rouges : chauffage par rayons X auprès de l’installation LCLS [369], et triangles noirs : chauffage par laser, expériences de Milchberg et coll. [249], réinterprétées par Dharma-wardana et Perrot [94]. Longs tirets noirs : calculs bi-température NPA à $0.1 \text{ eV} \lesssim T_e \lesssim 10 \text{ eV}$. Pointillés noirs : conductivité statique bi-température dans le cadre du modèle de la sphère ionique, et tirets magenta : conductivité dynamique bi-température $\sigma(\omega)$, où $\hbar\omega = 4.026 \text{ eV}$, avec le même modèle. Courbe rouge continue : présent travail, avec $T_e = T_i$. Nos conductivités bi-températures : avec le facteur de structure $S(q)$ du solide (points et tirets bleus) et avec celui du liquide, où les ions sont à la température $T_0 = 0.05 \text{ eV}$ (doubles points et doubles tirets bleus).

$$I(\epsilon, T_i, T_e) = \int_0^{2k} q^3 S(q, T_i, T_e) \Sigma(q, T_e) dq. \quad (8.60)$$

La fonction de distribution de Fermi et la section efficace de diffusion sont ici respectivement notées $f(\epsilon, \mu, T_e) \equiv f(\epsilon, \mu(T_e))$ et $\Sigma(q, T_e)$ pour rappeler que ces fonctions sont relatives à des électrons à la température $T_e \neq T_i$. De la même manière, $S(q)$ est remplacé par $S(q, T_i, T_e)$, c’est-à-dire le facteur de structure d’un ensemble d’ions à la température T_i immergé dans un gaz d’électrons à la température T_e . Pour l’analyse des expériences ultra-rapides, on considère que l’échantillon est préchauffé à une certaine température T_0 avant le chauffage des seuls électrons par l’impulsion principale. Aussi, on peut considérer que le facteur de structure à utiliser dans le formalisme bi-température de Ziman est $S(q, T_0, T_0) \equiv S(q, T_0)$. Par ailleurs, Petrov et coll. [317] remarquent que les interactions ioniques dépendent très faiblement de la température électronique dans le cas de l’aluminium, justifiant ainsi cette approximation. Ces auteurs ont étudié les effets des températures ionique et électronique sur la résistivité électrique, et observé qu’elle ne peut augmenter (i.e. que la conductivité ne peut baisser) que si la température ionique T_i augmente. Cette tendance est confirmée par l’approche DMQ-KG (KG pour Kubo-Greenwood) de Knyazev et Levashov, qui proposent la relation suivante, pour $3000 \text{ K} \leq T_i \leq T_e \leq 20\,000 \text{ K}$:

$$\sigma_{\text{KL}}(T_i, T_e) = \frac{2.844 \cdot 10^7}{[T_i(K)]^{0.25}} \Omega^{-1} m^{-1}. \quad (8.61)$$

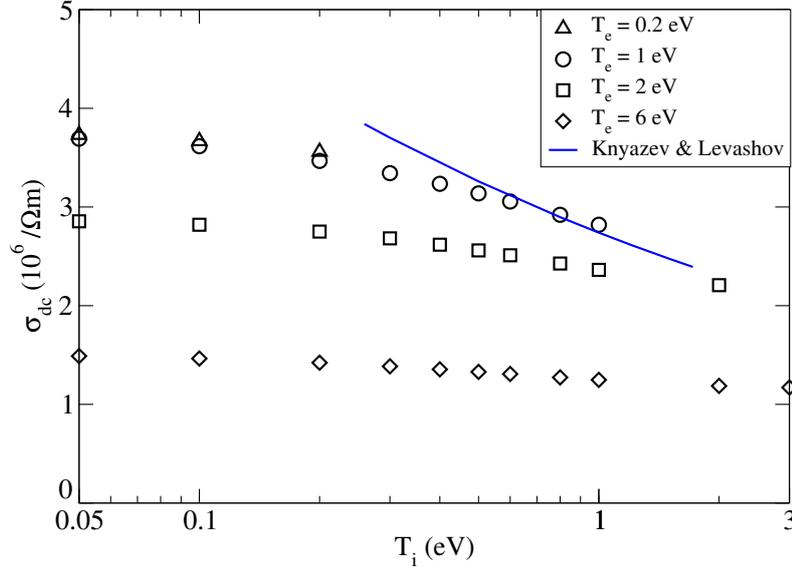


FIGURE 8.6 – Conductivités électriques bi-températures de l’aluminium, calculées avec le facteur de structure du liquide $S(q, T_i)$ à différentes températures T_i (symboles). La ligne bleue est l’approximant proposé par Knyazev et Levashov pour leurs calculs DMQ aux températures $3000 \text{ K} \leq T_i \leq T_e \leq 20\,000 \text{ K}$ [208].

Ces résultats excluent la possibilité d’un préchauffage de l’échantillon d’aluminium jusqu’à l’état liquide dans le cas des expériences LCLS, ce qui rejoint la conclusion du travail présenté dans la référence [95], où les conductivités calculées avec le facteur de structure du liquide $S(q, T_0)$, avec $T_0 = T_{\text{melt}}$, sont largement supérieures aux valeurs expérimentales. La figure 8.6 montre quelques-unes de nos de nos conductivités $\sigma(T_i, T_e)$ bi-températures pour différentes valeurs de la température électronique T_e , dont celles $T_e = 0.2 \text{ eV}$ et $T_e = 6 \text{ eV}$ correspondant aux expériences LCLS, la température ionique variant dans l’intervalle $0.05 \text{ eV} \leq T_i \leq 3 \text{ eV}$. Ces calculs ont été réalisés selon la procédure décrite dans la section 8.6.1, i.e. en soustrayant la contribution élastique $\delta\eta_{\text{el}}$ des résistivités bi-températures totales obtenues avec le facteur de structure $S(q, T_i)$ HNC. La validité de cette approche est illustrée sur la figure 8.6 par l’accord avec les conductivités DMQ de Knyazev et Levashov (approchées par l’expression (8.61), et représentées par la courbe bleue), qui n’est obtenu que si on applique la correction $\delta\eta_{\text{el}}$. Notre figure 8.6 confirme l’impossibilité de reproduire les valeurs expérimentales LCLS en admettant un préchauffage jusqu’à l’état liquide de l’aluminium. Ayant obtenu de bons résultats pour l’aluminium solide avec le facteur de structure dérivé de l’approximation de Meisel-Cote-Debye [246, 247], nous avons utilisé ce dernier pour le calcul des conductivités électriques bi-températures, et obtenu la courbe bleue points et tirets de la figure 8.5, qui s’avère en bon accord qualitatif avec les valeurs expérimentales de Milchberg et coll. pour $T_e < 10 \text{ eV}$, mais se situe considérablement au-dessus des valeurs LCLS. Ce résultat suggère un faible préchauffage de l’aluminium, qui est toujours à l’état solide à l’arrivée de l’impulsion laser principale, lors des expériences de Milchberg et coll..

Mais pour les expériences LCLS, si l'état de l'aluminium avant l'impulsion principale ne peut être parfaitement liquide, il ne peut non plus être exactement solide. Les tirets noirs de la figure 8.5 correspondent au calcul de Dharma-wardana et coll. réalisé avec le facteur de structure d'un liquide "super refroidi" à la température $T_0 = 0.06$ eV [95]. Construit pour simuler un facteur de structure ionique pour le solide, il associe un pseudo-potentiel capable de calculer avec précision les propriétés du solide, aux équations MHNC ("Modified HyperNetted Chain", soit l'approximation HNC prenant en compte les fonctions bridge) décrivant les corrélations de paires dans un fluide. Dans cette section, nous avons montré la pertinence de notre approche dans les conditions des expériences ultra-rapides, où les électrons sont chauffés à des températures T_e supérieures à celles T_i des ions. Nous avons expliqué les expériences de Milchberg et coll. pour $T_e \lesssim 10$ eV en considérant un préchauffage très limité de l'aluminium, laissant le système ionique à l'état solide avant l'impulsion laser principale. Au-delà de 10 eV, les valeurs de Milchberg et coll. peuvent être retrouvées en assumant un préchauffage progressivement plus fort, jusqu'à l'état liquide. Pour ce qui est des expériences LCLS de chauffage par rayonnement X, nous sommes d'accord avec Dharma-wardana et coll. quand nous concluons que l'état de l'aluminium avant l'impulsion principale ne peut être un vrai liquide (i.e., dont la température est supérieure à celle de la fusion). Mais nous avons également montré qu'il n'est pas plus un solide. Dharma-wardana et coll. sont parvenus à expliquer ces expériences LCLS en supposant un état liquide "super refroidi" avant le chauffage principal, ce qui ne correspond pas exactement à un solide. Un calcul comparable est hors de notre portée, et nécessiterait la construction d'un potentiel de paires plus réaliste, en cohérence avec le code d'atome moyen, au lieu d'utiliser le potentiel semi-empirique de Held et Pignolet comme c'est le cas actuellement.

8.7 Conclusion concernant les calculs de résistivités

Nous avons présenté des calculs de la résistivité électrique statique (DC pour Direct Current) des plasmas denses et tièdes en utilisant la formule de Ziman généralisée. Les calculs n'utilisent pas de potentiel modèle, fonction diélectrique ou données structurales, mais procèdent de calculs du type *ab initio* basés sur la théorie de la fonctionnelle densité à l'approximation de la densité locale. La structure électronique d'un diffuseur moyen est déterminée par résolution de l'équation de Schrödinger. Les calculs requièrent les déphasages qui satisfont la règle de somme de Friedel à température finie. Différents facteurs de structure modèles ont été testés. Nous avons discuté les approximations de la méthode résultant de l'utilisation d'un modèle d'atome moyen et comparé nos résultats avec d'autres modèles théoriques existants. Nos valeurs sont en assez bon accord avec les données expérimentales. La méthode proposée ici met en oeuvre une approche auto-cohérente *ab initio* de la conductivité électrique des plasmas, sans présager de leur dégénérescence, structure et densité. Elle permet d'effectuer des calculs au-delà du modèle de l'atome moyen, en prenant en compte les fluctuations dues aux configurations électroniques décrivant différents états d'ionisation et d'excitation.

Notre attention a été récemment attirée par les résultats encourageants obtenus par Ovechkin et coll. ainsi que par Hansen et coll. en étendant à l'état liquide un point de vue issu de la physique du solide, consistant à ne retenir que la composante inélastique du facteur de structure pour le calcul de la résistivité par la formule de Ziman. Nous avons poussé cette approche plus loin que ne l'ont fait ces auteurs, pour aboutir à une description continue du facteur de structure, depuis le solide jusqu'au plasma. Ovechkin et coll. se sont contentés d'étudier les états fluides, et Hansen

et coll. ont appliqué le modèle de Baiko et coll. au calcul du facteur de structure ion-ion du solide. Nous avons, dans ce travail, fait le développement multi-phonons du facteur de structure du solide. La partie inélastique de ce dernier correspond aux termes incluant au moins un phonon dans l'interaction de paires. Notre calcul du facteur de structure inélastique du solide converge en poussant le développement jusqu'au cinquième terme, soit celui prenant en compte la création ou l'annihilation de cinq phonons, A l'exception du facteur de Debye-Waller d'amortissement des pics de Bragg de la partie élastique (terme "zéro-phonon" du développement), toutes les autres quantités nécessaires au calcul de la résistivité peuvent être obtenues à l'aide du code d'atome moyen PARADISIO, y compris le facteur de structure HNC total que nous utilisons du liquide au plasma. Aucune interpolation entre deux formes limites n'est requise. C'est la suppression de la contribution élastique, qui décroît progressivement et naturellement lorsque la température augmente, qui permet de faire le lien entre ces deux états de l'aluminium. Nous avons obtenu un accord satisfaisant avec les conductivités électriques expérimentales publiées pour l'aluminium solide. Suivant l'affirmation de Baiko et coll. selon laquelle un ordre à longue portée persiste dans le liquide durant le processus de diffusion électron-ion, une contribution élastique comparable à celle de l'état solide doit également être retirée du facteur de structure total du liquide pour le calcul de sa résistivité. Nous avons établi l'expression de la correction à appliquer à la résistivité du liquide pour prendre en compte l'existence de cet ordre à longue portée transitoire dans le liquide. Cela nous a permis d'améliorer sensiblement l'accord de nos conductivités avec celles issues de la DMQ, et plus particulièrement avec celles reposant sur le même type de fonctionnelles d'échange-corrélations (i.e. basées sur la LDA) que la nôtre. De même, les résultats que nous avons obtenus pour les conductivités isobares de l'aluminium sont nettement plus proches des expériences lorsque nous appliquons cette correction. Nous avons constaté que les conductivités ainsi corrigées sont très sensibles au type d'ordre à longue portée considéré. Nos résultats suggèrent une structure cfc légèrement compressée dans le sens de l'axe c vertical du cube, plutôt qu'un ordre transitoire de type cfc parfait dans l'aluminium liquide. Enfin, nous avons abordé le cas de deux séries d'expériences ultra-rapides réalisées sur l'aluminium, respectivement par Milchberg et coll. avec des impulsions laser courtes, et par Sperling et coll. par chauffage par rayons X sur l'installation LCLS. Les premières ont été l'objet d'un grand nombre d'études théoriques entre 10 eV et 100 eV, où les expériences ont mis en évidence un maximum de la résistivité. Ces études, ainsi que la nôtre, donnent des résultats en bon accord avec les expériences, en utilisant le formalisme de Ziman mono-température habituel. Certains auteurs ont tenté une approche à deux températures, sans constater des différences très importantes. Nous nous sommes concentrés sur le cas des températures électroniques $T_e \lesssim 10$ eV, pour lesquelles le facteur de structure ion-ion a un impact plus important sur les résistivités, et où des effets bi-températures plus marqués sont par conséquent attendus. Admettant que, dans ces expériences, les ions continuent de former un cristal cfc, nous avons utilisé le facteur de structure multi-phonons calculé pour le solide, et obtenu, avec le formalisme de Ziman à deux températures, des résultats en accord qualitatif avec les valeurs expérimentales de Milchberg et coll.. Ce résultat signifie que l'état du sous-système ionique dans les expériences LCLS est très éloigné du solide. Nos tentatives de décrire ces dernières en supposant un état initial à une température $T_i \ll T_e$ mais cependant supérieure à celle de la fusion sont restées sans succès, et suggèrent que l'état initial avant le chauffage par l'impulsion principale n'est ni un solide parfait, ni un liquide normal. Dharma-wardana et coll. ont obtenu de bons résultats dans les conditions de ces expériences LCLS avec un formalisme bi-température basé sur leur code NPA, en considérant un état liquide "super refroidi" à une température T_i sous celle de la fusion. Un tel calcul est,

pour le moment, hors de notre portée. Nous prévoyons d'améliorer notre calcul du facteur de structure HNC total, et espérons alors apporter un nouvel éclairage sur ces expériences LCLS. Nous prévoyons de tester d'autres facteurs de structure, de calculer un facteur de structure ionique cohérent avec la structure électronique, et de poursuivre les comparaisons avec d'autres données expérimentales, notamment avec les résultats de l'enceinte à plasma isochore (EPI) [338]. Parmi les perspectives intéressantes, citons la généralisation aux plasmas de mélanges [221], et l'étude de la conductivité des gaz rares (et notamment l'effet Ramsauer-Townsend [3]).

Chapitre 9

Conclusion générale du mémoire et perspectives

9.1 Conclusion

Ce document présente différentes facettes de la modélisation théorique des propriétés structurales et radiatives des plasmas composés d'ions multi-chargés. Mon travail de recherche de ces dernières années s'articule autour de plusieurs grands axes :

- Etudier et comprendre les régularités, tendances, symétries *etc.* pouvant exister dans les distributions des niveaux et des raies spectrales. Au-delà de l'intérêt fondamental, cela ouvre la porte au développement de méthodes alternatives du calcul des propriétés radiatives des plasmas chauds dont les spectres peuvent s'avérer très complexes (en particulier pour des éléments de Z élevé, à haute température, ou si on veut prendre en compte l'interaction de configurations ou traiter correctement les profils de raie, *etc.*).
- Développer un code de calcul d'opacités détaillées pour l'interprétation d'expériences de spectroscopie et pour disposer de nouvelles tables destinées à alimenter les modèles (codes) de structure et d'évolution stellaires.
- Progresser dans la modélisation des profils de raie (effet Stark et Zeeman, collisions électroniques).
- Assurer la meilleure cohérence possible entre la physique atomique et la physique des plasmas.
- Pouvoir calculer les propriétés structurales (équation d'état), radiatives (opacité) et les coefficients de transport (résistivité) à partir du même modèle.

9.2 Perspectives

Le domaine offre de nombreuses possibilités d'études intéressantes et utiles. Voici quelques pistes :

- Satisfaire le besoin de données détaillées précises et exhaustives : niveaux d'énergie, forces d'oscillateur, énergies de raies et sections efficaces pour des atomes / ions / anions / molécules et des dipôles ioniques transitoires formés au cours de collisions [229].

- Exploiter au mieux l’augmentation constante de la puissance de calcul, qui devrait faciliter le compromis précision / exhaustivité (“accuracy / completeness”).
- Poursuivre les travaux relatifs à l’effet Stark et à l’élargissement de van der Waals. S’il reste impossible aujourd’hui d’effectuer des calculs précis dans les codes d’opacité en couches L, M, *etc.* (ce n’est possible qu’en couche K), il faut trouver des approches alternatives.
- Progresser sur les effets de densité (ou effets d’environnement plasma) : ionisation par la pression (états quasi-liés), distributions réalistes de microchamps pour disposer des meilleurs profils de raie possibles.
- Prendre en compte les oscillations plasma à travers la constante diélectrique [356], en particulier la dégénérescence électronique et l’écrantage.
- Poursuivre le travail relatif à l’hélio-sismologie, concernant la base de la zone convective et la zone d’ionisation He II.
- Poursuivre l’étude des étoiles pulsantes, des étoiles chimiquement particulières et de l’astéro-sismologie en n’éluant pas les modes mixtes (acoustique / gravitationnel) devrait aider à faire progresser la compréhension des opacités.

Dans la continuité de nos études relatives à l’utilisation des méthodes globales en physique atomique des plasmas chauds, nous envisageons d’appliquer la méthode des moments aux spectres moléculaires de rotation-vibration. Ce sujet a déjà été abordé, mais uniquement de manière très partielle, dans la littérature [55, 56].

Bibliographie

- [1] J. Abdallah. Jr., D. Kilcrease, N. Magee, S. Mazevet, P. Hakel and M. Sherrill, High Energy Density Phys. **3**, 309 (2007).
- [2] M. Abramowitz and I.A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, ninth printing, tenth GPO printing (Dover publications, Inc., New-York, 1972).
- [3] J.R. Adams, H. Reinholz, R. Redmer, V.B. Mintsev, N.S. Shilkin and V.K. Gryaznov, Phys. Rev. E **76**, 036405 (2007).
- [4] P. Alaterre, *Spectroscopie X des plasmas créés par Laser ; application à la détermination des gradients de densité et de température*, Thèse de doctorat, Université Paris VI, 1984.
- [5] L.V. Al'tshuler, S.B. Kormer, A.A. Bakanova and R.F. Trunin, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **38**, 790 (1960), Sov. Phys. JETP **11**, 573 (1960).
- [6] L.V. Al'tshuler, A.A. Bakanova and R.F. Trunin, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **42**, 91 (1962), Sov. Phys. JETP **15**, 65 (1962).
- [7] L.V. Al'tshuler, B.N. Moiseev, L.V. Popov, G.V. Simakov and R.F. Trunin, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **54**, 785 (1968), Sov. Phys. JETP **27**, 420 (1968).
- [8] L.V. Al'tshuler and B.S. Chekin, *Metrology of high pulsed pressures*, in : Proceed. of 1st All-Union Pulsed Pressures Symposium (VNIIFTRI, Moscow, 1974) **1**, 5.
- [9] L.V. Al'tshuler, N.N. Kalitkin, L.V. Kuz'mina and B.S. Chekin, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **72**, 317 (1977), Sov. Phys. JETP **45**, 167 (1977).
- [10] L.V. Al'tshuler, A.A. Bakanova, I.P. Dudoladov, E.A. Dynin, R.F. Trunin and B.S. Chekin, Zh. Prikl. Mekh. Tekhn. Fiz. **2**, 3 (1981), J. Appl. Mech. Techn. Phys. **22**, 145 (1981).
- [11] L.V. Al'tshuler, R.F. Trunin, K.K. Krupnikov and N.V. Panov, Usp. Fiz. Nauk **164**, 575 (1996), Sov. Phys. Usp. **39**, 539 (1996).
- [12] D. Angom and V.K.B. Kota, Phys. Rev. A **67**, 052508 (2003).
- [13] M. Asplund and N. Grevesse, A. J. Sauval and P. Scott, A & A **47**, 481 (2009).
- [14] P. Audebert, J.-P. Geindre, A. Rousse, F. Fallières, J.-C. Gauthier, A. Mysyrowicz, G. Grillon, A. Antonetti, J. Phys. B **27**, 3303-3314 (1994).
- [15] P. Audebert, R. Shepherd, K.B. Fournier, O. Peyrusse, D. Price, R.W. Lee, P. Springer, J.-C. Gauthier and L. Klein, Phys. Rev. E **66** (2002), 66412.
- [16] P.Audebert, V.Nagels, J.-P.Geindre, F.Dorchies, O.Peyrusse, S.Gary, F.Girard, R.Shepherd, J.-C.Gauthier and C.Chenais-Popovics, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **81**, 19-30 (2003).

- [17] E.N. Avrorin, B.K. Vodolaga, N.P. Voloshin, V.F. Kuropatenko, G.V. Kovalenko, V.A. Simonenko and B.T. Chernodolyuk, *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **43**, 241 (1986), *JETP Lett.* **43**, 309 (1986).
- [18] H.W. Babcock, *Astrophys. J.* **521**, 132 (1960).
- [19] D.A. Baiko and D.G. Yakovlev, *Astron. Lett.* **21**, 702 (1995). arXiv.astro-ph/9604164.
- [20] D.A. Baiko, A.D. Kaminker, A.Y. Potekhin and D.G. Yakovlev, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5556 (1998).
- [21] J.E. Bailey, P. Arnault, T. Blenski, G. Dejonghe, O. Peyrusse, J.J. MacFarlane, R.C. Mancini, M. Cuneo, D.S. Nielsen and G.A. Rochau, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **81**, 31 (2003).
- [22] J.E. Bailey, G.A. Rochau, 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 and S. Mazevet, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 265002 (2007).
- [23] J.E. Bailey, G.A. Rochau, R.C. Mancini, C. Iglesias, J.J. Mc Farlane, I.E. Golovkin, J.-C. Pain, F. Gilleron, C. Blancard, Ph. Cossé, G. Faussurier, G. A. Chandler, T. J. Nash, D. S. Nielsen and P. W. Lake, *Rev. Sci. Inst.* **79**, 113 (2008).
- [24] J.E. Bailey, T. Nagayama, G.P. Loisel, G.A. Rochau, C. Blancard, J. Colgan, Ph. Cosse, G. Faussurier, C.J. Fontes, F. Gilleron, I. Golovkin, S.B. Hansen, C.A. Iglesias, D.P. Kilcrease, J.J. MacFarlane, R.C. Mancini, S.N. Nahar, C.Orban, J.-C. Pain, A.K. Pradhan, M. Sherrill and B.G. Wilson, *Nature* **517**, 56 (2015).
- [25] P.M.S. Blackett, *Nature* **159**, 658 (1947).
- [26] M. Baranger, *Phys. Rev.* **112**, 855 (1958).
- [27] O.E. Barndorff-Nielsen, *Scand. J. of Statist.* **24**, 1 (1997).
- [28] A. Bar-Shalom and M. Klapisch, *Comput. Phys. Comm.* **50**, 375 (1988).
- [29] A. Bar-Shalom, J. Oreg, W.H. Goldstein, D. Shvarts and A. Zigler, *Phys. Rev. A* **40**, 3183 (1989).
- [30] A. Bar-Shalom, M. Klapisch and J. Oreg, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **71**, 169 (2001).
- [31] C. Bauche-Arnoult, J. Bauche and M. Klapisch, *J. Opt. Soc. Am.* **68**, 1136 (1978).
- [32] C. Bauche-Arnoult, J. Bauche and M. Klapisch, *Phys. Rev. A* **20**, 2424 (1979).
- [33] C. Bauche-Arnoult, J. Bauche and M. Klapisch, *Phys. Rev. A* **25**, 2641 (1982).
- [34] C. Bauche-Arnoult, J. Bauche and M. Klapisch, *Phys. Rev. A* **30**, 3026 (1984).
- [35] C. Bauche-Arnoult, J. Bauche and M. Klapisch, *Phys. Rev. A* **31**, 2248 (1985).
- [36] J. Bauche and C. Bauche-Arnoult, *J. Phys. B : At. Mol. Phys.* **20**, 1659 (1987).
- [37] J. Bauche, C. Bauche-Arnoult and M. Klapisch, *Adv. At. Mol. Phys.* **23**, 131 (1988).
- [38] J. Bauche and J. Oreg, *J. Phys. Coll. C1* **49**, 263-265 (1988).
- [39] J. Bauche, C. Bauche-Arnoult and M. Klapisch, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res.* **B31**, 139 (1988).
- [40] J. Bauche and C. Bauche-Arnoult, *Comp. Phys. Rep.* **12**, 1 (1990).

- [41] J. Bauche, C. Bauche-Arnoult, J.-F. Wyart, P. Duffy and M. Klapisch, Phys. Rev. A **44**, 5707 (1991).
- [42] J. Bauche and C. Bauche-Arnoult, Phys. Rev. Lett. **69**, 7 (1992).
- [43] J. Bauche, C. Bauche-Arnoult and J.-F. Wyart, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **51**, 41 (1994).
- [44] J. Bauche and C. Bauche-Arnoult, Phys. Scr. T **65**, 99 (1996).
- [45] J. Bauche and Ph. Cossé, J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. **30**, 1411 (1997).
- [46] C. Bauche-Arnoult, J. Bauche, J.-F. Wyart and K.B. Fournier, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **65**, 57 (2000).
- [47] G. Baym, Phys. Rev. **135**, A1691 (1964).
- [48] J.F. Benage, W.R. Shanahan and M.S. Murillo, Phys. Rev. Lett. **83**, 2953 (1999).
- [49] F. Benford, Proc. Am. Philos. Soc. **78**, 551 (1938).
- [50] D. Benredjem, A. Calisti, J.-C. Pain and F. Gilleron, J. Phys. : Conf. Ser. **244**, 042001 (2010).
- [51] D. Benredjem, A. Calisti, G. Mondet, J.-C. Pain and F. Gilleron, Can. J. Phys. **89**, 609 (2011).
- [52] D. Benredjem, A. Calisti, F. Gilleron, G. Mondet and J.-C. Pain, proceeding SPIE **7916**, 791602 (2011).
- [53] G. Mondet, F. Gilleron, J.-C. Pain, A. Calisti and D. Benredjem, High Energy Density Phys. **9**, 553 (2013).
- [54] H.A. Bethe, E.E. Salpeter, *Quantum Mechanics of One- and Two-electron Atoms* (Springer Verlag, Berlin, 1957).
- [55] D. Bielińska-Wąz and J. Karwowski, Adv. Quant. Chem. **28**, 159 (1997).
- [56] D. Bielińska-Wąz and J. Karwowski, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **59** 39 (1998).
- [57] C. Blancard and G. Faussurier, Phys. Rev. E **69**, 016409 (2004).
- [58] C. Blancard, P. Cossé, G. Faussurier, Astrophys. J. **745**, 10 (2012).
- [59] C. Blancard, J. Colgan, Ph. Cossé, G. Faussurier, C.J. Fontes, F. Gilleron, I. Golovkin, S.B. Hansen, C.A. Iglesias, D.P. Kilcrease, J.J. MacFarlane, R.M. More, J.-C. Pain, M. Sherrill, and B.G. Wilson, Phys. Rev. Lett. **117**, 249501 (2016).
- [60] T. Blenski, K. Ishikawa, Phys. Rev. E **51**, 4869 (1995).
- [61] T. Blenski, A. Grimaldi and F. Perrot, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **65**, 91 (2000).
- [62] P. Bogdanovich and O. Rancova, Phys. Rev. A **76**, 012507 (2007).
- [63] O. Bohigas and J. Flores, Phys. Lett. B **34**, 261 (1971).
- [64] O. Bohigas, M.J. Giannoni and C. Schmidt, Phys. Rev. Lett. **52**, 1 (1984).
- [65] Y. Bordarier, *Contribution à l'emploi de méthodes graphiques en spectroscopie atomique*, Thèse de doctorat, Université d'Orsay (1970).
- [66] R. Brandt and G. Neuer, "Electrical Resistivity and Thermal Conductivity of Pure Aluminum and Aluminum Alloys up to and above the Melting Temperature", Int. J. Thermophys. **28**, 1429 (2007).

- [67] G. Breit, Phys. Rev. **28**, 334 (1926).
- [68] G. Breit and E. Teller, Astrophys. J. **91**, 215 (1940).
- [69] J.-M. Caillol, J. Phys. A : Math. Gen. **36**, 10431 (2003).
- [70] A. Calisti, C. Mossé, S. Ferri, B. Talin, F. Rosmej, L.A. Bureyeva and V.S. Lisitsa, Phys. Rev. E **81**, 016406 (2010).
- [71] R. Car and M. Parrinello, Phys. Rev. Lett. **55**, 2471 (1985).
- [72] G. Casati and L. Molinari, Phys. Rev. Lett. **64**, 1851 (1990).
- [73] R. Casini and E.L. Landi Degl’Innocenti, A & A **300**, 309 (1995).
- [74] S. Chandrasekhar, *An Introduction to the Study of Stellar Structure* (Dover, New York, 1939).
- [75] C.T. Chantler, J. Phys. Chem. Ref. Data **24**, 71 (1995).
- [76] H. Chen et P. Beiersdorfer. Can. J. Phys. **86**, 55 (2008)
- [77] J. Colgan, D.P. Kilcrease, N.H. Magee, M.E. Sherrill, J. Abdallah Jr., P. Hakel, C.J. Fontes, J.A. Guzik, and K.A. Mussack, Astrophys. J. **817**, 116 (2016).
- [78] M. Comet, J.-C. Pain, F. Gilleron and R. Piron, High Energy Density Phys. **24**, 1 (2017).
- [79] L. Comtet, C. R. Acad. Sci. Paris **270**, 1085 (1970).
- [80] L. Comtet, *Advanced combinatorics*, D. Reidel Publishing Company (1974).
- [81] E.U. Condon and G.H. Shortley, *The theory of atomic spectra* (Cambridge University, Cambridge : England, 1935).
- [82] J.-P. Connerade, J. Phys. B : At. Mol. Phys. **30**, L31 (1997).
- [83] J.-P. Connerade, *Highly Ionized Atoms*, Cambridge Monographs on Atomic, Molecular and Chemical Physics, Vol. 9 (Cambridge University Press, 1998).
- [84] R.M. Corless, G.H. Gonnand, D.E.G. Hare, D.J. Jeffrey and D.E. Knuth, Adv. Comput. Math. **5**, 329 (1996).
- [85] Ph. Cossé, *Contribution à l’étude de la cinétique ionique des plasmas chauds. Mise en évidence de pseudo-équilibres thermodynamiques*, Thèse de doctorat, Université Paris Sud XI, Orsay (2001).
- [86] R.D. Cowan, *The theory of atomic structure and spectra* (University of California Press, Berkeley and Los Angeles, 1981).
- [87] R.F. Curl Jr. and J.E. Kilpatrick, Am. J. Phys. **28**, 357 (1960).
- [88] J. Dai, Y. Hou and J. Yuan, Astrophys. J. **721**, 1158 (2010).
- [89] W. Däppen, Astrophys. Space Sci. **328**, 139 (2010).
- [90] J. Daszýnska-Daszkiewicz, A.A. Pamyatnykh, P. Walczak, J. Colgan, C.J. Fontes, D.P. Kilcrease, MNRAS **466**, 2284 (2017).
- [91] S.J. Davidson, J.M. Foster, C.C. Smith, K.A. Warburton and S.J. Rose, App. Phys. Lett. **52**, 847 (1987).
- [92] D. Delande and J.-C. Gay, Phys. Rev. Lett. **59**, 1809 (1987).
- [93] P.D. Desai, H.M. James and C.Y. Ho, J. Phys. Chem. Ref. Data **13**, 1131 (1984).
- [94] M. W. C. Dharma-wardana and F. Perrot, Phys. Lett. A **163**, 223 (1992).

- [95] M.W.C. Dharma-wardana, D.D. Klug, L. Harbour and L.J. Lewis, *Phys. Rev. E* **96**, 053206 (2017).
- [96] M.S. Dimitrijevic and N. Konjevic, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **24**, 451 (1980).
- [97] M.S. Dimitrijevic and N. Konjevic, *Astron. Astrophys.* **172**, 345 (1987).
- [98] M. Dozières, F. Thais, S. Bastiani-Ceccotti, T. Blenski, J. Fariaut, W. Fölsner, F. Gilleron, D. Khaghani, J.-C. Pain, C. Reverdin, F. Rosmej, V. Silvert, G. Soullié, B. Villette, *High Energy Density Phys.* **17**, 231 (2015).
- [99] V.A. Dzuba and V.V. Flambaum, *Physical Review Letters* **104**, 213002 (2010).
- [100] E. El-Baz, J. Lafoucrière and B. Castel, *Traitement graphique de l'algèbre des moments angulaires*, Collection de monographies de physique (Masson and Cie, Paris).
- [101] E. El-Baz and B. Castel, *Graphical Methods of Spin Algebras* (Marcel Dekker, New-York, 1972).
- [102] E. El-Baz, *Algèbre de Racah and analyse vectorielle graphiques* (Ellipses, Marketing Editions, 1985).
- [103] R. Evans, B.L. Gyorffy, N. Szabo and J.M. Ziman, in *The Properties of Liquid Metals*, edited by S. Takeuchi (Wiley, New-York, 1973).
- [104] U. Fano and G. Racah, *Irreducible Tensorial Sets* (Academic Press, Inc., New York, 1959).
- [105] C. Blancard and G. Faussurier, *Phys. Rev. E* **69**, 016409 (2004).
- [106] G. Faussurier and C. Blancard, *Phys. Rev. E* **91**, 013105 (2015).
- [107] G. Faussurier and C. Blancard, *Phys. Rev. E* **100**, 033202 (2019).
- [108] M. Feingold, D.M. Leitner and M. Wilkinson, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 986 (1991).
- [109] S. Feneuille, *J. Phys. France* **28**, 61 (1967).
- [110] S. Feneuille, *Etude théorique des configurations électroniques mélangées $(\ell + \ell')^N$* , Thèse de doctorat, Université de Paris (1967).
- [111] S. Ferri, A. Calisti, C. Mossé, L. Mouret, B. Talin, M. A. Gigosos, M.A. González and V. Lisitsa, *Phys. Rev. E* **84**, 026407 (2011).
- [112] S. Ferri, A. Calisti, C. Mossé, J. Rosato, B. Talin, S. Alexiou, M.A. Gigosos, M.A. González, D. González-Herrero, N. Lara, T. Gomez, C. Iglesias, S. Lorenzen, R.C. Mancini and E. Stambulchik, *Atoms* **2**, 299 (2014).
- [113] R.P. Feynman, N. Metropolis and E. Teller, *Phys. Rev.* **75**, 1561 (1949).
- [114] V.V. Flambaum, A.A. Gribakina and M.G. Kozlov, *Phys. Rev. A* **50**, 267 (1994).
- [115] V.V. Flambaum, F.M. Izrailev and G. Casati, *Phys. Rev. E* **54**, 2136 (1996).
- [116] V.V. Flambaum and F.M. Izrailev, *Phys. Rev. E* **56**, 5144 (1997).
- [117] V.V. Flambaum, A.A. Gribakina and G.F. Gribakin, *Phys. Rev. A* **58**, 230 (1998).
- [118] S. Flügge, *Naturwiss.* **27**, 544 (1939).
- [119] C.J. Fontes, C.L. Fryer, A.L. Hungerford, P. Hakel, J. Colgan, D.P. Kilcrease, M.E. Sherill, *High Energy Density Phys.* **16**, 53 (2015).
- [120] M.E. Foord, S.H. Glenzer, R.S. Thoe, K.L. Wong, K.B. Fournier, B.G. Wilson and P.T. Springer, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 992 (2000).

- [121] V.E. Fortov, Usp. Fiz. Nauk **179**, 653 (2009), Sov. Phys. Usp. **52**, 615 (2009).
- [122] J.B. French and S.S.M. Wong, Phys. Lett. B **35**, 5 (1970).
- [123] C. Froese Fischer, *The Hartree-Fock Method for Atoms* (John Wiley, New York, 1977).
- [124] P. Fromy, C. Deutsch, G. Maynard, Europhys. Lett. **19**, 375 (1992).
- [125] P. Fromy, C. Deutsch and G. Maynard, Laser and Particle beams **10**, 263 (1992)
- [126] E.B. Frost, Astrophys. J. **24**, 259 (1906).
- [127] K. Fujii and J.-C. Berengut, arXiv :1908.10464v2 (2019).
- [128] Y.V. Fyodorov and Y. Alhassid, Phys. Rev. A **58**, R3375 (1998).
- [129] J.A. Gaffney and S.J. Rose, High Energy Density Phys. **7**, 240 (2011).
- [130] J.A. Gaffney, *Fast Calculation of the Radiative Opacity of Plasma*, PhD thesis (Imperial College, London, 2011).
- [131] B. Gao and A. Starace, Comput. Phys. **1**, 70 (1987).
- [132] G.R. Gathers, Int. J. Thermophys. **4**, 209 (1983).
- [133] B. Georgeot and D.L. Shepelyansky, Phys. Rev. Lett. **79**, 4365 (1997).
- [134] M.A. Gigosos, M.Á. González, B. Talin and A. Calisti, A & A **466**, 1189 (2007).
- [135] F. Gilleron and J.-C. Pain, Phys. Rev. E **69**, 056117 (2004).
- [136] F. Gilleron, J. Bauche and C. Bauche-Arnoult, J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. **40**, 3057 (2007).
- [137] F. Gilleron, J.-Ch. Pain, J. Bauche and C. Bauche-Arnoult, Phys. Rev. E **77**, 026708 (2008).
- [138] F. Gilleron and J.-C. Pain, High Energy Density Phys. **5**, 320 (2009).
- [139] F. Gilleron, J.C. Pain, Q. Porcherot, J. Bauche and C. Bauche-Arnoult, High Energy Density Phys. **7**, 277 (2011).
- [140] F. Gilleron and R. Piron, High Energy Density Phys. **17**, 219 (2015).
- [141] F. Gilleron and J.-C. Pain, Can. J. Phys. **95**, 878 (2017).
- [142] F. Gilleron and J.-C. Pain, Atoms **6**, 11 (2018).
- [143] D. Gilles and O. Peyrusse, J. Quant. Radiat. Transfer **53**, 647 (1995).
- [144] 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.A. Guzik, D.P. Kilcrease, N.H. Magee, J. Harris, M. Busquet, F. Delahaye, C.J. Zeippen and S. Bastiani-Ceccotti, High Energy Density Phys. **7**, 312 (2011).
- [145] D. Gilles, S. Turck-Chièze, M. Busquet, F. Thais, G. Loisel, L. Piau, J.-E. Ducret, T. Blenski, M. Poirier, C. Blancard, P. Cossé, G. Faussurier, F. Gilleron, J.-C. Pain, J.A. Guzik, D.P. Kilcrease, N. H. Magee, J.W.O. Harris, S. Bastiani-Ceccotti, F. Delahaye and C. J. Zeippen, EAS Publications Series **58**, 51 (2012).
- [146] D. Gilles, S. Turck-Chièze, M. Busquet, F. Thais, G. Loisel, L. Piau, J.-E. Ducret, T. Blenski, C. Blancard, P. Cossé, G. Faussurier, F. Gilleron, J.-C. Pain, Q. Porcherot, J.A. Guzik, D.P. Kilcrease, N. H. Magee, J.W.O. Harris, S. Bastiani-Ceccotti, F. Delahaye and C. J. Zeippen, EPJ Web of Conferences **59**, 14003 (2013).

- [147] R. Glück, D. Köppl and G. Wirsching, *Computational Aspects of Ordered Integer Partition with Upper Bounds*, in V. Bonifaci et al. (Eds.) : SEA 2013, LNCS 7933, pp. 79-90, 2013 (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2013).
- [148] B.L. Glushak, A.P. Zharkov, M.V. Zhernokletov, V.Ya. Ternovoi, A.S. Filimonov and V.E. Fortov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **96**, 1301 (1989), Sov. Phys. JETP **69**, 739 (1989).
- [149] L. Godbert-Mouret, J. Rosato, H. Capes, Y. Marandet, S. Ferri, M. Koubiti, R. Stamm, M. Gonzales and M. Gigosos, High Energy Density Phys. **5**, 162 (2009).
- [150] M. Goeppert-Mayer, Naturwiss. **17**, 932 (1929).
- [151] M. Goeppert-Mayer, Ann. Phys. (Leipzig) **9**, 273 (1931).
- [152] A. Goldberg, B.F. Rozsnyai and P. Thomson, Phys. Rev. A **34**, 421 (1986).
- [153] W. Gordon, Ann. Phys. **2**, 1031 (1929). [There is a numerical error in this paper. See Ref. [54] for correct formulas].
- [154] I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series and Products* (corrected and enlarged edition, Academic Press, 1980).
- [155] N. Grevesse, Phys. Scr. **T8**, 49 (1984).
- [156] H.R. Griem, Astrophys. J. **148**, 547 (1967).
- [157] H.R. Griem, *Principles of Plasma Spectroscopy* (Cambridge University Press, Cambridge, 1997).
- [158] M.F. Gu, Can. J. Phys. **86**, 675 (2008).
- [159] W.H. Gust, Phys. Rev. B **22**, 4744 (1980).
- [160] O. Hahn and F. Straßmann, Naturwiss. **27**, 89, 163 (1939).
- [161] J.P. Hansen, Phys. Rev. A **8**, 3096 (1973).
- [162] G.R. Harrison and M.H. Johnson, Phys. Rev. **38**, 757 (1931).
- [163] M. Hassani, *Approximation of the Lambert W Function*, RGMIA Research Report Collection, **8**, Art. 12 (2005).
- [164] B. Held and P. Pignolet, J. Physique **47**, 437 (1986).
- [165] B.L. Henke, E.M. Gullikson, J.C. Davis, At. Data Nucl. Data Tables **54**, 181 (1993).
- [166] J.D. Hey, J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. **40**, 4077 (2007).
- [167] J.D. Hey, J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. **42**, 125701 (2009).
- [168] J. Heyd, G.E. Scuseria and M. Ernzerhof, J. Chem. Phys. **118**, 8207 (2003).
- [169] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev **136**, 864 (1964).
- [170] A. Hui-Bon-Hoa and S. Vaclair, A & A **610**, L15 (2018).
- [171] M.S. Hussein and M.P. Pato, Physica A **285**, 383 (2000).
- [172] S. Ichimaru, H. Iyetomi and S. Tanaka, Phys. Rep. **149**, 91 (1987).
- [173] C.A. Iglesias, F.J. Rogers and B.G. Wilson, Astrophys. J. **322**, L45 (1987).
- [174] C.A. Iglesias, F.J. Rogers and B. G. Wilson, Astrophys. J. **360**, 221 (1990).
- [175] C.A. Iglesias, M.H. Chen, V. Sonnad, B.G. Wilson, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. **81**, 227 **2003**.

- [176] C.A. Iglesias, M.H. Chen, W.A. Isaacs, V. Sonnad and B.G. Wilson : TOPAZ. AIP Conf. Proc. **730**, 161 (2004).
- [177] C.A. Iglesias, V. Sonnad, B.G. Wilson and J.I. Castor, High Energy Density Phys. **5**, 97 (2009).
- [178] C.A. Iglesias and V. Sonnad, High Energy Density Phys. **8**, 154 (2012).
- [179] C.A. Iglesias, High Energy Density Phys. **8**, 253 (2012).
- [180] C.A. Iglesias, High Energy Density Phys. **8**, 260 (2012).
- [181] D.R. Inglis and E. Teller, Astrophys. J. **A90**, 439 (1939).
- [182] F.E. Irons, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **22**, 1 (1979).
- [183] W.H. Isbell, F.H. Shipman and A.H. Jones, *Hugoniot equation of state measurements for eleven materials to five megabars*, General Motors Corp. Materials Science Laboratory Report MSL-68-13 (1968).
- [184] Ph. Jacquod and D.L. Shepelyansky, Phys. Rev. Lett. **79**, 1837 (1997).
- [185] D.J. Jeffrey, R.M. Corless, D.E.G. Hare and D.E. Knuth, C. R. Acad. Sci. Paris **320**, 1449 (1995).
- [186] S. Johansson, Phys. Scr. **T65**, 7 (1996).
- [187] N.L. Johnson and S. Kotz, *Distributions in statistics - Continuous univariate distributions*, Vol. 2 (Boston, MA : Houghton Mifflin, 1970).
- [188] J.D. Johnson, Phys. Rev. E **59**, 3727 (1999).
- [189] A.P. Jucys, Y. Levinson and V. Vanagas, *Mathematical Apparatus of the Theory of Angular Momentum* (Israel Program for Scientific Translations, Jerusalem, 1962).
- [190] B.R. Judd, *Operator Techniques in Atomic Spectroscopy* (McGraw-Hill, New York, 1963).
- [191] B.R. Judd, *Second Quantization and Atomic Spectroscopy* (Johns Hopkins University, Baltimore, 1967).
- [192] B.R. Judd, Rep. Prog. Phys. **48**, 907 (1985).
- [193] Chr. Karanicoloff, Publications de la faculté d'électrotechnique de l'université à Belgrade **67**, 9 (1961).
- [194] V.V. Karasiev, T. Sjoström, J. Dufty and S. B. Trickey, Phys. Rev. Lett. **112**, 076403 (2014).
- [195] R. Karazija, *Sums of Atomic Quantities and Mean Characteristics of Spectra* (Mokslas, Vilnius, 1991), en russe.
- [196] R. Karazija, Acta Phys. Hungarica **70**, 367 (1991).
- [197] R. Karazija and S. Kučas, Lith. J. Phys. **35**, 155 (1995).
- [198] N. Karayianis, J. Math. Phys. **6**, 1204 (1965).
- [199] J. Karwowski and M. Bancewicz, J. Phys. A : Math. Gen. **20**, 6309 (1987).
- [200] J. Katriel and A. Novoselsky, J. Phys. A : Math. Gen. **22**, 1245 (1989).
- [201] M.G. Kendall and A. Stuart, *Advanced Theory of Statistics*, Vol. 1 (Hafner, New York, 1969), Vol. 1.
- [202] R.C. Kirkpatrick, I.R. Lindemuth and M.S. Ward, Fusion Technol. **27**, 201 (1995).

- [203] D.A. Kirzhnits and G.V. Shpatakovskaya, Sov. Phys. JETP **35**, 1088 (1972).
- [204] D.A. Kirzhnits, E.Yu. Lozovik and G.V. Shpatakovskaya, Sov. Phys. Usp. **18**, 649 (1976).
- [205] H. Kitamura and S. Ichimaru, Phys. Rev. E **51**, 6004 (1995).
- [206] M.D. Knudson, R.W. Lemke, D.B. Hayes, C.A. Hall, C. Deeney and J.R. Asay, J. Appl. Phys. **94**, 4420 (2003).
- [207] D.V. Knyazev and P.R. Levashov, Computational Materials Science **79**, 817 (2013).
- [208] D.V. Knyazev and P.R. Levashov, Phys. Plasmas **21**, 073302 (2014).
- [209] W. Kohn and L.J. Sham, Phys. Rev. **140**, A1133 (1965).
- [210] S.B. Kormer, A.I. Funtikov, V.D. Urlin and A.N. Kolesnikova, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **42**, 686 (1962), Sov. Phys. JETP **15**, 477 (1962).
- [211] A. Korol, J. Phys. B **26**, 3137 (1993).
- [212] A. Korol, J. Phys. B **27**, L103 (1994).
- [213] K.K. Krupnikov, A.A. Bakanova, M.I. Brazhnik and R.F. Trunin, Dokl. Akad. Nauk SSSR **148**, 1302 (1963), Sov. Phys. Dokl. **8**, 205 (1963).
- [214] M. Kruse and C. Iglesias, High Energy Density Phys. **31**, 38 (2019).
- [215] H.G. Kuhn, *Atomic Spectra* (Longmans, London, 1962).
- [216] H. Kunz, *Matrices aléatoires en physique* (Presses polytechniques and universitaires romandes, Lausanne, 1998).
- [217] L.D. Landau and E.M. Lifshitz, Course of Theoretical Physics, Vol. 6 : Fluid Mechanics (Nauka, Moscow, 1986 ; Pergamon, Oxford, 1987).
- [218] A. Landé, Z. Physik **5**, 231 (1921).
- [219] R.C.M. Learner, J. Phys. B **15**, L891 (1982).
- [220] Y.T. Lee and R.M. More, Phys. Fluids **27**, 1273 (1984).
- [221] D. Léger and C. Deutsch, J. Phys. France **51**, 2187 (1990).
- [222] M. Leitner, T. Leitner, A. Schmon, K. Aziz and G. Pottlacher, Metall. and Mat. Trans. A **48**, 3036 (2017).
- [223] M. Le Penec, S. Turck-Chièze, S. Salmon, C. Blancard, P. Cossé, G. Faussurier, G. Mondet, Astrophys. J. **813**, L42 (2015).
- [224] D.A. Liberman, Phys. Rev. B **20**, 4981 (1979).
- [225] E.L. Lindman, High Energy Density Phys. **6**, 227 (2010).
- [226] V.S. Lisitsa, *Atoms in Plasmas* (Springer Series on Atoms and Plasmas vol 14, Berlin : Springer).
- [227] 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 and B. Villette, High Energy Density Phys. **5**, 173 (2009).
- [228] T.L. Loucks, Augmented Plane Wave Method : A Guide to Performing Electronic Structure Calculations (W.A. Benjamin, Inc., New York, 1967).
- [229] A.E. Lynas-Gray, S. Basu, M.A. Bautista, J. Colgan, C. Mendoza, J. Tennyson, R. Trampedach, S. Turck-Chièze, Workshop on Astrophysical Opacities, ASP Conf. Ser. **515**, 301, C. Mendoza, S. Turck-Chièze, and J. Colgan, eds., Astronomical Society of the Pacific (2018).

- [230] J.J. Mcfarlane, I. Golovkin, P. Woodruff and P. Wang, APS Meeting Abstracts **J**, 1181 (2003).
- [231] J. Madjaczyk and M. Trippenbach, J. Phys. A **22**, 2369 (1989).
- [232] W. Kohn and C. Majumdar, Phys. Rev. **138**, 1617 (1965).
- [233] R.C. Mancini, R.F. Joyce, C.F. Hooper Jr., J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys. **20**, 2975 (1987).
- [234] B.B. Mandelbrot, *The Fractal Geometry of Nature* (Freeman, San Francisco, 1982).
- [235] Ph. Mangin, C. Tête and G. Marchal, Solid State Comm. **50**, 1073 (1984).
- [236] R. Marrus and P.J. Mohr, Adv. At. Mol. Phys. **14**, 181 (1978).
- [237] S.P. March, *LASL Hugoniot Data* (University of California Press, Berkeley, 1980).
- [238] G. Massacrier and J. Dubau, J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. **23**, 24595 (1990).
- [239] G. Massacrier, A. Y. Potekhin, G. Chabrier, Phys. Rev. E **84**, 056406 (2011).
- [240] H. Mayer, Los Alamos Scientific Laboratory Report No. 647 (1947).
- [241] H. Mayer, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **4**, 585 (1964).
- [242] G. Maynard, C. Deutsch, P. Fromy and K. Katsonis, Laser Part. Beams **13**, 271 (1995).
- [243] G. Maynard, K. Katsonis and S. Mabong, Nuclear Instruments and Methods B **107**, 51 (1996).
- [244] S. Mazevet and J. Abdallah Jr., J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. **39**, 3419 (2006).
- [245] M. Mehta, *Random Matrices and the Statistical Theory of Energy Levels* (Academic, New York, 1967).
- [246] L.V. Meisel and J.P. Cote, Phys. Rev. B **16**, 2978 (1977).
- [247] L.V. Meisel and J.P. Cote, Phys. Rev. B **17**, 4652 (1978).
- [248] D. Mihalas, *Stellar Atmospheres* (Second Edition) (W.H. Freeman and Company, San Francisco, 1978).
- [249] H.M. Milchberg, R.R. Freeman, S.C. Davey and R.M. More, Phys. Rev. Lett. **61**, 2364 (1988).
- [250] A.C. Mitchell, W.J. Nellis, J.A. Moriarty, R.A. Heinle, N.C. Holmes, R.E. Tipton and G.W. Repp, J. Appl. Phys. **69**, 2981 (1991).
- [251] D.S. Mitrinović and D. Doković, C. R. Acad. Sci. **250**, 2110 (1960).
- [252] Mondet, G. ; Blancard, C. ; Cossé, P. ; Faussurier, G. Opacity Calculations for Solar Mixtures. Astrophys. J. Suppl. Ser. **220**, 2 (2015).
- [253] E. Moravveji, MNRAS **455**, L67 (2016).
- [254] R.M. More, *Atomic Physics in Inertial Confinement Fusion*, UCRL Report 84991, 5/3/1981.
- [255] R.M. More, Adv. At. Mol. Phys. **21**, 305 (1985).
- [256] R.M. More, J.-C. Pain, S.B. Hansen, T. Nagayama and J.E. Bailey, High Energy Density Physics (2020).
- [257] S.A. Moszkowski, Prog. Theor. Phys. **28**, 1 (1962).
- [258] M. Murillo and J.C. Weisheit, Phys. Rep. **302**, 1 (1998).

- [259] S. Nadarajah, *J. Appl. Stat.* **32**, 685 (2005).
- [260] T. Nagayama, J.E. Bailey, G.P. Loisel, G.S. Dunham, G.A. Rochau, C. Blancard, J. Colgan, Ph. Cossé, G. Faussurier, C.J. Fontes, F. Gilleron, S.B. Hansen, C.A. Iglesias, I.E. Golovkin, D.P. Kilcrease, J.J. MacFarlane, R.C. Mancini, R.M. More, C. Orban, J.-C. Pain, M.E. Sherrill and B.G. Wilson, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 235001 (2019).
- [261] S.N. Nahar, A.K. Pradhan, G.X. Chen and W. Eissner, *Phys. Rev. A* **83**, 053417 (2011). [60 LS core states].
- [262] S.N. Nahar and A.K. Pradhan, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 235003 (2016). [99 LS core states].
- [263] E. Nardi and Z. Zinamon, *Phys. Rev. A* **20**, 1197 (1979).
- [264] W.J. Nellis, J.A. Moriarty, A.C. Mitchell and N.C. Holmes, *J. Appl. Phys.* **82**, 2225 (1997).
- [265] W.J. Nellis, A.C. Mitchell and A.K. McMahan, *J. Appl. Phys.* **90**, 696 (2001).
- [266] G. New, *Introduction to Nonlinear Optics* (Cambridge U. Press, Cambridge, 2011).
- [267] S. Newcomb, *Am. J. Math.* **4**, 39 (1881).
- [268] Nguyen-hoe, H.-W. Drawin and L. Herman, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **7**, 429 (1967).
- [269] A.F. Nikiforov, V.G. Novikov and V.B. Uvarov, *Teplofiz. Vys. Temp.* **25**, 12 (1987).
- [270] J. Oreg, W.H. Goldstein, A. Bar-Shalom and M. Klapisch, *J. Comp. Phys.* **91**, 460 (1990).
- [271] G. O'Sullivan, P.K. Carroll, P. Dunne, R. Faulkner, C. McGuinness and N. Murphy, *J. Phys. B* **32**, 1893 (1999).
- [272] J.-C. Pain and T. Blenski, *Laser Part. Beams* **20**, 211 (2002).
- [273] J.-C. Pain, *Sur la physique atomique des ions dans les plasmas en présence de l'écrantage*, Thèse de doctorat, Université Paris XI (2002).
- [274] J.-C. Pain and T. Blenski, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **81**, 355 (2003).
- [275] J.-C. Pain, G. Dejonghe and T. Blenski, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **99**, 451 (2006).
- [276] J.-C. Pain, G. Dejonghe and T. Blenski, *J. Phys. A : Math. Gen.* **39**, 4659 (2006).
- [277] J.-C. Pain, *Phys. Lett. A* **362**, 120 (2007).
- [278] J.-C. Pain, *Contrib. Plasma Phys.* **6**, 47 (2007).
- [279] J.-C. Pain, *High Energy Density Phys.* **3**, 204 (2007).
- [280] J.-C. Pain, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **40**, 1553 (2007).
- [281] J.-C. Pain, *Phys. Rev. E* **77**, 012102 (2008).
- [282] J.-C. Pain, F. Gilleron, J. Bauche and C. Bauche-Arnoult, *High Energy Density Phys.* **5**, 294 (2009).
- [283] J.-C. Pain, F. Gilleron and G. Faussurier, *Phys. Rev. E* **80**, 026703 (2009).
- [284] J.-C. Pain, F. Gilleron, J. Bauche and C. Bauche-Arnoult, *High Energy Density Phys.* **6**, 356 (2010).
- [285] J.-C. Pain, *High Energy Density Phys.* **7**, 161 (2011).
- [286] J.-C. Pain, F. Gilleron and Q. Porcherot, *Phys. Rev. E* **83**, 067701 (2011).

- [287] J.-C. Pain, F. Gilleron, J. Bauche and C. Bauche-Arnoult, High Energy Density Phys. **6**, 356 (2010).
- [288] J. C. Pain, *Giulio Racah (1909-1965) : la théorie des spectres complexes*, Reflets de la Physique **26**, 16 (2011).
- [289] J.-C. Pain and F. Gilleron, Phys. Rev. A **83**, 033409 (2012).
- [290] J.-C. Pain, F. Gilleron, J. Bauche and C. Bauche-Arnoult, J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. **45**, 135006 (2012).
- [291] J.-C. Pain, Chin. J. Phys. **50**, 523 (2012).
- [292] J.-C. Pain, G. Dejonghe and T. Blenski, Contrib. Plasma Phys. **52**, 23 (2012).
- [293] J.-C. Pain, High Energy Density Phys. **9**, 392 (2013).
- [294] J.-C. Pain and F. Gilleron, High Energy Density Phys. **15**, 30 (2015).
- [295] J.-C. Pain, F. Gilleron and T. Blenski, Laser Part. Beams **33**, 201 (2015).
- [296] J.-C. Pain, F. Gilleron, Q. Porcherot, T. Blenski, AIP Conf. Proc. **1811**, 190010 (2017).
- [297] J.-C. Pain, F. Gilleron and M. Comet, Atoms **5**, 22 (2017).
- [298] J.-C. Pain, High Energy Density Phys. **26**, 23 (2018).
- [299] J.-C. Pain, Phys. Rev. C **97**, 064311 (2018).
- [300] J.-C. Pain and F. Gilleron, High Energy Density Phys. **30**, 52 (2019).
- [301] J.-C. Pain, M. Comet and C.J. Fontes, Can. J. Phys. **97**, 576 (2019).
- [302] J.-C. Pain, Phys. Rev. C **99**, 054321 (2019).
- [303] J.-C. Pain and M. Poirier, J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. **53**, 115002 (2020).
- [304] J. Paldus, J. Chem. Phys. **61**, 5321 (1974).
- [305] F. Paschen and E. Back, Physica **1**, 261 (1921).
- [306] S.B. Hansen, J. Bauche, C. Bauche-Arnoult, M.F. Gu, High Energy Density Phys. **3**, 109 (2007).
- [307] J.P. Perdew and A. Zunger, Phys. Rev. B **23**, 5048 (1981).
- [308] J.P. Perdew, K. Burke and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996). Erratum : Phys. Rev. Lett. **78**, 1396 (1997).
- [309] F. Perrot and M.W.C. Dharma-Wardana, Phys. Rev. A **36**, 238 (1987).
- [310] F. Perrot, Phys. Rev. A **42**, 4871 (1990).
- [311] F. Perrot, *Généralités relatives au calcul and à l'utilisation des équations d'état*, septembre 1992, non publié.
- [312] F. Perrot, Phys. Rev. A **47**, 570 (1993).
- [313] F. Perrot, Laser Part. Beams **14**, 731 (1996).
- [314] F. Perrot, T. Blenski and A. Grimaldi, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **58**, 845 (1997).
- [315] F. Perrot, *Recherche d'un modèle de structure électronique des plasmas applicable aux calculs d'opacité and d'équation d'état*, Rapport CEA, 25/3/1998, non publié.
- [316] F. Perrot and M.W.C. Dharma-Wardana, Int. J. Thermophys. **20**, 1299 (1999).
- [317] Y.V. Petrov, N.A. Inogamov, A.V. Mokshin and B.N. Galimzyanov, Journal of Physics : Conf. Series **946**, 012096 (2018).

- [318] N.E. Phillips, Phys. Rev. **114**, 676 (1959).
- [319] L. Pietronero, E. Tossati, V. Tossati and A. Vespignani, Physica A **293**, 551 (2001).
- [320] R. Piron and T. Blenski, Phys. Rev. E **83**, 026403 (2011).
- [321] M. Poirier, S. Bastiani-Ceccotti, T. Blenski, M. Comet, C. Esnault, F. Gilleron, D. Gilles, J.-C. Pain, C. Reverdin and F. Thais, High Energy Density Phys. **33**, 100706 (2019).
- [322] M.A. Podurets, V.M. Kitorov, R.F. Trunin, L.V. Popov, A.Ya. Matveev, B.V. Pechenkin and A.G. Sevast'yanov, Teplofiz. Vys. Temp. **32**, 952 (1994).
- [323] E.L. Pollock and J.P. Hansen, Phys. Rev. A **8**, 3110 (1973).
- [324] Q. Porcherot, J.-C. Pain, F. Gilleron and T. Blenski, High Energy Density Phys. **7**, 234 (2011).
- [325] C.E. Porter and R.G. Thomas, Phys. Rev. **104**, 483 (1956).
- [326] C.E. Porter, *Statistical Theories of Spectra : Fluctuations* (Academic Press, New York, NY, 1965).
- [327] A.Y. Potekhin and G. Chabrier, Contrib. Plasma Phys. **50**, 82 (2010).
- [328] A. Y. Potekhin, D. A. Baiko, P. Haensel and D. G. Yakovlev, Astro. Astrophys. **346**, 345 (1999).
- [329] G. Racah, Phys.Rev. **61**, 186 (1942).
- [330] G. Racah, Phys.Rev. **62**, 438 (1942).
- [331] G. Racah, Phys. Rev. **63**, 367 (1943).
- [332] G. Racah, Phys. Rev. **76**, 1352 (1949).
- [333] G. Racah, in "Proceedings of the Rydberg Centennial Conference on Atomic Spectroscopy" (Edited by B. Edlén), Lunds Universitet Årsskrift, N. F. Avd. 2, Bd. 50 (C. W. K. Gleerup, Lund 1955) p. 31.
- [334] G. Racah a développé une méthode pour approcher simultanément, par la technique des moindres carrés et en s'appuyant sur les formules théoriques, les facteurs de Landé et les énergies mesurés des niveaux (see [N. Zeldes, Arch. Hist. Exact Sci. **63**, 289 (2009)] et références incluses). Il avait l'intention de présenter ses résultats à la "Zeeman Centennial Conference" qui s'est tenue du 6 au 11 septembre 1965 à Amsterdam. Malheureusement, G. Racah est mort en août 1965, juste avant la conférence, dont les proceedings ont été publiés dans "Proceedings of the Zeeman Centennial Conference : Amsterdam, 1965, edited by Nederlandse Natuurkundige Vereniging, 1966. Voir à ce sujet la référence [288].
- [335] C.E. Ragan, Phys. Rev. Ser. A **25**, 3360 (1982).
- [336] C.E. Ragan, Phys. Rev. Ser. A **29**, 1391 (1984).
- [337] T.S. Ramazanov, K.N. Dzhumagulova, M.T. Gabdullin, A.Zh. Akbarov and G.N. Nigmatova, Contrib. Plasma Phys. **47**, 262 (2007).
- [338] P. Renaudin, C. Blancard, G. Faussurier and P. Noiret, Phys. Rev. Lett. **88**, 215001 (2002).
- [339] G.A. Rinker, Phys. Rev. B **31**, 4207 (1985).
- [340] G.A. Rinker, Phys. Rev. A **37**, 1284 (1988).
- [341] F.J. Rogers, J. Chem. Phys. **73**, 6272 (1980).
- [342] F.J. Rogers, Astrophys. J. **310**, 723 (1986).

- [343] F.J. Rogers, F.J. Swenson and C.A. Iglesias, *Astrophys. J.* **456**, 902 (1996).
- [344] F.J. Rogers and A. Nayfonov, *Astrophys. J.* **576**, 1064 (2002).
- [345] A.M. Rosenfeld and M. J. Stott, *Phys. Rev. B* **42**, 3406 (1990).
- [346] N. Rosenzweig and C.E. Porter, *Phys. Rev.* **120**, 1698 (1960).
- [347] B.F. Rozsnyai, *Phys. Rev. A* **5**, 1137 (1972).
- [348] B.F. Rozsnyai, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **17**, 77 (1977).
- [349] B.F. Rozsnyai, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **27**, 211 (1981).
- [350] B.F. Rozsnyai, J.R. Albritton, D.A. Young, V.N. Sonnad and D.A. Liberman, *Phys. Lett. A* **291**, 226 (2001).
- [351] B.F. Rozsnyai, *High Energy Density Phys.* **4**, 64 (2008).
- [352] Z. Rudzikas, *Theoretical Atomic Spectroscopy* (Cambridge University Press, Cambridge, 1997).
- [353] T. Ryabchikova, O. Kochukhov, D. Kudryavtsev, I. Romanyuk, E. Semenko, S. Bagnulo, G. Lo Curto, P. North and M. Sachkov, *Astron. Astrophys.* **445**, L47-L50 (2006).
- [354] S. Salmon, J. Montalbán, T. Morel, A. Miglio, M.-A. Dupret and A. Noels, *MNRAS* **422**, 3460 (2012).
- [355] D. Salzmann, *Atomic Physics in Hot Plasmas*, International series of monographs on physics, p.28 (Oxford University Press, New York, 1998).
- [356] M. Sarfraz, H. Farooq, G. Abbas, S. Noureen, Z. Iqbal, and A. Rasheed, *Phys. of Plasmas* **25**, 032106 (2018).
- [357] P. Schmidt, G. Zwicknagel, P.-G. Reinhard and C. Toepffer, *Phys. Rev. E* **56**, 7310 (1997).
- [358] W. Schottky, *Physik. Z.* **23**, 448 (1922).
- [359] M.J. Seaton, *J. Phys. B* **20**, 6363 (1987).
- [360] The Opacity Project Team. *The Opacity Project*, Vol. 1 (1995); Institute of Physics Publishing : Bristol, UK, 1996; Volume 2.
- [361] M.J. Seaton, Y. Yan, D. Mihalas and A.K. Pradhan, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* **266**, 805 (1994).
- [362] N.R. Schaffer and C.E. Starrett, *Phys. Rev. E* **101**, 053204 (2020).
- [363] Y.R. Shen, *Principles of Nonlinear Optics* (J. Wiley and Sons, Singapore, 1991). [see Ch. 12].
- [364] R.C. Shukla, *Phys. Rev. B* **22**, 5810 (1980).
- [365] N.R. Simon, *Astrophys. J.* **260**, L87 (1982).
- [366] V.A. Simonenko, N.P. Voloshin, A.S. Vladimirov, A.P. Nagibin, V.N. Nogin, V.A. Popov, V.A. Vasilenko and Yu.A. Shoidin, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **88**, 1452 (1985), *Sov. Phys. JETP* **61**, 869 (1985).
- [367] T. Sjostrom and J. Daligault, *Phys. Rev. E* **92**, 063304 (2015).
- [368] J.C. Slater, *Quantum Theory of Atomic Structure* (McGraw-Hill, New York, 1960).
- [369] P. Sperling, E.J. Gamboa, H.J. Lee, H.K. Chung, E. Galtier, Y. Omarbakiyeva, H. Reinholz, G. Röpke, U. Zastra, J. Hastings, L.B. Fletcher and S.H. Glenzer, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 115001 (2015).

- [370] P. Sperling, S. Rosmej, R. Bredow, L.B. Fletcher, E. Galtier, E.J. Gamboa, H.J. Lee, H. Reinholz, G. Röpke, U. Zastra and S.H. Glenzer, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **50**, 134002 (2017).
- [371] E. Stambulchik and Y. Maron, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **41**, 095703 (2008).
- [372] E. Stambulchik and Y. Maron, *High Energy Density Phys.* **6**, 9 (2010).
- [373] E. Stambulchik, *High Energy Density Phys.* **9**, 528 (2013).
- [374] E. Stambulchik and Y. Maron, *Phys. Rev. E* **87**, 053108 (2013).
- [375] E. Stambulchik and A.V. Demura, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **49**, 035701 (2016).
- [376] C.E. Starrett, R. Perriot, N.R. Shaffer, T. Nelson, L.A. Collins and C. Ticknor, *Contrib. Plasma Phys.* **60**, 123 (2020).
- [377] C. Stehlé, *A & A* **305**, 677 (1996).
- [378] W.-Ü L. Tchang-Brillet and V.I. Azarov, *Physica Scripta* **T100**, 104 (2002).
- [379] N. Feautrier, C. Stehlé and W.-Ü Lydia Tchang-Brillet in “Transfert de Rayonnement en Astrophysique”, Forum du GRETA (Ed. Ph. Stee, Observatoire de la Côte d’Azur, 2000).
- [380] W.-Ü L. Tchang-Brillet, J.-F. Wyart, A. Meftah, N. Champion, Ch. Blaess, SF2A-2014 : Proceedings of the Annual meeting of the French Society of Astronomy and Astrophysics. Eds. : J. Ballet, F. Martins, F. Bournaud, R. Monier, C. Reylé, pp. 527-530.
- [381] R.F. Trunin, M.A. Podurets, B.N. Moiseev, G.V. Simakov and L.V. Popov, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **56**, 1172 (1969), *Sov. Phys. JETP* **29**, 630 (1969).
- [382] R.F. Trunin, M.A. Podurets, G.V. Simakov, L.V. Popov and B.N. Moiseev, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **62**, 1043 (1972), *Sov. Phys. JETP* **35**, 550 (1972).
- [383] R.F. Trunin, M.A. Podurets, L.V. Popov, V.N. Zubarev, A.A. Bakanova, V.M. Ktitorov, A.G. Sevast’yanov, G.V. Simakov and I.P. Dudoladov, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **102**, 1433 (1992), *Sov. Phys. JETP* **75**, 777 (1992).
- [384] R.F. Trunin, M.A. Podurets, L.V. Popov, B.N. Moiseev, G.V. Simakov and A.G. Sevast’yanov, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **103**, 2189 (1993), *JETP* **76**, 1095 (1993).
- [385] R.F. Trunin, *Usp. Fiz. Nauk* **164**, 1215 (1994).
- [386] R.F. Trunin, L.A. Il’kaeva, M.A. Podurets, L.V. Popov, B.V. Pechenkin, L.V. Prokhorov, A.G. Sevast’yanov and V.V. Khrustalev, *Teplofiz. Vys. Temp.* **32**, 692 (1994).
- [387] R.F. Trunin, N.V. Panov and A.B. Medvedev, *Pis’ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **62**, 572 (1995).
- [388] S. Türck-Chièze, W. Däppen, E. Fossat, J. Provost, E. Schatzman and D. Vignaud, *Phys. Rep.* **230**, 57 (1993).
- [389] S. Turck-Chièze, G. Loisel, D. Gilles, L. Piau, C. Blancard, T. Blenski, M. Busquet, P. Cossé, F. Delahaye, G. Faussurier, F. Gilleron, J. Guzik, J. Harris, D.P. Kilcrease, N.H. Magee Jr., J.C. Pain, Q. Porcherot, M. Poirier, C. Zeippen, S. Bastiani-Ceccotti, C. Reverdin, V. Silvert and F. Thais, *Astrophys. Space Sci.* **336**, 103-109 (2011).
- [390] S. Turck-Chièze, G. Loisel, D. Gilles, F. Thais, S. Bastiani, C. Blancard, M. Busquet, T. Caillaud, P. Cossé, T. Blenski, F. Delahaye, J.E. Ducret, G. Faussurier, F. Gilleron, J. Guzik, J.W. Harris, D.P. Kilcrease, N.H. Magee, L. Piau, J.C. Pain, M. Poirier, Q. Porcherot, C. Reverdin, V. Silvert, B. Villette and C. Zeippen, *J. Phys. : Conf. Ser.* **271**, 012035 (2011).

- [391] S. Turck-Chièze, G. Loisel, D. Gilles, J.E. Ducret, L. Piau, T. Blenski, M. Poirier, F. Thais, S. Bastiani, C. Blancard, P. Cossé, F. Delahaye, G. Faussurier, F. Gilleron, J. A. Guzik, J.W. Harris, D.P. Kilcrease, N.H. Magee, J.C. Pain, Q. Porcherot, C. Reverdin, V. Silvert, B. Villette and C. Zeippen, *ASP Conf. Ser.* **462**, 95 (2012).
- [392] S. Turck-Chièze, D. Gilles, M. Le Pennec, T. Blenski, F. Thais, S. Bastiani-Ceccotti, C. Blancard, M. Busquet, T. Caillaud, J. Colgan, P. Cossé, F. Delahaye, J.-E. Ducret, G. Faussurier, C.J. Fontes, F. Gilleron, J. Guzik, J.W. Harris, D.P. Kilcrease, G. Loisel, N.H. Magee, J.-C. Pain, C. Reverdin, V. Silvert, B. Villette and C. Zeippen, *High Energy Density Phys.* **9**, 473 (2013).
- [393] S. Turck-Chièze, M. Le Pennec, J.E. Ducret, J. Colgan, D.P. Kilcrease, C. J. Fontes, N. Magee, F. Gilleron, and J.C. Pain, *Astrophys. J.* **823**, 78 (2016).
- [394] P.H.M. Uylings, *J. Phys. B : At. Mol. Phys.* **17**, 2375 (1984).
- [395] M.K. Varanasi and B. Aazhang, *J. Acoust. Soc. Am.* **86**, 1404 (1989).
- [396] D.A. Varshalovich, A.N. Moskalev and V.K. Khersonskii, *Quantum Theory of Angular Momentum* (World Scientific, Singapore, 1988).
- [397] D. Veberič, *Comput. Phys. Comm.* **183**, 2622 (2012).
- [398] V. Veniard and B. Piraux, *Phys. Rev. A* **41**, 4019 (1990).
- [399] P. Vinet, J.H. Rose, J. Ferrante and J.R. Smith, *J.Phys. : Condens. Matter* **1**, 1941 (1989).
- [400] A.S. Vladimirov, N.P. Voloshin, V.N. Nogin, A.V. Petrovtsev and V.A. Simonenko, *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **39**, 69 (1984), *JETP Lett.* **39**, 85 (1984).
- [401] V. Vlček, N. de Koker and G. Steinle-Neumann, *Phys. Rev. B* **85**, 184201 (2012).
- [402] L.P. Volkov, N.P. Voloshin, A.S. Vladimirov, V.N. Nogin and V.A. Simonenko, *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **31**, 623 (1980), *JETP Lett.* **31**, 588 (1980).
- [403] F. Vu Ngoc, Multiple atome moyen dans les plasmas denses et chauds, Thèse de doctorat, Université Paris VI (1996).
- [404] J.M. Walsh, M.H. Rice, R.G. McQueen and F.L. Yarger, *Phys. Rev.* **108**, 196 (1957).
- [405] J.K.G. Watson, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **39** L291 (2006).
- [406] N. Wetta, J.-C. Pain and O. Heuzé, *Phys. Rev. E* **98**, 033205 (2018).
- [407] N. Wetta and J.-C. Pain, *Phys. Rev. B* **100**, 205127 (2019).
- [408] N. Wetta and J.-C. Pain, *Phys. Rev. E*, in press (2020).
- [409] J.E. Wilkins, *Phil. Trans. Roy. Soc.* **216**, 432 (1916).
- [410] B.G. Wilson, F. Rogers and C. Iglesias, *Phys. Rev. A* **37**, 2695 (1988).
- [411] B. Wilson, V. Sonnad, P. Sterne and W. Isaacs, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **99**, 658 (2006).
- [412] B.G. Wilson, F. Gilleron and J.-C. Pain, *Phys. Rev. E* **73**, 032103 (2007).
- [413] G. Winhart, K. Eidmann, C. A. Iglesias and A. Bar-shalom, *Phys. Rev. E* **53**, R1332 (1996).
- [414] G. Wirsching, *Balls in constrained urns and cantor-lik sets*, *Zeitschrift für Analysis und ihre Anwendungen*, **17**, 979-996 (1998).

- [415] B. B. L. Witte, P. Sperling, M. French, V. Recoules, S. H. Glenzer and R. Redmer, *Phys. Plasmas* **25**, 056901 (2018).
- [416] R. Xu and Z. Dai, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **39**, 3221 (2006).
- [417] J. Yuan, *Phys. Rev. E* **66**, 047401 (2002).
- [418] J. Yuan, *Chin. Phys. Lett. E* **66**, 047401 (2002).
- [419] Ya.B. Zel'dovich and Yu.P. Raizer, *Physics of Shock Waves and High-Temperature Hydrodynamic Phenomena*, Vol. 1, Chap. 3 (Academic Press, New York, 1966).
- [420] J.M. Ziman, *Philos. Mag.* **6**, 1013 (1961).
- [421] J.W. Zink, *Phys. Rev.* **176**, 279 (1968).

Chapitre 10

Annexe A : Seconde quantification et théorème de Uylings

A partir de l'état de Dirac "vide" $|0\rangle$, on crée un déterminant de Slater à N électrons par l'action de N opérateurs création a^\dagger :

$$a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger \cdots a_\nu^\dagger |0\rangle = |\alpha\beta \cdots \nu\rangle \quad (10.1)$$

où $\alpha = n_\alpha \ell_\alpha m_{s_\alpha} m_{\ell_\alpha}$ est un jeu de nombres quantiques d'un électron dans le champ central de Slater. De la même manière, l'action des opérateurs d'annihilation se traduit par

$$a_\nu \cdots a_\beta a_\alpha |\alpha\beta \cdots \nu\rangle = |0\rangle. \quad (10.2)$$

avec

$$a_\lambda a_\mu^\dagger + a_\mu^\dagger a_\lambda = \delta_{\lambda\mu} \quad (10.3)$$

La représentation d'un opérateur mono-électronique est :

$$F = \sum_{i=1}^n f_i = \sum_{\epsilon, \phi} a_\epsilon^\dagger \langle \epsilon | f | \phi \rangle a_\phi \quad (10.4)$$

où les sommes sur ϵ et ϕ courent sur les jeux de nombres quantiques du nombre infini de fonctions propres du champ central. L'opérateur d'interaction Coulombienne (bi-électronique) s'écrit

$$G = \sum_{i < j=1}^n g_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger \langle (\alpha)_1 (\beta)_2 | g_{12} | (\gamma)_1 (\delta)_2 \rangle a_\delta a_\gamma \quad (10.5)$$

La force d'une transition peut s'écrire :

$$\begin{aligned} S &= \sum_{i, f} \langle \psi_i | G | \psi_f \rangle \langle \psi_f | G | \psi_i \rangle \\ &= \frac{1}{4} \sum_{i, f} \langle \psi_i | \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\delta a_\gamma \langle (\alpha)_1 (\beta)_2 | g_{12} | (\gamma)_1 (\delta)_2 \rangle | \psi_f \rangle \\ &\quad \langle \psi_f | a_{\gamma'}^\dagger a_{\delta'}^\dagger a_{\beta'} a_{\alpha'} \langle (\alpha')_1 (\beta')_2 | g_{12} | (\gamma')_1 (\delta')_2 \rangle | \psi_i \rangle \end{aligned} \quad (10.6)$$

soit

$$\begin{aligned}
S &= \sum_i \langle \psi_i | G | \psi_f \rangle \langle \psi_f | G | \psi_i \rangle \\
&= \frac{1}{4} \sum_{i,f} \langle \psi_i | \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\delta a_\gamma a_\gamma^\dagger a_\delta^\dagger a_{\beta'} a_{\alpha'} \langle (\alpha)_1 (\beta)_2 | g_{12} | (\gamma)_1 (\delta)_2 \rangle \\
&\quad \langle (\alpha')_1 (\beta')_2 | g_{12} | (\gamma')_1 (\delta')_2 \rangle | \psi_i \rangle
\end{aligned} \tag{10.7}$$

Nous obtenons, avec (10.3)

$$\begin{aligned}
a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\delta a_\gamma a_\gamma^\dagger a_\delta^\dagger a_{\beta'} a_{\alpha'} &= \left(a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_{\beta'} a_{\alpha'} \right) (\delta_{\gamma,\gamma'} \delta_{\delta,\delta'} - \delta_{\delta,\gamma'} \delta_{\gamma,\delta'}) \\
&\quad + a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger \left(\delta_{\delta,\gamma'} a_\delta^\dagger a_\gamma + \delta_{\gamma,\delta'} a_\gamma^\dagger a_\delta - \delta_{\gamma,\gamma'} a_\delta^\dagger a_\delta - \delta_{\delta,\delta'} a_\gamma^\dagger a_\gamma \right) a_{\beta'} a_{\alpha'} \\
&\quad + a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\gamma^\dagger a_\delta^\dagger a_\delta a_\gamma a_{\beta'} a_{\alpha'}
\end{aligned} \tag{10.8}$$

qui fait donc intervenir des opérateurs à 2, 3 et 4 électrons. Le théorème de Uylings s'énonce ainsi : la trace d'un opérateurs à k électrons dans le sous-espace ℓ^N ne dépend de N que par le coefficient binomial $\binom{N-k}{4\ell+2-k}$. La somme à évaluer est donc une combinaison linéaire de ces coefficients. Elle est complètement déterminée s'il est possible de la connaître, par les méthodes de Racah ou dans des tables, pour un nombre suffisant de valeurs simples de N , par exemple, 1, 2, 4ℓ ou $4\ell+1$.

Chapitre 11

Annexe B : Dimension fractale de la loi de Learner

Supposons que les intensités soient distribuées régulièrement dans leur intervalle de définition. Le nombre M d'intervalles (barres) de taille h requis(es) pour recouvrir l'ensemble. Dans l'intervalle $[2^n I_0, 2^{n+1} I_0]$ de taille $2^n I_0$, les intensités des raies sont séparées par une "distance" :

$$d_n = \frac{2^n I_0}{N_0 10^{-np}} = \frac{x^n I_0}{N_0} \quad \text{avec} \quad x = 2 \cdot 10^p. \quad (11.1)$$

Pour $h < d_n$, il faut une barre pour chaque intensité de raie :

$$M_n = \frac{N_0}{10^{np}}. \quad (11.2)$$

Pour $h > d_n$, il faut remplir le $n^{\text{ième}}$ intervalle de taille $2^n I_0$ avec des barres de taille h . Le nombre de telles barres est

$$M_n = \frac{2^n I_0}{h}. \quad (11.3)$$

Soit n_0 un entier tel que $h = d_{n_0}$; on a

$$n_0 = \frac{\ln(N_0 h) - \ln(I_0)}{\ln(x)}. \quad (11.4)$$

Le nombre total de barres de taille h requises pour recouvrir l'ensemble est donc :

$$M = \sum_{n=1}^{\infty} M_n = \sum_{n=1}^{n_0} \frac{2^n I_0}{h} + \sum_{n=n_0}^{\infty} \frac{N_0}{10^{np}}. \quad (11.5)$$

L'hypothèse $h \ll 1$ (autrement dit $n_0 \gg 1$) permet d'écrire

$$M \approx \frac{I_0}{h} 2^{n_0+1} + \frac{N_0}{10^{n_0 \cdot p}} \frac{1}{(1 - 10^{-p})}. \quad (11.6)$$

Le premier terme l'emporte dans cette dernière expression. En utilisant l'expression (11.4) de n_0 , on a

$$M \approx \frac{2}{h} \left(\frac{N_0 h}{I_0} \right)^{\frac{\ln 2}{\ln(2 \cdot 10^p)}}, \quad (11.7)$$

qui conduit à la dimension fractale :

$$D_F = 1 - \frac{\ln 2}{\ln [2 \cdot 10^p]} = 1 - \frac{\ln 2}{\ln 2 + p} = \frac{p}{\ln 2 + p}. \quad (11.8)$$

Il faut vérifier pour quelle valeur de h et quelle valeur suffisamment grande de N on obtient la loi de puissance $M \approx h^{-D_F}$. Learner a observé que $p \approx \log_{10}(2)/2 \approx 0.1505$. Dans ce cas :

$$D_F = \frac{\log_{10}(2)/2}{\log_{10}(2) + \log_{10}(2)/2} = \frac{1}{3}. \quad (11.9)$$

Cette valeur est relativement petite, en comparaison des systèmes fractals courants [234], ce qui signifie que la capacité du fractal à remplir l'espace est relativement limitée. Elle est différente de celle qui a été obtenue par Bauche et Bauche-Arnoult [43] (voir paragraphe 4.3.2).

Chapitre 12

Annexe C : Importance de la théorie des groupes en spectroscopie

L'année 1949 peut être considérée comme l'origine de l'application moderne des groupes de Lie à la théorie des couches atomiques, avec la publication d'une série de quatre articles fondateurs de Racah sur la théorie des spectres complexes. La nouveauté de son approche résidait dans l'introduction des groupes de Lie de non invariance, contrairement aux groupes de symétrie usuels utilisés auparavant et sous-tendant la théorie (en particulier le groupe de rotation $SO(3)$ en spectroscopie atomique). Même s'il faut mentionner que Wigner a été le premier à reconnaître la valeur des problèmes d'identification modèle de super-multiplet $SU(4) \supset SU(2) \times SU(2)$ de 1937, cette approche n'a été acceptée que beaucoup plus tard. L'ansatz de Racah a également été la première étape vers une réconciliation de deux écoles opposées : les défenseurs de la théorie des groupes comme Hermann Weyl (avec son fameux ouvrage "Gruppentheorie und Quantenmechanik") et les opposants, représentés en particulier par Condon et Shortley avec leur ouvrage "The Theory of Atomic Spectra". Il faut cependant remarquer que dans cet ouvrage, les auteurs utilisent implicitement la théorie des groupes en choisissant des combinaisons linéaires adéquates de déterminants de Slater qui correspondent en fait aux représentations irréductibles de $SO(5)$.

Il est possible que le déclin d'intérêt pour la spectroscopie atomique (et la recherche fondamentale associée) à la fin des années trente ait été lié à l'attention croissante portée à la structure des noyaux suivant les expériences liées à la fission de Hahn-Straßmann [160], ainsi que par les exigences de la guerre en ce qui concerne les applications militaires [118]. Pendant un certain temps après 1949, un grand nombre des résultats de Racah sont demeurés dans l'ombre pour les spécialistes de spectroscopie atomique, bien que leur importance en physique nucléaire ait été rapidement reconnue. Avec la technique de Racah, par exemple, Jahn a énuméré les états apparaissant lors du remplissage de la couche d du noyau dans le couplage de Russel-Saunders, obtenant une classification des états selon le groupe de rotation $SO(5)$.

Notons que la théorie des groupes présente également un intérêt pour l'étude de l'interaction de configurations (on pourra lire à ce sujet l'excellente thèse de Feneuille [110] intitulée "Etude théorique des configurations électroniques mélangées $(\ell + \ell')^N$ " ou son article "Application de la théorie des groupes de Lie aux configurations mélangées" [109]).

Chapitre 13

Annexe D : moyenne de formes linéaires et bilinéaires dans le formalisme STA

13.1 Relation de double récurrence

Les calculs effectués jusqu'à présent dans la littérature [29,61] reposaient tous sur la relation suivante :

$$U_Q = \frac{1}{Q} \sum_{k=1}^Q \chi_k U_{Q-k}, \quad (13.1)$$

avec

$$\chi_k = - \sum_{i=1}^N g_i (-X_i)^k, \quad (13.2)$$

N étant le nombre d'orbitales de la super-couche considérée. La relation de récurrence (13.1) est initialisée avec la condition $U_0 = 1$. Jusqu'à présent, nous avons adopté la notation U_Q illustrant le fait que la fonction de partition dépend du nombre d'électrons. En réalité, la fonction de partition dépend également du nombre d'orbitales de la super-couche. Cette dépendance sera notée $U_Q(N)$. La relation (13.1) contient des sommes alternées sources d'instabilités numériques. Cela se produit particulièrement lorsque l'on s'intéresse à des grandes super-couches (et par conséquent si on souhaite effectuer un calcul par degré de charge par exemple). C'est la raison pour laquelle nous avons proposé une relation de récurrence [135,412] portant non plus seulement sur le nombre d'électrons Q mais également sur le nombre d'orbitales N de la super-couche considérée. Elle ne comprend pas de sommes alternées et est exempte des difficultés numériques de la relation de Bar-Shalom et coll. [29]. Elle permet le calcul précis des fonctions de partition de super-couches de toutes tailles. Cette relation s'écrit :

$$U_Q(N) = \sum_{q_N=0}^{\min(Q, g_N)} U_{Q-q_N}(N-1) \exp[\Omega_N(q_N)] \quad (13.3)$$

avec

$$\Omega_N(q_N) = -\beta\epsilon_N q_N + \frac{1}{\beta} \ln \left(\frac{g_N}{q_N} \right). \quad (13.4)$$

La relation (13.3) est initialisée avec la condition $U_0(0) = 1$.

13.2 Moyennes des populations

Il est aisé, en s'appuyant sur les relations du binôme, de montrer que la population moyenne de l'orbitale i au sein d'une super-configuration s'écrit :

$$\langle q_i \rangle = g_i \left[1 - \frac{U_Q(g^i)}{U_Q(g)} \right], \quad (13.5)$$

où

$$g = \{g_1, g_2, \dots, g_\alpha, \dots, g_N\} \quad (13.6)$$

représente le vecteur des dégénérescences et

$$g^\alpha = \{g_1, g_2, \dots, g_\alpha - 1, \dots, g_N\} \quad (13.7)$$

est le vecteur des dégénérescences dans lequel la dégénérescence de la sous-couche α est réduite de 1. De la même manière, on a

$$g^{\alpha\beta} = \{g_1 - \delta_{1,\alpha} - \delta_{1,\beta}, \dots, g_s - \delta_{s,\alpha} - \delta_{s,\beta}, \dots, g_N - \delta_{N,\alpha} - \delta_{N,\beta}\}, \quad (13.8)$$

etc. En utilisant la relation

$$U_Q(g) = X_i U_{Q-1}(g^i) + U_Q(g^i), \quad (13.9)$$

on peut également écrire

$$\langle q_i \rangle = g_i X_i \frac{U_{Q-1}(g^i)}{U_Q(g)}, \quad (13.10)$$

ou encore

$$\langle q_i \rangle = \frac{g_i}{1 + \frac{U_Q(g^i)}{X_i U_{Q-1}(g^i)}}. \quad (13.11)$$

Les expressions (13.5), (13.10) et (13.11) sont équivalentes. La relation (13.11) se révèle toutefois plus efficace car elle fait intervenir deux fonctions $U_Q(g^i)$ et $U_{Q-1}(g^i)$ qui sont obtenues conjointement dans la double récurrence (13.3), à condition d'effectuer le remplacement $g \rightarrow g^i$. Afin de limiter le temps de calcul, il est intéressant, lorsque le nombre d'électrons d'une super-couche dépasse la dégénérescence moitié de cette super-couche, de raisonner sur le complémentaire des électrons : les "trous". La définition d'une fonction de partition en "trous", notée U^* , est identique à celle d'une fonction de partition en électrons U en remplaçant les X_k par $X_k^* = 1/X_k$. Les mêmes relations de récurrence s'appliquent. Le nombre d'électrons Q est remplacé par le

nombre de trous $Q^* = g_\sigma - Q$, où g_σ est la dégénérescence totale de la super-couche σ définie par

$$g_\sigma = \sum_{i=1}^N g_i. \quad (13.12)$$

La relation (13.9) devient

$$U_{Q^*}^*(g) = X_i^* U_{Q^*-1}^*(g^i) + U_{Q^*}^*(g^i). \quad (13.13)$$

Concernant les dégénérescences réduites, on a les relations suivantes

$$U_{Q-n}(g) = A_\sigma U_{Q^*+n}^*(g), \quad (13.14)$$

$$U_{Q-n}(g) = A_\sigma X_i^* U_{Q^*+n-1}^*(g^i), \quad (13.15)$$

et

$$U_{Q-n}(g^{ij}) = A_\sigma X_i^* X_j^* U_{Q^*+n-2}^*(g^{ij}), \quad (13.16)$$

avec

$$A_\sigma = \prod_{i \in \sigma} X_i^{g_i}. \quad (13.17)$$

En formalisme “trous”, on a

$$\langle q_i \rangle^* = g_i \frac{U_{Q^*}^*(g^i)}{U_{Q^*}^*(g)}, \quad (13.18)$$

ou encore

$$\langle q_i \rangle^* = \frac{g_i}{1 + X_i^* \frac{U_{Q^*-1}^*(g^i)}{U_{Q^*}^*(g^i)}}. \quad (13.19)$$

13.3 Moyennes des interactions à deux corps

La moyenne de $\langle q_i (q_j - \delta_{ij}) \rangle$ s'exprime sous la forme compacte suivante :

$$\langle q_i (q_j - \delta_{ij}) \rangle = g_i (g_j - \delta_{ij}) \left[1 - \frac{U_Q(g^i)}{U_Q(g)} - \frac{U_Q(g^j)}{U_Q(g)} - \frac{U_Q(g^{ij})}{U_Q(g)} \right]. \quad (13.20)$$

En appliquant deux fois la relation (13.9), on obtient également

$$\langle q_i (q_j - \delta_{ij}) \rangle = g_i (g_j - \delta_{ij}) X_i X_j \frac{U_{Q-2}(g^{ij})}{U_Q(g)}, \quad (13.21)$$

ou encore

$$\langle q_i (q_j - \delta_{ij}) \rangle = \frac{g_i (g_j - \delta_{ij})}{1 + \left(\frac{1}{X_i} + \frac{1}{X_j} \right) \frac{U_{Q-1}(g^{ij})}{U_{Q-2}(g^{ij})} + \frac{1}{X_i X_j} \frac{U_Q(g^{ij})}{U_{Q-2}(g^{ij})}}. \quad (13.22)$$

En réalité nous avons besoin de $\langle q_i q_j \rangle$ avec $i \neq j$ et de $\langle q_i^2 \rangle$. La moyenne $\langle q_i q_j \rangle$ avec $i \neq j$ s'écrit

$$\langle q_i q_j \rangle = g_i g_j \left[1 - \frac{U_Q(g^i)}{U_Q(g)} - \frac{U_Q(g^j)}{U_Q(g)} + \frac{U_Q(g^{ij})}{U_Q(g)} \right]. \quad (13.23)$$

On obtient aisément, en utilisant la relation (13.9) :

$$\langle q_i q_j \rangle = g_i g_j X_i X_j \frac{U_{Q-2}(g^{ij})}{U_Q(g)}, \quad (13.24)$$

que l'on peut écrire

$$\langle q_i q_j \rangle = \frac{g_i g_j}{1 + \left(\frac{1}{X_i} + \frac{1}{X_j} \right) \frac{U_{Q-1}(g^{ij})}{U_{Q-2}(g^{ij})} + \frac{1}{X_i X_j} \frac{U_Q(g^{ij})}{U_{Q-2}(g^{ij})}}, \quad (13.25)$$

impliquant

$$\langle q_i^2 \rangle = g_i^2 \left[1 - 2 \frac{U_Q(g^i)}{U_Q(g)} + \frac{U_Q(g^{ii})}{U_Q(g)} \right] + g_i \left[\frac{U_Q(g^i)}{U_Q(g)} - \frac{U_Q(g^{ii})}{U_Q(g)} \right]. \quad (13.26)$$

Il est encore possible d'écrire, en utilisant la relation (13.9) :

$$\langle q_i^2 \rangle = g_i^2 X_i^2 \frac{U_{Q-2}(g^{ii})}{U_Q(g)} + g_i X_i \frac{U_{Q-1}(g^{ii})}{U_Q(g)} \quad (13.27)$$

ou

$$\langle q_i^2 \rangle = \frac{g_i (g_i - 1)}{1 + \frac{2}{X_i} \frac{U_{Q-1}(g^{ii})}{U_{Q-2}(g^{ii})} + \frac{1}{X_i^2} \frac{U_Q(g^{ii})}{U_{Q-2}(g^{ii})}} + \frac{g_i}{1 + \frac{U_{Q-1}(g^i)}{X_i U_Q(g^i)}}. \quad (13.28)$$

En formalisme "trous", on a

$$\langle q_i (q_j - \delta_{ij}) \rangle_Q^* = g_i (g_j - \delta_{ij}) \left[1 - X_i^* \frac{U_{Q^*-1}^*(g^i)}{U_{Q^*}^*(g)} - X_j^* \frac{U_{Q^*-1}^*(g^j)}{U_{Q^*}^*(g)} + X_i^* X_j^* \frac{U_{Q^*-2}^*(g^{ij})}{U_{Q^*}^*(g)} \right]. \quad (13.29)$$

Il est également possible d'écrire, en utilisant la relation (13.13) :

$$\langle q_i (q_j - \delta_{ij}) \rangle_Q^* = g_i (g_j - \delta_{ij}) \frac{U_{Q^*}^*(g^{ij})}{U_{Q^*}^*(g)}, \quad (13.30)$$

ou

$$\langle q_i (q_j - \delta_{ij}) \rangle_Q^* = \frac{g_i (g_j - \delta_{ij})}{1 + \left(X_i^* + X_j^* \right) \frac{U_{Q^*-1}^*(g^{ij})}{U_{Q^*}^*(g^{ij})} + X_i^* X_j^* \frac{U_{Q^*-2}^*(g^{ij})}{U_{Q^*}^*(g^{ij})}}. \quad (13.31)$$

Cela permet d'obtenir

$$\langle q_i q_j \rangle^* = g_i g_j \left[1 - X_i^* \frac{U_{Q^*-1}^*(g^i)}{U_{Q^*}^*(g)} - X_j^* \frac{U_{Q^*-1}^*(g^j)}{U_{Q^*}^*(g)} + X_i^* X_j^* \frac{U_{Q^*-2}^*(g^{ij})}{U_{Q^*}^*(g)} \right]. \quad (13.32)$$

Il est encore possible d'écrire, en utilisant la relation (13.13) :

$$\langle q_i q_j \rangle^* = g_i g_j \frac{U_Q^*(g^{ij})}{U_{Q^*}^*(g)}, \quad (13.33)$$

ou encore

$$\langle q_i q_j \rangle^* = \frac{g_i g_j}{1 + \left(X_i^* + X_j^* \right) \frac{U_{Q^*-1}^*(g^{ij})}{U_{Q^*}^*(g^{ij})} + X_i^* X_j^* \frac{U_{Q^*-2}^*(g^{ij})}{U_{Q^*}^*(g^{ij})}}. \quad (13.34)$$

Par conséquent, on a finalement

$$\langle q_i^2 \rangle^* = g_i^2 \left[1 - 2X_i^* \frac{U_{Q^*-1}^*(g^i)}{U_{Q^*}^*(g)} + X_i^{*2} \frac{U_{Q^*-2}^*(g^{ii})}{U_{Q^*}^*(g)} \right] + g_i X_i^* \left[\frac{U_{Q^*-1}^*(g^i)}{U_{Q^*}^*(g)} - X_i^* \frac{U_{Q^*-2}^*(g^{ii})}{U_{Q^*}^*(g)} \right], \quad (13.35)$$

qui s'écrit, en utilisant la relation (13.9) :

$$\langle q_i^2 \rangle^* = g_i^2 \frac{U_{Q^*}^*(g^{ii})}{U_{Q^*}^*(g)} + g_i X_i^* \frac{U_{Q^*-1}^*(g^{ii})}{U_{Q^*}^*(g)}, \quad (13.36)$$

soit

$$\langle q_i^2 \rangle^* = \frac{g_i (g_i - 1)}{1 + 2X_i^* \frac{U_{Q^*-1}^*(g^{ii})}{U_{Q^*}^*(g^{ii})} + X_i^{*2} \frac{U_{Q^*-2}^*(g^{ii})}{U_{Q^*}^*(g^{ii})}} + \frac{g_i}{1 + X_i^* \frac{U_{Q^*-1}^*(g^i)}{U_{Q^*}^*(g^i)}}. \quad (13.37)$$

13.4 Moyennes sur les super-couches

Considérons la forme linéaire générale :

$$L = \sum_i L_i q_i. \quad (13.38)$$

Sa moyenne sur les orbitales de la super-couche σ (dénommée en abrégé “moyenne sur la super-couche σ ” et notée $\langle \rangle_\sigma$) s'écrit :

$$\langle L \rangle_\sigma = \sum_{i \in \sigma} L_i \langle q_i \rangle_\sigma = \frac{1}{U_Q(g)} \sum_{i \in \sigma} L_i g_i X_i U_{Q-1}(g^i). \quad (13.39)$$

Considérons la forme quadratique particulière :

$$B = \frac{1}{2} \sum_{i,j} V_{ij} q_i (q_j - \delta_{ij}). \quad (13.40)$$

Sa moyenne sur la super-couche σ s'écrit :

$$\langle B \rangle_\sigma = \frac{1}{2} \sum_{i,j} V_{ij} \langle q_i (q_j - \delta_{ij}) \rangle_\sigma = \frac{1}{2U_Q(g)} \sum_{i,j} V_{ij} (g_j - \delta_{ij}) X_i X_j U_{Q-2} (g^{ij}). \quad (13.41)$$

Il sera utile également de savoir évaluer le moment d'ordre deux d'une forme linéaire et sa moyenne sur une super-couche σ :

$$\begin{aligned} \langle L^2 \rangle_\sigma &= \sum_{i \in \sigma} \sum_{j \in \sigma} L_i L_j \langle q_i q_j \rangle_\sigma \\ &= \frac{1}{U_Q(g)} \sum_{i,j \in \sigma} L_i L_j g_i g_j X_i X_j U_{Q-2} (g^{ij}) + \frac{1}{U_Q(g)} \sum_{i \in \sigma} L_i^2 g_i X_i U_{Q-1} (g^{ii}). \end{aligned} \quad (13.42)$$

13.5 Moyennes sur les super-configurations

La moyenne de la forme linéaire L sur toutes les super-couches de la super-configuration Ξ (dénommée en abrégé "moyenne sur la super-configuration Ξ " et notée $\langle \rangle_\Xi$) s'écrit :

$$\langle L \rangle_\Xi = \sum_{\sigma \in \Xi} \sum_{i \in \sigma} L_i \langle q_i \rangle_\sigma = \sum_{\sigma \in \Xi} \langle L \rangle_\sigma. \quad (13.43)$$

La moyenne de la forme quadratique B sur la super-configuration Ξ s'écrit :

$$\langle B \rangle_\Xi = \sum_{\sigma \in \Xi} \langle B \rangle_\sigma + \frac{1}{2} \sum_{\sigma \in \Xi} \sum_{i \in \sigma} \langle q_i \rangle_\sigma \sum_{\sigma' \neq \sigma} \sum_{j \in \sigma'} V_{ij} \langle q_j \rangle_{\sigma'}, \quad (13.44)$$

ou encore

$$\langle B \rangle_\Xi = \sum_{\substack{\sigma \in \Xi \\ i \in \sigma, j \in \sigma}} \langle B \rangle_\sigma + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\sigma \in \Xi \\ i \in \sigma, j \in \sigma'}} g_i X_i \frac{U_{Q_{\sigma-1}}(g^i)}{U_{Q_\sigma}(g)} \sum_{\sigma' \neq \sigma} \sum_{j \in \sigma'} V_{ij} g_j X_j \frac{U_{Q_{\sigma'-1}}(g^j)}{U_{Q_{\sigma'}}(g)}. \quad (13.45)$$

La moyenne du moment d'ordre deux d'une forme linéaire sur la super-configuration Ξ s'écrit :

$$\langle L^2 \rangle_\Xi = \sum_{\sigma \in \Xi} \langle L^2 \rangle_\sigma + \sum_{\sigma \in \Xi} \sum_{i \in \sigma} g_i L_i X_i \frac{U_{Q_{\sigma-1}}(g^i)}{U_{Q_\sigma}(g)} \sum_{\sigma' \neq \sigma} \sum_{j \in \sigma'} L_j g_j X_j \frac{U_{Q_{\sigma'-1}}(g^j)}{U_{Q_{\sigma'}}(g)}, \quad (13.46)$$

soit

$$\langle L^2 \rangle_\Xi = \sum_{\sigma \in \Xi} \langle L^2 \rangle_\sigma + \sum_{\sigma, \sigma' \in \Xi, \sigma \neq \sigma'} \langle L \rangle_\sigma \langle L \rangle_{\sigma'} = \sum_{\sigma \in \Xi} \langle L^2 \rangle_\sigma - \sum_{\sigma \in \Xi} \langle L \rangle_\sigma^2 + \left(\sum_{\sigma \in \Xi} \langle L \rangle_\sigma \right)^2 \quad (13.47)$$

Il est alors aisé d'obtenir la variance

$$v[L] = \langle L^2 \rangle_\Xi - \langle L \rangle_\Xi^2. \quad (13.48)$$

Chapitre 14

Annexe E : Expression des moments STA

14.1 Formules générales

Pour des éléments de Z intermédiaire ou élevé, le nombre de raies entre 2 configurations C et C' peut être si grand que la séparation moyenne entre deux raies est plus petite que la largeur individuelle des raies. Dans ce cas, pour un saut mono-électronique donné, les raies coalescent en une enveloppe quasi-Gaussienne appelée UTA (Unresolved Transition Array) [32]. Dans la théorie STA [29], les faisceaux de transition non-résolus entre deux super-configurations sont également modélisés par une distribution continue de l'énergie des photons (souvent Gaussienne), caractérisée par ses moments d'ordre 0, 1 et 2, résultant d'une moyenne des éléments de transition inter-termes sur l'ensemble des configurations mises en jeu. De la même manière qu'un UTA est une superposition de raies, un STA peut être compris comme une superposition d'UTAs. Les moments $M_n^{\alpha \rightarrow \beta}$ d'ordre n associés à un saut mono-électronique $\alpha \rightarrow \beta$ donné ne sont pas normalisés dans ce rapport. Ceci explique la notion de moment d'ordre 0 qui représente précisément cette norme. En reprenant les notations du paragraphe 2.2, on définit ainsi :

$$M_n^{\alpha \rightarrow \beta} = \sum_{C \in \Xi} (E_C^{\alpha \rightarrow \beta})^n G_C \exp \left[-\beta \left(E_C^{\alpha \rightarrow \beta} - \mu Q \right) \right] = \langle E_C^n \rangle U_Q^{(\Xi)}, \quad (14.1)$$

où l'énergie d'une configuration C s'écrit :

$$E_C^{\alpha \rightarrow \beta} = D_0^{\alpha \beta} + \sum_r (q_r - \delta_{r\alpha}) D_r^{\alpha \beta}. \quad (14.2)$$

Un STA est un groupe spectral de transitions à partir d'une super-configuration Ξ donnée et impliquant un saut mono-électronique donné $\alpha \rightarrow \beta$. Un STA inclut par conséquent toutes les transitions entre deux super-configurations $\Xi \rightarrow \Xi' = \Xi - \alpha + \beta$. Les moments caractérisant une transition $\alpha \rightarrow \beta$ sont définis formellement par :

$$M_i^{(\Xi, \alpha \rightarrow \beta)} = \frac{4\pi^2 \alpha}{3} \sum_{C \in \Xi, C' \in \Xi', \alpha \rightarrow \beta} \mathcal{P}_C \sum_{n_E \in C, m_E \in C'} (E_{m_E} - E_{n_E})^i \left| \langle n_E | \hat{D} | m_E \rangle \right|^2, \quad (14.3)$$

n_E et m_E étant les états initial et final de la transition et \hat{D} l'opérateur dipolaire. “ $C \in \Xi$, $C' \in \Xi'$, $\alpha \rightarrow \beta$ ” signifie “ C' déduite de C par le saut mono-électronique $\alpha \rightarrow \beta$ ”. La mise en œuvre de l'équation (14.3) implique de tenir compte de la dépendance de \mathcal{P}_C en fonction de la température. Dans le but d'introduire cette dépendance, on utilise l'approximation principale de la méthode des super-configurations introduite au chapitre 2. Cette approximation simplifie grandement le calcul. Ainsi, avec les deux premiers moments calculés à l'aide des relations de récurrence mentionnées précédemment, le coefficient de normalisation (ou moment d'ordre zéro) s'écrit :

$$M_0^{(\Xi, \alpha \rightarrow \beta)} = \frac{4\pi^2 \alpha}{3} \frac{2^{n_\Xi}}{U} X_\alpha \prod_{\sigma \in \Xi} U_{Q_{\sigma - \delta_{\alpha \in \sigma}}}^{(\sigma)} |\langle \alpha || \vec{r} || \beta \rangle|^2, \quad (14.4)$$

où

$$\delta_{\alpha \in \sigma} = \begin{cases} 1 & \text{si } \alpha \in \sigma \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases} \quad (14.5)$$

et

$$g^{\alpha\beta} = \{g_1 - \delta_{1,\alpha} - \delta_{1,\beta}, \dots, g_s - \delta_{s,\alpha} - \delta_{s,\beta}, \dots, g_N - \delta_{N,\alpha} - \delta_{N,\beta}\} \quad (14.6)$$

est le vecteur des dégénérescences réduites. n_Ξ est le nombre de super-couches de la super-configuration Ξ et U est la fonction de partition totale du plasma

$$U = \sum_{\Xi'} U_{\Xi'}, \quad (14.7)$$

où

$$U_\Xi = \sum_{C \in \Xi} g_C \exp(-\beta E_C). \quad (14.8)$$

Dans le code SCO, la contribution des transitions lié-libre est calculée pour chaque super-configuration (avec élargissement statistique des seuils), et la partie libre-libre du spectre est calculée à l'issue du calcul de l'Atome Moyen. Elle est calculée par la formule classique de Kramers corrigée, pour la prise en compte des effets quantiques, du facteur de Gaunt calculé de manière approchée par un modèle proposé par Perrot [313].

14.2 Moments d'ordre 0, 1 et 2

On peut développer les moments d'ordre 0 et 1 sous la forme :

$$M_0^{\alpha \rightarrow \beta} = g_\alpha g_\beta X_\alpha U_{Q-1}^\alpha (g^{\alpha\beta}) \quad (14.9)$$

et

$$M_1^{\alpha \rightarrow \beta} = g_\alpha g_\beta X_\alpha \left[D_0^{\alpha\beta} U_{Q-1}^\alpha (g^{\alpha\beta}) + \sum_r D_r^{\alpha\beta} X_r g_r^{\alpha\beta} U_{Q-2}^{\alpha r} (g^{\alpha\beta r}) \right]. \quad (14.10)$$

Les fonctions $D_0^{\alpha\beta} = \langle \beta \rangle - \langle \alpha \rangle$ et $D_r^{\alpha\beta} = 2[\langle \beta, r \rangle - \langle \alpha, r \rangle] + (\delta_{r\alpha} - \delta_{r\beta})\eta_r^{\alpha\beta}$ dépendent des fonctions radiales à un corps $\langle r \rangle$ et à deux corps $\langle r, s \rangle$, ainsi que des fonctions $\eta_r^{\alpha\beta}$ dont on peut trouver les expressions dans la référence [29]. La notation $U_{Q-1}^\alpha(g^{\alpha\beta})$ signifie que

i) la fonction de partition est évaluée avec $Q_\sigma - 1$ électrons dans la super-couche σ contenant l'orbitale α , et Q_σ dans les autres super-couches (avec $\sum_\sigma Q_\sigma = Q$).

ii) les dégénérescences des orbitales α et β sont diminuées d'une unité.

On pose $g_r^{\alpha\beta} = g_r - \delta_{r\alpha} - \delta_{r\beta}$. L'énergie moyenne d'un faisceau STA se calcule à partir de ces deux moments par la formule

$$E_{\Xi}^{\alpha \rightarrow \beta} = \frac{M_1^{\alpha \rightarrow \beta}}{M_0^{\alpha \rightarrow \beta}} = D_0^{\alpha \beta} + \sum_r D_r^{\alpha \beta} X_r g_r^{\alpha \beta} \frac{U_{Q-2}^{\alpha r}(g^{\alpha \beta r})}{U_{Q-1}^\alpha(g^{\alpha \beta})}. \quad (14.11)$$

Le moment d'ordre deux est décomposé, pour des raisons d'organisation du calcul, en cinq parties :

$$M_2^{\alpha \rightarrow \beta} = M_{21}^{\alpha \rightarrow \beta} + M_{22}^{\alpha \rightarrow \beta} + M_{23}^{\alpha \rightarrow \beta} + M_{24}^{\alpha \rightarrow \beta} + M_{25}^{\alpha \rightarrow \beta}. \quad (14.12)$$

Pour les super-configurations de départ et d'arrivée considérées, une transition mono-électronique $\alpha \rightarrow \beta$ donnée peut se produire entre plusieurs couples de configurations électroniques. Chacune de ces raies $\alpha \rightarrow \beta$ possède une énergie légèrement différente, et une largeur UTA qui lui est propre. Le moment $M_{21}^{\alpha \rightarrow \beta}$ est la contribution au moment d'ordre deux des largeurs UTA de chacune de ces raies :

$$M_{21}^{\alpha \rightarrow \beta} = g_\alpha g_\beta X_\alpha \sum_r \mathcal{V}_G(\ell_r \ell_\alpha - \ell_r \ell_\beta) X_r g_r^{\alpha \beta} U_{Q-2}^{\alpha r}(g^{\alpha \beta r r}), \quad (14.13)$$

où $\mathcal{V}_G(\ell_r \ell_\alpha - \ell_r \ell_\beta)$ est la variance UTA de la transition $\alpha \rightarrow \beta$ avec un unique électron spectateur dans l'orbitale r . Les formules analytiques de ces variances sont données dans la référence [32]. La deuxième composante représente la contribution de l'interaction spin-orbite

$$M_{22}^{\alpha \rightarrow \beta} = \Delta_{\text{so}, \alpha \rightarrow \beta}^2 M_0^{\alpha \rightarrow \beta}, \quad (14.14)$$

avec

$$\Delta_{\text{so}, \alpha \rightarrow \beta}^2 = \frac{(\zeta_\alpha - \zeta_\beta)}{4} [\ell_\alpha (\ell_\alpha + 1) \zeta_\alpha - \ell_\beta (\ell_\beta + 1) \zeta_\beta] + \frac{\zeta_\alpha \zeta_\beta}{2}, \quad (14.15)$$

où ζ_r est l'intégrale de spin-orbite usuelle. Les termes restant correspondent à l'étalement en énergie des raies $\alpha \rightarrow \beta$ associées à un couple de configurations distinctes, les raies étant considérées "à largeur nulle" (l'effet des termes est pris en compte par la première composante) :

$$M_{23}^{\alpha \rightarrow \beta} = g_\alpha g_\beta X_\alpha \left[\sum_{r,t} D_r^{\alpha \beta} D_t^{\alpha \beta} g_t^{\alpha \beta r} g_r^{\alpha \beta} X_r X_t U_{Q-3}^{\alpha r t}(g^{\alpha \beta r t}) + \sum_t (D_t^{\alpha \beta})^2 g_t^{\alpha \beta} X_t U_{Q-2}^{\alpha t}(g^{\alpha \beta t}) \right], \quad (14.16)$$

$$M_{24}^{\alpha \rightarrow \beta} = 2D_0^{\alpha\beta} \left(M_1^{\alpha \rightarrow \beta} - D_0^{\alpha\beta} M_0^{\alpha \rightarrow \beta} \right) \quad (14.17)$$

et

$$M_{25}^{\alpha \rightarrow \beta} = (D_0^{\alpha\beta})^2 M_0^{\alpha \rightarrow \beta}. \quad (14.18)$$

La variance du faisceau STA s'écrit :

$$\left(\Delta_S^{\alpha \rightarrow \beta} \right)^2 = \frac{M_2^{\alpha \rightarrow \beta}}{M_0^{\alpha \rightarrow \beta}} - \left(\frac{M_1^{\alpha \rightarrow \beta}}{M_0^{\alpha \rightarrow \beta}} \right)^2. \quad (14.19)$$

Le calcul des fonctions de partition, faisant intervenir des dégénérescences modifiées, peut sembler problématique. Lorsque la couche de départ ou d'arrivée de la transition mono-électronique est une orbitale "s" ($\ell = 0$ et donc $g = 4\ell + 2 = 2$), les formules précédentes peuvent faire apparaître des dégénérescences négatives, ce qui rend la formule indéterminée *a priori*. Par exemple, la fonction de partition $U_Q(g^{\alpha\beta rs})$ n'a pas de sens si $r = s = \alpha$ (ou $r = s = \beta$) et que α (ou β) est une orbitale "s", puisque cela revient à considérer que la dégénérescence de cette orbitale est égale à -1. Habituellement, le problème est contourné en réexprimant les fonctions de partition à l'aide de la relation suivante :

$$U_Q(g^{\alpha\beta rs}) = \sum_{i=0}^Q (-X_s)^i U_{Q-i}(g^{\alpha\beta r}) \quad (14.20)$$

$$= \sum_{i=0}^Q \sum_{j=0}^{Q-i} (-X_s)^i (-X_r)^j U_{Q-i-j}(g^{\alpha\beta}) \quad (14.21)$$

$$= \sum_{k=0}^Q \sum_{i=0}^k (-X_s)^i (-X_r)^{k-i} U_{Q-k}(g^{\alpha\beta}) \quad (14.22)$$

$$= \sum_{k=0}^Q (-X_r)^k U_{Q-k}(g^{\alpha\beta}) \sum_{i=0}^k \left(\frac{X_s}{X_r} \right)^i. \quad (14.23)$$

En procédant de la sorte, il n'y a plus de problèmes "apparents" puisque les fonctions $U_{Q-k}(g^{\alpha\beta})$ sont toujours définies. Mais il subsiste le doute sur la validité générale des formules finales, puisqu'elles peuvent reposer sur une forme indéterminée à une étape du calcul. Il faut lever cette indétermination, lorsqu'elle apparaît, en reprenant les différentes étapes de calcul des moments, et de vérifier l'impact que cela peut avoir sur les formules des variances STA publiées par Bar-Shalom et coll. [29]. En examinant les formules des moments, on voit que deux contributions sont susceptibles de poser problème : $M_{23}^{\alpha \rightarrow \beta}$ et $M_{21}^{\alpha \rightarrow \beta}$. On rappelle l'expression de la contribution $M_{23}^{\alpha \rightarrow \beta}$:

$$M_{23}^{\alpha \rightarrow \beta} = g_\alpha g_\beta X_\alpha \left[\sum_{r,t} D_r^{\alpha\beta} D_t^{\alpha\beta} g_t^{\alpha\beta r} g_r^{\alpha\beta} X_r X_t U_{Q-3}^{\alpha\beta rt} (g^{\alpha\beta rt}) + \sum_t (D_t^{\alpha\beta})^2 g_t^{\alpha\beta} X_t U_{Q-2}^{\alpha\beta t} (g^{\alpha\beta t}) \right]. \quad (14.24)$$

Dans la double somme, une indétermination peut apparaître pour $r = t = \alpha$ (ou $r = t = \beta$) si α (ou β) est une orbitale “s” : on doit alors calculer des fonctions $U_{Q-3}^{\alpha\alpha\alpha}(g^{\alpha\beta\alpha\alpha})$ (ou $U_{Q-3}^{\alpha\beta\beta}(g^{\alpha\beta\beta\beta})$) qui n’ont *a priori* aucun sens. Toutefois, on est sauvé par le terme $g_t^{\alpha\beta r}$ qui est nul dans ces situations. La formule (14.24) est donc correcte, et peut ainsi être utilisée dans tous les cas.

Une indétermination peut également apparaître dans le calcul lié à la prise en compte des “termes” ou larges UTA,

$$M_{21}^{\alpha \rightarrow \beta} = g_\alpha g_\beta X_\alpha \sum_r \mathcal{V}_G(\ell_r \ell_\alpha - \ell_r \ell_\beta) g_r^{\alpha\beta} X_r U_{Q-2}^{\alpha r} (g^{\alpha\beta r r}), \quad (14.25)$$

lorsque $r = \alpha$ (ou $r = \beta$) et que α (ou β) est une orbitale “s”. Contrairement au cas précédent, il n’y a aucun facteur permettant d’annuler ces contributions, et on doit donc évaluer des fonctions $U_{Q-2}^{\alpha\alpha}(g^{\alpha\beta\alpha\alpha})$ (ou $U_{Q-2}^{\alpha\beta}(g^{\alpha\beta\beta\beta})$) sans véritable sens physique. L’origine de ces indéterminations provient d’une opération illicite dans l’établissement de l’expression du moment. Nous allons maintenant en reprendre la démonstration. On considère la transition mono-électronique $\alpha \rightarrow \beta$ reliant deux configurations C et C' définies selon :

$$\begin{cases} C : & \ell_1^{q_1} & \ell_1^{q_2} & \dots & \ell_1^{q_\alpha} & \dots & \ell_1^{q_\beta} & \dots \\ C' : & \ell_1^{q_1} & \ell_1^{q_2} & \dots & \ell_1^{q_{\alpha-1}} & \dots & \ell_1^{q_{\beta+1}} & \dots \end{cases}$$

L’élargissement statistique dû aux termes du faisceau C-C’ peut s’écrire [32] comme une combinaison des variances à deux corps $\mathcal{V}_G(\ell_r \ell_\alpha - \ell_r \ell_\beta)$,

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_G^{\alpha \rightarrow \beta}(\vec{q}) &= \frac{q_1 (g_1 - q_1)}{g_1 - 1} \mathcal{V}_G(\ell_1 \ell_\alpha - \ell_1 \ell_\beta) + \frac{q_2 (g_2 - q_2)}{g_2 - 1} \mathcal{V}_G(\ell_2 \ell_\alpha - \ell_2 \ell_\beta) + \dots \\ &+ \frac{(q_\alpha - 1)(g_\alpha - q_\alpha)}{g_\alpha - 2} \mathcal{V}_G(\ell_\alpha^2 - \ell_\alpha \ell_\beta) + \dots + \frac{q_\beta (g_\beta - q_\beta - 1)}{g_\beta - 2} \mathcal{V}_G(\ell_\alpha \ell_\beta - \ell_\beta^2) + \dots, \end{aligned} \quad (14.26)$$

chaque terme correspondant à la prise en compte de spectateurs éventuels dans chacune des orbitales. Sous forme compacte, l’équation précédente se réécrit selon :

$$\mathcal{V}_G^{\alpha \rightarrow \beta}(\vec{q}) = \sum_s \frac{(q_s - \delta_{s\alpha})(g_s - q_s - \delta_{s\beta})}{g_s^{\alpha\beta} - 1} \mathcal{V}_G^{s, \alpha \rightarrow \beta}, \quad (14.27)$$

avec la notation simplifiée $\mathcal{V}_G^{s, \alpha \rightarrow \beta} = \mathcal{V}_G(\ell_r \ell_\alpha - \ell_r \ell_\beta)$. Le moment $M_{21}^{\alpha \rightarrow \beta}$ s’obtient en sommant cette variance sur toutes les configurations initiales de la super-configuration :

$$M_{21}^{\alpha \rightarrow \beta} = \sum_{|\vec{q}|=Q} \prod_j \binom{g_j}{q_j} X_j^{q_j} \mathcal{V}_G^{\alpha \rightarrow \beta}(\vec{q}) q_\alpha (g_\beta - q_\beta). \quad (14.28)$$

Si on introduit l’expression (14.27) dans l’équation (14.28), on aboutit après quelques étapes de calcul à l’expression (14.25). Les détails de ces calculs ont été publiés par Bar-Shalom et coll. [29], et indépendamment vérifiées par Blenski et coll. [61].

14.3 Moments STA d’ordre 3 et 4 sans structure fine

Si on fait abstraction de la structure fine, et que l’on ne considère que les moyennes sur les configurations, le moment centré STA d’ordre n s’écrit

$$\tilde{M}_n = \sum_{|\bar{q}|=Q} \prod_r \binom{g_r}{q_r} \left[\sum_s (q_s + \delta_{\alpha,s}) D_s + D_0 \right]^n. \quad (14.29)$$

Pour le moment d'ordre zéro, on peut écrire

$$\tilde{M}_0 = g_\alpha g_\beta X_\alpha U_{Q-1}^\alpha (g^{\alpha\beta}), \quad (14.30)$$

le moment d'ordre 1

$$\tilde{M}_1 = D_0 \tilde{M}_0 + \tilde{M}_{1,A}, \quad (14.31)$$

le moment d'ordre 2

$$\tilde{M}_2 = -D_0^2 \tilde{M}_0 + 2D_0 \tilde{M}_1 + \tilde{M}_{2,A}, \quad (14.32)$$

le moment d'ordre 3

$$\tilde{M}_3 = D_0^3 \tilde{M}_0 - 3D_0^2 \tilde{M}_1 + 3D_0 \tilde{M}_2 + \tilde{M}_{3,A}, \quad (14.33)$$

et le moment d'ordre 4

$$\tilde{M}_4 = -D_0^4 \tilde{M}_0 + 4D_0^3 \tilde{M}_1 - 6D_0^2 \tilde{M}_2 + 4D_0 \tilde{M}_3 + \tilde{M}_{4,A} \quad (14.34)$$

avec respectivement

$$\frac{\tilde{M}_{1,A}}{g_\alpha g_\beta X_\alpha} = \sum_r D_r g_r^{\alpha\beta} U_{Q-2}^{\alpha r} (g^{\alpha\beta r}) X_r, \quad (14.35)$$

$$\frac{\tilde{M}_{2,A}}{g_\alpha g_\beta X_\alpha} = \sum_{r,t} D_r D_t g_t^{\alpha\beta r} U_{Q-3}^{\alpha r t} (g^{\alpha\beta r t}) X_r X_t + \sum_t D_t^2 g_t^{\alpha\beta} U_{Q-2}^{\alpha t} (g^{\alpha\beta t}) X_t, \quad (14.36)$$

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{M}_{3,A}}{g_\alpha g_\beta X_\alpha} &= \sum_{s,t,u} D_s D_t D_u g_s^{\alpha\beta} g_t^{\alpha\beta s} g_u^{\alpha\beta st} X_s X_t X_u U_{Q-4}^{\alpha stu} (g^{\alpha\beta stu}) \\ &+ \sum_{s,t} (2D_s^2 D_t + D_s D_t^2) g_s^{\alpha\beta} g_t^{\alpha\beta s} X_s X_t U_{Q-3}^{\alpha st} (g^{\alpha\beta st}) \\ &+ \sum_s D_s^3 g_s^{\alpha\beta} X_s U_{Q-2}^{\alpha s} (g^{\alpha\beta s}), \end{aligned} \quad (14.37)$$

et

$$\begin{aligned}
\frac{\tilde{M}_{4,A}}{g_\alpha g_\beta X_\alpha} &= \sum_{s,t,u,v} D_s D_t D_u D_v g_s^{\alpha\beta} g_t^{\alpha\beta s} g_u^{\alpha\beta st} g_v^{\alpha\beta st u} X_s X_t X_u X_v U_{Q-5}^{\alpha st u v} \left(g^{\alpha\beta st u v} \right) \\
&+ \sum_{s,t,u} (3D_s^2 D_t D_u + 2D_s D_t^2 D_u + D_s D_t D_u^2) g_s^{\alpha\beta} g_t^{\alpha\beta s} g_u^{\alpha\beta st} X_s X_t X_u U_{Q-4}^{\alpha\beta st u} \left(g^{\alpha\beta st u} \right) \\
&+ \sum_{s,t} (3D_s^3 D_t + 3D_s^2 D_t^2 + D_s D_t^3) g_s^{\alpha\beta} g_t^{\alpha\beta s} X_s X_t U_{Q-3}^{\alpha st} \left(g^{\alpha\beta st} \right) \\
&+ \sum_s D_s^4 g_s^{\alpha\beta} X_s U_{Q-2}^{\alpha s} \left(g^{\alpha\beta s} \right). \tag{14.38}
\end{aligned}$$

Chapitre 15

Annexe F : Premières couronnes de vecteurs réciproques

15.1 Cas du réseau cubique faces centrées (cfc)

La maille élémentaire du réseau cfc est définie par les vecteurs de base

$$\begin{aligned}\vec{R}_1 &= \frac{a}{2}(0, 1, 1) \\ \vec{R}_2 &= \frac{a}{2}(1, 0, 1) \\ \vec{R}_3 &= \frac{a}{2}(1, 1, 0),\end{aligned}\tag{15.1}$$

où a désigne le paramètre de la maille (longueur d'un des cotés du cube), tel que $a^3 = 4\Omega_{\text{WS}}$, Ω_{WS} étant le volume de la sphère de Wigner-Seitz, et le réseau réciproque par les vecteurs réciproques élémentaires

$$\begin{aligned}\vec{G}_1 &= 2\pi \frac{\vec{R}_2 \times \vec{R}_3}{\vec{R}_1 \cdot (\vec{R}_2 \times \vec{R}_3)} = \frac{2\pi}{a}(-1, 1, 1) \\ \vec{G}_2 &= 2\pi \frac{\vec{R}_3 \times \vec{R}_1}{\vec{R}_1 \cdot (\vec{R}_2 \times \vec{R}_3)} = \frac{2\pi}{a}(1, -1, 1) \\ \vec{G}_3 &= 2\pi \frac{\vec{R}_1 \times \vec{R}_2}{\vec{R}_1 \cdot (\vec{R}_2 \times \vec{R}_3)} = \frac{2\pi}{a}(1, 1, -1).\end{aligned}\tag{15.2}$$

Les vecteurs réciproques \vec{G} s'écrivent

$$\vec{G} = n_1\vec{G}_1 + n_2\vec{G}_2 + n_3\vec{G}_3.\tag{15.3}$$

La table 15.1 donne les 10 premières couronnes de vecteurs réciproques pour le réseau cfc, le mot "couronne" désignant un ensemble de $N(G)$ vecteurs réciproques de même longueur G .

$N(G)$	8	6	12	24	8	6	24	24	24	32
G	$\sqrt{3}$	2	$2\sqrt{2}$	$\sqrt{11}$	$2\sqrt{3}$	4	$\sqrt{19}$	$2\sqrt{5}$	$2\sqrt{6}$	$3\sqrt{3}$

TABLE 15.1 – Nombres $N(G)$ et longueurs G (en unités de $2\pi/a$) des dix premières couronnes de vecteurs réciproques du réseau cfc.

15.2 Cas du réseau cubique centré (cc)

La maille élémentaire du réseau cc est définie par les vecteurs

$$\begin{aligned}
\vec{R}_1 &= \frac{a}{2}(-1, 1, 1) \\
\vec{R}_2 &= \frac{a}{2}(1, -1, 1) \\
\vec{R}_3 &= \frac{a}{2}(1, 1, -1),
\end{aligned} \tag{15.4}$$

le paramètre a de la maille vérifiant $a^3 = 2\Omega_{\text{WS}}$, et les vecteurs réciproques élémentaires sont

$$\begin{aligned}
\vec{G}_1 &= 2\pi \frac{\vec{R}_2 \times \vec{R}_3}{\vec{R}_1 \cdot (\vec{R}_2 \times \vec{R}_3)} = \frac{2\pi}{a}(0, 1, 1) \\
\vec{G}_2 &= 2\pi \frac{\vec{R}_3 \times \vec{R}_1}{\vec{R}_1 \cdot (\vec{R}_2 \times \vec{R}_3)} = \frac{2\pi}{a}(1, 0, 1) \\
\vec{G}_3 &= 2\pi \frac{\vec{R}_1 \times \vec{R}_2}{\vec{R}_1 \cdot (\vec{R}_2 \times \vec{R}_3)} = \frac{2\pi}{a}(1, 1, 0).
\end{aligned} \tag{15.5}$$

Les 10 premières couronnes de vecteurs réciproques du réseau cc sont donnés dans la table 15.2.

$N(G)$	12	6	24	12	24	8	48	6	36	24
G	$\sqrt{2}$	2	$\sqrt{6}$	$2\sqrt{2}$	$\sqrt{10}$	$2\sqrt{3}$	$\sqrt{14}$	4	$3\sqrt{2}$	$2\sqrt{5}$

TABLE 15.2 – Nombres $N(G)$ et longueurs G (unités de $2\pi/a$) des 10 premières couronnes de vecteurs réciproques du réseau cc.