HAL
open science

Modélisation de la physique atomique et du transport radiatif dans un code particle-in-cell

David Tordeux

To cite this version:

David Tordeux. Modélisation de la physique atomique et du transport radiatif dans un code particle-in-cell. Physique des plasmas [physics.plasm-ph]. Université Paris-Saclay, 2022. Français. NNT : 2022UPASP035 . tel-03653070

HAL Id: tel-03653070

https://theses.hal.science/tel-03653070

Submitted on 27 Apr 2022

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.

Modélisation de la physique atomique et du transport radiatif dans un code particle-in-cell

Modeling of atomic physics and radiation transport in a particle-in-cell code

Thèse de doctorat de l'université Paris-Saclay

École doctorale n° 572, Ondes et Matière (EDOM)
Spécialité de doctorat : Physique
Graduate School : Physique, Référent : Faculté des sciences d'Orsay

Thèse préparée dans l'unité de recherche LCME Laboratoire Matière sous conditions extrêmes (Université Paris-Saclay, CEA), sous la direction de Christophe BLANCARD, Ingénieur-Chercheur (LMCE) et la co-direction de Laurent GREMILLET, Ingénieur-Chercheur (LMCE).

Thèse soutenue à Paris-Saclay, le 25 mars 2022, par

David TORDEUX

Composition du jury

Frank ROSMEJ Professeur, LULI - Sorbonne Université	Président
Emmanuel d'HUMIERES Professeur, CELIA - Université de Bordeaux	Rapporteur & Examinateur
Rachel NUTER Ingénieur-Chercheur, CESTA - Université de Bordeaux	Rapportrice & Examinatrice
Marta FAJARDO Professeur, Instituto Superior Técnico	Examinatrice
Frédéric PEREZ Chercheur, LULI - École Polytechnique	Examinateur
Christophe BLANCARD Ingénieur-Chercheur, LMCE - CEA/DAM/DIF	Directeur de thèse

THESE DE DOCTORAT

NNT : 2022UPASP035

À mes parents

Remerciements

Ces trois années passées au CEA/DAM ont été riches, aussi bien scientifiquement qu'humainement. Ceci, je le dois en premier lieu à mes deux directeurs de thèse, Laurent Gremillet et Christophe Blancard, qui m'ont offert la chance de faire mes preuves dans ce qui me paraissait (et qui s'est avéré être !) un sujet passionnant et ambitieux. Laurent, j'ai été particulièrement impressionné par ton sens physique et tes connaissances étendues dans ce domaine, que tu as bien voulu partager un peu avec moi pendant cette thèse. Outre tes qualités scientifiques que chacun sait (et pour lesquelles ma petite prose aurait bien du mal à rendre justice), je voulais souligner ici ta grande disponibilité pour tes thésards, ton écoute et ta bienveillance. Christophe, inutile de souligner que tes connaissances en physique atomique et radiative ont été essentielles pour ces travaux, merci pour toutes les fois où tu m'as aiguillé sur des pistes qui se sont souvent révélées très judicieuses. Merci pour ton enthousiasme et merci d'avoir pris ton rôle de directeur à cœur, aussi bien pour ce qui concerne la thèse que pour mes nouvelles aventures au CEA.

Je tiens à remercier les membres de mon jury de thèse, M. Frank Rosmej, Mme Rachel Nuter, M. Emmanuel d'Humières, Mme Marta Fajardo et M. Frédéric Pérez pour leur intérêt porté à mes travaux ainsi que pour leurs nombreux commentaires constructifs.

Cette thèse ne se serait pas aussi bien passée sans un cadre de travail aussi agréable et propice à la discussion. Aussi, je remercie toutes les personnes que j'ai eu la chance de croiser au CEA, à commencer par Catherine Cherfils, Florian Bonneau, Denis Penninckx et Luc Bergé pour votre accessibilité et votre écoute. Merci à Serge pour nos dégustations de madeleines et nos ateliers jardinage, à Gaétan d'avoir écouté mes lamentations de thésard et pour tous les bons conseils qu'il m'a prodigués, à Xavier pour toutes nos discussions concernant les codes PIC et surtout pour sa gentillesse, à Jean-Etienne pour nos paris (que j'ai tous perdus), à Didier pour sa contribution indéniable à l'atmosphère du laboratoire, merci à Sylvie, formidable secrétaire du laboratoire et à la non moins formidable Céline qui lui a succédé avec brio : merci d'avoir été aussi efficaces, gentilles, bienveillantes avec les doctorants, et de m'avoir tant facilité la vie.

Merci également à tous les post-doc, thésards et stagiaires que j'ai eu le plaisir de rencontrer : Rodolphe, Vojtech, Bertrand, Pierre-Louis, Alizée, Antoine, Alexandre, Mélanie, Léo, Diego et tous les autres que je pourrais oublier sur l'instant, avec une pensée particulière pour les doctorants en fin de thèse qui viennent de s'attaquer à l'épineuse phase de rédaction : Valeria, Quentin, Colomban et Mikael. Merci à vous d'avoir été de si bonne compagnie, en particulier Mikael dont le succulent thé et la conversation me laisseront un souvenir délicieux.

Non, je ne vous ai pas oublié ! Les personnes qui se sont succédé dans mon bureau ont eu un rôle probablement déterminant dans mes travaux et ont donc droit à ces remerciements privilégiés. Je remercie donc Jérémy de m'avoir initié aux us et coutumes du laboratoire, pour nos discussions, pour toutes les fois où il m'a porté secours alors que je commençais à me plonger dans les méandres de Calder et surtout pour avoir fortement contribué à la bonne ambiance. Je remercie également Damien d'avoir été un confident précieux et de m'avoir fait

profiter de son expérience (inestimable) de post-doc. Enfin, je n'oublie pas le petit dernier, arrivé récemment mais qui me laissera néanmoins un très bon souvenir : merci Emilien pour ta gentillesse et ton entrain, qui ont été rafraîchissants pour finir cette thèse.

Évidemment, j'ai à cœur d'adresser mes remerciements les plus vifs à ma famille, tout particulièrement à mes parents qui ont fait preuve d'un soutien sans faille, et ce depuis toujours.

Enfin, merci à mes amis, en particulier à toi Sacha qui a vécu au jour le jour mes instants de joie (et de désillusion) sans jamais te plaindre.

Table des matières

1 Introduction **11**
1.1 Contexte de l'étude . . . 11
1.2 Caractérisation d'un plasma . . . 13
1.3 Notations atomistiques . . . 16
1.4 Présentation du manuscrit . . . 17
Bibliographie . . . 19

2 Méthode particle-in-cell **21**
2.1 Principe . . . 21
2.2 Schémas numériques . . . 24
2.2.1 Facteur de forme . . . 24
2.2.2 Pousseur de particule . . . 27
2.2.3 Équation de continuité du courant . . . 28
2.2.4 Solveur de Maxwell . . . 29
2.3 Le code PIC-Monte Carlo CALDER . . . 32
2.3.1 Description générale . . . 32
2.3.2 Résumé des processus d'interaction inclus dans CALDER . . . 32
2.3.3 Traitement Monte Carlo des collisions . . . 34
2.4 Coalescence des macro-particules . . . 39
2.4.1 Algorithme de Vranic *et al.* . . . 39
2.4.2 Algorithme implémenté dans CALDER . . . 42
2.4.3 Tests de validation . . . 45
2.5 Conclusion . . . 48
Bibliographie . . . 50

3 Abaissement des potentiels d'ionisation **53**
3.1 Les principaux modèles d'IPD . . . 53
3.1.1 Modèle de Debye-Hückel . . . 53
3.1.2 Modèle de la sphère ionique . . . 56
3.1.3 Modèles d'Ecker-Kröll et de Stewart-Pyatt . . . 57
3.2 Implémentation numérique de l'IPD . . . 59
3.2.1 Correction des énergies de liaison . . . 59
3.2.2 Ionisation par pression . . . 60
3.3 Tests de validation en régime stationnaire . . . 61
3.3.1 Développement d'un solveur de Saha incluant l'IPD . . . 61
3.3.2 Comparaison avec les codes de cinétique atomique FLYCHK et SAPHyR 64
3.3.3 Quelques éléments de comparaison entre les modèles de Stewart-Pyatt et d'Ecker-Kröll . . . 65
3.4 Conclusion . . . 68

Bibliographie 69

4 Ionisation collisionnelle et recombinaison à trois corps 73

4.1 Ionisation collisionnelle 73
4.1.1 Principe physique du processus d'ionisation collisionnelle 73
4.1.2 Section efficace d'ionisation collisionnelle 74
4.1.3 Implémentation de l'ionisation collisionnelle dans CALDER 77
4.1.4 Tests de validation du module 79
4.1.5 Conclusion 85
4.2 Recombinaison à trois corps 86
4.2.1 Recombinaison à trois corps, processus inverse de l'ionisation collisionnelle 86
4.2.2 Principe du bilan détaillé et de la micro-réversibilité 86
4.2.3 Modélisation numérique et implémentation dans CALDER 88
4.2.4 Tests de validation 95
4.2.5 Effets de la recombinaison à trois corps sur la cinétique des plasmas à densité solide 101
4.2.6 Conclusion 103
Bibliographie 105

5 Désexcitation atomique par cascade 107

5.1 Introduction 107
5.2 Implémentation dans CALDER 108
5.2.1 Cas particuliers 111
5.2.2 Création des particules 111
5.3 Tests de validation 113
5.3.1 Tests pour une lacune électronique sur une sous-couche $k > 1$ 113
5.3.2 Cas d'une lacune électronique initiale en couche K ($k = 1$) 115
5.3.3 Reproduction des spectres d'émission de Kaastra et Mewe 115
5.4 Effets de la désexcitation atomique sur la dynamique d'un plasma 116
5.4.1 Lacune électronique initiale en couche K 116
5.4.2 Spectres d'émission d'un plasma hors équilibre 118
5.4.3 Effet Doppler dans les spectres d'émission de CALDER 119
5.5 Conclusion 120
Bibliographie 121

6 Modélisation du transport radiatif 123

6.1 Photoionisation 123
6.1.1 Introduction 123
6.1.2 Formule de Verner *et al.* pour la section efficace de photoionisation . . 124
6.1.3 Implémentation de la photoionisation dans CALDER 125
6.1.4 Tests de validation 127
6.2 Recombinaison radiative 129
6.2.1 Introduction 129
6.2.2 Section efficace 129
6.2.3 Implémentation dans CALDER 131
6.2.4 Tests de validation 132
6.3 Diffusion Compton 134
6.3.1 Introduction 134

6.3.2 Section efficace . . . 134
6.3.3 Implémentation dans CALDER . . . 136
6.3.4 Confrontation du module CALDER avec des modèles théoriques . . . 139
6.4 Conclusion . . . 148
Bibliographie . . . 149

7 Validation et effets des nouveaux modules CALDER sur la thermalisation d'un plasma dense 151
7.1 Introduction . . . 151
7.2 État de l'art de la physique atomique dans les codes *particle-in-cell* . . . 152
7.2.1 SMILEI . . . 152
7.2.2 LAPINE . . . 153
7.2.3 PICLS . . . 155
7.3 Thermalisation du plasma dense et comparaison avec les modèles de Saha et FLYCHK . . . 158
7.3.1 Effet de l'abaissement des potentiels d'ionisation . . . 158
7.3.2 Simulations de relaxation plasma intégrant l'ensemble des nouveaux processus de physique atomique . . . 159
7.3.3 Effet de la coalescence des macro-particules . . . 165
7.4 Conclusion . . . 171
Bibliographie . . . 172

8 Application à des configurations d'interaction laser UHI-solide et faisceau X-solide 176
8.1 Interaction laser-solide à ultra-haute intensité . . . 176
8.1.1 Introduction . . . 176
8.1.2 Simulations 1D . . . 177
8.1.3 Simulations 2D . . . 182
8.1.4 Conclusion . . . 192
8.2 Interaction XFEL-solide . . . 194
8.2.1 Introduction . . . 194
8.2.2 Irradiation X d'une cible d'Aluminium solide, comparaisons avec le code PICLS . . . 195
8.2.3 Variation de l'énergie photonique à intensité constante . . . 199
8.2.4 Domaine de validité des simulations . . . 209
8.2.5 Conclusion . . . 211
8.3 Interaction faisceau γ-plasma . . . 213
8.3.1 Introduction . . . 213
8.3.2 Paramètres de simulation . . . 213
8.3.3 Présentation des résultats . . . 213
8.3.4 Interprétation des résultats . . . 215
8.3.5 Instabilité électron-ion de Buneman . . . 218
8.3.6 Conclusion . . . 220
Bibliographie . . . 221

9 Conclusion 226
9.1 Résumé . . . 226
9.2 Perspectives . . . 228
Bibliographie . . . 229

1 Introduction

1.1 Contexte de l'étude

L'étude de la matière dans un régime de haute densité d'énergie est un domaine d'intérêt croissant, dont découlent de nombreuses applications : de l'étude des plasmas stellaires à l'étude de la fusion par confinement magnétique ou inertiel, les plasmas considérés présentent généralement des températures importantes et une physique riche.

Un des moyens les plus efficaces de recréer ces conditions extrêmes en laboratoire est l'utilisation de lasers d'ultra-haute intensité (UHI). Leur développement, irrégulier au cours de l'Histoire (comme le montre la Fig. 1.1 représentant l'évolution de l'intensité laser au cours du temps) a connu une stagnation à une intensité proche de 10^{14} W/cm^2, des années 60 jusqu'au milieu des années 80, en raison de l'endommagement des composants optiques pour de telles intensités [Maine *et al.*, 1988]. Pour contourner cette limitation, [Strickland & Mourou, 1985] ont proposé une méthode dite "d'amplification par dérive de fréquence" (abrégée CPA pour *Chirped Pulse Amplification*) valant à D. Strickland et G. Mourou le prix Nobel de physique de 2018. Son principe est simple : étirer temporellement l'impulsion laser (via un réseau de diffraction) permettant de diminuer son intensité. Cette impulsion peut ensuite être amplifiée sans endommager les composants, puis être compressée pour la ramener à une durée d'impulsion proche de celle d'origine. Cette méthode a marqué un tournant majeur dans l'étude de l'interaction laser-matière en permettant l'émergence de lasers approchant aujourd'hui le régime ultra-relativiste. Le record est actuellement détenu par le laser CoReLS [Yoon *et al.*, 2021] affichant une intensité maximale de 10^{23} W/cm^2 (pour une durée d'impulsion de 20 fs), surpassant le précédent record détenu par le laser APOLLON [Burdonov *et al.*, 2021] (une intensité de 2×10^{21} W/cm^2 pour une durée d'impulsion de 20 fs). D'autres installations en cours de développement ont des ambitions encore supérieures : tel est le cas de l'*Extreme Light Infrastructure-Beamlines* (ELI-Beamlines), en particulier pour son laser HAPLS [Sistrunk *et al.*, 2017], visant des intensités proches de 10^{24} W/cm^2 (pour des impulsions de 30 fs). À côté des lasers UHI, certains lasers comme celui du *National Ignition Facility* (NIF) [Miller *et al.*, 2004] aux États-Unis ou le laser Mégajoule à Bordeaux

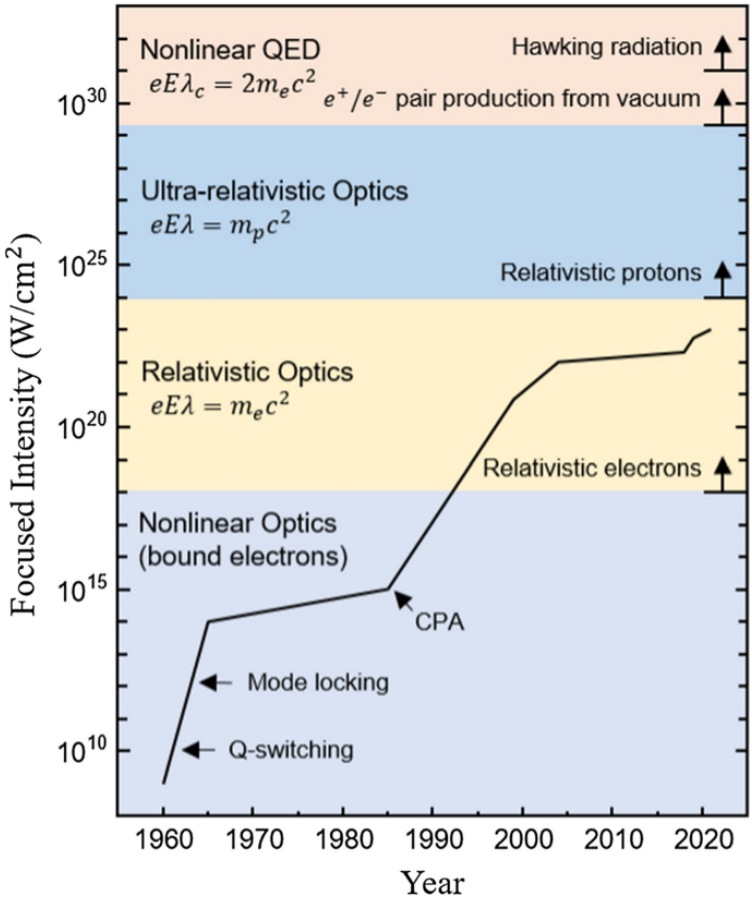


FIGURE 1.1 – Représentation des progrès effectués dans le domaine de la technologie laser à haute intensité avec l'évolution de l'intensité de 1960 à nos jours. Figure tirée de [Bang *et al.*, 2022].

(CEA) [Fleurot *et al.*, 2005], permettent d'explorer des régimes physiques différents, affichant des intensités proches de 10^{14-15} W/cm^2 mais avec des durées d'impulsion beaucoup plus longues (dans le régime nanoseconde). Des lasers complémentaires comme le laser PETAL (CEA) [Casner *et al.*, 2015] permettent d'examiner des régimes intermédiaires en affichant des intensités allant jusqu'à 10^{20} W/cm^2 et des durées d'impulsion allant de 0.5 ps jusqu'à 10 ps. Enfin, certaines installations plus récentes permettent de générer des faisceaux photoniques via des impulsions électroniques rapides : il s'agit des lasers à électrons libres (abrégés FEL pour *Free Electron Laser*, ou XFEL lorsque les photons générés ont une énergie comprise dans une gamme allant de la centaine d'eV jusqu'à quelques dizaines de keV), dont les performances s'approchent des installations laser classiques avec des intensités de faisceau allant de 10^{17} W/cm^2 à 10^{20} W/cm^2 pour des durées d'impulsions comprises entre la dizaine de femtosecondes et plusieurs centaines de femtosecondes.

Remarque 1.1.1 Dans le cadre de cette thèse, nous ne considérerons que des applications numériques faisant intervenir des lasers de type UHI, avec des intensités proches de 10^{20} W/cm^2 et des durées d'impulsions de quelques dizaines de femtosecondes, ou des faisceaux photoniques X dont les intensités seront comprises entre 10^{17} W/cm^2 et 10^{20} W/cm^2 avec des durées d'impulsions de même ordre de grandeur.

L'interaction entre de telles impulsions et des échantillons de matière conduit à la création de régimes transitoires exotiques présentant de nombreux phénomènes physiques complexes. Pour tenter de les comprendre et de les caractériser, il est indispensable de faire appel à la simulation numérique, dont la fiabilité ne cesse d'augmenter grâce aux ressources de calcul

croissantes et aux modèles physiques de plus en plus précis. Parmi les méthodes numériques utilisées pour simuler la dynamique temporelle des plasmas, figure la méthode *particle-in-cell* (PIC), principal objet d'étude de cette thèse. Malgré leur capacité à pouvoir décrire un grand nombre de phénomènes cinétiques, les codes PIC ne permettent pas de prendre en compte les processus atomiques et radiatifs dans leur formulation originelle. Si cette approximation est acceptable pour des plasmas dilués, où la dynamique est principalement due aux effets des champs électromagnétiques, ça n'est pas le cas pour les plasmas denses, où les interactions inter-particulaires sont fréquentes et où la physique atomique et le transport radiatif peuvent jouer un rôle déterminant. Pour pallier ce défaut, il est d'usage de coupler ces codes avec des algorithmes Monte Carlo [Motwani & Raghavan, 1995] modélisant, de façon probabiliste, certains processus d'ionisation et ou de diffusion par exemple. Ainsi, ils se sont vu enrichir au fil du temps par des modèles d'interactions améliorant la description de la dynamique des systèmes de haute densité. Néanmoins, la modélisation de la physique atomique ou du transport radiatif dans ces codes reste, aujourd'hui encore, lacunaire.

L'objectif principal de cette thèse est de de modéliser et d'implémenter une variété de processus atomiques et radiatifs. Ces travaux, reposant sur le code PIC Calder, développé au CEA/DAM, s'inscrivent dans la lignée de précédents travaux ayant permis la prise en compte d'un certain nombre de processus tels que la diffusion élastique entre les particules chargées, l'ionisation collisionnelle ou encore l'effet Bremsstrahlung (ces processus seront mentionnés de façon plus exhaustive dans le prochain chapitre). Les algorithmes que nous présentons dans ce manuscrit ont donc eu pour but soit de raffiner la description de processus déjà inclus, soit d'en intégrer de nouveaux. Le second objectif de la thèse a été d'illustrer l'intérêt de ces différents apports en examinant leur impact dans des contextes d'interaction laser UHI-solide par exemple, ou en considérant d'autres systèmes d'interaction, inédits dans Calder, comme celui entre un faisceau photonique X avec une cible solide.

1.2 Caractérisation d'un plasma

Souvent considéré comme le quatrième état de la matière (de façon abusive puisqu'il n'existe en réalité pas de transition de phase), l'état plasma est le plus abondant de l'Univers, représentant plus de 99.9 % de la matière ordinaire [Schmidt, 1979]. Lorsqu'une énergie suffisamment importante est transférée à des atomes, les électrons liés aux noyaux sont libérés dans le continuum en énergie. Les plasmas se distinguent des gaz lorsque la proportion d'atomes ionisés est assez grande pour que la présence de charges électriques ait un impact sur la dynamique des particules. Cette proportion est quantifiée par le degré d'ionisation [Delcroix & Bers, 1963], s'exprimant comme suit :

$$\tau = \frac{n_e}{n_e + n_n}\,, \tag{1.1}$$

où n_e et n_n sont respectivement les densités d'électrons et d'atomes neutres. Nous parlons généralement de plasma lorsque la proportion de particules chargée est telle qu'elle entraîne des effets collectifs. Lorsque ce degré d'ionisation est très inférieur à 1, le plasma est dit "faiblement ionisé". A l'inverse, les plasmas présentant un degré d'ionisation proche de 1 seront qualifiés de plasmas "fortement ionisés".

De la présence de ces charges électriques portées par les ions et les électrons résultent, selon les lois de l'électromagnétisme, des effets d'attraction et de répulsion inter-particulaires mais aussi d'écrantage du champ électrostatique (par un effet de compensation locale des

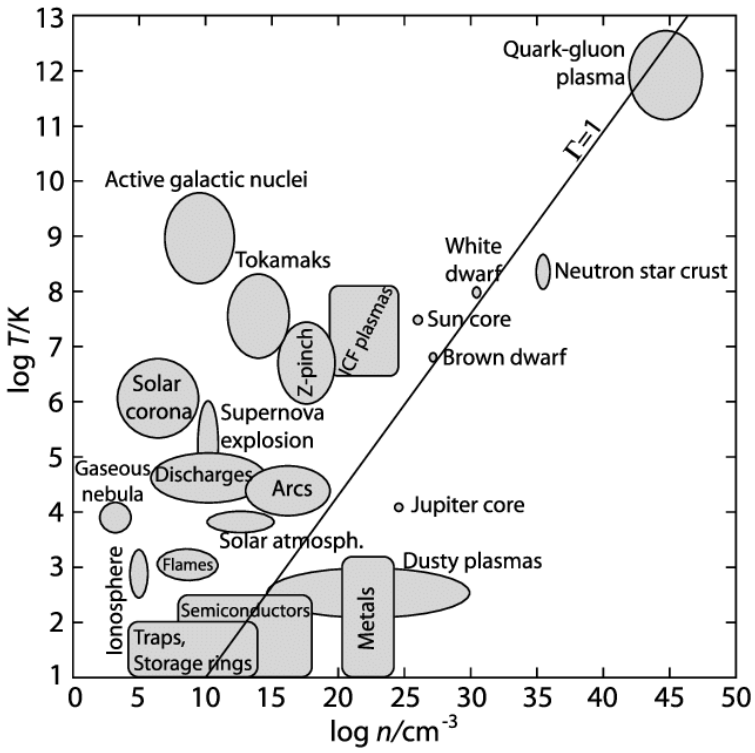


FIGURE 1.2 – Diagramme température-densité classant les principaux types de plasmas. La figure est tirée de [Donkó *et al.*, 2007].

charges positives et négatives). Aussi, la considération de la dynamique d'un plasma n'a de sens qu'au-delà d'une certaine échelle spatiale, définie telle que les charges électriques en présence écrantent le champ électrostatique local. Cette longueur, appelée longueur de Debye (ici limitée aux seuls électrons), est définie comme suit

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\varepsilon_0 k_B T_e}{n_e e^2}}\,, \tag{1.2}$$

où e est la charge élémentaire, n_e la densité électronique, ε_0 la permittivité du vide, k_B la constante de Boltzmann et T_e la température électronique (la longueur de Debye sera dérivée dans le Chap. 3, concernant l'abaissement des potentiels d'ionisation dû aux effets de densité). Il est possible de classer les plasmas selon leur densité et leur température : nous distinguons ainsi les plasmas stellaires (de très fortes densité et température) des plasmas interstellaires (de faible densité et température) en passant par des plasmas de régimes intermédiaires, comme par exemple les plasmas de magnétosphères. Un échantillon de ces catégories est représenté sur le diagramme de la Fig. 1.2. Nous retrouvons sur cette figure les plasmas générés par lasers, généralement de forte densité (le plasma produit via une cible d'Aluminium solide à $\rho = 2.7$ g/cm^3 affichera des densités électroniques $n_e \in [6 \times 10^{22};\ 7.8 \times 10^{23}]$ cm^{-3}) et présentant des températures électroniques moyennes comprises entre la centaine d'eV et le keV.

La longueur de Debye est liée à un autre paramètre caractéristique, à savoir la fréquence plasma. Considérons un plasma de densité électronique n_e pour lequel nous négligeons les collisions non élastiques. Le principe de conservation de la masse [Delcroix & Bers, 1963] induit que

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot (n_e \mathbf{v}_e) = 0\,, \tag{1.3}$$

avec $\mathbf{v}_e$ la vitesse des électrons. De même, la conservation de la quantité de mouvement se traduit mathématiquement par l'équation

$$m_e n_e \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_e \cdot \boldsymbol{\nabla} \right) \mathbf{v}_e = n_e q_e \mathbf{E} \,, \tag{1.4}$$

où m_e et q_e sont respectivement la masse et la charge électronique et $\mathbf{E}$ le champ électrostatique. On considère alors une petite perturbation de la densité électronique telle que

$$n_e = n_{e0} + n_{e1} \quad \text{avec } n_{e1} \ll n_{e0} \,. \tag{1.5}$$

En supposant que $\mathbf{v}_e = \mathbf{v}_{e1}$ et que $\mathbf{E} = \mathbf{E}_1$ avec des perturbations de la forme $X = \overline{X} \exp(\mathbf{k}.\mathbf{r} - i\omega t)$, il vient, par linéarisation des équation précédentes

$$-i\omega n_{e1} + i n_{e0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{e1} = 0 \,, \tag{1.6}$$

$$n_{e0} m_e (-i\omega) \mathbf{v}_{e1} = n_{e0} q_e \mathbf{E}_1 \,. \tag{1.7}$$

Pour fermer ce système, nous utilisons alors l'équation de Poisson linéarisée dans l'hypothèse de quasi-neutralité

$$i\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}_1 = \frac{n_{e1} q_e}{\varepsilon_0} \,, \tag{1.8}$$

où ε_0 est la constante de permittivité du vide. Par substitution, on obtient finalement l'équation de l'oscillateur harmonique sur la densité électronique

$$n_{e1} - \frac{n_{e0} q_e^2}{\omega^2 \varepsilon_0 m_e} n_{e1} = 0 \,, \tag{1.9}$$

où $n_{e0} q_e^2 / \varepsilon_0 m_e$ est homogène au carré d'une pulsation, notée ω_{pe}, la pulsation plasma. Elle est reliée à la longueur de Debye par la relation

$$\lambda_D = \frac{v_{the}}{\omega_{pe}} \,, \tag{1.10}$$

où v_{the} est la vitesse thermique des électrons (due à l'agitation thermique) définie telle que

$$v_{the} = \sqrt{\frac{k_B T_e}{m_e}} \,. \tag{1.11}$$

Enfin, une autre grandeur permettant de caractériser le plasma est le paramètre plasma (parfois appelé paramètre de couplage), définie comme suit

$$\Gamma_i = \frac{\text{Énergie d'interaction électrostatique}}{\text{Énergie thermique}} = \frac{\langle Z^* \rangle^2 e^2}{6\pi \varepsilon_0 r_{ii} k_B T_i} \,, \tag{1.12}$$

où T_i est la température ionique, $\langle Z^* \rangle = n_e/n_i$ la charge ionique moyenne et $r_{ii} = n_i^{-1/3}$ la distance inter-ionique moyenne. Lorsque $\Gamma_i < 1$, le plasma est dit "faiblement corrélé", ou encore "cinétique", et son comportement erratique est animé principalement par la température. Dans le cas inverse, il est dit "fortement corrélé" et sa structure est cette fois plus ordonnée. Les plasmas auxquels nous nous intéresserons dans ces travaux seront des plasmas cinétiques.

Une notion importante en physique des plasmas est celle d'équilibre thermodynamique. Un système est dit à l'équilibre thermodynamique lorsqu'il atteint une valeur minimale de potentiel thermodynamique : il ne présentera plus d'évolution de ses grandeurs intensives, c'est-à-dire de sa pression (ou de sa densité) et de sa température. Dans un plasma, nous parlerons généralement de système à l'équilibre thermodynamique (ou, de façon raccourcie, simplement de "système à l'équilibre") lorsque les températures ionique et électronique sont égales et donc lorsque les distributions de ces deux espèces sont des maxwelliennes de même largeur (on rappelle que la température d'une population particulaire correspond, à l'équilibre, à l'écart-type de sa distribution maxwellienne). Nous pouvons donc, par opposition, définir comme étant hors-équilibre thermodynamique tout système ne vérifiant par les précédents critères. Un système hors-équilibre sans apport d'énergie extérieur tend à s'équilibrer : plus précisément, nous parlerons de relaxation entre les températures ionique et électronique par des mécanismes collisionnels que nous expliciterons dans le prochain chapitre. Les plasmas étudiés dans le contexte de ces travaux seront très majoritairement fortement hors-équilibre thermodynamique puisqu'il s'agira précisément d'étudier la cinétique atomique lors de leur relaxation. Dans les applications numériques présentées dans le Chap. 8, les distributions, initialement maxwelliennes, seront fortement perturbées par un apport d'énergie dû à l'interaction du plasma avec une impulsion laser UHI.

1.3 Notations atomistiques

Au cours de l'Histoire, différents modèles ont tenté de décrire la structure atomique, en particulier la répartition des électrons liés autour du noyau : nous pouvons ainsi citer le modèle atomique de Thomson (1897) qui considérait l'atome comme un ensemble diffus de charges positives et négatives se neutralisant. La considération du noyau apparaît avec le modèle de Rutherford (1904), également appelé modèle planétaire, sans considération sur le mouvement des électrons. En 1913, le physicien Niels Bohr propose un modèle proche de celui de Rutherford mais qui considère cette fois que les électrons sont localisés sur des orbites d'énergies bien particulières [Bohr, 1913]. Cette vision, qui intègre pour la première fois la notion de quantification de l'énergie, rencontre un vif succès du fait qu'elle permet d'expliquer les raies d'émission spectrales des ions hydrogénoïdes.

Avec l'avènement de la mécanique quantique au début des années 1920, le modèle de Bohr est abandonné au profit d'une description beaucoup plus complète. Ce modèle, encore en vigueur aujourd'hui, prédit que le comportement des électrons liés peut être décrit selon une fonction mathématique, appelée orbitale atomique, permettant de calculer la probabilité de présence d'un électron dans un volume donné [Cowan, 1981]. Ces orbitales peuvent être caractérisées par trois paramètres quantiques :

- le nombre quantique principal $n > 1$, caractérisant les principaux niveaux d'énergies (déjà utilisé pour le calcul des niveaux d'énergie du modèle de Bohr $E_n = -13.6/n^2$ [eV]). Chacun de ces niveaux correspond à ce que l'on appelle une couche électronique à laquelle est associée une lettre. Ainsi le niveau $n = 1$ correspondra à la

couche électronique K, le niveau $n = 2$ à la couche L, le niveau $n = 3$ à la couche M, etc ;

- le nombre quantique azimutal ℓ tel que $0 \leq \ell \leq n - 1$, correspondant au moment angulaire orbital des électrons et permettant cette fois de définir les sous-couches électroniques. Chaque sous-couche est associée à une lettre : s pour $\ell = 0$ (pouvant comporter 2 électrons au maximum), p pour $\ell = 1$ (6 électrons), d pour $\ell = 2$ (10 électrons), f pour $\ell = 3$ (14 électrons), etc ;
- le nombre quantique magnétique m_ℓ tel que $-\ell \leq m_\ell \leq \ell$, correspondant à la projection du moment orbital électronique sur un axe arbitraire appelé l'axe de quantification.

A chaque électron lié, on peut également associer un nombre quantique magnétique de spin m_s, pouvant prendre les valeurs $-1/2$ et $1/2$, tel que chaque orbitale $n\ell$ peut contenir deux électrons de spins opposés. Ainsi, en utilisant les règles de remplissage de Klechkowski, Hund et Pauli [Cowan, 1981], on peut par exemple prévoir la répartition des électrons liés, appelée "configuration électronique", pour l'Aluminium

$$_{13}\mathrm{Al} \ : \ (1\mathrm{s})^2 \ (2\mathrm{s})^2 \ (2\mathrm{p})^6 \ (3\mathrm{s})^2 \ (3\mathrm{p})^1 \, . \tag{1.13}$$

Il est possible de raffiner davantage cette description en prenant en compte le dédoublement de certains niveaux d'énergie que l'on distingue alors selon leur valeur de moment cinétique total, noté j, résultant du couplage entre le moment cinétique orbital l et le moment cinétique de spin s (on parle de couplage "spin-orbite") [Slater, 1951]. Ceci permet de considérer la structure atomique fine qui, dans le cas de l'Aluminium, donne

$$_{13}\mathrm{Al} \ : (1\mathrm{s}_{1/2})^2 \ (2\mathrm{s}_{1/2})^2 \ (2\mathrm{p}_{1/2})^2 \ (2\mathrm{p}_{3/2})^4 \ (3\mathrm{s}_{1/2})^2 \ (3\mathrm{p}_{1/2})^1 \, . \tag{1.14}$$

Pour alléger l'écriture de ces orbitales qui apparaîtront à de très nombreuses reprises dans ce manuscrit, nous lui préférerons une forme plus concise faisant intervenir les couches électroniques notées par les lettres K, L, M etc. Finalement la configuration électronique de la structure atomique fine de l'Aluminium sera notée

$$_{13}\mathrm{Al} \ : \ \mathrm{K}^2 \ \mathrm{L_1}^2 \ \mathrm{L_2}^2 \ \mathrm{L_3}^4 \ \mathrm{M_1}^2 \ \mathrm{M_2}^1 \, . \tag{1.15}$$

Remarque 1.3.1 Nous verrons que les modèles utilisés pour les processus atomiques considérés dans cette thèse ne sont pas forcément tous décrits avec la même résolution. Ainsi, si certains modèles sont raffinés suivant la structure $n\ell j$, nous devrons, pour d'autres, nous contenter de la configuration électronique standard (que nous appellerons la configuration $n\ell$).

1.4 Présentation du manuscrit

Dans le Chap. 2, nous commencerons par présenter le principe de fonctionnement général d'un code *particle-in-cell*, ses principaux modules ainsi que les principales caractéristiques propres au code Calder. Nous présenterons également un algorithme de coalescence des

macro-particules récemment implémenté et permettant de limiter l'augmentation du temps de calcul que pourraient engendrer les nouveaux processus.

Nous nous plaçons, pour ces travaux, dans un régime de densité solide pour lequel la pression exercée par les électrons libres est telle qu'elle affecte les niveaux d'énergie des sous-couches électroniques et modifie ainsi les énergies de liaison. Ce phénomène, observé expérimentalement, a été décrit par différents modèles dont on présentera les plus célèbres, ainsi que leur implémentation dans le code PIC, dans le Chap. 3.

Le Chap. 4 sera dans un premier temps dédié au processus d'ionisation collisionnelle dont l'algorithme a été modifié afin de raffiner la description de ce processus à l'échelle de la structure atomique fine. Nous aborderons dans ce même chapitre son processus inverse, la recombinaison à trois corps, que nous avons réduit à une interaction binaire électron-ion plongée dans un bain d'électrons environnants.

Le Chap. 5 concernera l'implémentation d'un modèle de désexcitation atomique par cascade, résultant de la présence d'une lacune électronique sur la sous-couche d'un ion due à l'ionisation et engendrant une émission radiative et/ou non radiative (électrons Auger). Ce modèle sera basé sur l'utilisation de tables de probabilités d'émission instantanée.

Un modèle de transport radiatif sera proposé dans le Chap. 6, comprenant un modèle de photoionisation, un modèle de recombinaison radiative, processus inverse de la photoionisation, ainsi qu'un modèle de diffusion Compton.

L'effet de ces nouveaux processus sera illustré dans le Chap. 7, dans le contexte d'un plasma en cours de thermalisation. Nous montrerons à cette occasion l'amélioration de la description de la cinétique atomique lorsque le plasma atteint un état de quasi-équilibre, comparable à celui décrit par le modèle de Saha. Ce chapitre s'intéressera également à l'effet de la coalescence sur la physique du système mais également sur le temps de calcul des simulations.

Enfin, nous proposons dans le Chap. 8 trois applications numériques permettant de mettre en lumière l'utilité de ces améliorations dans des états du plasma plus exotiques. Nous nous intéresserons dans un premier temps à la prise en compte de ces processus dans le contexte de l'interaction entre un laser UHI avec des cibles solides d'Aluminium (en 1D et 2D). Un deuxième exemple s'intéressera à l'interaction entre un faisceau de photons X particulaires, tel que ceux issus des XFELs, avec des cibles solides. Enfin, une dernière application examinera cette fois la génération d'instabilités dans un plasma d'Hydrogène via la diffusion Compton.

Bibliographie

Bang, W., Cho, B., Cho, M., Cho, M., Chung, M., Hur, M. S., Kang, G., Kang, K., Kang, T., Kim, C. *et al.* (2022). *Review of laser-plasma physics research and applications in Korea.* Journal of the Korean Physical Society p. 1–19.

Bohr, N. (1913). *I. On the constitution of atoms and molecules.* The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science **26**.

Burdonov, K., Fazzini, A., Lelasseux, V., Albrecht, J., Antici, P., Ayoul, Y., Beluze, A., Cavanna, D., Ceccotti, T., Chabanis, M. *et al.* (2021). *Characterization and performance of the Apollon Short-Focal-Area facility following its commissioning at 1 PW level.* Matter and Radiation at Extremes **6**, no. 6, p. 064402.

Casner, A., Caillaud, T., Darbon, S., Duval, A., Thfouin, I., Jadaud, J. P., LeBreton, J. P., Reverdin, C., Rosse, B., Rosch, R., Blanchot, N., Villette, B., Wrobel, R. & Miquel, J. L. (2015). *LMJ/PETAL laser facility : Overview and opportunities for laboratory astrophysics.* High Energy Density Physics **17**.

Cowan, R. D. (1981). *The theory of atomic structure and spectra.* Univ. of California Press.

Delcroix, J.-L. & Bers, A. (1963). *Physique des plasmas*, tome 1. Dunod Paris.

Donkó, Z., Hartmann, P. & Kalman, G. (2007). *Strongly coupled plasma liquids.* arXiv preprint arXiv :0710.5229 .

Fleurot, N., Cavailler, C. & Bourgade, J. L. (2005). *The Laser Mégajoule (LMJ) Project dedicated to inertial confinement fusion : Development and construction status.* tome 74.

Maine, P., Strickland, D. & Mourou, G. (1988). *Tabletop Terawatt Laser By Chirped Pulse Amplification.* High Intensity Laser-Matter Interactions **913**, p. 140–146.

Miller, G. H., Moses, E. I. & Wuest, C. R. (2004). *The National Ignition Facility.* Optical Engineering **43**, no. 12, p. 2841–2853.

Motwani, R. & Raghavan, P. (1995). *Randomized Algorithms.* Cambridge University Press.

Schmidt, G. (1979). *Physics of High Temperature Plasmas.* Elsevier.

Sistrunk, E., Spinka, T., Bayramian, A., Betts, S., Bopp, R., Buck, S., Charron, K., Cupal, J., Deri, R., Drouin, M. *et al.* (2017). *All diode-pumped, high-repetition-rate advanced petawatt laser system (HAPLS).* CLEO : Science and Innovations p. STh1L–2.

Slater, J. C. (1951). *Quantum Theory of Matter.* McGraw-Hill.

Strickland, D. & Mourou, G. (1985). *Compression of amplified chirped optical pulses.* Optics Communications **55**, no. 6, p. 447–449.

Yoon, J. W., Kim, Y. G., Choi, I. W., Sung, J. H., Lee, H. W., Lee, S. K. & Nam, C. H. (2021). *Realization of laser intensity over* 10^{23} W/cm^2. Optica **8**, no. 5, p. 630–635.

2 Méthode particle-in-cell

2.1 Principe

Les plasmas sont des systèmes complexes qui, du fait de la présence de charges électriques, vont combiner des comportements individuels et des comportements collectifs, entraînés par les champs électromagnétiques. L'évolution d'une particule chargée est régie par son équation du mouvement relativiste, couplée à la force de Lorentz, due au champ électrique et au champ magnétique

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{p}}{\mathrm{d}t} = q\mathbf{E}(\mathbf{r},\, t) + q\mathbf{v} \wedge \mathbf{B}(\mathbf{r},\, t)\,, \tag{2.1}$$

avec $\mathbf{v}$ le vecteur vitesse de la particule, $\mathbf{p}$ son vecteur impulsion tel que $\mathbf{p} = \gamma m\mathbf{v}$ (où m est la masse de la particule et $\gamma = \sqrt{1 + (p/mc)^2}$ son facteur de Lorentz), q sa charge électrique et t le temps. Les champs électrique $\mathbf{E}$ et magnétique $\mathbf{B}$ obéissent aux équations de Maxwell

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0}\,, \tag{2.2}$$

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{B} = 0\,, \tag{2.3}$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\boldsymbol{\nabla} \wedge \mathbf{E}\,, \tag{2.4}$$

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = c^2 \boldsymbol{\nabla} \wedge \mathbf{B} - \frac{\mu_0}{\varepsilon_0}\mathbf{J}\,, \tag{2.5}$$

avec μ_0 et ε_0 respectivement la perméabilité et la permittivité du vide, $\mathbf{J}$ le courant électrique et ρ la densité de charge électrique. Ces champs naissent de la somme des contributions de chaque particule chargée. Ils vont accélérer les particules, ce qui modifiera en retour les densités de charge et les courants, et donc les champs électromagnétiques. Si l'on doit, pour chaque particule, prendre en compte la contribution exacte de toutes les autres particules, le calcul de la dynamique devient ardue, sur le modèle du problème dit à "n-corps" en

gravitation.

Une autre façon de décrire l'évolution de ce système est de s'intéresser à sa fonction de distribution $\mathcal{N}_\alpha(\mathbf{r},\,\mathbf{p})$ (α étant l'indice de l'espèce). L'équation de Klimontovich reformule l'Eq. (2.1) en fonction de $\mathcal{N}_\alpha(\mathbf{r},\,\mathbf{p})$

$$\frac{\partial \mathcal{N}_\alpha(\mathbf{r},\,\mathbf{p})}{\partial t} + \mathbf{v}\,\cdot\,\frac{\partial \mathcal{N}_\alpha(\mathbf{r},\,\mathbf{p})}{\partial \mathbf{r}} + q_\alpha\left(\mathbf{E}^{\mathrm{m}}(\mathbf{r},\,t) + \mathbf{v}\wedge\mathbf{B}^{\mathrm{m}}(\mathbf{r},\,t)\right)\,\cdot\,\frac{\partial \mathcal{N}_\alpha(\mathbf{r},\,\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} = 0\,, \tag{2.6}$$

Cette expression a la particularité d'être rigoureusement exacte, puisque faisant intervenir les champs électriques et magnétiques microscopiques $\mathbf{E}^{\mathrm{m}}$ et $\mathbf{B}^{\mathrm{m}}$, contrairement à l'équation de Vlasov qui repose, elle, sur l'approximation des champs moyens avec des champs électromagnétiques et des fonctions de distributions approchés [Schram, 1991]. Nous pouvons en effet décomposer ces grandeurs en une contribution moyenne, notée $\langle\ \rangle$ et une contribution fluctuante notée δ comme suit

$$\mathcal{N}_\alpha = \langle\mathcal{N}_\alpha\rangle + \delta\mathcal{N}_\alpha = f_\alpha + \delta\mathcal{N}_\alpha\,, \tag{2.7}$$

$$\mathbf{E}^{\mathrm{m}} = \langle\mathbf{E}^{\mathrm{m}}\rangle + \delta\mathbf{E}^{\mathrm{m}} = \mathbf{E} + \delta\mathbf{E}^{\mathrm{m}}\,, \tag{2.8}$$

$$\mathbf{B}^{\mathrm{m}} = \langle\mathbf{B}^{\mathrm{m}}\rangle + \delta\mathbf{B}^{\mathrm{m}} = \mathbf{B} + \delta\mathbf{B}^{\mathrm{m}}\,, \tag{2.9}$$

ce qui nous permet d'écrire l'équation de Vlasov [Vlasov, 1968]

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \mathbf{v}\,\cdot\,\frac{\partial f_\alpha}{\partial \mathbf{r}} + q_\alpha\left(\mathbf{E} + \mathbf{v}\wedge\mathbf{B}\right)\,\cdot\,\frac{\partial f_\alpha}{\partial \mathbf{p}} = 0\,. \tag{2.10}$$

Si les codes de type *particle-in-cell* (PIC) ont pour ambition de résoudre l'équation de Klimontovich, nous verrons que, du fait de leur approche moyennée pour certaines grandeurs dans les mailles de simulation, ils se rapprocheront davantage de la vision de Vlasov.

Nous pouvons dès lors deviner les deux ingrédients principaux de ces codes, à savoir la détermination des champs électromagnétiques et le calcul de la dynamique des particules. Dans le cas des plasmas denses, nous verrons qu'il est également important d'ajouter un troisième ingrédient, constituant l'objet de ces travaux de thèse, à savoir les collisions et les processus de physique atomique pouvant affecter la dynamique du plasma.

Remarque 2.1.1 En réalité, l'équation de Klimontovich tient compte des collisions binaires mais, pour les décrire, il faudrait une taille de maille très inférieure à la longueur de Debye et une géométrie 3D ce qui, en pratique, ne sera jamais le cas dans nos simulation pour des raisons de temps de calcul.

Comme son nom le suggère, le principe de base du code PIC [Birdsall & Langdon, 2018] [Tskhakaya *et al.*, 2007] est de simuler l'évolution temporelle de particules dans un domaine spatial discrétisé en cellules (ou mailles). Ces particules, que l'on appelle en fait macro-particules, sont en réalité des regroupements de plusieurs particules proches dans l'espace des phases, c'est-à-dire présentant des positions et des vitesses que l'on considère assimilables. Un des principes du code PIC est de projeter ces macro-particules sur la grille du domaine de simulation afin de déduire, grâce à des méthodes que nous présentons dans ce chapitre, les valeurs moyennées, pour chaque cellule, de grandeurs physiques macroscopiques telles que la densité, ou les champs électromagnétiques.

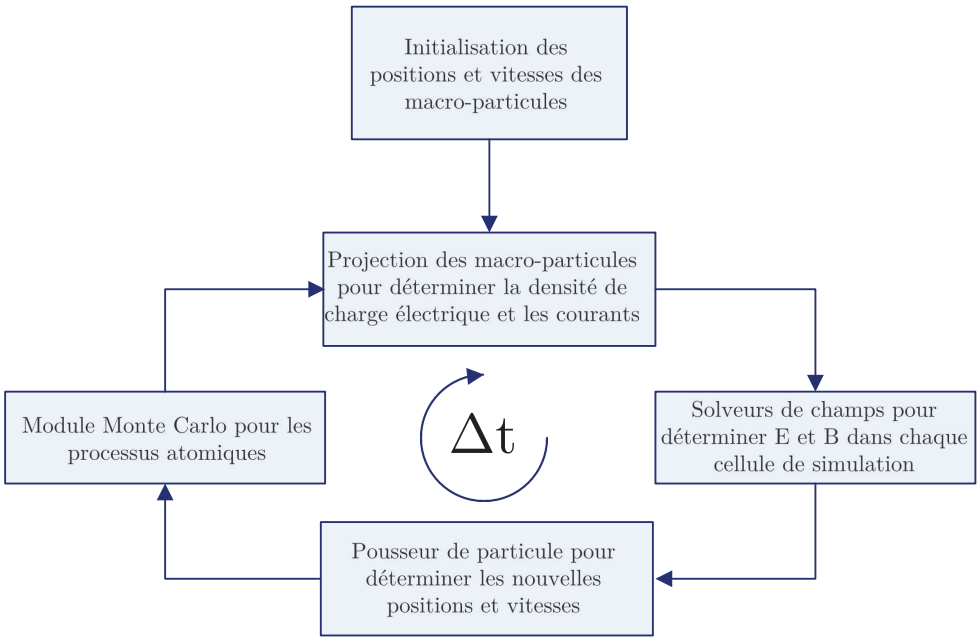


FIGURE 2.1 – Schéma simplifié des différentes étapes caractérisant la boucle d'un pas de temps PIC.

Les étapes clés pour un pas de temps PIC, ou "boucle PIC", sont résumées de façon très simplifiée dans la Fig. 2.1 : les macro-particules sont projetées sur la grille de simulation afin de déduire, pour chaque maille, la densité de charges et le courant électrique. Des solveurs de champs électromagnétiques (solveurs de Poisson, de Maxwell) permettent de déterminer la valeur locale de **E** et **B**. Ces dernières sont alors utilisées après interpolation, dans le pousseur de particules qui calcule les nouvelles vitesses et positions des particules. À cela s'ajoute enfin la prise en compte des processus collisionnels, c'est-à-dire les interactions au sein de chaque maille entre les particules, qu'il s'agisse de collisions élastiques, comme les collisions coulombiennes, de processus de physique atomique comme l'ionisation collisionnelle, ou de transport radiatif comme la photoionisation.

Si la méthode PIC a été développée relativement tôt (vers la fin des années 50), la prise en compte des collisions a été plus tardive [Takizuka & Abe, 1977] [Nanbu & Yonemura, 1998] et est encore relativement limitée pour bon nombre de codes actuels. Comme évoqué en introduction de ce manuscrit, l'objectif de cette thèse est d'enrichir le module Monte Carlo avec une variété de nouveaux processus atomiques et de quantifier leur impact sur la physique dans des contextes réalistes tels que l'interaction entre des impulsions laser UHI et des solides ou l'interaction faisceau X-solide par exemple.

Le présent chapitre abordera dans la Sec. 2.2 les différents ingrédients constituant les codes PIC puis se concentrera en Sec. 2.3 sur la présentation du code PIC CALDER, développé depuis de nombreuses années au sein du CEA/DAM et permettant de simuler un large spectre de phénomènes. Nous aborderons en particulier en Sec. 2.3.3 le principe général des modèles probabilistes de type Monte Carlo pour la prise en compte des collisions (élastiques et inélastiques). Nous verrons en outre les processus Monte Carlo déjà présents au début de cette thèse. La Sec. 2.4 sera finalement dédiée à la présentation d'un module de coalescence des macro-particules, basé sur la méthode de [Vranic *et al.*, 2015] et permettant de limiter efficacement le temps de calcul.

2.2 Schémas numériques

2.2.1 Facteur de forme

Comme évoqué en introduction de ce chapitre, le code PIC simule la dynamique de macro-particules, qui représentent en réalité des agrégats de particules proches dans l'espace des phases. Il est en effet difficilement concevable, encore aujourd'hui, de simuler des systèmes avec un nombre de particules réelles pour les volumes physiques généralement considérés. On peut associer à ces macro-particules un poids statistique, que l'on notera W_α (α étant l'indice de l'espèce de la macro-particule concernée), traduisant, en 3D, le nombre de particules réelles qu'elles représentent (ce poids aura la dimension d'une densité linéique en 2D et surfacique en 1D).

Ces macro-particules vont être associées à un jeu de paramètres qui leur est propre : poids statistique, que nous venons d'évoquer, position dans l'espace, impulsion, charge, masse, etc. Quelques uns de ces paramètres peuvent être plus exotiques, comme la position de la lacune électronique, découlant de la prise en compte de l'ionisation collisionnelle et sur laquelle nous reviendrons au Chap. 4. Nous avons vu plus tôt que la particularité des codes PIC était de considérer des grandeurs associées aux particules, dont nous venons d'énumérer quelques exemples, et des grandeurs associées aux mailles de simulation, comme la densité de charges ou le courant électrique. Ces valeurs sont obtenues par projection des macro-particules sur le domaine spatial.

Nous avons également vu que les particules étaient associées à un poids statistique. A densité physique fixée, plus ce poids est élevé, moins il y a de macro-particules, et plus la simulation est bruitée et présentera des fluctuations fortes pour certaines grandeurs moyennes. Ce bruit statistique, également lié à la nature discrète de notre méthode de résolution, peut être limité lors de la projection des macro-particules en leur associant un facteur de forme de type *spline*, généralement noté S, variant suivant l'ordre d'interpolation choisi. Dans l'exemple d'une configuration 1D et en posant $\overline{x} = x/\Delta x$, on a pour facteur de forme à l'ordre 0

$$S^0(\overline{x}) = H\left(\overline{x} + \frac{1}{2}\right) H\left(\overline{x} - \frac{1}{2}\right) , \tag{2.11}$$

avec H la fonction de Heaviside telle que $\forall x \in \mathbb{R}$ on a

$$H(x) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad x < 0\,, \\ \text{Indéfinie} & \text{si} \quad x = 0\,, \\ 1 & \text{si} \quad x > 0\,. \end{cases} \tag{2.12}$$

Les facteurs de forme d'ordre supérieur l sont alors obtenus par produit de convolution des fonctions $S^0(\overline{x})$ tel que

$$S^l(\overline{x}) = \underbrace{S^0(\overline{x}) * S^0(\overline{x}) * \cdots * S^0(\overline{x})}_{n+1} . \tag{2.13}$$

L'ordre 0 peut être réécrit sous la formule d'une fonction porte

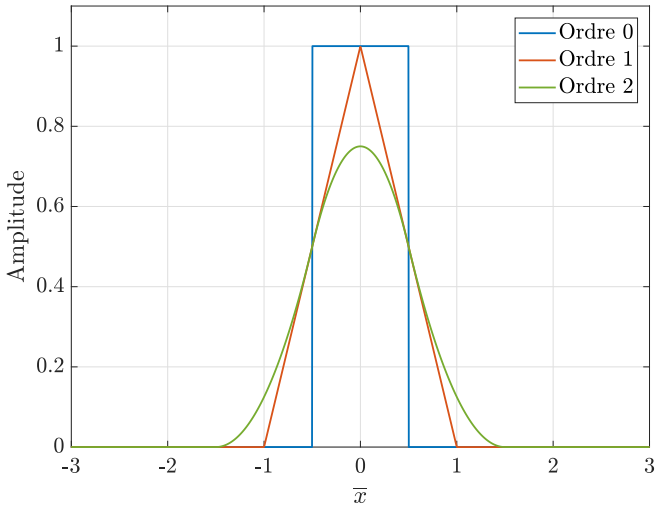


FIGURE 2.2 – Profil spatial (facteur de forme) des macro-particules pour les trois premiers ordres d'interpolation : une fonction porte pour l'ordre 0, une fonction triangulaire pour l'ordre 1 et une fonction de type *spline* pour l'ordre 2. L'aire de chacune de ces fonctions est égale à 1 (le facteur de forme sera alors multiplié par le poids statistique de la macro-particule).

$$S^0(\overline{x}) = \begin{cases} 1 & \text{si} \quad -\dfrac{1}{2} \leq \overline{x} \leq \dfrac{1}{2}\,, \\ 0 & \text{sinon}\,, \end{cases}, \tag{2.14}$$

une fonction triangulaire pour l'ordre 1

$$S^1(\overline{x}) = \begin{cases} 1+\overline{x} & \text{si} \quad -1 \leq \overline{x} < 0\,, \\ 1-\overline{x} & \text{si} \quad 0 \leq \overline{x} < 1\,, \\ 0 & \text{sinon}\,, \end{cases} \tag{2.15}$$

et une fonction polynomiale par morceau (aussi appelée fonction *spline*) pour l'ordre 2

$$S^2(\overline{x}) = \begin{cases} \dfrac{3}{4} - |\overline{x}|^2 & \text{si} \quad |\overline{x}| \leq \dfrac{1}{2}\,, \\ \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{3}{2} - |\overline{x}|\right)^2 & \text{si} \quad \dfrac{1}{2} \leq |\overline{x}| < \dfrac{3}{2}\,, \\ 0 & \text{sinon}\,. \end{cases} \tag{2.16}$$

Ces trois premiers ordres d'interpolation pour les macro-particules sont représentés en Fig. 2.2 où on note que l'intégrale des différentes fonctions est toujours égale à 1. Nous remarquons que plus l'ordre d'interpolation est élevé, moins le facteur de forme est abrupt et plus il s'étend sur un nombre important de cellules, amenant à une meilleure réduction du bruit statistique.

Pour s'en convaincre, on peut prendre l'exemple simple de 1000 macro-particules de poids statistique égal à 1 et réparties aléatoirement sur un domaine de simulation 1D de taille $L_x = 100$ (unités arbitraires). Nous associons à ces macro-particules les trois premiers facteurs de forme et nous faisons, pour ces trois cas, la somme des profils des particules pour obtenir un profil total sur x, que l'on a représenté sur la Fig. 2.3. Nous voyons sur cette figure que plus l'ordre est élevé, plus le profil total est lissé, avec une fluctuation d'amplitude plus faible autour de la valeur moyenne. Aussi, il est courant d'utiliser des ordres d'interpolation de

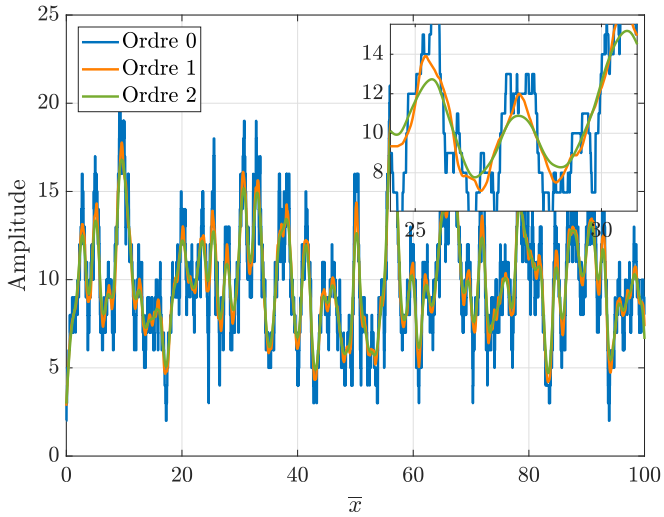


FIGURE 2.3 – Profil spatial de la somme des facteurs de forme de 1000 particules, positionnées aléatoirement, pour les trois premiers ordres : 0 (bleu), 1 (orange) et 2 (vert). Plus l'ordre d'interpolation est élevé, plus l'amplitude des fluctuations autour de la valeur moyenne (10) est faible.

deux ou trois, voire même plus pour certaines simulations pouvant être sensibles au bruit numérique. Ce bruit peut en effet être à l'origine d'artefacts numériques, comme la création de micro-champs d'amplitude assez élevée pour induire un chauffage ou une ionisation artificielle du plasma.

Dans une configuration 2D, le facteur de forme est obtenu par le produit tensoriel des facteurs de formes associés à chacune des deux dimensions

$$S^l_{\mathrm{2D}}(\overline{x},\overline{y}) = S^l(\overline{x}) \otimes S^l(\overline{y})\,. \tag{2.17}$$

Il est dès lors possible de déduire la valeur de certaines grandeurs au sein des mailles de simulation, après projection des macro-particules sur le domaine spatial comme par exemple la densité de charge électrique

$$\rho(\mathbf{R}_i,\, t) = \sum_{\alpha} \sum_{j=1}^{N_\alpha} q_\alpha W_{\alpha,j}(t) S^l(\mathbf{R}_i - \mathbf{r}_j(t))\,, \tag{2.18}$$

avec $\mathbf{R}_i$ le vecteur position de la maille i, $\mathbf{r}_j$ la position de la particule j, α l'index de l'espèce chargée (électrons et ions), N_α le nombre total de macro-particules de l'espèce α dans la simulation, q_α la charge électrique de l'espèce α, $W_{\alpha,j}$ le poids statistique de la particule j de l'espèce α à l'instant t, S^l le facteur de forme d'ordre l et enfin ρ la densité de charge électrique. De façon similaire, nous pouvons exprimer le vecteur de courant électrique selon

$$\mathbf{J}(\mathbf{R}_i,\, t) = \sum_{\alpha} \sum_{j=1}^{N_\alpha} q_\alpha \mathbf{v}_{\alpha,j}(t) W_{\alpha,j}(t) S^l(\mathbf{R}_i - \mathbf{r}_j(t))\,, \tag{2.19}$$

avec $\mathbf{v}_{\alpha,j}(t)$ la vitesse de la particule j de l'espèce α à l'instant (t). Les Eqs. (2.18) et (2.19) ne vérifient cependant pas l'équation de continuité, de sorte que la densité de courant sera obtenue par une autre méthode due à [Esirkepov, 2001].

2.2.2 Pousseur de particule

Une des finalités des codes PIC est de pouvoir prédire le déplacement des macro-particules dans l'espace de simulation en fonction du temps. Pour ce faire, nous partons de l'équation du mouvement relativiste, que nous rappelons :

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{p}(t)}{\mathrm{d}t} = q\mathbf{E}(\mathbf{r},\, t) + q\mathbf{v}(t) \wedge \mathbf{B}(\mathbf{r},\, t)\,, \tag{2.20}$$

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{r}(t)}{\mathrm{d}t} = \mathbf{v}(t)\,, \tag{2.21}$$

où $\mathbf{p}(t)$ est le vecteur d'impulsion de la particule, $\mathbf{v}(t)$ son vecteur vitesse tel que $\mathbf{p} = \gamma m \mathbf{v}$, m étant la masse de la particule et q la charge électrique de la particule. Comme pour les champs électromagnétiques avec les équations de Maxwell, on peut résoudre ce système différentiel en utilisant la méthode du "saute-mouton" consistant à calculer la position et l'impulsion avec un décalage d'un demi-pas de temps :

$$\frac{\mathbf{p}_j^{n+1/2} - \mathbf{p}_j^{n-1/2}}{\Delta t} = \mathbf{F}\left(\mathbf{E}^n(\mathbf{r}_j^n),\, \mathbf{B}^n(\mathbf{r}_j^n)\right)\,, \tag{2.22}$$

$$\frac{\mathbf{r}_j^{n+1} - \mathbf{r}_j^n}{\Delta t} = \frac{1}{m_j}\frac{\mathbf{p}_j^{n+1/2}}{\gamma_j^{n+1/2}}\,, \tag{2.23}$$

Le schéma le plus fréquemment employé pour résoudre cette équation est celui de [Boris, 1970]. Nous introduisons pour cela des impulsion intermédiaires, généralement notées $\mathbf{p}^-$, $\mathbf{p}^+$ et $\mathbf{p}^*$. Pour des raisons de clarté, nous allégeons l'écriture pour la présentation de cet algorithme, de sorte que les impulsions sont associées à une macro-particule j (tout comme la charge électrique q) et les valeurs des champs sont estimées à la position de la macro-particule j. Une première étape consiste à évaluer l'accélération du champ électrique sur un demi-pas de temps

$$\frac{\mathbf{p}^- - \mathbf{p}^{n-1/2}}{\Delta t/2} = q\mathbf{E}^n\,. \tag{2.24}$$

L'algorithme calcule ensuite la rotation subie par la particule, induite par le champ magnétique

$$\mathbf{p}^* - \mathbf{p}^- = T\mathbf{p}^- \wedge \mathbf{b}\,, \tag{2.25}$$

$$\mathbf{p}^+ - \mathbf{p}^- = S\mathbf{p}^* \wedge \mathbf{b}\,, \tag{2.26}$$

avec $\mathbf{b} = \mathbf{B}/|\mathbf{B}|$, $T = \tan\left(q|\mathbf{B}^n|\Delta t/2m\gamma^-\right)$ et $S = 2T/(1+T^2)$. Enfin, on calcule l'accélération par le champ électrique pendant la seconde moitié du pas de temps afin de déterminer l'impulsion finale

$$\frac{\mathbf{p}^{n+1/2} - \mathbf{p}^+}{\Delta t/2} = q\mathbf{E}^n\,, \tag{2.27}$$

ce qui nous permet de déduire la nouvelle valeur de position $\mathbf{r}^{n+1}$ via l'Eq. (2.23).

2.2.3 Équation de continuité du courant

Nous avons vu précédemment que le calcul des densité de charge et courant selon les Eqs. (2.18) et (2.19) ne satisfait pas l'équation de continuité. Il s'ensuit que le champ E_y obtenu par l'équation de Maxwell-Ampère ne vérifie pas la relation de Maxwell-Gauss. Une première solution à ce problème a été proposée par [Boris & Lee, 1972], sous la forme d'un terme correctif au champ $\mathbf{E}$:

$$\mathbf{E}' = \mathbf{E} - \nabla\varphi\,, \tag{2.28}$$

où $\nabla\varphi$ est un gradient correctif de nature électrostatique et $\mathbf{E}'$ le champ électrique corrigé. En injectant $\mathbf{E}'$ dans l'Eq. (2.2) on obtient alors

$$\boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{E}' = \boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{E} - \Delta\phi = \frac{\rho}{\varepsilon_0}\,, \tag{2.29}$$

avec $\Delta\varphi = \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\nabla}\varphi$ le laplacien de φ. Si cette méthode peut théoriquement être satisfaisante vis-à-vis de l'équation de continuité, résoudre un laplacien à chaque pas de temps peut s'avérer coûteux numériquement.

Une autre méthode, introduite par [Esirkepov, 2001], consiste à calculer $\mathbf{J}$ à partir de l'équation de continuité, qui se trouvera donc naturellement vérifiée. Commençons par discrétiser l'équation de continuité dans un cas bi-dimensionnel (x,y)

$$\frac{(J_x)^{n+1/2}_{i+1/2,j} - (J_x)^{n+1/2}_{i-1/2,j}}{\Delta x} = -\frac{q}{\Delta t}(D_x)^{n+1/2}_{i,j}\,, \tag{2.30}$$

$$\frac{(J_y)^{n+1/2}_{i,j+1/2} - (J_y)^{n+1/2}_{i,j-1/2}}{\Delta y} = -\frac{q}{\Delta t}(D_y)^{n+1/2}_{i,j}\,, \tag{2.31}$$

Le vecteur $\mathbf{D} = (D_x, D_y)$ est obtenu à partir des Eqs. (2.30) et (2.31) et en faisant l'hypothèse d'une unique particule. Il vient alors

$$(D_x)^{n+1/2}_{i,j} + (D_y)^{n+1/2}_{i,j} = \frac{\rho^{n+1}_{i,j} - \rho^{n}_{i,j}}{q}\,, \tag{2.32}$$

$$= S_{i,j}(x^{n+1}, y^{n+1}) - S_{i,j}(x^n, y^n)\,. \tag{2.33}$$

où on aura posé pour plus de clarté $S_{i,j}(x, y) = S^l(X_i - x, Y_j - y)$ avec (X_i, Y_j) les coordonnées des mailles de simulation. En considérant les fonctions suivantes

$$f_1(x, y, \delta x, \delta y) = S_{i,\ j}(x, y)\,, \tag{2.34}$$

$$f_2(x, y, \delta x, \delta y) = S_{i,j}(x + \delta x, y)\,, \tag{2.35}$$

$$f_3(x, y, \delta x, \delta y) = S_{i,j}(x, y + \delta y)\,, \tag{2.36}$$

$$f_4(x, y, \delta x, \delta y) = S_{i,j}(x + \delta x, y + \delta y)\,, \tag{2.37}$$

[Esirkepov, 2001] introduit quatre hypothèses :

1. Les composantes D_x et D_y peuvent être exprimées comme des combinaisons linéaires des fonctions f_1, f_2, f_3 et f_4.

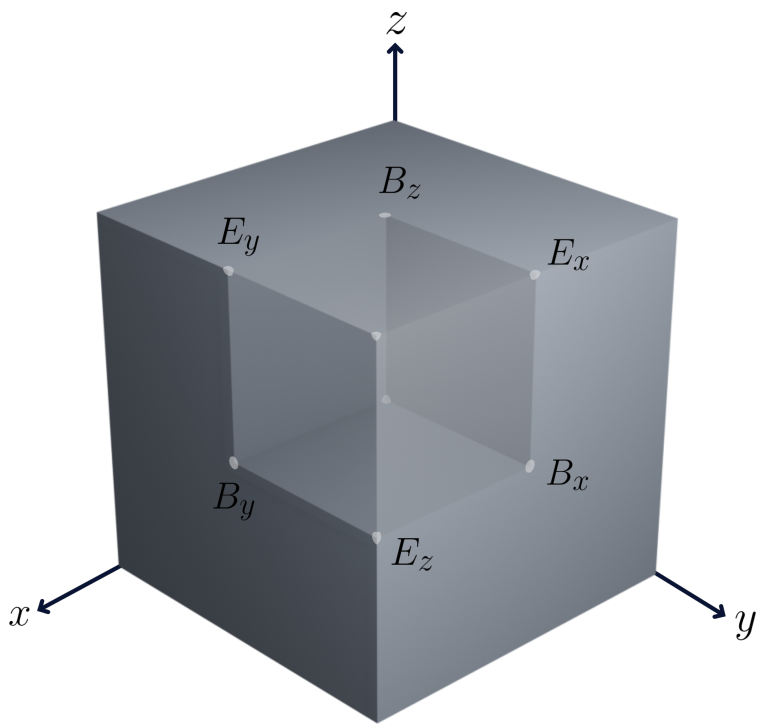


FIGURE 2.4 – Schéma d'une cellule de simulation 3D avec le maillage primal pour le champ électrique (au centre des arrêtes) et le maillage dual pour le champ magnétique (au centre des faces).

2. L'équation de continuité est satisfaite, de sorte que $D_x + D_y = f_4 - f_1$.

3. Si $\delta\alpha = 0$, avec $\alpha = x$, y, alors $D_\alpha = 0$.

4. Si $\delta x = \delta y$, on aura par symétrie $D_x = D_y$.

Ces conditions ne laissent alors qu'une seule possibilité pour la combinaison linéaire des composantes de $\mathbf{D}$:

$$D_x = \frac{1}{2}(f_4 - f_3) + \frac{1}{2}(f_2 - f_1) \ , \tag{2.38}$$

$$D_y = \frac{1}{2}(f_4 - f_2) + \frac{1}{2}(f_3 - f_1) \ . \tag{2.39}$$

Ces deux équations nous permettent donc de déterminer les valeurs de D_x et D_y et, par conséquent, les composantes du courant électrique J_x et J_y grâce aux Eqs. (2.30) et (2.31).

2.2.4 Solveur de Maxwell

De nombreux algorithmes ont été développés pour résoudre, avec une plus ou moins bonne précision, les valeurs des champs électrique et magnétique dans l'espace de simulation. Nous présentons dans cette section la méthode la plus couramment employée, à savoir celle développée par [Yee, 1966]. Nous avons vu en Sec. 2.1 que les champs électrique et magnétique sont reliés par l'équation de Maxwell-Faraday [Eq. (2.4)] et l'équation de Maxwell-Ampère [Eq. (2.5)] qui sont suffisantes pour résoudre le système (les Eqs. (2.2) et (2.3) constituent des contraintes à satisfaire parallèlement). [Yee, 1966] propose d'utiliser le schéma FDTD (*Finite Difference Time Domain*) afin de résoudre les champs successivement, au deuxième ordre et de façon centrée tels que

$$\left(\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}\right)^n = -\left(\boldsymbol{\nabla} \wedge \mathbf{E}\right)^n \,, \tag{2.40}$$

$$\left(\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}\right)^{n+1/2} = c^2 \left(\boldsymbol{\nabla} \wedge \mathbf{B} - \mu_0 \mathbf{j}\right)^{n+1/2} \,, \tag{2.41}$$

où n est l'indice du pas de temps tel que $t = n\Delta t$. $\mathbf{E}$ et $\mathbf{B}$ sont donc décalés d'un demi-pas de temps (schéma saute-mouton, ou *leapfrog*) pour assurer le centrage des dérivées temporelles. Par ailleurs, pour assurer le centrage des dérivées spatiales, les champs $\mathbf{E}$ et $\mathbf{B}$ sont discrétisés sur des grilles décalées d'un demi-pas spatial. Plus précisément, en géométrie 3D, les composantes du champ $\mathbf{B}$ sont calculées au centre des faces des cellules de simulation alors que les valeurs des composantes du champ électrique sont calculées au centre des arrêtes comme illustré sur la Fig. 2.4. Nous pouvons alors discrétiser les Eqs. (2.40) et (2.41) sur les trois dimensions spatiales, en posant i, j et k les indices des mailles de simulation sur leur dimension respective x, y et z. Il vient donc pour l'équation de Maxwell-Faraday

$$\begin{aligned}\frac{(B_x)^{n+1/2}_{i,j+1/2,k+1/2} - (B_x)^{n-1/2}_{i,j+1/2,k+1/2}}{\Delta t} = &- \frac{(E_z)^n_{i,j+1,k+1/2} - (E_z)^n_{i,j,k+1/2}}{\Delta y} \\ &+ \frac{(E_y)^n_{i,j+1/2,k+1} - (E_y)^n_{i,j+1/2,k}}{\Delta z} \,,\end{aligned} \tag{2.42}$$

$$\begin{aligned}\frac{(B_y)^{n+1/2}_{i+1/2,j,k+1/2} - (B_y)^{n-1/2}_{i+1/2,j,k+1/2}}{\Delta t} = &- \frac{(E_x)^n_{i+1/2,j,k+1} - (E_x)^n_{i+1/2,j,k}}{\Delta z} \\ &+ \frac{(E_z)^n_{i+1,j,k+1/2} - (E_z)^n_{i,j,k+1/2}}{\Delta x} \,,\end{aligned} \tag{2.43}$$

$$\begin{aligned}\frac{(B_z)^{n+1/2}_{i+1/2,j+1/2,k} - (B_z)^{n-1/2}_{i+1/2,j+1/2,k}}{\Delta t} = &- \frac{(E_y)^n_{i+1,j+1/2,k} - (E_y)^n_{i,j+1/2,k}}{\Delta x} \\ &+ \frac{(E_x)^n_{i+1/2,j+1,k} - (E_x)^n_{i+1/2,j,k}}{\Delta y} \,,\end{aligned} \tag{2.44}$$

et pour l'équation de Maxwell-Ampère

$$\begin{aligned}\frac{(E_x)^{n+1}_{i+1/2,j,k} - (E_x)^n_{i+1/2,j,k}}{\Delta t} = &\frac{(B_z)^{n+1/2}_{i+1/2,j+1/2,k} - (B_z)^{n+1/2}_{i+1/2,j-1/2,k}}{\Delta y} \\ &- \frac{(B_y)^{n+1/2}_{i+1/2,j,k+1/2} - (B_y)^{n+1/2}_{i+1/2,j,k-1/2}}{\Delta z} \\ &- \mu_0 (J_x)^{n+1/2}_{i+1/2,j,k} \,,\end{aligned} \tag{2.45}$$

$$\begin{aligned}\frac{(E_y)^{n+1}_{i,j+1/2,k} - (E_y)^n_{i,j+1/2,k}}{\Delta t} = &\frac{(B_x)^{n+1/2}_{i,j+1/2,k+1/2} - (B_x)^{n+1/2}_{i,j+1/2,k-1/2}}{\Delta z} \\ &- \frac{(B_z)^{n+1/2}_{i+1/2,j+1/2,k} - (B_z)^{n+1/2}_{i-1/2,j+1/2,k}}{\Delta x} \\ &- \mu_0 (J_y)^{n+1/2}_{i,j+1/2,k} \,,\end{aligned} \tag{2.46}$$

$$\frac{(E_z)^{n+1}_{i,j,k+1/2} - (E_z)^{n}_{i,j,k+1/2}}{\Delta t} = \frac{(B_y)^{n+1/2}_{i+1/2,j,k+1/2} - (B_y)^{n+1/2}_{i-1/2,j,k+1/2}}{\Delta x} - \frac{(B_x)^{n+1/2}_{i,j+1/2,k+1/2} - (B_x)^{n+1/2}_{i,j-1/2,k+1/2}}{\Delta y} - \mu_0 (J_z)^{n+1/2}_{i,j,k+1/2} \,. \tag{2.47}$$

Pour obtenir la valeur de ces champs au même instant $n\Delta t$, on procède alors à une interpolation temporelle linéaire sur le champ magnétique

$$\mathbf{B}^n = \frac{1}{2}\left(\mathbf{B}^{n-1/2} + \mathbf{B}^{n+1/2}\right) \,. \tag{2.48}$$

Nous avons vu dans la Sec. 2.2.2 que les valeurs des champs électrique et magnétique sont utilisées pour calculer la force de Lorentz s'exerçant sur les particules. Or, ces champs sont définis à des positions bien particulières du maillage tandis que les macro-particules peuvent avoir n'importe quelles coordonnées dans l'espace de simulation. Pour évaluer celle-ci, considérons une onde de la forme

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}_j) = \sum_{i=1}^{N^{\mathrm{m}}} \mathbf{E}(\mathbf{R}_i) S^l\left(\mathbf{R}_i - \mathbf{r}_j\right) \,, \tag{2.49}$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}_j) = \sum_{i=1}^{N^{\mathrm{m}}} \mathbf{B}(\mathbf{R}_i) S^l\left(\mathbf{R}_i - \mathbf{r}_j\right) \,. \tag{2.50}$$

Si cette méthode est relativement simple d'un point de vue numérique, elle connaît toutefois une faiblesse : elle peut, dans certains cas, donner naissance à un effet Tcherenkov numérique, non physique, si la vitesse des particules dépasse la vitesse de phase des ondes électromagnétiques. Pour le démontrer, on peut utiliser l'exemple simple d'une onde électromagnétique plane telle que

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},\, t) = \mathbf{E}_0 \exp\left[i(\mathbf{k}.\mathbf{r} - \omega t)\right] \,, \tag{2.51}$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r},\, t) = \mathbf{B}_0 \exp\left[i(\mathbf{k}.\mathbf{r} - \omega t)\right] \,, \tag{2.52}$$

avec $\mathbf{k}$ le vecteur d'onde et ω la pulsation. Lorsque l'on discrétise cette onde plane avec la méthode de [Yee, 1966], définie par les Eqs. (2.42) à (2.47), on obtient pour la vitesse de phase

$$v_\phi = \frac{\omega}{|\mathbf{k}|} = \frac{2}{k\Delta t} \arcsin\left(c\Delta t \sqrt{\frac{\sin^2\left(k_x \Delta x/2\right)}{\Delta x^2} + \frac{\sin^2\left(k_y \Delta y/2\right)}{\Delta y^2} + \frac{\sin^2\left(k_z \Delta z/2\right)}{\Delta z^2}}\right) \,, \tag{2.53}$$

où $|\mathbf{k}|^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$. On remarque que la vitesse de phase v_ϕ peut être inférieure à la vitesse de la lumière c. Plusieurs méthodes ont été développées pour résoudre ce problème comme par exemple [Pukhov, 1999] et [Lehe *et al.*, 2013] qui proposent de corriger la discrétisation de [Yee, 1966] par l'ajout de coefficients permettant d'annuler la dispersion des ondes électromagnétiques le long des axes du maillage. Nous en déduisons par ailleurs la condition

liant le pas de temps aux pas d'espace :

$$\frac{1}{(c\Delta t)^2} \geq \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2} \right) , \tag{2.54}$$

qui correspond à la condition CFL (Courant-Fiedrichs-Lewy) [Courant *et al.*, 1967], exprimée ici dans un cas 3D.

2.3 Le code PIC-Monte Carlo CALDER

2.3.1 Description générale

Calder est un code PIC-MC développé depuis plus de vingt ans au sein du CEA/DAM pour la simulation cinétique des plasmas hors équilibre et, en particulier, des interactions laser- et faisceau-plasma. Il permet de considérer une configuration géométrique cartésienne à une, deux ou trois dimensions spatiales selon les besoins et les ressources informatiques disponibles.

Au fil des années, le code a connu de nombreux enrichissements, en particulier pour la partie Monte Carlo, avec l'ajout de processus atomiques tels que l'ionisation collisionnelle ou le Bremsstrahlung par exemple, permettant d'améliorer la description de la cinétique du plasma. Nous dresserons dans la Sec. 2.3.2 une liste exhaustive de ces processus.

Calder est écrit en Fortran et parallélisé via la méthode MPI (Message Passing Interface) [Clarke *et al.*, 1994], ce qui lui permet d'être lancé sur un très grand nombre de processeurs. Les simulations présentées dans ce manuscrit ont été menées sur les calculateurs du Très Grand Centre de Calcul (TGCC). Outre les apports algorithmiques pour une meilleure description de la physique, il a fait l'objet de multiples améliorations d'ordre numérique. Nous présenterons dans la dernière section de ce chapitre le nouveau module de coalescence des macro-particules implémenté durant cette thèse et ayant pour but de limiter le temps de calcul induit par la production de macro-particules par les processus atomiques.

2.3.2 Résumé des processus d'interaction inclus dans CALDER

Depuis sa création à la fin des années 90, Calder a bénéficié d'ajouts importants que nous allons passer en revue dans cette section. Parmi eux, nous retrouverons des outils nécessaires à la simulation de l'interaction laser-matière, comme le processus d'ionisation par champ, des processus permettant l'amélioration de la description des plasmas denses ou encore plus récemment des processus faisant intervenir de très hautes énergies, dans des régimes dits relativistes. Ils ont tous pour ambition de permettre à Calder d'améliorer ses capacités prédictives, dans des conditions proches des systèmes expérimentaux.

2.3.2.1 Ionisation par champ

La modélisation de l'ionisation par effet tunnel, décrite dans [Nuter *et al.*, 2011], constitue un ingrédient important de Calder, ce dernier étant à l'origine destiné à l'étude de l'interaction laser-plasma. L'algorithme repose sur le calcul du taux d'ionisation par effet tunnel via la formule proposée dans [Yudin & Ivanov, 2001], permettant de créer une fonction de distribution sur le nombre d'électrons arrachés à l'ion. Un tirage Monte Carlo permet alors de déterminer le degré d'ionisation final de l'ion et l'algorithme produit en conséquence un macro-électron associé à un certain poids statistique, puis corrige le champ électrique en introduisant un courant d'ionisation.

2.3.2.2 Collisions élastiques

Ce module, dont l'implémentation est décrite dans [Pérez *et al.*, 2012], repose sur la méthode d'appariement proposée par [Takizuka & Abe, 1977] puis adaptée par [Nanbu & Yonemura, 1998] à des macro-particules de poids statistiques différents. La section efficace de collision coulombienne entre deux particules est estimée grâce à la formule de [Frankel *et al.*, 1979] en prenant soin d'appliquer la correction due à la différence des poids statistiques. Ces interactions sont essentielles dans les plasmas collisionnels puisque ce sont elles qui vont assurer la thermalisation du plasma, c'est-à-dire le retour à une distribution maxwellienne de même température pour chacune des espèces constituant le plasma.

2.3.2.3 Ionisation par impact électronique

En plus des collisions élastiques, [Pérez *et al.*, 2012] décrivent également le modèle d'ionisation collisionnel implémenté dans Calder, basé sur le calcul de la section efficace proposée par [Kim *et al.*, 2000] et adapté à l'interaction entre des macro-électrons et des macro-ions de poids statistiques différents. Cet algorithme, partiellement Monte Carlo (puisque l'interaction est traitée de façon probabiliste au contraire de la modification des particules qui est traitée de façon déterministe[1]), a été modifié durant cette thèse de façon à permettre une description entièrement Monte Carlo, avec une résolution sur la structure atomique fine et permettant la création de lacunes électroniques sur les sous-couches.

[1] Chap. 4.

2.3.2.4 Bremsstrahlung

Un processus bien connu en physique des plasma est celui du Bremsstrahlung (dérivé de l'allemand pour "rayonnement de freinage"). Lorsqu'un électron passe au voisinage d'un ion, il subit une déviation s'accompagnant d'une émission radiative.

Le module de Bremsstrahlung implémenté dans Calder [Martinez *et al.*, 2019] considère trois régimes physiques distincts :

- un régime classique (ou non relativiste) lorsque l'énergie de l'électron, ε, est comprise entre $m_e c^2$ et $2\ m_e c^2$, basée sur l'approximation de Born [Heitler, 1954], améliorée dans le régime non relativiste par le facteur d'Elwert [Elwert, 1939] ;
- un régime relativiste lorsque $2\ m_e c^2 < \varepsilon \leq 100\ m_e c^2$ basé sur le calcul des sections efficaces proposées par [Bethe, 1934] et [Koch & Motz, 1959] ;
- un régime ultra relativiste où $\varepsilon > 100\ m_e c^2$ et pour lequel l'approximation de Born va être améliorée grâce à l'ajout d'un terme correctif coulombien [Koch & Motz, 1959].

Dans chacun des cas est pris en compte l'écrantage de la charge ionique du noyau par les électrons liés (écrantage de Thomas-Fermi) et électrons libres (écrantage de Debye-Hückel), faisant l'originalité de ce modèle.

2.3.2.5 Rayonnement synchrotron

Le rayonnement synchrotron résulte de l'interaction d'une particule chargée avec un champ électromagnétique ($\mathbf{E}$, $\mathbf{B}$) et peut être quantifié par le paramètre sans dimension χ tel que

$$\chi = \frac{\gamma\,|\mathbf{E}_\perp + \mathbf{v} \wedge \mathbf{B}|}{E_S} \tag{2.55}$$

avec $E_S = m_e^2 c^3 / e\hbar \approx 1.3 \times 10^{18}$ V/m le champ de Schwinger [Schwinger, 1951], limite au delà de laquelle le champ électromagnétique est supposé non linéaire (et ne peut donc plus être traité classiquement).

Plus précisément, Calder décrit ce rayonnement dans le régime classique ($\chi \ll 1$), selon une approche déterministe (le rayonnement peut être vu comme un freinage continu des électrons, du fait du grand nombre de photons émis) et dans le régime quantique ($\chi \geq 10^{-2}$), selon une technique Monte Carlo (peu de photons sont émis mais avec une énergie comparable à celle des électrons). L'implémentation de ces modules est décrite dans [Lobet, 2015; Lobet *et al.*, 2016].

2.3.2.6 Création de paires par processus de Breit-Wheeler et Bethe-Heitler

Pour compléter la description du transport radiatif à haute énergie ($\hbar\omega > 1$ MeV), Calder a également été agrémenté d'un module permettant la création de paire électron-positron à partir de photons, interagissant avec

- un champ électromagnétique très intense ($> 10^{23}$ W/cm^2), où on parlera alors de processus non linéaire de Breit-Wheeler [Lobet *et al.*, 2016] ;
- le champ coulombien d'un noyau atomique, où on parlera de processus de Bethe-Heitler [Martinez *et al.*, 2019].

Ces processus seront négligés dans l'ensemble des travaux présentés dans ce manuscrit.

2.3.3 Traitement Monte Carlo des collisions

Si la formulation originelle des codes PIC, telle que décrite dans la première partie de ce chapitre, permet de décrire fidèlement la dynamique collective d'un plasma sous l'effet de champs électromagnétiques externes et auto-induits, elle ne permet pas de prendre en compte les interactions à une échelle inférieure au maillage. Le pas spatial étant généralement comparable à la longueur de Debye du plasma, ces interactions "à courte portée" sont de nature collisionnelle. S'il est justifié de les négliger dans les plasmas chauds et dilués, ce n'est pas le cas dans les plasmas denses mis en jeu dans les interaction laser-solide ou XFEL-solide au cœur de notre étude.

Du fait de leur nature stochastique, ces interactions se prêtent naturellement à des algorithmes de type Monte Carlo. Une complication est cependant introduite par le caractère souvent binaire des interactions. Se pose donc le problème de leur échantillonnage au sein d'une distribution arbitraire de particules, caractérisés, en toute généralité, par des poids statistiques distincts.

2.3.3.1 Méthode d'appariement de Nanbu

La très grande majorité des processus implémentés dans Calder lors de ces travaux de thèse (et même pour les processus déjà implémentés auparavant), se déroule dans un contexte d'interaction binaire, c'est-à-dire au sein d'une paire de particules pouvant être un photon et un électron (diffusion Compton), un électron et un ion (ionisation collisionnelle, collision coulombienne), un photon et un ion (photoionisation) etc.

La première étape est donc de sélectionner les particules susceptibles d'interagir ensemble. Un premier critère s'imposant spontanément est celui de la nature des particules : comme suggéré dans le paragraphe précédent, chaque processus se déroule entre des espèces bien précises. En effet, les codes PIC ont la capacité de pouvoir séparer les macro-particules dans des classes, selon leur nature. Nous aurons donc une classe pour l'espèce électronique, une autre pour une espèce atomique, encore une autre pour les photons, etc. Il sera par ailleurs possible de procéder à des sous-divisions de classe, permettant, par exemple, d'initialiser des électrons supra-thermiques et des électrons thermiques, ou encore d'initialiser différents degrés de charge d'un même atome.

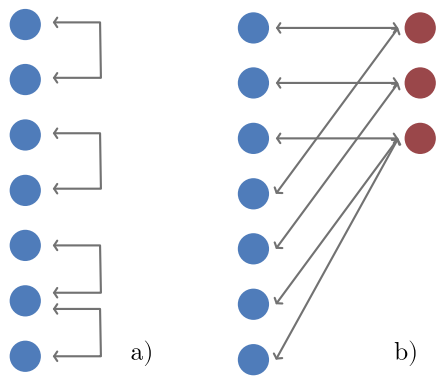


FIGURE 2.5 – Schéma de la méthode d'appariement de Nanbu : a) au sein d'une même espèce où chaque macro-particule est associée aléatoirement à une autre dans la cellule de simulation avec, dans le cas d'un nombre impair, la possibilité d'avoir une même macro-particules dans deux paires pour que chaque macro-particule fasse partie d'une paire ; b) entre deux espèces différentes (représentées en bleu et rouge) avec la possibilité que les macro-particules de l'espèce sous-numéraire interviennent dans plusieurs paires de sorte que chaque macro-particule soit appariée une fois au moins.

Un autre critère est celui de la proximité des macro-particules pouvant potentiellement interagir. L'idée la plus simple est de considérer que seules les macro-particules contenues dans une même maille de simulation peuvent interagir, un raisonnement justifié par le fait que le pas spatial est généralement de l'ordre de la longueur de Debye du plasma, en deçà de laquelle les interactions sont de nature collisionnelle.

Si l'on considère une maille contenant N_α macro-particules de l'espèce α et N_β macro-particules de l'espèce β, nous pouvons théoriquement, pour un processus quelconque qui ferait intervenir ces deux espèces, former $N_\alpha \times N_\beta$ paires possibles. Cette méthode, statistiquement satisfaisante, se révèle en pratique difficilement applicable en raison de la croissance rapide du nombre de paires à considérer avec le nombre de macro-particules, entraînant un coût numérique élevé.

En s'inspirant d'une méthode proposée par [Takizuka & Abe, 1977], [Nanbu & Yonemura, 1998] proposent un modèle d'appariement de macro-particules plus économique, appliqué aux collisions coulombiennes (élastiques) entre particules chargées. Nous pouvons distinguer deux sortes de collisions coulombiennes :

- les collisions qui font intervenir des macro-particules de la même espèce α (au sens numérique du terme), auquel cas l'algorithme formera aléatoirement des paires. Lorsque le nombre de macro-particules N_α dans la maille est impair, on imposera qu'une des macro-particules intervienne dans une seconde paire, de sorte que chaque macro-particule se trouve dans une paire au moins une fois, comme illustré en Fig. 2.5a ;
- les collisions faisant intervenir les macro-particules de deux espèces différentes, ou chaque macro-particule de l'espèce α est associée aléatoirement à une macro-particule de l'espèce β. Lorsque $N_\alpha \neq N_\beta$, on dupliquera virtuellement $|N_\alpha - N_\beta|$ macro-particules de l'espèce sous-numéraire de sorte à ce que, encore une fois, chaque macro-particule appartienne à au moins une paire, illustré en Fig. 2.5b. Un nombre $\max(N_\alpha, N_\beta)$ de paires est ainsi formé.

Nous avons vu plus tôt dans ce chapitre que CALDER permettait de considérer des macro-particules de poids statistique variable. Ces poids statistiques vont intervenir à la fois dans le calcul de la probabilité d'interaction, mais également lors de la modification des propriétés des macro-particules suite à l'interaction.

2.3.3.2 Application au traitement des collisions coulombiennes relativistes

Dans cette section, nous présentons un exemple de processus implémenté dans CALDER, faisant intervenir la méthode d'appariement de Nanbu, à savoir le processus de collisions coulombiennes. Ce modèle, proposé dans [Pérez *et al.*, 2012], s'intéresse à la collision élastique de deux particules chargées, indicées $\alpha \in (1, 2)$, caractérisées par leur masse, m_α, leur charge

électrique, q_α, leur densité, n_α, leur vitesse, $\mathbf{v}_\alpha$, leur facteur de Lorentz, γ_α et enfin leur impulsion, $\mathbf{p}_\alpha$, telle que $\mathbf{p}_\alpha = \gamma_\alpha m_\alpha \mathbf{v}_\alpha$. Nous commençons par nous placer dans le référentiel du centre de masse (CM) en calculant sa vitesse

$$\mathbf{v}_{\text{CM}} = \frac{\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2}{m_1\gamma_1 + m_2\gamma_2} \,. \tag{2.56}$$

On peut alors exprimer les paramètres associés aux particules dans le référentiel du CM (ils seront marqués du symbole "*") grâce à la transformée de Lorentz :

$$\mathbf{p}_\alpha^* = \mathbf{p}_\alpha + \left[\frac{\gamma_{\text{CM}} - 1}{v_{\text{CM}}^2}(\mathbf{v}_{\text{CM}} \cdot \mathbf{v}_\alpha) - \gamma_{\text{CM}}\right] m_\alpha \gamma_{\text{CM}} \,. \tag{2.57}$$

Le but est ici de déterminer l'angle total de déviation χ^* subie par chacune des macro-particules pendant une itération PIC dans le centre de masse. [Nanbu & Yonemura, 1998] proposent une expression de la densité de probabilité associée (dans le régime de diffusion multiple) :

$$f(\chi^*) = \frac{A}{4\pi \sinh(A)} \exp\left(A\cos(\chi^*)\right) \,, \tag{2.58}$$

où A est un facteur défini tel que

$$\coth(A) - A^{-1} = \exp(-s_{12}) \,, \tag{2.59}$$

avec

$$s_{12} = \frac{N\langle\theta^*\rangle}{2} \,, \tag{2.60}$$

un paramètre relié à l'angle de diffusion moyen $\langle\theta^*\rangle$ pour une seule collision et au nombre de collisions N. Ce nombre de collisions peut être estimé par la formule usuelle $N = \sigma^{\text{CC}} v_{\text{rel}} n_2 \Delta t$ avec σ^{CC} la section efficace totale de diffusion élastique, $v_{\text{rel}} = |\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2|$ la vitesse relative entre les deux particules et Δt le pas de temps. En utilisant l'invariant relativiste de $\sigma^{\text{CC}} v_{\text{rel}} \gamma_1 \gamma_2$ [Landau & Lifshitz, 1975], Nous pouvons réexprimer N en fonction des paramètres dans le référentiel du CM

$$N = \sigma^{\text{CC}*} v_{\text{rel}} \frac{\gamma_1^* \gamma_2^*}{\gamma_1 \gamma_2} n_2 \Delta t \,, \tag{2.61}$$

avec $\gamma_\alpha^* = (1 - \mathbf{v}_{\text{CM}} \cdot \mathbf{v}/c^2)/\gamma_{\text{CM}}\gamma$. [Frankel *et al.*, 1979] proposent une expression de la section efficace différentielle dans le référentiel du CM

$$\frac{\mathrm{d}\sigma^{\text{CC}*}}{\mathrm{d}\Omega^*} = \left(\frac{2q_1q_2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1 + v_1^* v_2^*/c^2}{p_1^* v_{\text{rel}}^*}\right)^2 \frac{1}{\theta^{*4}} \,, \tag{2.62}$$

Ω^* étant l'angle de déviation d'une particule après une unique collision. En intégrant cette section efficace différentielle entre le minimum et le maximum pour l'angle θ^* [Frankel *et al.*,

1979], on peut exprimer l'expression de $\langle\theta^{*2}\rangle$

$$\langle\theta^{*2}\rangle = \frac{1}{\sigma^{\mathrm{CC}*}}\frac{\ln(\Lambda)}{2\pi}\left(\frac{q_1 q_2}{\varepsilon_0}\frac{1+v_1^* v_2^*/c^2}{p_1^* v_{\mathrm{rel}}^*}\right)^2 , \tag{2.63}$$

où $\ln(\Lambda)$ est le logarithme coulombien, pour lequel [Pérez *et al.*, 2012], inspirés par [Lee & More, 1984], proposent l'expression suivante

$$\ln(\Lambda) = \max\left[2, \frac{1}{2}\ln\left(1+\frac{\lambda_D^2}{\max\left(h/2p_1^*, b_0\right)^2}\right)\right] , \tag{2.64}$$

avec h la constante de Planck et b_0 un paramètre tel que

$$b_0 = \frac{q_1 q_2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\gamma_{\mathrm{CM}}}{m_1\gamma_1 + m_2\gamma_2}\left(\frac{m_1\gamma_1^* m_2\gamma_2^*}{p_1^{*2}}c^2+1\right)^2 . \tag{2.65}$$

En combinant les Eqs. (2.61) et (2.63) et sachant que $v_{\mathrm{rel}}^* = v_1^* + v_2^*$, on peut déduire l'expression du paramètre s_{12}

$$s_{12} = \frac{n_2\Delta t\ln(\Lambda)q_1^2 q_2^2}{4\pi\varepsilon^2 c^4 m_1\gamma_1 m_2\gamma_2}\frac{\gamma_{\mathrm{CM}}p_1^*}{m_1\gamma_1+m_2\gamma_2}\left(\frac{m_1\gamma_1^* m_2\gamma_2^*}{p_1^{*2}}c^2+1\right)^2 . \tag{2.66}$$

Nous pouvons alors déterminer l'angle de déviation χ^*

$$\cos(\chi^*) = A^{-1}\ln\left(e^{-A}+2\xi\sinh(A)\right) , \tag{2.67}$$

où ξ est un nombre généré aléatoirement entre 0 et 1. On distingue alors quatre cas possibles :

1. si $s_{12} < 0{,}1$, alors $\cos(\chi^*) = 1 + s_{12}\ln(\xi)$,

2. si $0{,}1 < s_{12} \leq 3$ alors

$$A^{-1} = 0{,}0056958 + 0{,}9560202 s_{12} - 0{,}08139 s_{12}^2 \tag{2.68}$$
$$+ 0{,}47913906 s_{12}^3 - 0{,}12788975 s_{12}^4 + 0{,}02389567 s_{12}^5 , \tag{2.69}$$

3. si $3 < s_{12} \leq 6$ alors $A = 3e^{-s_{12}}$,
4. si $s_{12} > 6$ alors $\cos(\chi^*) = 2\xi + 1$.

L'angle de déflection azimutal ϕ^* est, quant à lui, généré aléatoirement entre 0 et 2π. [Pérez *et al.*, 2012] donnent finalement l'expression de l'impulsion finale des particules, après déflexion d'un même angle (χ^*, ϕ^*)

$$\mathbf{p}_{1f}^* = -\mathbf{p}_{2f}^* = \begin{bmatrix} \frac{p_{1x}^* p_{1z}^*}{p_{1\perp}^*} & \frac{p_{1y}^* p_1^*}{p_{1\perp}^*} & p_{1x}^* \\ \frac{p_{1y}^* p_{1z}^*}{p_{1\perp}^*} & \frac{p_{1x}^* p_1^*}{p_{1\perp}^*} & p_{1y}^* \\ p_{1\perp}^* & 0 & p_{1z}^* \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \sin(\chi^*)\cos(\phi^*) \\ \sin(\chi^*)\sin(\phi^*) \\ \cos(\chi^*) \end{pmatrix} , \tag{2.70}$$

avec $p^*_{1\perp} = \sqrt{p^{*2}_{1x} + p^{*2}_{1y}}$. Il suffit alors de procéder à une transformée de Lorentz inverse pour obtenir l'impulsion finale dans le référentiel du laboratoire :

$$\mathbf{p}_f = \mathbf{p}^*_f + \mathbf{v}_{\text{CM}} \left[\frac{\gamma_{\text{CM}} - 1}{v^2_{\text{CM}}} (\mathbf{v}_{\text{CM}} \cdot \mathbf{p}^*_f) + m\gamma^* \gamma_{\text{CM}} \right] . \tag{2.71}$$

Le calcul qui précède ne vaut en toute rigueur que pour deux particules réelles. Son application directe à deux macro-particules de poids statistiques différents violerait la conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie que la collision élastique doit vérifier. Pour assurer cette conservation en moyenne, une solution, proposée par [Nanbu & Yonemura, 1998], est de modifier l'impulsion de la macro-particule la plus "lourde" avec une probabilité inférieure à 1. De façon plus générale, les macro-particules de la paire subiront véritablement l'effet de l'interaction (c'est-à-dire ici une déflexion dans le centre de masse) avec les probabilités respectives

$$P_1 = \frac{W_2}{\max(W_1, W_2)} \quad \text{et} \quad P_2 = \frac{W_1}{\max(W_1, W_2)} . \tag{2.72}$$

Cette probabilité nous permet de calculer des pas de temps effectifs pour chaque macro-particules $\delta t_1 = P_1 \Delta t_1$ et $\delta t_2 = P_2 \Delta t_2$ où Δt_α est le pas de temps d'interaction associé aux particules réelles de l'espèce α. Nous pouvons alors déterminer le pas de temps moyen pour les particules réelles

$$\overline{\Delta t}_1 = \frac{\sum_{j=1}^{N_{12}} W_{1,j} \delta t_{1,j}}{\sum_{j=1}^{N_1} W_{1,j}} = \frac{\Delta t_1}{V} \frac{\sum_{j=1}^{N_{12}} W_{1,j} P_{1,j}}{n_1} = \Delta t_1 \frac{n_{12}}{n_1} , \tag{2.73}$$

où $V = \Delta x \Delta y \Delta z$ est le volume de la maille et où on a introduit la densité croisée n_{12} telle que

$$n_{12} = \frac{1}{V} \sum^{N_{12}} \min(W_1, W_2) . \tag{2.74}$$

De même, par symétrie, on obtient $\overline{\Delta t}_2 = \Delta t_2 n_{12}/n_2$. Finalement, en imposant $\overline{\Delta t}_1 = \overline{\Delta t}_2 = \Delta t_{\text{PIC}}$, on peut exprimer le paramètre $s = s_{12}(\Delta t_1) = s_{21}(\Delta t_2)$ prenant en compte la différence des poids statistiques

$$s = \frac{n_1 n_2}{n_{12}} \frac{\Delta t_{\text{PIC}} \ln(\Lambda) q_1^2 q_2^2}{4\pi\varepsilon_0^2 c^4 m_1 \gamma_1 m_2 \gamma_2} \frac{\gamma_{\text{CM}} p^*_1}{m_1\gamma_1 + m_2\gamma_2} \left(\frac{m_1 \gamma^*_1 m_2 \gamma^*_2}{p^*_1} c^2 + 1 \right)^2 . \tag{2.75}$$

Tous les processus stochastiques d'interaction binaire implémentés durant cette thèse, faisant intervenir des macro-particules de poids différents, feront également appel à ces probabilités d'interaction ainsi que la correction par la densité croisée.

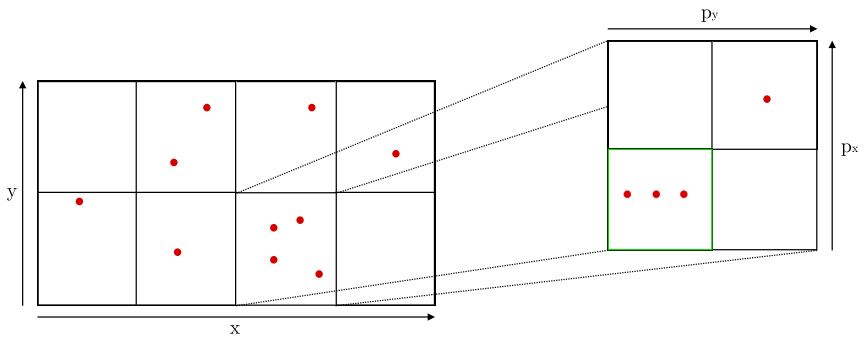


FIGURE 2.6 – Discrétisation dans l'espace des positions (domaine de simulation) et discrétisation dans l'espace des impulsions, permettant l'identification des macro-particules subissant la coalescence (ici encadrées en vert) dans un exemple 2D.

2.4 Coalescence des macro-particules

Un des paramètres déterminants pour le temps de calcul des simulations PIC est le nombre de macro-particules mises en jeu. Si l'on décide de prendre en compte des processus permettant la création, ou la suppression, de macro-particules, ce nombre peut varier, atteignant parfois une valeur rédhibitoire pour les ressources informatiques utilisées. C'est par exemple le cas pour CALDER lorsque nous activons l'ionisation collisionnelle et la recombinaison à trois corps (deux processus que nous présentons au Chap. 4), où de nouvelles macro-particules sont créées du fait de l'ionisation collisionnelle, et que ne supprime la recombinaison à trois corps, celle-ci se contentant simplement d'abaisser le poids statistique des macro-électrons recombinés. Pour contrer cette augmentation du nombre de macro-particules, il est donc nécessaire d'envisager leur coalescence, c'est-à-dire la fusion des macro-particules proches dans l'espace des phases.

2.4.1 Algorithme de Vranic *et al.*

Nous avons choisi le modèle de coalescence des macro-particules développé par [Vranic *et al.*, 2015], que nous présentons dans la suite de cette section ainsi que les modifications apportées pour l'adapter aux besoins de nos simulations. Ce modèle a le grand avantage de conserver exactement la masse, l'énergie, mais aussi la quantité de mouvement des particules coalescées. Ceci est rendu possible en fusionnant les particules initiales en deux particules plutôt qu'en une seule, comme considéré précédemment [Lobet, 2015]. Un élément central de cette méthode est le choix des critères pour quantifier la proximité des macro-particules dans l'espace des phases. Concernant la position, nous avons décidé de comparer dans CALDER les macro-particules d'une même maille de simulation, définie par les pas d'espace (Δx, Δy, Δz).

L'algorithme de [Vranic *et al.*, 2015] consiste en les étapes suivantes :

1. les cellules du domaine de simulation sont passées en revue pour identifier celles contenant plus de deux macro-particules ;
2. l'espace local des impulsions est discrétisé sur une grille de pas (Δp_x, Δp_y, Δp_z) que l'on précisera par la suite ;
3. on passe en revue toutes les cellules de la grille des impulsions pour identifier celles contenant plus de deux macro-particules dont on opère la fusion.

Ces différentes discrétisations, en position et en impulsion, sont schématisées dans la Fig. 2.6.

Considérons N_{m} macro-particules dans une même cellule du domaine des impulsions. Le

poids statistique total (W_t), la quantité de mouvement totale ($\mathbf{p}_t$) et l'énergie totale (γ_t) peuvent être définis comme suivent

$$W_t = \sum_{i=1}^{N_\mathrm{m}} W_i \qquad \mathbf{p}_t = \sum_{i=1}^{N_\mathrm{m}} W_i \mathbf{p}_i \qquad \gamma_t = \sum_{i=1}^{N_\mathrm{m}} W_i \gamma_i \,, \tag{2.76}$$

Ces quantités étant conservées au cours de la coalescence, elles peuvent être reliées aux paramètres caractérisant les deux macro-particules finales, dénotées A et B :

$$W_t = W_A + W_B \,, \tag{2.77}$$

$$\mathbf{p}_t = W_A \mathbf{p}_A + W_B \mathbf{p}_B \,, \tag{2.78}$$

$$\gamma_t = W_A \gamma_A + W_B \gamma_B \,. \tag{2.79}$$

Il existe une infinité de possibilités pour la répartition des poids statistiques des deux nouvelles macro-particules. [Vranic *et al.*, 2015] proposent une équipartition du poids statistique et de l'énergie, de sorte que $W_A = W_B = W_t/2$ et $\gamma_A = \gamma_B = \gamma_t/W_t$. Il reste alors à déterminer les deux vecteurs $\mathbf{p}_A$ et $\mathbf{p}_B$. La norme $p = |\mathbf{p}_A| = |\mathbf{p}_B|$, qui est la même pour les deux vecteurs, peut être déterminée en utilisant la relation entre l'énergie et la quantité de mouvement (qui diffère selon que la macro-particule considérée a une masse finie ou non (dans le cas d'un macro-photon)

$$\gamma = p^2 + 1 \,, \quad \text{si } m \neq 0 \,, \tag{2.80}$$

$$\gamma = p \,, \qquad \text{si } m = 0 \,. \tag{2.81}$$

Là encore, il existe une infinité de combinaisons pour la direction du vecteur d'impulsion de ces deux macro-particules mais [Vranic *et al.*, 2015] proposent de les restreindre dans un plan créé de manière à éviter l'apparition d'une composante de quantité de mouvement artificielle : en effet, s'il n'y a pas de mouvement dans une direction donnée avant la coalescence, nous voulons naturellement que ceci reste vrai après la coalescence. [Vranic *et al.*, 2015] proposent d'introduire un vecteur diagonal $\mathbf{d}$ tel que

$$\mathbf{d} = \frac{1}{\sqrt{\Delta p_x^2 + \Delta p_y^2 + \Delta p_z^2}} \begin{pmatrix} \Delta p_x \\ \Delta p_y \\ \Delta p_z \end{pmatrix} \,, \tag{2.82}$$

qui permet, avec le vecteur $\mathbf{p}_t$, de créer le plan représenté sur la Fig. 2.7 (en rose). La première étape consiste à définir un repère direct orthonormé ($\mathbf{e}_1$, $\mathbf{e}_2$, $\mathbf{e}_3$), illustré sur cette même figure, et défini tel que

$$\mathbf{e}_1 = \frac{\mathbf{p}_t}{p_t} \,, \tag{2.83}$$

$$\mathbf{e}_3 = \frac{\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{d}}{d \sin\left(\widehat{\mathbf{e}_1, \mathbf{d}}\right)} \,, \tag{2.84}$$

$$\mathbf{e}_2 = \mathbf{e}_3 \wedge \mathbf{e}_1 \,. \tag{2.85}$$

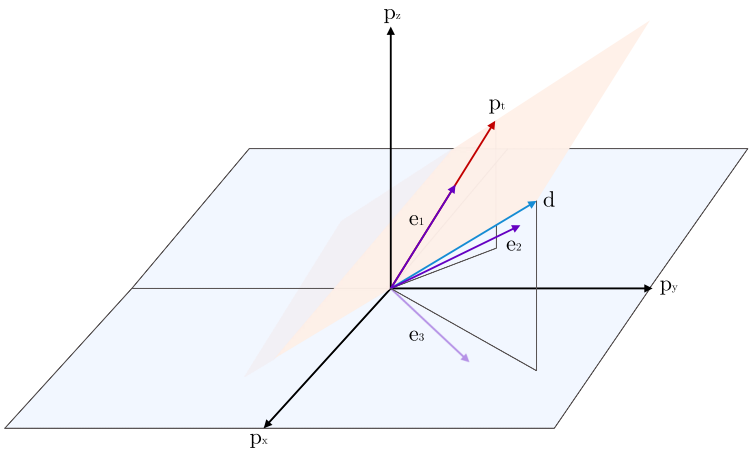


FIGURE 2.7 – Exemple de construction du nouveau système de coordonnées ($\mathbf{e}_1$, $\mathbf{e}_2$, $\mathbf{e}_3$) à partir de l'impulsion totale $\mathbf{p}_t$.

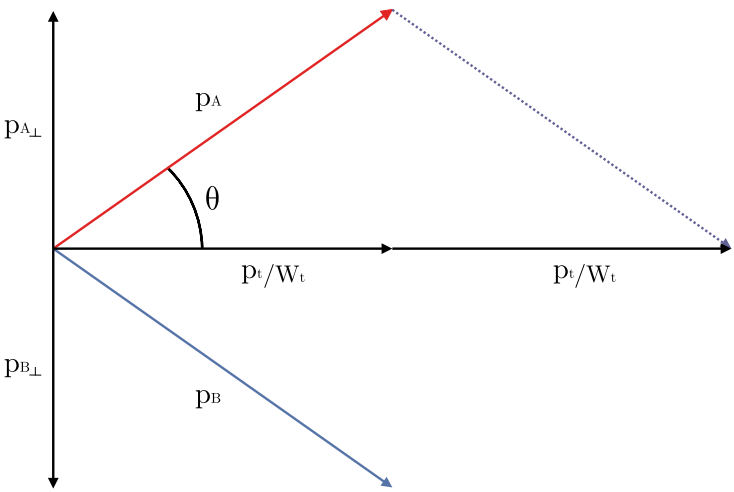


FIGURE 2.8 – Représentation schématique des impulsions des deux nouvelles macro-particules, $\mathbf{p}_A$ et $\mathbf{p}_B$, ainsi que l'angle θ qu'elles forment avec le vecteur $\mathbf{p}_t$.

Il est ensuite nécessaire de déterminer l'angle θ que formeront les vecteurs $\mathbf{p}_A$ et $\mathbf{p}_B$ avec $\mathbf{p}_t$, représenté en Fig. 2.8. Pour ce faire, nous formulons les hypothèses suivantes : $(\mathbf{p}_A)_\parallel = (\mathbf{p}_B)_\parallel = \mathbf{p}_t/W_t$, $(\mathbf{p}_A)_\perp = -(\mathbf{p}_B)_\perp$ ($\parallel$ correspond à une projection sur $\mathbf{e}_1$ et $\perp$ correspond à une projection sur $\mathbf{e}_3$) et en considérant les relations entre l'impulsion des macro-particules et leur énergie, donnée dans les Eqs. (2.81) et (2.80), nous sommes alors en mesure d'exprimer θ

$$\cos\theta = \frac{p_t}{W_t p}\,, \tag{2.86}$$

avec $p = \mathbf{p}_A = \mathbf{p}_B$. Nous pouvons maintenant exprimer ces deux vecteurs selon les deux vecteurs unitaires $\mathbf{e}_1$, $\mathbf{e}_2$ ($\mathbf{e}_1$, $\mathbf{e}_2$ et $\mathbf{d}$ sont coplanaires) et l'angle θ

$$\mathbf{p}_A = p\left(\cos\theta\,\mathbf{e}_1 + \sin\theta\,\mathbf{e}_2\right)\,, \tag{2.87}$$

$$\mathbf{p}_B = p\left(\cos\theta\,\mathbf{e}_1 - \sin\theta\,\mathbf{e}_2\right)\,. \tag{2.88}$$

Les propriétés (W, $\mathbf{p}$) des deux macro-particules issues de la coalescence sont alors définies.

2.4.2 Algorithme implémenté dans CALDER

2.4.2.1 Ajustement auto-cohérent de la taille des cellules de coalescence

Nous avons décidé d'ajuster la discrétisation de la grille en impulsion créée dans une maille spatiale donnée en fonction de la distribution des particules associées. L'idée est donc d'ajuster la taille des cellules Δp_α en fonction des impulsions des particules présentes dans une cellule du domaine de simulation. Pour ce faire, nous introduisons l'écart-type de l'ensemble des macro-particules d'une espèce dans la cellule

$$\delta p_\alpha = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^{N_\mathrm{m}} W_j \left(p_{\alpha,j} - \langle p_\alpha \rangle\right)^2}{\sum_{j=1}^{N_\mathrm{m}} W_j}}\,, \tag{2.89}$$

avec W_j le poids statistique de la macro-particule j et $\langle p_\alpha \rangle$ l'impulsion moyenne en α dans la cellule de coalescence :

$$\langle p_\alpha \rangle = \frac{1}{\sum_{j=1}^{N_\mathrm{m}} W_j} \sum_{j=1}^{N_\mathrm{m}} W_j p_{\alpha,j}\,. \tag{2.90}$$

La taille des cellules du domaine en impulsion est alors prise égale à une fraction de δp_α :

$$\Delta p_\alpha = \frac{\delta p_\alpha}{n}\,, \quad n \in \mathbb{R}^{+*}\,. \tag{2.91}$$

Cette méthode permet un ajustement automatique de la résolution de la grille locale en impulsion, au fur et à mesure des fluctuations du nombre et des propriétés des particules présentes dans la maille spatiale.

2.4.2.2 Conservation du courant électrique

Une question non évoquée jusqu'ici est celle de la détermination de la position des macro-particules coalescées. [Vranic *et al.*, 2015] proposent de créer les nouvelles macro-particules à la position de la première macro-particule indicée dans la cellule en impulsion. Dans un exemple 1D, le premier indice désigne donc la macro-particule la plus à gauche, dans le cas du code Calder. Ainsi, appliquer la méthode de [Vranic *et al.*, 2015] ici fait apparaître la densité de courant artificielle :

$$\mathbf{j}_\mathrm{c} = q \sum_{j=1}^{N_\mathrm{m}} W_j \frac{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_j}{\Delta t}\,, \tag{2.92}$$

où $\mathbf{r}_j$ est le vecteur position de la macro-particule j et Δt le pas de temps PIC. Cette densité de courant est une source de fluctuations électromagnétiques parasites aux effets potentiellement délétères. Il nous est donc apparu plus judicieux de créer les nouvelles particules à une même positions $\mathbf{r}_c$ vérifiant :

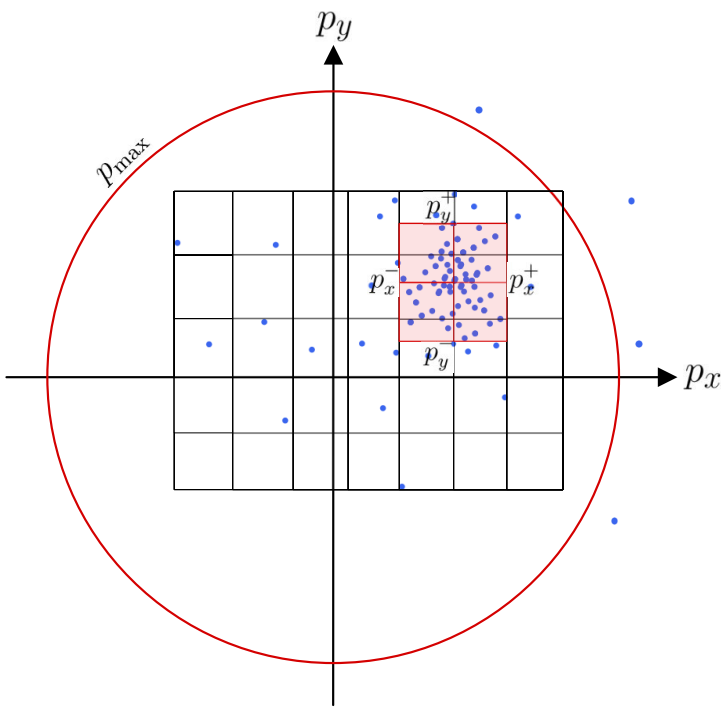


FIGURE 2.9 – Représentation du domaine en impulsion (maillage noir) défini entre $p^{\min}$ et $p^{\max}$ initialement implémenté dans le code (le cercle rouge indiquant la borde supérieure en énergie) et du domaine en impulsion réduit, centré sur la valeur en impulsion moyenne (maillage rouge), finalement utilisé.

$$\sum_{j=1}^{N_{\mathrm{m}}} W_j \left(\mathbf{r}_{\mathrm{c}} - \mathbf{r}_j\right) = \mathbf{0}\,, \tag{2.93}$$

Cette condition, qui assure la conservation du courant, admet une unique solution, à savoir la position du barycentre des macro-particules de la maille. On peut donc calculer la position des deux macro-particules coalescées avec la formule usuelle

$$\mathbf{r}_{\mathrm{c}} = \frac{1}{\sum\limits_{j=1}^{N_{\mathrm{m}}} W_j} \sum_{j=1}^{N_{\mathrm{m}}} W_j \mathbf{r}_j\,. \tag{2.94}$$

2.4.2.3 Optimisation du domaine de coalescence

Le but premier du module de coalescence est de diminuer le temps de calcul ou, à défaut, de faire en sorte qu'il n'augmente pas de façon démesurée, en contrant la production de macro-particules due aux processus inter-particulaires. Or, comme tout module du code, l'algorithme de coalescence va consommer un temps de calcul qui dépendra lui-même du nombre de macro-particules mais également de la taille des grilles en impulsion créées dans chaque cellule spatiale.

Pour limiter le coût de ce modèle, nous avons décidé de le restreindre aux particules dont la norme de l'impulsion est inférieure à une valeur $p_{\max}$. En effet, l'inflation particulaire se produit essentiellement à basse énergie (par les électrons secondaires issus de l'ionisation, les électrons participant à la recombinaison, etc), d'où le choix d'une borne supérieure en énergie des particules autorisées à coalescer.

Dans le but de restreindre encore davantage le nombre de cellules en impulsion, nous pouvons considérer le fait que les particules sont réparties dans l'espace des phases selon

une certaine distribution, proche d'une maxwellienne, de sorte qu'un grand nombre d'entre elles sont proches d'une valeur moyenne dans l'espace des phases et que cette population s'amenuise à mesure que la norme de l'impulsion devient importante, comme schématisé sur la Fig. 2.9. On voit sur ce schéma que considérer les cellules en impulsion très peu peuplées n'est en réalité pas très efficace et que nous pourrions nous contenter d'appliquer la coalescence pour les cellules proches de la valeur moyenne. Nous avons décidé de limiter le nombre de cellules en impulsion à une valeur maximale $N_{\text{imp,max}}$. Pour ce faire, on introduit des bornes inférieure et supérieure en impulsion, p_α^+ et p_α^-, au delà desquelles les macro-particules ne seront pas considérées pour la coalescence (à l'instar de la limite sur l'impulsion totale p_{max}) :

$$p_\alpha^+ = \langle p_\alpha \rangle + \frac{N_{\text{imp,max}}^{1/3}}{2} \Delta p_\alpha \quad \text{et} \quad p_\alpha^- = \langle p_\alpha \rangle - \frac{N_{\text{imp,max}}^{1/3}}{2} \Delta p_\alpha \,. \tag{2.95}$$

avec Δp_α le pas en impulsion sur la dimension α, calculé en considérant toutes les particules d'impulsion inférieure ou égale à p_{max}. Nous aurons donc

$$N_{\text{imp,max}} = \left\lceil \frac{p_x^+ - p_x^-}{\Delta p_x} \right\rceil \left\lceil \frac{p_y^+ - p_y^-}{\Delta p_y} \right\rceil \left\lceil \frac{p_z^+ - p_z^-}{\Delta p_z} \right\rceil \,. \tag{2.96}$$

En résumé, la borne inférieure de la grille en impulsion correspondra, pour chaque composante α, à la valeur minimale d'impulsion des macro-particules dont l'impulsion totale est inférieure à p_{max} et dont la composante en impulsion p_α est comprise entre p_α^- et p_α^+. L'algorithme créé alors autant de mailles (de taille Δp_α) que nécessaire pour contenir toutes les macro-particules répondant aux critères sur l'impulsion précédemment évoqués. Cependant, et à l'instar du code Smilei, nous avons fait le choix de ne pas permettre l'existence de cellules pouvant contenir des impulsions de signes opposés : pour l'éviter, il suffit, quand c'est nécessaire, de créer une cellule supplémentaire et de décaler les bornes de la grille en impulsion de sorte que la limite $p_\alpha = 0$ se trouve à l'interface entre deux cellules.

2.4.2.4 Coalescence des ions dans CALDER

La coalescence vise à faire fusionner des macro-particules proches dans l'espace des phases mais également de même nature physique. Ainsi, les macro-électrons ne fusionnerons qu'avec des macro-électrons, les macro-photons avec les macro-photons etc. Dans le cas des ions, le problème est légèrement plus délicat du point de vue de l'implémentation car nous ne pouvons coalescer que des macro-ions de même charge électrique.

Pour gérer correctement leur coalescence, nous avons procédé à une légère modification de l'algorithme nous permettant, pour chaque cellule en impulsion, de boucler sur tous les degrés de charge ionique en les considérant comme faisant partie d'espèces distinctes. Cependant, tous les paramètres de coalescence précédemment présentés tels que l'écart type, la valeur de l'impulsion moyenne ou les valeurs minimales et maximales en impulsion sont calculés sur l'ensemble de l'espèce ionique sans distinction de charge électrique.

2.4.2.5 Fréquence d'appel et seuil sur le nombre de macro-particules

Un dernier ajout nous permet, comme pour les processus de physique atomique, de pouvoir appeler le module de coalescence à une fréquence plus faible que le pas de temps PIC afin d'en limiter le coût numérique.

Nous avons également introduit une valeur seuil sur le nombre minimal de macro-particules que nous voudrions conserver dans nos cellules de simulation : lorsque le nombre

de macro-particules est égal ou inférieur à ce seuil, la coalescence, pour cette cellule de simulation, ne sera pas activée sur l'espèce considérée. En revanche, si ce nombre est supérieur au seuil, la coalescence ne tiendra pas compte de ce seuil lors de la réduction du nombre de macro-particules dans la maille, qui pourra devenir alors inférieur au seuil (et la coalescence ne s'activera que lorsque ce nombre dépassera à nouveau le seuil).

2.4.3 Tests de validation

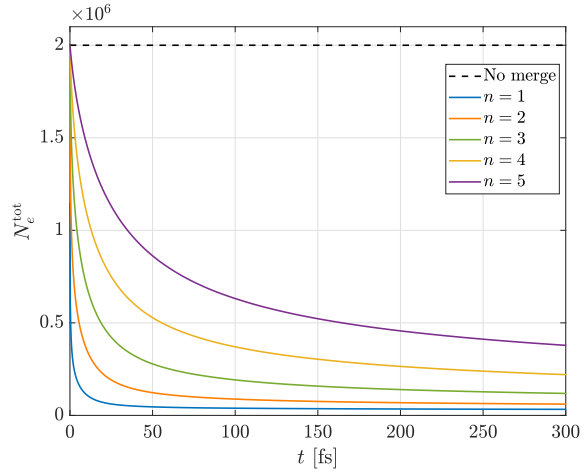
2.4.3.1 Conservation des grandeurs physiques

Nous présentons ici quelques tests simples effectués dans le but de vérifier que notre implémentation du modèle de [Vranic *et al.*, 2015], modifié comme décrit plus tôt, nous permet effectivement de diminuer le nombre de macro-particules tout en conservant la masse, l'impulsion et l'énergie du système. Pour cela, nous avons procédé à des simulations 0D Monte Carlo de l'évolution temporelle d'un plasma d'Aluminium de charge constante $Z^* = 1$ (seules les collisions binaires sont activées), densité $\rho = 2.7$ g/cm^3 ($n_i = n_e = 54.25\ n_c$), températures $T_i = T_e = 100$ eV avec un nombre de macro-particules par maille $N_i = N_e = 200$, sur 10000 mailles. Nous étudions l'effet de la coalescence sur environ 58000 pas de temps.

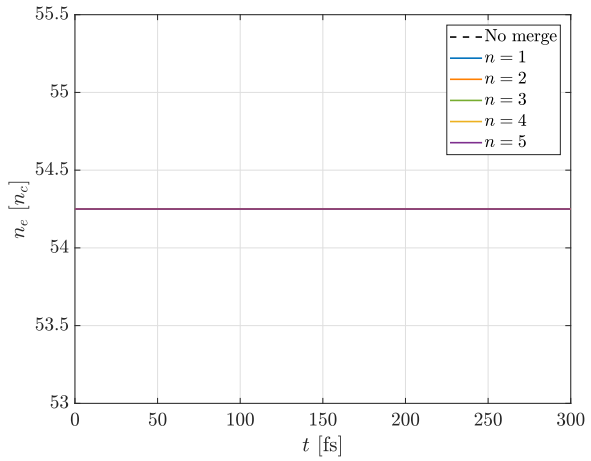
Nous lançons six simulations : une première sans coalescence et les cinq suivantes avec un paramètre de coalescence [Eq. (2.91)] $n = 1$ (courbe bleue), 2 (orange), 3 (vert), 4 (jaune) et 5 (violet). La coalescence est activée à chaque pas de temps et sans seuil sur le nombre minimal de macro-particules par maille.

La Fig. 2.10a représente l'évolution du nombre de macro-particules en fonction du temps. Sans surprise, plus le paramètre de coalescence n est petit, plus la taille des cellules du domaine en impulsion est grande et plus la réduction du nombre de macro-particules est efficace. Nous notons sur la Fig. 2.10b que la masse est parfaitement conservée puisque toutes les densités moyennes restent constantes. En revanche, nous remarquons sur la Fig. 2.10c que la coalescence induit des fluctuations dans l'évolution de la température. Ceci s'explique par le caractère Monte Carlo du module de collisions coulombiennes : comme le nombre de macro-électrons diminue et que leur densité reste inchangée, le poids des macro-particules coalescées augmente. Nous avons vu en Sec. 2.3.3.2 que les collisions binaires entre les macro-particules de poids statistiques différents ne conservent l'énergie totale qu'en moyenne et peuvent conduire à un chauffage/refroidissement artificiel des espèces concernées lorsque celles-ci sont représentées par un très faible nombre de macro-particules par maille. C'est ce que nous voyons pour le cas le plus extrême à $n = 1$, pour lequel l'évolution de la température électronique semble montrer un chauffage global du plasma.

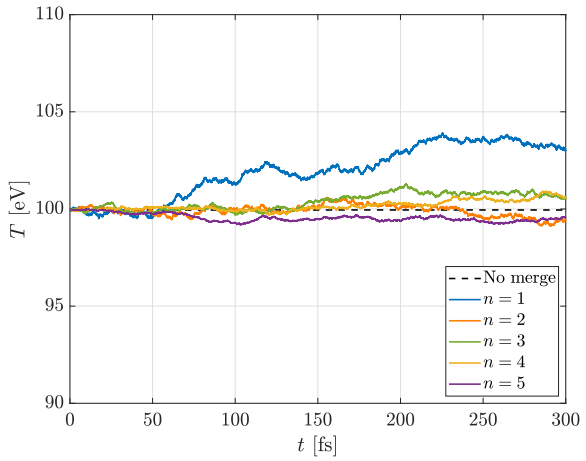
Pour tester l'impact de la coalescence sur la quantité de mouvement, nous reprenons les paramètres de simulations précédents que nous modifions légèrement de sorte à avoir une température initiale $T_i = T_e = 1$ eV et nous imposons une dérive pour les électrons telle que $\mathbf{p}_e = 0.01\ m_e c\ \mathbf{U}_x$. La Fig. 2.11 montre le profil spatial de la distribution en p_x des particules, sans coalescence (Fig. 2.11a), avec $n = 1$ (Fig. 2.11b) et avec $n = 5$ (Fig. 2.11c). L'échelle de couleur rend compte du nombre d'électrons en échelle logarithmique. Le diagnostic est fait après 58000 pas de temps. On voit sur ces figures que la quantité de mouvement reste globalement conservée bien que l'on note de très légères modulations quand $n = 1$: la coalescence tend à condenser l'impulsion dans des zones correspondant aux valeurs d'impulsions moyennes p_A et p_B définies en Eqs. (2.87) et (2.88). En revanche, le cas à $n = 5$ reste visuellement pratiquement inchangé.



(a) Nombre total de macro-électrons

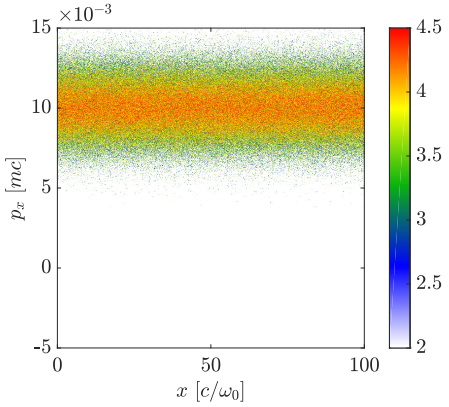


(b) Densité électronique moyenne

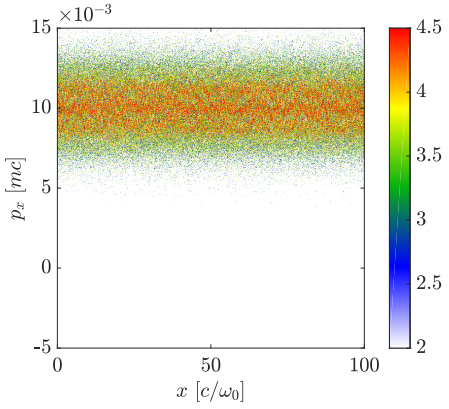


(c) Température électronique moyenne

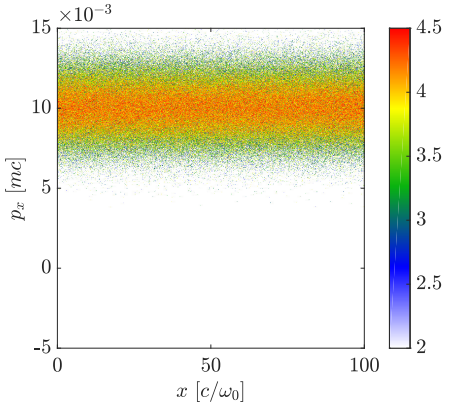
FIGURE 2.10 – Évolution (a) du nombre de macro-électrons, (b) de la densité électronique et (c) de la température électronique moyenne pour un plasma maxwellien initialisé à $Ti = T_e = 100$ eV, une densité $n_e = n_i = 54.25\ n_c$, une charge ionique $Z^* = 1$ et pour différentes valeurs du paramètre de coalescence n.



(a) Sans coalescence



(b) $n = 1$



(c) $n = 5$

FIGURE 2.11 – Profil spatial de la distribution de la composante en impulsion p_x après 58000 pas de temps pour un plasma initialement maxwellien de température $T_i = T_e = 1$ eV, densité $n_e = n_i = 54.25\ n_c$, charge ionique $Z^* = 1$, présentant une dérive $\mathbf{p}_e = 0.01\ m_e c\ \mathbf{U}_x$ et pour différentes valeurs du paramètre de coalescence n.

2.4.3.2 Impact de la coalescence sur le spectre en énergie

Si la méthode de [Vranic *et al.*, 2015] permet une conservation globale de la masse, de l'impulsion et de l'énergie, il est intéressant d'examiner son impact sur la distribution en énergie d'une espèce donnée. Nous nous basons pour cela sur des simulations similaires à celles présentées au début de cette section avec une température initiale $T_i = T_e = 100$ eV, mais en désactivant cette fois les collisions coulombiennes.

La Fig. 2.12 montre l'évolution temporelle du profil de la distribution en énergie (sous la forme du facteur de Lorentz) des électrons en absence de coalescence (Fig. 2.12a), avec $n = 1$ (Fig. 2.12b), avec $n = 3$ (Fig. 2.12c) et avec $n = 5$ (Fig. 2.12a). Avec $n = 5$, la distribution électronique en énergie reste essentiellement inchangée en fonction du temps, comme prévu compte tenu du caractère maxwellien du plasma. Le même comportement est bien sûr observé en l'absence de coalescence. Avec $n = 1$, en revanche, de très fortes modulations déforment d'emblée la fonction de distribution, qui se maintiennent tout au long du calcul. Ces modulations sont grandement atténuées à $n = 3$ (du moins dans le corps de la fonction de distribution), quoique encore discernable à "haute" énergie (~ 200 eV).

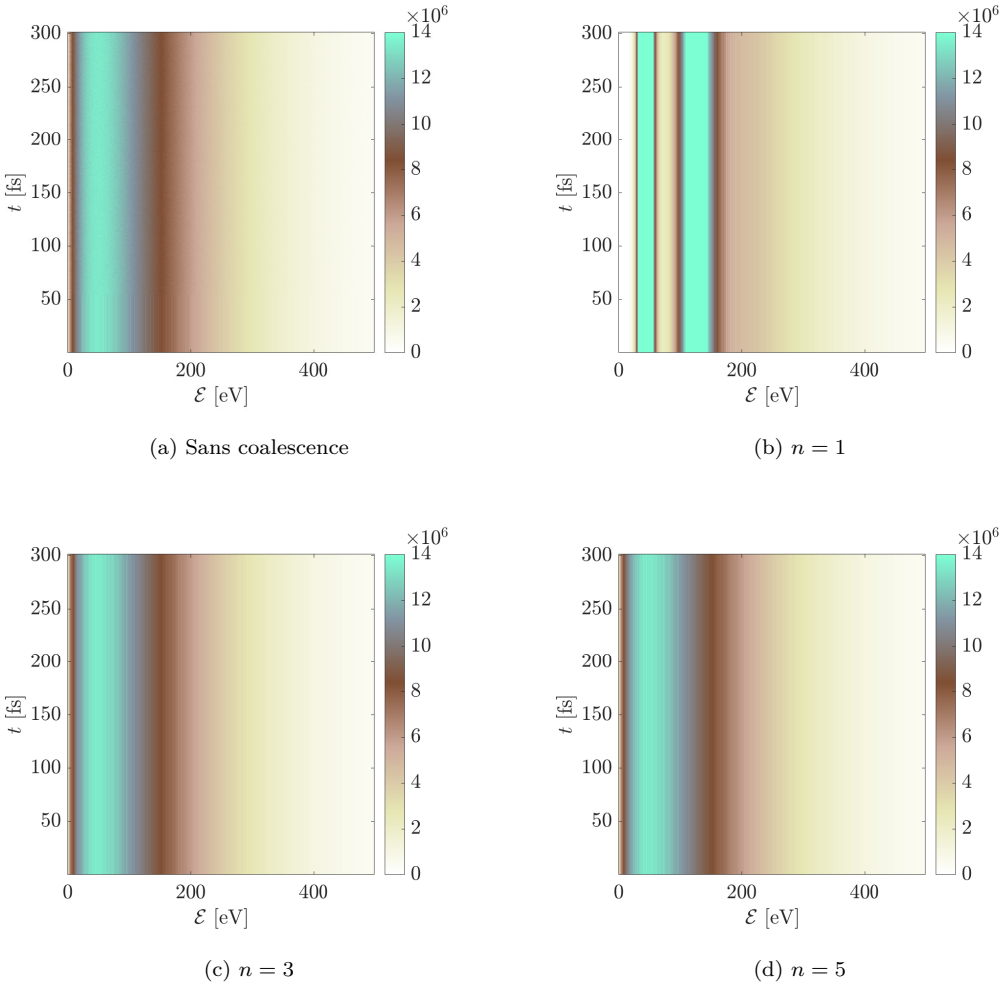
2.5 Conclusion

Nous avons vu dans ce chapitre le principe de fonctionnement général d'un code PIC en présentant ses modules principaux, à savoir le solveur des champs électromagnétiques, le pousseur de particules ainsi que l'algorithme d'Esirkepov, permettant de corriger le courant électrique.

Nous avons également pu illustrer, au travers de l'exemple du code PIC Calder, un moyen de prendre en compte les processus inter-particulaires tels que les collisions coulombiennes via les algorithmes probabilistes de type Monte Carlo, couplés à la méthode d'appariement des macro-particules proposée par [Nanbu & Yonemura, 1998]. Calder se destinant à la description de l'interaction laser-plasma, nous avons également présenté le module implémenté pour modéliser le laser et l'ionisation par effet tunnel.

Enfin, nous avons abordé dans une dernière partie une facette de la problématique d'optimisation des codes PIC en présentant le nouveau module de coalescence des macro-particules ajouté durant cette thèse.

Si la Sec. 2.3.2 nous a permis de dresser le bilan des processus implémentés dans Calder, nous allons, dans les quatre chapitres qui suivent, présenter en détails les nouveaux processus physiques, modélisés et intégrés dans notre code PIC durant ces trois années, à savoir l'abaissement des potentiels d'ionisation, la résolution de l'ionisation collisionnelle sur les sous-couches électroniques, la recombinaison à trois corps, la désexcitation atomique par cascade, la photoionisation, la recombinaison radiative et la diffusion Compton.



(a) Sans coalescence

(b) $n = 1$

(c) $n = 3$

(d) $n = 5$

FIGURE 2.12 – Évolution temporelle de la distribution électronique en énergie d'un plasma électron-ion initialement maxwellien, de température $T_i = T_e = 100$ eV, densité $n_e = n_i = 54.25\ n_c$, une charge ionique $Z^* = 1$ et pour différentes valeur du paramètre de coalescence n. Le temps physique d'intégration (300 fs) correspond à 58000 pas de temps.

Bibliographie

Bethe, H. (1934). *The influence of screening on the creation and stopping of electrons.* Cambridge University Press **30**, no. 4, p. 524–539.

Birdsall, C. K. & Langdon, A. B. (2018). *Plasma Physics via Computer Simulation.* CRC Press.

Boris, J. P. (1970). *The Acceleration Calculation From a Scalar Potential.*

Boris, J. P. & Lee, R. E. (1972). *Non-Physical Self Forces in Electromagnetic Plasma-Simulation Algorithms* .

Clarke, L., Glendinning, I. & Hempel, R. (1994). *The MPI message passing interface standard.* Springer.

Courant, R., Friedrichs, K. & Lewy, H. (1967). *On the partial difference equations of mathematical physics.* IBM Journal of Research and Development **11**, no. 2, p. 215–234.

Elwert, G. (1939). *Verschärfte berechnung von intensität und polarisation im kontinuierlichen Röntgenspektrum1.* Annalen der Physik **426**, no. 2, p. 178–208.

Esirkepov, T. Z. (2001). *Exact charge conservation scheme for particle-in-cell simulation with an arbitrary form-factor.* Computer Physics Communications **135**, no. 2, p. 144–153.

Frankel, N., Hines, K. & Dewar, R. (1979). *Energy loss due to binary collisions in a relativistic plasma.* Physical Review A **20**, no. 5, p. 2120.

Heitler, W. (1954). *The Quantum Theory of Radiation* .

Kim, Y.-K., Santos, J. P. & Parente, F. (2000). *Extension of the binary-encounter-dipole model to relativistic incident electrons.* Physical Review A **62**, no. 5, p. 052710.

Koch, H. W. & Motz, J. (1959). *Bremsstrahlung cross-section formulas and related data.* Reviews of Modern Physics **31**, no. 4, p. 920.

Landau, L. & Lifshitz, E. (1975). *The Classical Theory of Fields.* Institute of Physical Problems, URSS Academy of Sciences.

Lee, Y. T. & More, R. (1984). *An electron conductivity model for dense plasmas.* The Physics of Fluids **27**, no. 5, p. 1273–1286.

Lehe, R., Lifschitz, A., Thaury, C., Malka, V. & Davoine, X. (2013). *Numerical growth of emittance in simulations of laser-wakefield acceleration.* Physical Review Special Topics-Accelerators and Beams **16**, no. 2, p. 021301.

Lobet, M. (2015). *Radiative and quantum electrodynamics effects in extreme intensity laser-matter interaction* .

Lobet, M., d'Humières, E., Grech, M., Ruyer, C., Davoine, X. & Gremillet, L. (2016). *Modeling of radiative and quantum electrodynamics effects in pic simulations of ultra-relativistic laser-plasma interaction.* Journal of Physics : Conference Series **688**, no. 1, p. 012058.

Martinez, B., Lobet, M., Duclous, R., d'Humières, E. & Gremillet, L. (2019). *High-Energy Radiation and Pair Production by Coulomb Processes in Particle-in-Cell Simulations.* Physics of Plasmas **26**, no. 10, p. 103109.

Nanbu, K. & Yonemura, S. (1998). *Weighted particles in Coulomb collision simulations based on the theory of a cumulative scattering angle.* Journal of Computational Physics **145**, no. 2, p. 639–654.

Nuter, R., Gremillet, L., Lefebvre, E., Lévy, A., Ceccotti, T. & Martin, P. (2011). *Field ionization model implemented in particle in cell code and applied to laser-accelerated carbon ions.* Physics of Plasmas **18**, no. 3, p. 033107.

Pérez, F., Gremillet, L., Decoster, A., Drouin, M. & Lefebvre, E. (2012). *Improved modeling of relativistic collisions and collisional ionization in particle-in-cell codes.* Physics of Plasmas **19**, no. 8, p. 083104.

Pukhov, A. (1999). *Three-dimensional electromagnetic relativistic particle-in-cell code VLPL (Virtual Laser Plasma Lab).* Journal of plasma physics **61**, no. 3, p. 425–433.

Schram, P. P. (1991). *Kinetic Theory of Gases and Plasmas*, tome 46. Springer Science & Business Media.

Schwinger, J. (1951). *On gauge invariance and vacuum polarization.* Physical Review **82**, no. 5, p. 664.

Takizuka, T. & Abe, H. (1977). *A binary collision model for plasma simulation with a particle code.* Journal of Computational Physics **25**, no. 3, p. 205–219.

Tskhakaya, D., Matyash, K., Schneider, R. & Taccogna, F. (2007). *The Particle-In-Cell Method.* Contributions to Plasma Physics **47**, no. 8-9, p. 563–594.

Vlasov, A. A. (1968). *The vibrational properties of an electron gas.* Soviet Physics Uspekhi **10**, no. 6, p. 721.

Vranic, M., Grismayer, T., Martins, J. L., Fonseca, R. A. & Silva, L. O. (2015). *Particle merging algorithm for PIC codes.* Computer Physics Communications **191**, p. 65–73.

Yee, K. (1966). *Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media.* IEEE Transactions on Antennas and Propagation **14**, no. 3, p. 302–307.

Yudin, G. L. & Ivanov, M. Y. (2001). *Nonadiabatic tunnel ionization : Looking inside a laser cycle.* Physical Review A **64**, no. 1, p. 013409.

3

Abaissement des potentiels d'ionisation

Dans notre régime physique d'intérêt, où des cibles à densité solide sont utilisées et où les milieux étudiés se caractérisent par des valeurs de températures et de densités élevées, l'hypothèse d'atome (ou d'ion) isolé n'est plus valide. Les énergies des configurations calculées à l'aide du modèle de Carlson [Carlson *et al.*, 1970] doivent donc être a minima corrigées pour tenir compte de certains effets induits par l'environnement plasma. Parmi ceux-ci, on se limitera ici à celui relatif à l'abaissement des potentiels d'ionisation (IPD) résultant de l'interaction des électrons liés avec les électrons du continuum.

Dans ce chapitre, nous commençons dans la Sec. 3.1 par introduire brièvement les principaux modèles développés pour la prise en compte de l'IPD, à savoir le modèle de Debye-Hückel, le modèle de la sphère ionique, pour nous concentrer par la suite sur les modèles de Ecker-Kröll et de Stewart-Pyatt, choisis pour être implémentés dans Calder, en présentant les hypothèses physiques sous-jacentes. La Section 3.2 est dédiée à la présentation de notre algorithme permettant, d'une part, le calcul de la correction des potentiels d'ionisation et, d'autre part, de mettre en œuvre le mécanisme d'ionisation par pression. Enfin, dans la Section 3.3 nous mettons en lumière l'effet de l'IPD sur la charge moyenne ionique à l'équilibre via un solveur de Saha, dont les résultats seront comparés aux prédictions faites par deux codes de cinétique atomique, Flychk et SaphyR.

3.1 Les principaux modèles d'IPD

3.1.1 Modèle de Debye-Hückel

Le plasma étant par définition composé de charges dissociées, il est possible de lui associer un potentiel électrique tel que défini par l'équation de Poisson

$$\Delta\phi(\mathbf{r}) = \frac{\rho(\mathbf{r})}{\varepsilon_0} = -\frac{1}{\varepsilon_0}\sum_{j=1}^{N} q_j n_j(\mathbf{r})\,, \tag{3.1}$$

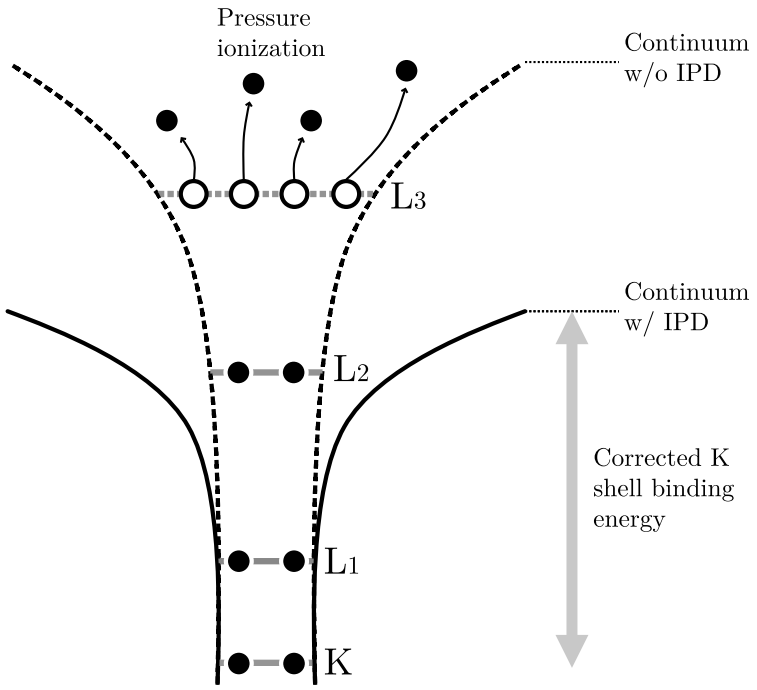


FIGURE 3.1 – Représentation schématique de l'abaissement des potentiels d'ionisation dû aux effets de densité dans le plasma. On voit sur cet exemple que lorsqu'une orbitale atomique voit son énergie passer au dessus du continuum, les électrons de cette orbitale sont éjectés, phénomène connu sous le nom d'"ionisation par pression".

où $\Delta\phi(\mathbf{r})$ est le laplacien du potentiel électrique ϕ défini en $\mathbf{r}$, ε_0 la permittivité électrique du vide, q_j la charge électrique et n_j la densité particulaire de l'espèce j. En faisant l'hypothèse que la distribution des charges est boltzmannienne et que les températures électroniques et ioniques sont égales, on peut exprimer la densité de façon thermodynamique

$$n_j(\mathbf{r}) = n_j^0 \exp\left(-\frac{q_j\phi(\mathbf{r})}{k_B T}\right) , \tag{3.2}$$

avec n_j^0 la densité de l'espèce j non perturbée et T la température du plasma. Pour une température suffisamment élevée, impliquant $k_B T \gg q_j\phi(\mathbf{r})$, on peut procéder au développement limité de l'exponentielle à l'ordre 1

$$n_j(\mathbf{r}) \approx n_j^0 \left(1 - \frac{q_j\phi(\mathbf{r})}{k_B T}\right) , \tag{3.3}$$

ce qui nous permet, en réinjectant l'Eq. (3.3) dans l'Eq. (3.1), d'obtenir l'équation de Debye-Hückel

$$\Delta\phi(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}) \sum_{j=1}^{N} \frac{q_j^2 n_j^0}{\varepsilon_0 k_B T} - \frac{1}{\varepsilon_0} \sum_{i=1}^{N} q_j n_j^0 . \tag{3.4}$$

Le principe d'électro-neutralité inhérent aux plasmas nous permet d'annuler le second terme de droite dans l'Eq. (3.4), qui se retrouve donc simplifiée

$$\Delta\phi(\mathbf{r}) = \frac{\phi(\mathbf{r})}{\lambda_{DH}^2} \quad \text{avec } \lambda_{DH} = \sqrt{\frac{\varepsilon_0 k_B T}{\sum_{i=1}^{N} q_j^2 n_j^0}}\,, \tag{3.5}$$

λ_{DH} étant la longueur de Debye-Hückel, définie en introduction[1]. [1] Chap. 1, Sec. 1.2.

Dans le cas d'un ion isolé et d'un modèle à particules indépendantes, chaque électron lié se trouve sur une orbitale atomique, qui n'est autre qu'un puits de potentiel, associée à une énergie de liaison prédite par les modèles utilisés en physique atomique. Lorsque le plasma étudié est suffisamment dense, les particules voisines chargées peuvent avoir une influence sur le potentiel électrique local et donc sur les énergies de liaison des orbitales, qui s'en trouvent réduites. Considérons un ion de charge totale Z^*, composé d'un noyau de charge Z et $Z - Z^*$ électrons liés. Dans le cas d'un ion isolé, l'énergie potentielle d'un électron lié vaut

$$E_{\text{vide}} = -\frac{Z^* e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0}\,. \tag{3.6}$$

En utilisant les résultats obtenus en Eqs. (3.4) et (3.5), on peut en déduire l'énergie potentielle de cet électron en présence d'un écrantage par des particules chargées environnantes

$$E = -\frac{Z^* e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0} \mathrm{e}^{-r_0/\lambda_{DH}}\,, \tag{3.7}$$

où l'on reconnaît la forme du potentiel de Yukawa [Yukawa, 1935] $V(r) = -g^2 \exp(mr)/r$ (où g et m sont des constantes), et où le signe négatif indique que le potentiel est attracteur. La correction de l'énergie de liaison, que nous appelons ΔI, est définie comme la différence entre ces deux énergies potentielles [Griem, 1964]

$$\Delta I = E - E_{\text{vide}} = \frac{(Z^*+1)e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0}\left(1 - \mathrm{e}^{-r_0/\lambda_{DH}}\right)\,. \tag{3.8}$$

En nous plaçant à $r \ll \lambda_{DH}$, on peut linéariser l'exponentielle au premier ordre pour obtenir finalement la correction en énergie du modèle de Debye-Hückel

$$\Delta I_{\text{DH}} = \frac{(Z^*+1)e^2}{4\pi\varepsilon_0 \lambda_{DH}}. \tag{3.9}$$

Nous noterons que dans les deux équations précédentes, la charge (Z^*+1) est substituée à la charge Z^* pour que la correction des énergies de liaison soit non nulle lorsque l'atome est neutre, c'est-à-dire lorsque $Z^* = 0$. Au regard de cette formule, tous les électrons liés d'un même ion subiront la même correction, quelque soit leur énergie de liaison (ou, autrement dit, quelque soit la sous-couche électronique qu'ils occupent).

Ce modèle n'est valable que dans la limite d'un plasma faiblement couplé ($\Gamma \ll 1$)[2], avec une densité suffisamment faible pour justifier les développements limités. [2] Chap. 1, Sec. 1.2.

3.1.2 Modèle de la sphère ionique

Dans le cas d'un plasma dense, nous pouvons repartir de l'équation de Poisson en faisant l'hypothèse d'un ion central, écranté à une distance r_i par un nuage électronique sphérique et homogène tel que

$$\frac{4\pi r_i^3}{3} = \frac{1}{n_i} = \frac{\langle Z^* \rangle}{n_e} , \tag{3.10}$$

où $r_i = (3/4\pi n_i)^{1/3}$ est appelé rayon de sphère ionique. Dans ces conditions, l'équation de Poisson devient

$$\Delta\phi(\mathbf{r}) = \frac{e}{\varepsilon_0} \left(n_e - Z^* \delta(\mathbf{r}) \right) , \tag{3.11}$$

$Z^*\delta(\mathbf{r})$ représentant la charge ponctuelle ionique. Comme $r > 0$, la solution générale de cette équation est

$$\phi(r) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \left(\frac{Z^* e r^2}{2r_i^3} - \frac{A}{r} + B \right) , \tag{3.12}$$

avec A et B des constantes, fonctions des hypothèses du modèle de la sphère ionique. En l'occurrence, lorsque r tend vers 0, le potentiel tend à être non écranté. De plus, la définition du rayon de sphère ionique veut que lorsque $r = r_i$, la charge ionique soit totalement écrantée par la charge électronique et le potentiel électrique y est donc nul. Il vient alors $A = -Z^* e$ et $B = -3Z^* e/2r_i$. En injectant ces expressions dans l'Eq. (3.12), nous obtenons alors l'expression du potentiel électrique $\phi(r \leq r_i)$

$$\phi(r) = \frac{Z^* e}{4\pi\varepsilon_0 r} \left(\frac{r^3}{2r_i^3} + 1 - \frac{3r}{2r_i} \right) . \tag{3.13}$$

Comme pour le modèle de Debye-Hückel, nous pouvons alors estimer la correction en énergie due à l'IPD pour un degré d'ionisation $(Z^* + 1)$ (et ce toujours dans le but de pouvoir décrire l'IPD pour les atomes neutres)

$$\Delta I_{\mathrm{SI}} = E - E_{\mathrm{vide}} = \frac{3}{2} \frac{(Z^*+1)e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_i} - \frac{1}{2} \frac{(Z^*+1)e^2 r^2}{4\pi\varepsilon_0 r_i^3} \approx \frac{3}{2} \frac{(Z^*+1)e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_i} \quad \text{avec } r \leq r_i . \tag{3.14}$$

Les Eqs. (3.9) et (3.14), de forme relativement proche, s'appliquent dans des limites de basse et haute densité électroniques. Dans la Fig. 3.2, nous avons tracé les corrections prédites par les modèles de Debye-Hückel et de la sphère ionique pour l'exemple de l'Aluminium ionisé une fois, en fonction de la densité électronique du plasma et à une température fixée à 10 eV. Pour ce faire, plusieurs hypothèses ont été faites sur la longueur de Debye donnée en Eq. (3.5). Premièrement, nous considérons que la température ionique est égale à la température électronique. Nous pouvons réexprimer cette longueur telle que

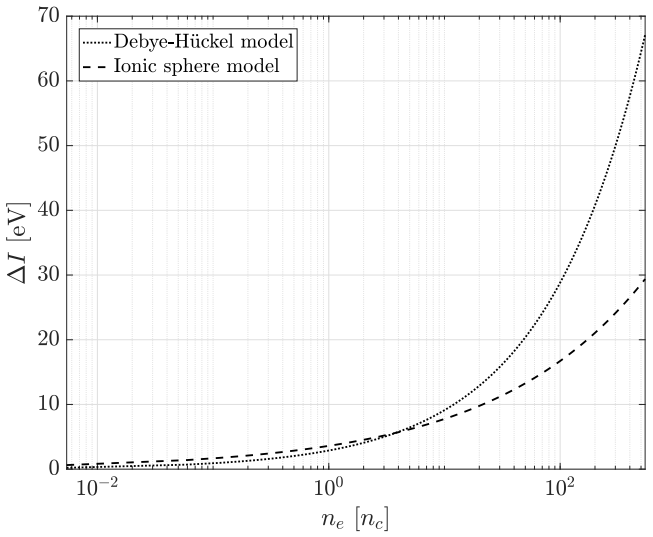


FIGURE 3.2 – Abaissement du potentiel d'ionisation prédit par les modèles de SI (pointillés) et DH (traitillés) pour un plasma d'Al^+ à une température $T = 10$ eV en fonction de la densité électronique. Cette dernière est normalisée par rapport à la densité critique $n_c = 1.11 \times 10^{21}$ cm^{-3}, calculée pour une longueur d'onde laser de référence de 1 μm.

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\varepsilon_0 k_B T_e}{e^2(n_e + n_i\langle Z^{*2}\rangle)}} = \sqrt{\frac{\varepsilon_0 k_B T_e}{e^2(n_e 1 + \overline{Z})}} \quad \text{avec } \overline{Z} = \frac{\langle Z^{*2}\rangle}{\langle Z^{*}\rangle} \simeq \langle Z^{*}\rangle\,. \tag{3.15}$$

Nous supposons que tous les ions partagent localement la même charge, de sorte que le degré d'ionisation $\overline{Z}$ est équivalent à la charge ionique moyenne $\langle Z^*\rangle$. Cette approximation, utilisée par le code de référence FLYCHK [Chung *et al.*, 2005] sera également utilisée dans le modèle plus complet de Stewart-Pyatt, présenté dans la prochaine section. La Fig. 3.2 montre que, à forte densité, le modèle de DH prévoit une plus forte correction que le modèle de la SI et vice versa à faible densité. La valeur élevée de ΔI_{DH}, associée au modèle de DH à forte densité, est cependant sujette à caution car la linéarisation de la densité qui sous-tend le modèle suppose de faibles énergies d'interaction, donc de faibles densités. Si dans cet exemple le traitement du régime de faible densité électronique est sensiblement proche (à l'échelle de la figure) entre les deux modèles, nous voyons que le régime de haute densité n'est plus valable avec les hypothèses de DH, au regard de l'approximation faite en Eq. (3.3).

Bien que ces modèles représentent un premier pas vers la prise en compte des effets de densité sur le traitement de la physique atomique dans les plasmas d'ions multichargés, un vide théorique persiste concernant les régimes de densités intermédiaires. Nous présentons dans les sections suivantes deux modèles d'interpolation, respectivement le modèle d'Ecker-Kröll et le modèle de Stewart-Pyatt, permettant de combler ce vide.

3.1.3 Modèles d'Ecker-Kröll et de Stewart-Pyatt

Historiquement, Ecker et Kröll [Ecker & Kröll, 1963] ont été les premiers à proposer une alternative aux modèles limités de DH et de SI qui a été suivi, quelques années après, par le modèle de Stewart et Pyatt [Stewart & Pyatt Jr, 1966]. Dans ce manuscrit, nous n'explicitons pas le cheminement mathématique amenant aux expressions des corrections des énergies de liaison, disponibles dans leur article respectif, mais nous soulignerons leur différences, engendrées par les différentes hypothèses sous-jacentes.

Le modèle d'Ecker-Kröll (EK) considère deux régimes de densité, selon que la somme des densités ionique et électronique est inférieure ou supérieure à une densité critique

$$\begin{cases} \Delta I_{\mathrm{EK}} = \Delta I_{\mathrm{DH}} & \text{si } n < n_{\mathrm{crit}}\,, \\ \Delta I_{\mathrm{EK}} = \dfrac{(Z^*+1)e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{\mathrm{EK}}} \left(\dfrac{r_{\mathrm{EK}}}{\lambda_D}\right)_{n=n_{\mathrm{crit}}} & \text{si } n \geq n_{\mathrm{crit}}\,, \end{cases} \tag{3.16}$$

avec $n = n_i + n_e$ et

$$\frac{4\pi r_{\mathrm{EK}}^3}{3} = \frac{1}{n_e + n_i}\,, \tag{3.17}$$

et

$$n_{\mathrm{crit}} = \frac{3}{4\pi}\left(\frac{4\pi\varepsilon_0 k_B T}{Z^2 e^2}\right)^3\,, \tag{3.18}$$

avec Z le numéro atomique de l'espèce considérée. Il est usuel de considérer le rapport $r_{\mathrm{EK}}/\lambda_D$ comme étant égal à 1 afin de pouvoir approcher au mieux les données expérimentales [Ciricosta *et al.*, 2012]. Nous ferons également cette approximation pour notre implémentation du modèle d'EK dans Calder.

Concernant le modèle de Stewart-Pyatt (SP), la correction des énergies de liaison est donnée par

$$\Delta I_{\mathrm{SP}} = \frac{3}{2}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Z^*+1}{r_i}\left\{\left[1+\left(\frac{\lambda_D}{r_i}\right)^3\right]^{2/3} - \left(\frac{\lambda_D}{r_i}\right)^2\right\}\,, \tag{3.19}$$

faisant apparaître cette fois le rayon de sphère ionique r_i, défini en Eq. (3.10). On peut montrer que cette expression nous permet d'obtenir les modèles de DH et de SI dans les limites de basse et haute densité respectivement. En effet, lorsque la densité électronique devient suffisamment faible, le terme entre accolade tend vers zéro et on peut alors le remplacer par son développement limité à l'ordre 1, à savoir $2r_i/3\lambda_D$ Il vient au final $\Delta I_{\mathrm{SP}} \approx (Z^*+1)e^2/4\pi\varepsilon_0\lambda_D$, soit la correction prédite par DH. À l'inverse, pour une densité électronique importante, le rapport λ_D/r_i devient négligeable devant 1 et le terme entre accolades tend vers 1 : la correction est alors égale à celle du modèle de la SI.

Plusieurs différences notables peuvent d'ores et déjà être notées dans les Eqs. (3.16) et (3.19). Premièrement, le rayon caractéristique, r_{EK}, prend aussi bien en considération la densité électronique que la densité ionique et il vient, dans l'hypothèse où $\langle Z^* \rangle = Z^*$ localement, $\Delta I_{\mathrm{EK}} \propto Z^* n_e^{1/3}$. Le modèle de SP, lui, donne $\Delta I_{\mathrm{SP}} \propto Z^{*2/3} n_e^{1/3}$. On a donc $\Delta I_{\mathrm{EK}}/\Delta I_{\mathrm{SP}} \propto 2Z^{*1/3}/3$, induisant que la correction estimée par le modèle d'EK sera presque toujours supérieure à la correction proposée par le modèle de SP. Dans la Sec. 3.3.3, nous tenterons de mettre en lumière l'effet de ces différentes dépendances en Z^* sur l'ionisation moyenne.

Nous avons donc d'un côté le modèle d'EK, se concentrant principalement sur la description des systèmes à forte densité et de l'autre le modèle de SP permettant une jonction des deux modèles limites de DH et de la SI. Ces deux modèles sont utilisés abondamment encore aujourd'hui et la communauté n'a pas tranché de façon claire sur le bien fondé de l'un ou l'autre. Des campagnes expérimentales sur l'installation XFEL du LCLS (SLAC) [Ciricosta *et al.*, 2012] et sur le laser Orion [Hoarty *et al.*, 2013] (dont nous reparlerons ultérieurement

dans ce chapitre) ont montré l'existence de régimes extrêmes présentant des résultats déviant de façon significative avec ceux prédits par les modèles de SP ou d'EK. En l'occurrence, si les résultats de l'expérience sur le LCLS ont montré un meilleur accord avec le modèle d'EK, les résultats de l'expérience effectuée sur le laser Orion semblent au contraire aller en faveur du modèle de SP. Pour pallier ce problème, d'autres modèles (que nous mentionnerons dans les perspectives de ces travaux[1]) ont été développés mais elles sont plus ardues à implémenter dans un code PIC.

[1] Chap. 9.

Afin de pouvoir mesurer l'impact respectif de ces deux modèles, nous avons fait le choix de les implémenter tous les deux dans Calder. Néanmoins, le modèle de SP est celui que avons privilégié afin de faciliter les comparaisons avec des codes l'ayant également adopté, comme Flychk.

3.2 Implémentation numérique de l'IPD

Dans cette section, nous détaillons l'implémentation des modèles d'Ecker-Kröll et de Stewart-Pyatt dans le code PIC Calder. Celle-ci se fait en deux temps : un premier algorithme ayant pour but de calculer la correction ΔI, qui sera ensuite utilisée dans d'autres processus de physique atomique faisant intervenir les énergies de liaison comme l'ionisation collisionnelle ou la recombinaison à trois corps[1] et un second algorithme permettant d'effectuer l'ionisation par pression proprement dite.

[1] Chap. 4.

3.2.1 Correction des énergies de liaison

Comme évoqué précédemment, le principe général de la méthode consiste à corriger les énergies de liaison via les formules proposées par les modèles d'EK ou de SP. Nous avons vu en Sec. 3.1.3 que ces corrections dépendent de grandeurs physiques locales, en particulier des densités ionique et électronique, de la charge ionique moyenne et de la température électronique. Il est donc naturel d'appliquer l'IPD dans chaque cellule du domaine de simulation et à chaque pas de temps PIC. En effet, des tests ont montré que le coût numérique de l'IPD reste modéré, ce qui nous permet de l'appeler fréquemment sans impacter le temps de simulation outre mesure.

La densité de l'espèce α, n_α, est égale à la somme des poids statistiques, W_α, des macro-particules présentes dans la maille divisée par le volume de celle ci, V, soit

$$n_\alpha = \frac{1}{V}\sum_{i=1}^{N_\alpha} W_\alpha^i \,, \tag{3.20}$$

Pour calculer la charge ionique moyenne, nous passons en revue tous les macro-ions de la maille ce qui nous permet de déterminer

$$\langle Z^* \rangle = \frac{\sum_{j=1}^{N_i} W_i^j Z^{*j}}{\sum_{j=1}^{N_i} W_i^j} \,, \tag{3.21}$$

avec $\langle Z^* \rangle$ la charge ionique moyenne dans la maille considérée, N_i le nombre de macro-ions, W_i^j le poids statistique de l'ion j et Z^{*j} sa charge. Cette grandeur pourrait être approximée plus rapidement en considérant l'hypothèse de quasi-neutralité du plasma, entraînant $n_e =$

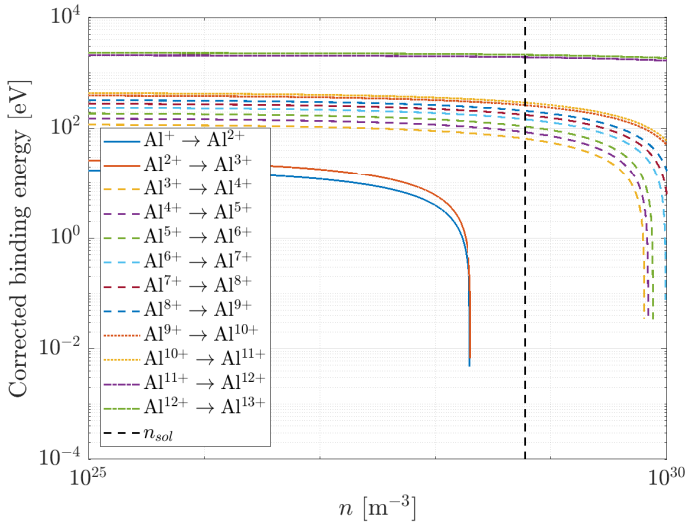


FIGURE 3.3 – Évolution des énergies d'ionisation successives corrigées par le modèle de SP en fonction de la densité ionique du plasma avec $T_e = 10$ eV. La ligne noire pointillée représente la valeur de la densité solide de l'Aluminium pur à $\rho = 2.7$ g/cm^3 ($n_i \approx 6.02 \times 10^{28}$ m^{-3}).

$\langle Z^* \rangle n_i$. Ceci n'est pas toujours le cas partout dans la cible, en particulier au niveau des gaines [Sheridan & Goree, 1991], où règne un fort champs électrique dû à la séparation des charges ioniques et électroniques. C'est pourquoi nous avons préféré opter pour la première méthode.

Concernant la température d'une espèce α, nous partons de sa définition donnée par la théorie cinétique des gaz où elle est proportionnelle au flux d'impulsion des particules de l'espèce telle que

$$k_B T_\alpha = \frac{1}{3} \int \mathrm{d}^3\mathbf{p} \frac{p^2}{m\gamma} f(\mathbf{p}) = \frac{mc^2}{3} \int \mathrm{d}^3\mathbf{p} \frac{\gamma^2 - 1}{\gamma} f(\mathbf{p}) \,, \tag{3.22}$$

avec p l'impulsion de la particule, γ son facteur de Lorentz, m sa masse et $f(\mathbf{p})$ la distribution en impulsion des particules. Elle se traduit dans le formalisme de CALDER par

$$T_\alpha = \frac{\sum_{j=1}^{N_\alpha} W_\alpha^i \left(\gamma_\alpha^j - \frac{1}{\gamma_\alpha^j} \right)}{3 \sum_{j=1}^{N_\alpha} W_\alpha^j} \,, \tag{3.23}$$

Cette définition peut-être sujette à débat dans notre cas où le plasma peut être fortement non-maxwellien, or nous rappelons que les modèles d'IPD d'EK et de SP supposent des distributions à l'équilibre thermodynamique. Nous nous justifions néanmoins en précisant que l'IPD varie lentement avec la température mais beaucoup plus rapidement avec la densité.

3.2.2 Ionisation par pression

Lorsque la correction de l'IPD, ΔI, se trouve être plus grande ou égale à l'énergie de liaison d'une sous-couche électronique (avant la correction), nous considérons que cette sous-couche ne peut plus posséder d'électrons liés et, si elle en possède, le code doit procéder à leur libération dans le continuum, ce que l'on appelle l'ionisation par pression. Nous avons représenté en Fig. 3.3 les énergies d'ionisation de l'Aluminium, corrigées par le modèle de SP en fonction de la densité ionique. On remarque qu'à densité solide, représenté par le trait noir en pointillés, les trois premiers degrés de charge de l'Aluminium, Al, Al$^+$ et Al^{2+}, ne

peuvent exister.

Pour décrire brièvement la façon de procéder du code, prenons l'exemple d'un atome possédant un électron sur sa sous-couche électronique d'énergie de liaison B, en faisant l'hypothèse que la densité devient telle que $B - \Delta I < 0$. Le code va alors produire un électron libre d'énergie $\Delta I - B$ et de direction aléatoire dans le référentiel de l'ion. Le poids statistique de cet électron est bien sûr le même que celui de l'ion afin de contrebalancer le gain en charge de l'ion, passée de Z^* à $Z^* + 1$.

Par commodité, Calder ionise les électrons successivement en commençant par un électron se trouvant dans l'orbitale atomique la plus externe et les énergies de liaison associées à chacune de ces ionisations potentielles sont les énergies d'ionisation successives tabulées par le NIST (nous donnons en Tab. 3.1 l'exemple des énergies d'ionisation successives de l'Aluminium [Kaufman & Martin, 1991; Chang, 1990; Martin & Zalubas, 1979; Isberg & Litzén, 1986; Artru & Kaufman, 1975; Brillet & Artru, 1975; Biémont *et al.*, 1999; Sapirstein *et al.*, 2011; Artemyev *et al.*, 2005; Johnson & Soff, 1985]).

Ionisation	Énergie [eV]
1er	5.985768
2^{e}	18.82855
3^{e}	28.44765
4^{e}	119.992
5^{e}	153.825
6^{e}	190.49
7^{e}	241.76
8^{e}	284.66
9^{e}	330.13
10^{e}	398.75
11^{e}	442.00
12^{e}	2085.98
13^{e}	2304.1410

Table 3.1 – Énergies d'ionisation successives de l'Aluminium issues de [Kaufman & Martin, 1991; Chang, 1990; Martin & Zalubas, 1979; Isberg & Litzén, 1986; Artru & Kaufman, 1975; Brillet & Artru, 1975; Biémont *et al.*, 1999; Sapirstein *et al.*, 2011; Artemyev *et al.*, 2005; Johnson & Soff, 1985])

3.3 Tests de validation en régime stationnaire

3.3.1 Développement d'un solveur de Saha incluant l'IPD

Un moyen simple de tester l'implémentation de notre module d'IPD dans Calder est d'en comparer les résultats avec le modèle théorique éprouvé de Saha [Saha, 1920, 1921], en y incluant les modèles de SP et d'EK. Nous avons pour cela développé un solveur itératif permettant de prédire, en fonction de la température électronique et de la densité ionique, la répartition des états de charge ionique pour un élément donné. Dans cette section, nous décrivons brièvement son mode de fonctionnement et présentons les différents tests qu'il nous a permis d'effectuer.

Le modèle stationnaire de Saha repose sur le système d'équations

$$\frac{n_{i+1} n_e}{n_i} = \frac{2}{\Lambda^3} \frac{g_{i+1}}{g_i} \exp\left(-\frac{B_i}{k_B T}\right) , \tag{3.24}$$

où n_{i+1} et n_i sont les densités des états de charge respectifs $i+1$ et i, n_e est la densité électronique, g_i la dégénérescence de l'état, $\Lambda = \sqrt{h^2/2\pi m_e k_B T}$ la longueur d'onde thermique de de Broglie, B_i le potentiel d'ionisation et T la température du plasma. Cette équation relie deux à deux les fractions ioniques d'un élément donné où chaque état de charge est supposé dans son état fondamental. Elle ne couple que des états électroniques liés ou libres et la température considérée correspond donc à la température électronique.

L'idée simple de ce solveur repose sur l'égalité décrite en Eq. (3.24), qui doit être vraie pour tous les états ioniques de l'atome considéré (modulo une certaine précision ε). Pour ce faire, il suffit d'appliquer de façon itérative une correction sur les valeurs de densité des états ioniques. Par commodité, nous appelons le terme de gauche LHS[1] et le terme de droite RHS. Nous distinguons deux cas de figure : soit LHS < RHS et dans ce cas il faut procéder à un transfert de l'état i vers l'état $i+1$, soit RHS < LHS et il faudra donc faire l'inverse. Le transfert d'un état à un autre se fait proportionnellement à un facteur, lui même dépendant du rapport entre LHS et RHS. Ainsi, dans le cas où LHS < RHS, on aura

[1] Pour *Left Hand Side.*

$$n_{i+1} = n_{i+1} + (1-\alpha)n_i \,, \tag{3.25}$$

$$n_i = \alpha n_i \,, \tag{3.26}$$

avec $\alpha = \xi^{1-\mathrm{LHS/RHS}}$ et où ξ est un paramètre arbitraire compris entre 0 et 1. Quelques tests nous ont permis de déterminer que $\xi = 0.8$ était une valeur efficace pour obtenir une convergence rapide. Dans le cas inverse où $RHS < LHS$, il vient par analogie

$$n_i = n_i + (1-\beta)n_{i+1} \,, \tag{3.27}$$

$$n_{i+1} = \beta n_{i+1} \,, \tag{3.28}$$

avec $\beta = \xi^{1-\mathrm{RHS/LHS}}$. Lorsque l'ensemble des α_i et/ou β_i répondent au critère de convergence

$$1-\alpha < \varepsilon \quad \text{ou} \quad 1-\beta < \varepsilon \,, \tag{3.29}$$

avec $\varepsilon \ll 1$ (en pratique, $\varepsilon = 10^{-5}$), la boucle itérative est arrêtée. A partir de ce code basique, inclure l'IPD dans ce modèle est trivial : il s'agit de procéder à une correction de l'énergie de liaison dans RHS telle que

$$\frac{n_{i+1}n_e}{n_i} = \frac{2}{\Lambda^3}\frac{g_{i+1}}{g_i}\exp\left(-\frac{B_i - \Delta I}{k_B T}\right) \,, \tag{3.30}$$

où ΔI est la correction en énergie prédite par les modèles de SP ou d'EK et explicitée dans les Eqs. (3.16) et (3.19).

Remarque 3.3.1 Comme cette correction dépend de la densité électronique, il est nécessaire de l'actualiser à chaque itération de la boucle de convergence en prenant soin d'utiliser la nouvelle valeur de $n_e = \sum Z_i^* n_i$.

Nous avons représenté sur la Fig. 3.4 la distribution de charges ainsi obtenue dans le cas d'un plasma d'Aluminium de densité solide ($n_i \approx 6.02 \times 10^{28}$ m^{-3} pour $\rho = 2.7$ g/cm^3) et de

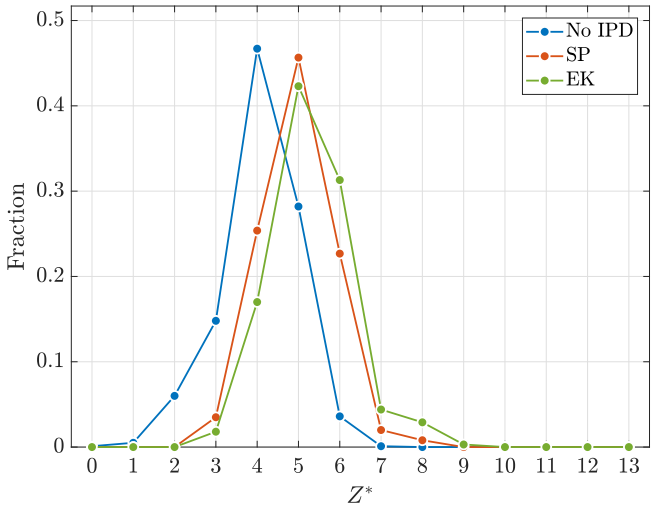


FIGURE 3.4 – Répartition des états de charge de l'Aluminium dans un plasma de densité $\rho = 2.7$ g/cm^3 (solide) et de température $T_e = 50$ eV avec l'IPD désactivée (courbe bleue) et activée avec le modèle de SP (courbe orange) et d'EK (courbe verte) présentant respectivement des degré d'ionisation moyens $\langle Z^* \rangle$ de 4.07, 4.97 et 5.29. L'IPD conduit au dépeuplement des trois premiers états de charge car les énergies de liaisons des sous-couches électroniques associées sont inférieures aux corrections ΔI_{SP} et ΔI_{EK}. Les courbes sont obtenues via le solveur de Saha.

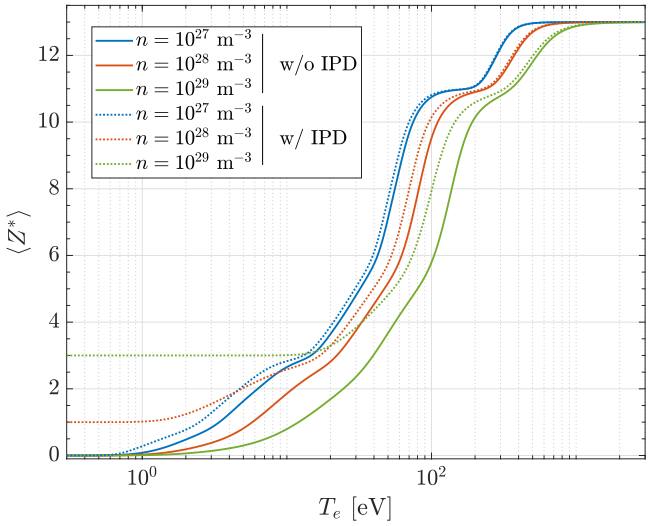


FIGURE 3.5 – Évolution du degré de charge moyen d'un plasma d'Aluminium pour trois densités ioniques différentes : $n_i = 10^{27}$ m^{-3} (bleu), $n_i = 10^{28}$ m^{-3} (orange) et $n_i = 10^{29}$ m^{-3} (vert), avec IPD-SP (traits pleins) et sans IPD (courbes pointillés). Les courbes ont été obtenues via le solveur de Saha.

température $T_e = 50$ eV. Sont comparés les états de charge en l'absence d'IPD (bleu) ou en tenant compte des modèles de SP (orange) et d'EK (vert). L'IPD abaissant l'énergie de liaison des électrons liés, l'ionisation s'en trouve favorisée, expliquant le décalage de la distribution vers les hauts degrés de charge. On note également que l'IPD dépeuple entièrement les niveaux dont les énergies sont inférieures à la correction des modèles de SP et d'EK ce qui est ici le cas pour les trois premier niveaux de l'Aluminium.

Sur la Fig. 3.5 sont représentées les évolutions de la charge ionique moyenne pour l'Aluminium en fonction de la température électronique (à l'état stationnaire) pour trois densités différentes (10^{27} m^{-3} en bleu, 10^{28} m^{-3} en orange et 10^{29} m^{-3} en vert) avec IPD en utilisant le modèle de SP (pointillés) et sans IPD (traits pleins). La première chose que nous remarquons est la présence de plateaux pour des valeurs de $\langle Z^* \rangle$ proches de 3 et 11, soit lorsque les sous-couches KL et K sont complètes respectivement. Pour une température donnée, le degré d'ionisation moyen décroît avec la densité du système (par exemple, pour $T_e = 100$ eV, $\langle Z^* \rangle$ vaut respectivement 11, 9.6 et 6). En régime stationnaire, la stabilité de la charge ionique moyenne est le fruit de l'équilibration des processus atomiques tels que l'ionisation collisionnelle ou la recombinaison à trois corps. Ces processus dépendent eux mêmes de probabilités d'interaction quantifiées par leur section efficace, elle aussi dépendante de la température et

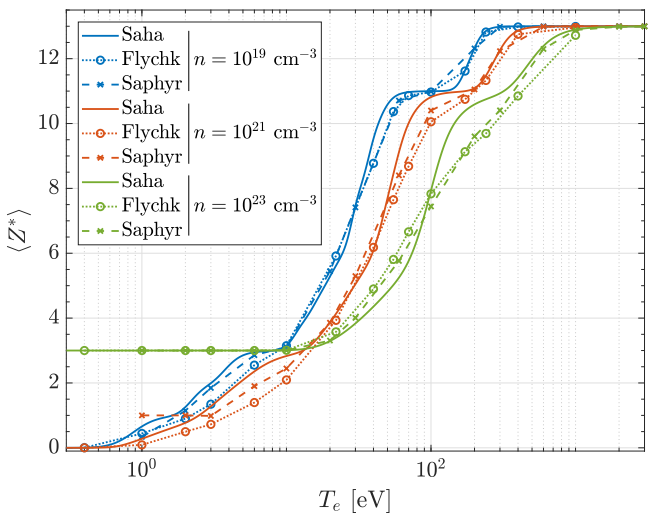


FIGURE 3.6 – Comparaison des évolutions de la charge ionique moyenne $\langle Z^* \rangle$ en fonction de la température électronique T_e à l'équilibre, pour trois valeurs de densité : 10^{19} cm^{-3} (bleu), 10^{21} cm^{-3} (orange) et 10^{23} cm^{-3} (vert). Les résultats obtenus par le solveur de Saha sont représentés par les traits pleins, ceux de FLYCHK sont représentés par les pointillés avec ronds et ceux de SAPHYR par des pointillés avec croix.

de la densité du milieu. Or, le bilan détaillé entre CI et TBR, donné dans le chapitre suivant, donne la relation entre les taux de ces deux processus $\kappa^{\mathrm{TBR}} \propto n_e \kappa^{\mathrm{CI}}$ en régime non relativiste (ce qui est le cas dans notre exemple où les températures mises en jeu sont très inférieures à $m_e c^2$). Le taux de TBR augmentant ainsi plus rapidement avec la densité que le taux de CI (et il paraît en effet logique que la probabilité d'un processus à trois corps augmente plus rapidement avec la densité que la probabilité d'un processus à deux corps), l'équilibre se décale par conséquent vers de plus petites valeurs de $\langle Z^* \rangle$. Concernant les cas intégrant l'IPD, la première différence majeure est qu'il peut exister, selon la densité du plasma, une valeur minimale de Z^* comme c'est le cas ici avec un Z^* minimal de 1 pour $n_i = 10^{28}$ m^{-3} et de 3 pour $n_i = 10^{29}$ m^{-3}. En effet, et comme nous l'avons vu précédemment, l'énergie de liaison dans l'hypothèse d'un atome isolé (sans IPD) peut être inférieure à la correction apportée par l'IPD et tous les électrons de la couche électronique considérée sont alors émis dans le continuum. L'ionisation par pression est par conséquent à prendre en compte lors de l'initialisation de nos simulations. Pour les trois valeurs de densité ionique considérées, l'IPD tend à augmenter la charge ionique moyenne et les écarts présentés sont d'autant plus importants que la densité est forte (en atteignant par exemple un écart de $\langle Z^* \rangle$ égal à 3 pour $n_i = 10^{29}$ m^{-3}) puisque ΔI_{SP} est fonction de la densité par l'intermédiaire du rayon de sphère ionique, comme exprimé en Eq. (3.19). Cet écart s'amenuise à mesure que la température augmente, ce que l'on peut expliquer par le fait que plus un plasma est chaud, et donc ionisé, plus les énergies nécessaires pour continuer à ioniser deviennent elles aussi élevées (de l'ordre de 2300 eV pour ioniser un atome isolé d'Al^{12+}) et on comprend donc qu'une correction de l'ordre de quelques dizaines d'eV n'influe que peu sur l'ionisation des couches les plus profondes. Il s'ensuit que l'IPD joue un rôle mineur dans les énergies des électrons Auger issus d'une transition KLL, qui nous intéresseront particulièrement dans la Sec. 8.2.

3.3.2 Comparaison avec les codes de cinétique atomique FLYCHK et SAPHyR

Le modèle de Saha décrit un plasma à l'équilibre thermodynamique. Pour une validation plus complète des modèles d'IPD implémenté dans le code PIC en régime instationnaire, nous avons employé les codes FLYCHK et SAPHyR.

FLYCHK [Chung *et al.*, 2005] est un code de cinétique atomique (0D), faisant référence dans la communauté scientifique. Il est basé sur la résolution des équations de taux pour

déterminer la distributions des états de charge en intégrant une large variété de processus collisionnels et radiatifs. Ces distributions peuvent être déterminées à l'état stationnaire ou instationnaire ("*time-dependent*") ainsi que pour des distributions en énergie électronique maxwelliennes ou non-maxwelliennes. FLYCHK inclut :

- un modèle radiatif comprenant la photo-excitation par absorption [Scofield, 1989], la désexcitation atomique, spontanée et stimulée (via les relations d'Einstein [Einstein, 1916]), la photo-ionisation [Kramers, 1923] et la recombinaison radiative (via le bilan détaillé, présenté dans le prochain chapitre) ;
- un modèle collisionnel comprenant l'excitation et la désexcitation collisionnelle [Van Regemorter, 1962], l'ionisation collisionnelle [Lotz, 1970], la recombinaison à trois corps (via le bilan détaillé) ;
- un modèle d'auto-ionisation [Sobelman *et al.*, 1995] ;
- un modèle d'IPD [Stewart & Pyatt Jr, 1966] ;
- un modèle spectral (FLYSPEC), permettant de calculer les émissivités et les opacités du plasma.

SAPHYR, développé au CEA/DAM, est également un code de cinétique atomique, possédant des fonctionnalités très proches de celles de FLYCHK. Il présente pour nous l'avantage d'intégrer, pour l'ionisation collisionnelle, un modèle similaire au code CALDER, avec une section efficace issue de [Kim *et al.*, 2000], et de nous permettre de désactiver les taux des processus que ne nous sommes pas en mesure de décrire.

Dans la Fig. 3.6, nous avons représenté l'évolution de la charge ionique moyenne en fonction de la température du plasma d'Aluminium (plasma considéré à l'équilibre), calculée avec trois codes différents : le solveur de Saha incluant l'IPD (traits pleins), le code FLYCHK (pointillés) et le code SAPHYR (tirets). La première chose que l'on remarque est que les trois modèles donnent des résultats assez proches même si les plateaux prédits par le modèle de Saha sont moins prononcés pour les courbes issues de FLYCHK et SAPHYR. Nous pouvons raisonnablement faire l'hypothèse que cette évolution plus lisse de la charge moyenne est due à la prise en compte des états excités dans FLYCHK et SAPHYR, ce qui n'est pas le cas du solveur de Saha, conçu pour ne considérer que les états fondamentaux, à l'instar de ce qui est fait dans le code PIC CALDER. Concernant la charge ionique initiale, on observe une différence pour SAPHYR à $n_i = 10^{21}$ cm^{-3}, où l'évolution démarre avec $\langle Z^* \rangle = 1$ lorsque Saha et FLYCHK prédisent $\langle Z^* \rangle = 0$.

3.3.3 Quelques éléments de comparaison entre les modèles de Stewart-Pyatt et d'Ecker-Kröll

Nous tentons dans cette section de mettre en évidence les différences entre les modèles de SP et d'EK pour notre élément de référence, l'Aluminium. Les différentes dépendances en Z^* nous permettent d'ores et déjà d'imaginer que l'écart entre les modèles sera d'autant plus important que $\langle Z^* \rangle$ sera grand et donc que T_e sera élevée. Cependant, $\langle Z^* \rangle$ est bien sûr limitée au numéro atomique de l'espèce et on devine qu'à température suffisamment forte (de quelques centaines d'eV à quelques keV), la différence entre SP et EK devient infime car ces deux modèles tendent vers le modèle de DH pour des plasmas fortement cinétiques. C'est précisément ce que l'on observe sur la Fig. 3.7 où nous traçons les variations de l'écart absolu entre les degrés de charge prédits par les modèles de SP ou d'EK, via le solveur de Saha, dans un plasma d'Aluminium et ce pour différentes densités ioniques, n_{solid}, $2n_{\text{solid}}$ et $n_{\text{solid}}/2$ où on rappelle que $n_{\text{solid}} = 6.02 \times 10^{22}$ cm^{-3}.

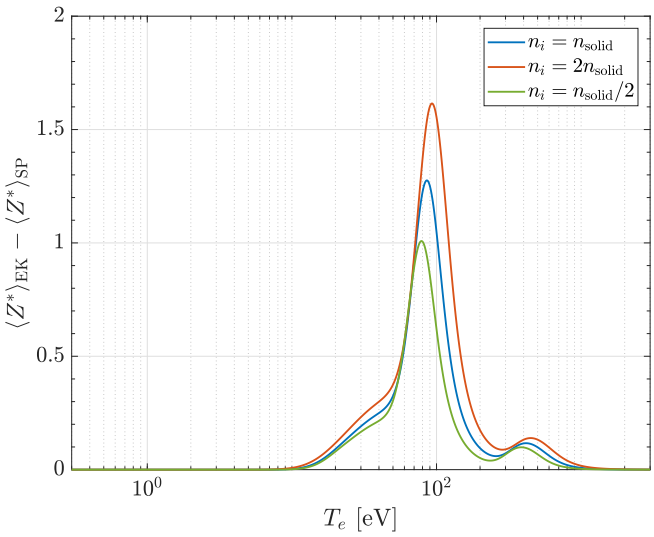


FIGURE 3.7 – Évolutions de la différence des charges ioniques moyennes pour l'Aluminium entre les modèles d'EK et de SP en fonction de la température du plasma et pour différentes densités : n_{solid} (bleu), $2n_{\text{solid}}$ (orange) et $n_{\text{solid}}/2$ (vert) avec $n_{\text{solid}} = 6.02 \times 10^{22}$ cm^{-3}, calculées grâce au solveur de Saha intégrant l'IPD (modèle de SP).

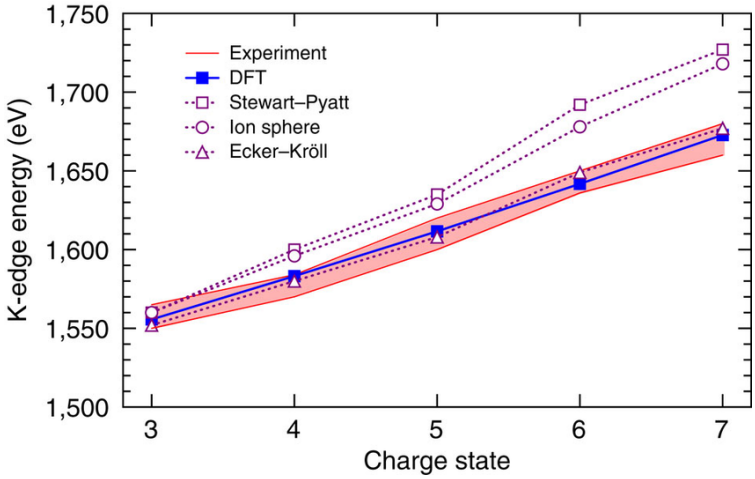


FIGURE 3.8 – Figure tirée de [Vinko *et al.*, 2014]. Comparaison de l'évolution du potentiel d'ionisation de la sous-couche électronique K dans l'Aluminium en fonction de son degré de charge après irradiation par un faisceau XFEL (LCLS) avec des prédictions théoriques comprenant les modèles de SP et d'EK.

En premier lieu, on remarque que les courbes sont toujours positives, traduisant le fait que la charge ionique moyenne prédite par le modèle d'EK est toujours supérieure à celle prédite par le modèle de SP, faisant écho au fait que $\Delta I_{\text{EK}}/\Delta I_{\text{SP}} \propto 2Z^{*1/3}/3$. Pour des températures suffisamment faibles ($\leq$ 10 eV), l'écart est quasiment nul du fait que la charge moyenne est, dans ces trois cas, limitée à 3 en raison de l'ionisation par pression. Nous observons en revanche la présence d'un pic d'écart aux alentours de $T_e = 100$ eV. La différence en amplitude entre ces trois pics s'explique par le fait que les deux modèles sont proportionnels à $n_e^{1/3}$ et il en sera donc de même pour leur différence. Nous remarquons un décalage des pics vers les fortes températures à mesure que la densité augmente, faisant écho au comportement observé en Fig. 3.5 où une augmentation de densité ionique entraîne un décalage vers les $\langle Z^* \rangle$ petits. Il faut donc davantage d'énergie pour atteindre le plateau observé pour Al^{11+}. Globalement, nous noterons que ces différences restent modestes au regard des rapports entre les valeurs de densités ioniques utilisées.

Ces modèles présentant des différences notables, la question de l'utilisation de l'un ou de l'autre se pose naturellement. Pour y répondre, le mieux reste d'apprécier leur faculté à reproduire des résultats expérimentaux : une première expérience [Vinko *et al.*, 2012] marquante sur ce sujet a été menée sur l'installation XFEL du LCLS, où un échantillon d'Al a été irradié par un faisceau X d'intensité proche de 10^{17} W/cm^2 et une énergie photonique aux

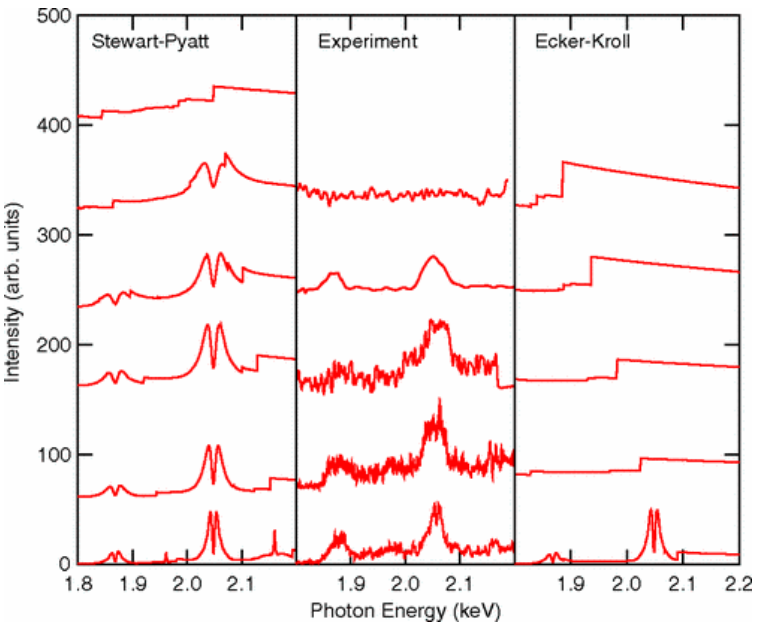


FIGURE 3.9 – Figure tirée de [Hoarty *et al.*, 2013]. Comparaison des spectres d'émission expérimentaux des raies des niveaux $n = 3$ pour différentes densités (de bas en haut : 1.2, 2.5, 4.0, 5.5 et 9.0 g/cm^{-3}) et températures électroniques (de bas en haut : 550, 650, 700, 550, 700 eV) d'un plasma d'Al^{11+} et Al^{12+} après interaction avec un laser d'ultra-haute intensité (Orion) avec des prédictions théoriques comprenant les modèles de SP et d'EK.

alentours de 1700 eV, soit la gamme d'énergie pour laquelle la section efficace de photoionisation en couche K est maximale (dans la Sec. 8.2, nous exposons plus en détails le principe de fonctionnement des XFELs et les enjeux physiques sous-jacents) afin d'extraire des mesures spectroscopiques, en particulier des émissions K_α afin d'apprécier les variations du potentiel d'ionisation de la couche K en fonction du degré de charge de l'Aluminium, ce qui est représenté en Fig. 3.8. Ces résultats sont comparés avec les prédictions des modèles de SP et d'EK, ainsi qu'avec un modèle quantique, noté "DTF" (pour *Density Functional Theory*) [Perdew & Yue, 1986; Sousa *et al.*, 2007], permettant l'étude de la structure électronique de façon plus précise et donc de prendre en compte l'effet de l'IPD de façon auto-consistante, sans nécessité de corrections extérieures. Nous y voyons clairement que le modèle d'EK (dans l'hypothèse où l'on impose $C = 1$) permet ici de fournir des prédictions bien plus proches des résultats expérimentaux que ceux issus du modèle de SP, relativement proches de celles données par le modèle de sphère ionique. L'écart s'amplifie à mesure que la charge ionique augmente ce qui laisse penser que la dépendance du modèle d'EK en Z^* telle que présentée en Sec. 3.1.3 serait plus fiable que celle en $Z^{*2/3}$ de SP.

Cette analyse a été quasi-simultanément infirmée par une expérience réalisée sur l'installation laser Orion [Hoarty *et al.*, 2013] dont est issue la Fig. 3.9. Dans cette expérience, un échantillon d'Aluminium, à différentes densités (de bas en haut : 1.2, 2.5, 4.0, 5.5 et 9.0 g/cm^{-3}) et températures électroniques (de bas en haut : 550, 650, 700, 550, 700 eV), est irradié par un laser dont l'intensité est de l'ordre de 10^{19} W/cm^2 et d'impulsion courte, de l'ordre de quelques centaines de femtosecondes. Par différents processus physiques que nous discutons en détail dans la Sec. 8.1, la cible est chauffée et des photons sont émis suite à la désexcitation des ions. La Fig. 3.9 montre les spectres d'émission présentant les raies des niveaux $n = 3$ pour l'Al^{11+} et l'Al^{12+}, et ce pour différents cas de densités et températures (au centre) ainsi que les prédictions des modèles de SP (à gauche) et d'EK (à droite). Le modèle de SP semble ici le plus à même de pouvoir s'approcher des spectres d'émission de la couche K obtenus expérimentalement, en comparaison avec le modèle d'EK, qui semble ici beaucoup plus approximatif.

Ces deux expériences ont eu le mérite de mettre en évidence le fait que la fiabilité des modèles d'EK et de SP dépendait fortement du système physique et des grandeurs physiques

étudiées (en l'occurrence des mesures directes des potentiels d'ionisation de la couche K et des spectres d'émission de l'Aluminium). Le débat entre ces deux modèles ne se réduit cependant pas à ces deux expériences : plus récemment, une expérience similaire menée sur l'installation XFEL du LCLS [Ciricosta *et al.*, 2016] est venue conforter les résultats observée dans [Vinko *et al.*, 2014], à savoir un meilleur accord entre les résultats expérimentaux et les prédictions du modèle d'EK pour les hauts degrés de charge dans des plasmas solides d'Aluminium et de Magnésium. [Crowley, 2014] propose une interprétation de ces résultats, qui seraient principalement dus au fait que le modèle de SP ne décrit en fait que la contribution statique de l'IPD. Il propose dans ce même article un modèle, le modèle TIPD (pour *Thermodynamic Ionization Potential Depression*) permettant de pallier la description lacunaire du modèle de SP.

3.4 Conclusion

Nous avons passé en revue quelques modèles simples de l'effet de l'écrantage du potentiel ionique sur les énergies de liaison atomiques. Stewart-Pyatt et celui d'Ecker-Kröll font encore partie aujourd'hui des modèles les plus couramment employés pour décrire ce phénomène. Ils permettent dans de nombreux cas de reproduire assez fidèlement les résultats expérimentaux attendus, mais nous avons également vu qu'il existait certains systèmes physiques où les deux modèles n'étaient pas en mesure de décrire convenablement les variations du potentiels d'ionisation de la couche K ou la reproduction des spectres d'émissions dans l'Aluminium, par exemple. Nous avons décidé d'implémenter ces deux modèles dans Calder.

Bibliographie

Artemyev, A., Shabaev, V., Yerokhin, V., Plunien, G. & Soff, G. (2005). *QED calculation of the $n = 1$ and $n = 2$ energy levels in He-like ions.* Physical Review A **71**, no. 6, p. 062104.

Artru, M.-C. & Kaufman, V. (1975). *Extension of the analysis of triply ionized aluminum (Al IV).* Journal of the Optical Society of America **65**, no. 5, p. 594–599.

Biémont, E., Frémat, Y. & Quinet, P. (1999). *Ionization potentials of atoms and ions from lithium to tin (Z=50).* Atomic Data and Nuclear Data Tables **71**, no. 1, p. 117–146.

Brillet, W.-Ü. L. & Artru, M.-C. (1975). *2p 4, 4f, 5f, and 5g configurations of quadruply ionized aluminum (Al v).* Journal of the Optical Society of America **65**, no. 12, p. 1399–1403.

Carlson, T. A., Nestor Jr, C., Wasserman, N. & McDowell, J. (1970). *Calculated ionization potentials for multiply charged ions.* Atomic Data and Nuclear Data Tables **2**, p. 63–99.

Chang, E. S. (1990). *Energy Levels of Atomic Aluminum with Hyperfine Structure.* Journal of Physical and Chemical Reference Data **19**, no. 1, p. 119–125.

Chung, H.-K., Chen, M., Morgan, W., Ralchenko, Y. & Lee, R. (2005). *FLYCHK : Generalized population kinetics and spectral model for rapid spectroscopic analysis for all elements.* High Energy Density Physics **1**, no. 1, p. 3–12.

Ciricosta, O., Vinko, S., Barbrel, B., Rackstraw, D., Preston, T., Burian, T., Chalupskỳ, J., Cho, B. I., Chung, H.-K., Dakovski, G. *et al.* (2016). *Measurements of continuum lowering in solid-density plasmas created from elements and compounds.* Nature Communications **7**, no. 1, p. 1–6.

Ciricosta, O., Vinko, S., Chung, H.-K., Cho, B.-I., Brown, C., Burian, T., Chalupskỳ, J., Engelhorn, K., Falcone, R., Graves, C. *et al.* (2012). *Direct measurements of the ionization potential depression in a dense plasma.* Physical Review Letters **109**, no. 6, p. 065002.

Crowley, B. (2014). *Continuum lowering–a new perspective.* High Energy Density Physics **13**, p. 84–102.

Ecker, G. & Kröll, W. (1963). *Lowering of the ionization energy for a plasma in thermodynamic equilibrium.* The Physics of Fluids **6**, no. 1, p. 62–69.

Einstein, A. (1916). *Zur quantentheorie der strahlung.* Mitteilungen der Physikalischen Gesellschaft Zürich **18**, p. 47–62.

Griem, H. R. (1964). *Plasma Spectroscopy.* McGraw-Hill.

Hoarty, D., Allan, P., James, S., Brown, C., Hobbs, L., Hill, M., Harris, J., Morton, J., Brookes, M., Shepherd, R. *et al.* (2013). *Observations of the effect of ionization-potential depression in hot dense plasma.* Physical Review Letters **110**, no. 26, p. 265003.

Isberg, B. & Litzén, U. (1986). *Spectrum and term system of copper-like gallium, Ga III.* Physica Scripta **33**, no. 5, p. 420.

Johnson, W. & Soff, G. (1985). *The lamb shift in hydrogen-like atoms,* $1 \leq Z \leq 110$. Atomic Data and Nuclear Data Tables **33**, no. 3, p. 405–446.

Kaufman, V. & Martin, W. C. (1991). *Wavelengths and Energy Level Classifications for the Spectra of Aluminum (AlI through AlXIII).* Journal of Physical and Chemical Reference Data **20**, no. 5, p. 775–858.

Kim, Y.-K., Santos, J. P. & Parente, F. (2000). *Extension of the binary-encounter-dipole model to relativistic incident electrons.* Physical Review A **62**, no. 5, p. 052710.

Kramers, H. A. (1923). *XCIII. On the theory of X-ray absorption and of the continuous X-ray spectrum.* The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science **46**, no. 275, p. 836–871.

Lotz, W. (1970). *Electron-impact ionization cross-sections for atoms up to Z= 108.* Zeitschrift für Physik A Hadrons and nuclei **232**, no. 2, p. 101–107.

Martin, W. C. & Zalubas, R. (1979). *Energy levels of aluminum, Al I through Al XIII.* Journal of Physical and Chemical Reference Data **8**, no. 3, p. 817–864.

Perdew, J. P. & Yue, W. (1986). *Accurate and simple density functional for the electronic exchange energy : Generalized gradient approximation.* Physical Review B **33**, no. 12, p. 8800.

Saha, M. N. (1920). *LIII. Ionization in the solar chromosphere.* The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science **40**, no. 238, p. 472–488.

Saha, M. N. (1921). *On a physical theory of stellar spectra.* Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character **99**, no. 697, p. 135–153.

Sapirstein, J., Cheng, K. *et al.* (2011). *S-matrix calculations of energy levels of the lithium isoelectronic sequence.* Physical Review A **83**, no. 1, p. 012504.

Scofield, J. H. (1989). *Angular and polarization correlations in photoionization and radiative recombination.* Physical Review A **40**, no. 6, p. 3054.

Sheridan, T. & Goree, J. (1991). *Collisional plasma sheath model.* Physics of Fluids B : Plasma Physics **3**, no. 10, p. 2796–2804.

Sobelman, I. I., Vainshtein, L. A. & Yukov, E. A. (1995). *Excitation of Atoms and Broadening of Spectral Lines*, tome 7. Springer Science & Business Media.

Sousa, S. F., Fernandes, P. A. & Ramos, M. J. (2007). *General Performance of Density Functionals.* The Journal of Physical Chemistry A **111**, no. 42, p. 10439–10452.

Stewart, J. C. & Pyatt Jr, K. D. (1966). *Lowering of ionization potentials in plasmas.* The Astrophysical Journal **144**, p. 1203.

Van Regemorter, H. (1962). *Rate of Collisional Excitation in Stellar Atmospheres.* The Astrophysical Journal **136**, p. 906.

Vinko, S., Ciricosta, O., Cho, B., Engelhorn, K., Chung, H.-K., Brown, C., Burian, T., Chalupskỳ, J., Falcone, R., Graves, C. *et al.* (2012). *Creation and diagnosis of a solid-density plasma with an X-ray free-electron laser.* Nature **482**, no. 7383, p. 59–62.

Vinko, S., Ciricosta, O. & Wark, J. (2014). *Density functional theory calculations of continuum lowering in strongly coupled plasmas.* Nature Communications **5**, no. 1, p. 1–7.

Yukawa, H. (1935). *On the Interaction of Elementary Particles. I.* Proceedings of the Physico-Mathematical Society of Japan. 3rd Series **17**, p. 48–57.

4

Ionisation collisionnelle et recombinaison à trois corps

4.1 Ionisation collisionnelle

4.1.1 Principe physique du processus d'ionisation collisionnelle

L'impact d'un électron avec un ion peut conduire à un transfert d'énergie du projectile vers un électron lié à une sous-couche électronique de l'ion. Si l'énergie transférée est supérieure à l'énergie de liaison de l'électron, celui-ci est expulsé dans le continuum.

Une illustration simple d'ionisation collisionnelle (CI) entre un électron et un atome de Béryllium est donnée en Fig. 4.1 : un électron libre d'énergie E dans le référentiel de l'ion avec $E > B_{\mathrm{L}_1}$, l'énergie de liaison des électrons de la sous-couche électronique L_1, impacte l'atome initialement neutre. Nous considérons que la CI a lieu et nous avons donc en produits de ce processus un premier électron libre, que l'on qualifiera de "secondaire", d'énergie W et un second électron libre d'énergie $E - B_{\mathrm{L}_1} - W$. L'atome, initialement neutre, est ionisé et sa charge Z^* est donc incrémentée de 1 pour former dans notre exemple l'ion Be^+, avec une lacune électronique sur la sous-couche électronique concernée, ici L_1. Nous verrons dans le chapitre suivant qu'une lacune en couche interne entraîne une cascade de

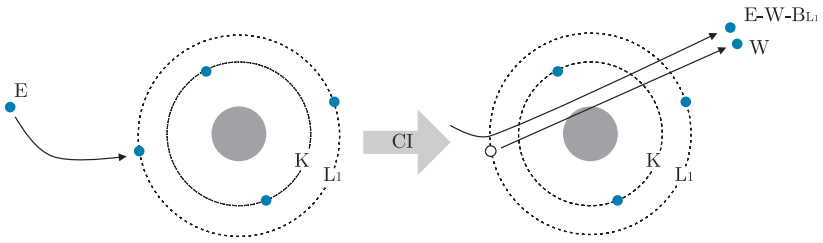


FIGURE 4.1 – Schéma du processus de CI entre un électron libre d'énergie E et un atome de Béryllium. Il résulte de ce processus deux électrons d'énergies respectives $E - W - B_{\mathrm{L}_1}$ et W et un ion Be^+.

désexcitations, radiatives ou non (émissions Auger). On remarque que le bilan énergétique du processus est négatif puisqu'égal à $-B_{\mathrm{L}_1}$, correspondant au tribut énergétique payé par l'électron impactant pour que l'électron lié puisse être libéré dans le continuum.

La CI est un des processus que l'on retrouve le plus couramment dans les codes PIC d'interaction laser-matière [Derouillat *et al.*, 2018] [Arber *et al.*, 2015] [Fonseca *et al.*, 2002] [Wu *et al.*, 2018] [Royle *et al.*, 2017]. Ceci peut s'expliquer par son rôle de premier plan dans les plasmas à haute densité d'énergie. Nous le verrons dans la Sec. 4.1.2, la section efficace de CI dans les conditions physiques de l'interaction laser-solide, à savoir une densité importante ($\sim 10^{22}$ cm^{-3}) et des énergies s'étendant sur une gamme allant de quelques eV à plusieurs GeV pour les particules les plus énergétiques, peut être importante. La CI va avoir pour effet d'abaisser l'énergie moyenne des électrons libres, ce qui pourra entraîner une baisse de la température du plasma. Elle va également permettre d'augmenter la charge ionique, renforçant l'amplitude des potentiels locaux qui pourront accélérer les particules chargées plus efficacement.

Le modèle de CI introduit initialement dans le code Calder [Pérez *et al.*, 2012] permet de prendre en compte ce processus de façon partiellement Monte Carlo : seule la probabilité d'ionisation totale fait l'objet d'un tirage au sort, tandis que les transferts d'énergies subséquents sont calculés de façon déterministe, c'est-à-dire moyennés sur l'ensemble des couches électroniques. Il s'ensuit que cet algorithme ne résout pas la couche sujette à l'ionisation. L'objet des sections suivantes est de développer un algorithme plus complet, déterminant de façon probabiliste la sous-couche électronique où la lacune est créée.

4.1.2 Section efficace d'ionisation collisionnelle

Soit un électron libre d'énergie cinétique E, impactant un ion pour l'ioniser en sous-couche k, cette sous-couche possédant une énergie cinétique U_k, et permettant la libération dans le continuum d'un électron secondaire d'énergie W. On pose $\varepsilon = E/B_k$, $\omega = W/B_k$, $\varepsilon' = E/mc^2$ (m étant la masse d'un électron et c la vitesse de la lumière), $b' = B_k/mc^2$, $u' = U_k/mc^2$, $\beta_\varepsilon = 1-(1+\varepsilon')^{-2}$, $\beta_b = 1-(1+b')^{-2}$ et $\beta_u = 1-(1+u')^{-2}$. La formule de section efficace de CI proposée dans [Kim *et al.*, 2000], déjà utilisée dans le modèle de CI de [Pérez *et al.*, 2012], est résolue sur la structure $n\ell j$, dans le référentiel de l'ion :

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_k^{\mathrm{CI}}}{\mathrm{d}\omega} = \sigma_k^0 \left[A_3 f_3(\omega) + f_2(\omega) + \frac{2A_2}{\varepsilon'-1} - A_1 f_1(\omega) \right] , \tag{4.1}$$

où

$$\sigma_k^0 = \frac{2\pi r_e N_k}{b' \left(\beta_\varepsilon^2 + \beta_b^2 + \beta_u^2\right)} , \tag{4.2}$$

$$f_x(\omega) = (\omega+1)^{-x} + (\varepsilon-\omega)^{-x} , \tag{4.3}$$

$$A_1 = \frac{1}{1+\varepsilon'} \frac{1+2\varepsilon'}{\left(1+\dfrac{\varepsilon'}{2}\right)^2} , \tag{4.4}$$

$$A_2 = \frac{\varepsilon-1}{2} \frac{b'^2}{\left(1+\dfrac{\varepsilon'}{2}\right)^2} , \tag{4.5}$$

$$A_3 = \ln\left(\frac{\beta_\varepsilon^2}{1-\beta_\varepsilon^2}\right) - \beta_\varepsilon^2 - \ln\left(2b'\right) , \tag{4.6}$$

avec r_e le rayon électronique classique et N_k le nombre d'occupation de la sous-couche k, c'est-à-dire le nombre d'électrons liés à cette sous-couche. En intégrant cette différentielle sur toutes les valeurs possibles pour l'énergie de l'électron secondaire ω, nous pouvons alors déterminer la section efficace totale pour chaque sous-couche électronique k

$$\sigma_k^{\mathrm{CI}} = \int_0^{\frac{\varepsilon-1}{2}} \frac{\mathrm{d}\sigma_k^{\mathrm{CI}}}{\mathrm{d}\omega}\mathrm{d}\omega \tag{4.7}$$

$$= \sigma_k^0 \left[\frac{A_3}{2}\left(1-\frac{1}{\varepsilon^2}\right) + 1 - \frac{1}{\varepsilon} + A_2 - A_2 \ln(\varepsilon)\right]. \tag{4.8}$$

De façon similaire, on peut déduire l'expression de l'énergie moyenne transférée à l'électron secondaire

$$\langle \omega_k \rangle = \frac{1}{\sigma_k^{\mathrm{CI}}} \int_0^{\frac{\varepsilon-1}{2}} \omega \frac{\mathrm{d}\sigma_k^{\mathrm{CI}}}{\mathrm{d}\omega}\mathrm{d}\omega \tag{4.9}$$

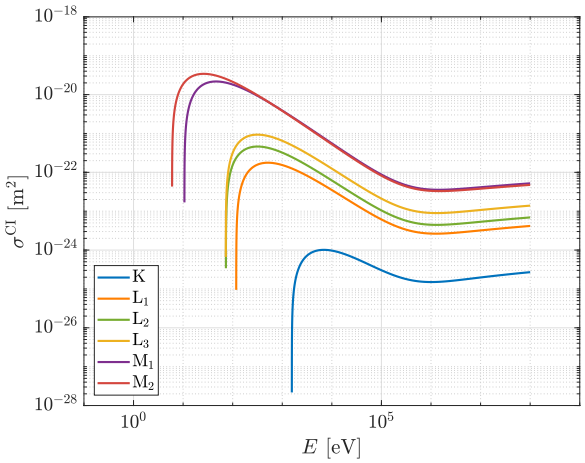
$$= \frac{\sigma_k^0}{\sigma_k^{\mathrm{CI}}} \left\{ \frac{A_3}{2}\frac{(\varepsilon-1)}{\varepsilon(\varepsilon+1)} + 2\ln(\varepsilon) + A_2\frac{\varepsilon-1}{4} - A_1\left[\ln(\varepsilon) - (\varepsilon+1)\ln\left(\frac{\varepsilon+1}{2}\right)\right]\right\}. \tag{4.10}$$

Nous pouvons distinguer trois sortes d'énergies pour décrire la liaison entre les électrons liés et les ions. Une première, que nous appelons $B_Z^0(n)$, correspondant à l'énergie de liaison du $n-$ième électron (du plus lié au moins lié) lorsque l'atome neutre est dans son état fondamental. Les énergies $B_Z^0(n)$ tabulées dans Calder sont tirées de [Bearden & Burr, 1967] et [Vaughan, 1986]. La seconde sorte, que nous appelons $B_Z^{Z^*}(Z-Z^*)$ correspond à l'énergie d'ionisation de l'ion de charge Z^* dans son état fondamental (c'est-à-dire l'énergie de l'électron le moins lié). Ces valeurs sont fournies dans [Carlson *et al.*, 1970]. Enfin, nous voulons déterminer l'énergie de liaison, $B_Z^{Z^*}(n)$, de n'importe quel électron n d'un ion dans son état fondamental et ce pour n'importe quel degré d'ionisation Z^*. Ces valeurs sont calculées grâce à la formule approchée fournie dans [Carlson *et al.*, 1970]

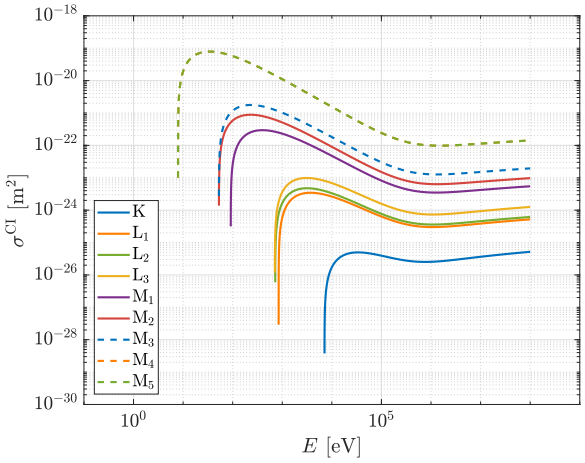
$$B_Z^{Z^*}(n) = B_Z^{Z^*}(Z-Z^*) - B_Z^0(Z-Z^*) + B_Z^0(n). \tag{4.11}$$

Comme les électrons d'une même sous-couche électronique k sont liés à l'atome par la même énergie, nous préférerons plutôt considérer l'énergie de liaison associée à la sous-couche électronique portant ces électrons, que l'on note B_k.

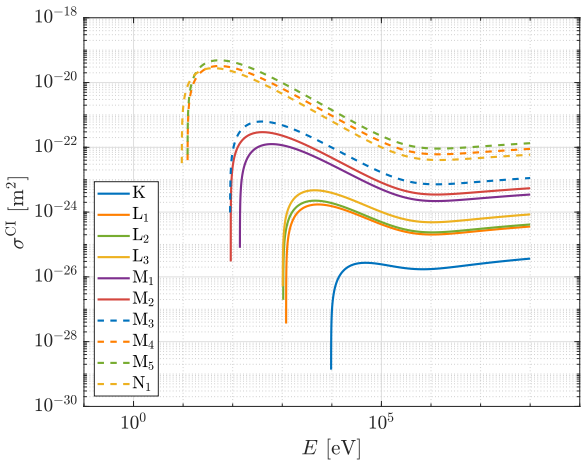
Afin d'avoir une première idée des valeurs de sections efficaces de CI mises en jeu, nous les traçons en Fig. 4.2 en fonction de l'énergie du projectile électronique pour chaque sous-couche de l'Al (a), du Fe (b) et du Zn (c). La première chose que l'on distingue sur ces figures est l'existence de seuils pour l'ionisation, correspondant aux valeurs d'énergies de liaison B_k pour chaque sous-couche k. Dans les faits, nous imposons la valeur 0 à la section efficace de CI lorsque l'électron n'est pas assez énergétique pour ioniser la sous-couche. Nous remarquons également que plus la sous-couche électronique est profonde, plus il est difficile de l'ioniser. Autrement dit, les ions vont être ionisés préférentiellement dans leur sous-couche externe : pour une énergie d'électron impactant donnée E, la section efficace d'ionisation de la sous-couche K se trouve plusieurs ordres de grandeur sous celle de la sous-couche L_1



(a) Al



(b) Fe



(c) Zn

FIGURE 4.2 – Sections efficaces de CI en fonction de l'énergie E de l'électron impactant pour chaque sous-couche électronique des atomes neutres d'Al (a), de Fe (b) et de Zn (c), trois éléments que l'on rencontrera dans ce manuscrit. On notera que, globalement, plus une sous-couche est externe, plus sa section efficace de CI est grande et donc plus il est aisé de l'ioniser.

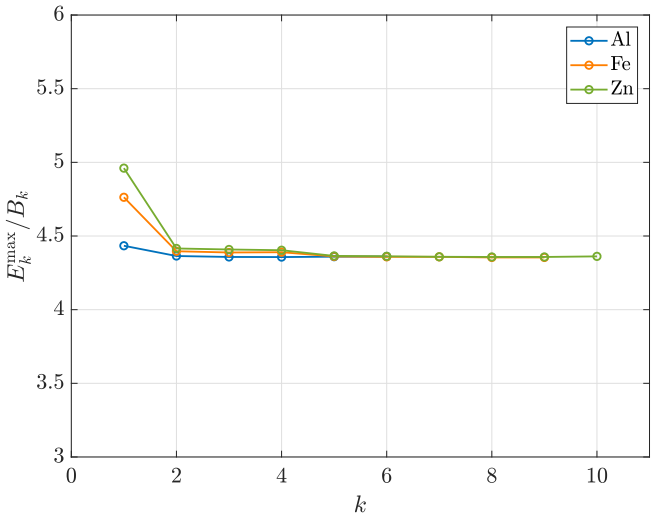


FIGURE 4.3 – Évolution du rapport entre l'énergie $E_{\max}$ maximisant la section efficace de CI d'une sous-couche électronique k et l'énergie de liaison B_k de cette sous-couche. On remarque que ce rapport reste relativement constant, quels que soit l'élément la sous-couche électronique.

et ainsi de suite. On notera tout de même une exception pour le cas du Zinc, où la section efficace de la sous-couche N_1 devient inférieure à celle de la M_5 et même de la M_4. Ce détail est en fait peu important puisque nous avons vu au chapitre précédent que les premières sous-couches étaient très souvent ionisées par pression à densité solide en raison de l'IPD. Enfin, on remarque que l'énergie cinétique maximisant l'ionisation est proportionnelle à la valeur d'énergie de liaison. Pour nous en convaincre, nous avons tracé en Fig. 4.3 les rapports $E_k^{\max}/B_k$ pour chaque sous-couche électronique, dans le cas de nos trois éléments Al, Fe et Zn. On voit que globalement, le rapport reste constant avec une valeur moyenne de 4.3, sauf dans le cas de la couche K du Fer et du Zinc où la section efficace croît à nouveau jusqu'à une valeur proche de la valeur maximale, en régime relativiste. Cette remontée de la section efficace prédite dans [Kim *et al.*, 2000] est particulière aux modèles relativistes de la CI, au contraire de la description classique pour laquelle ce comportement n'est pas prévu [Kim *et al.*, 2000].

4.1.3 Implémentation de l'ionisation collisionnelle dans CALDER

Dans cette section, nous expliquons en détails les modifications apportées au modèle de CI proposée par [Pérez *et al.*, 2012], basé sur le calcul de la section efficace issue de [Kim *et al.*, 2000] et sur la méthode d'appariement de Nanbu, abordée au Chap. 2, Sec. 2.3.3.1.

4.1.3.1 Estimation de la probabilité d'interaction, sélection de la sous-couche ionisée

Pour chaque paire électron-ion formée par la méthode de Nanbu, il s'agira d'abord d'estimer une probabilité d'ionisation, fonction des paramètres de la paire et de la discrétisation numérique, puis de déterminer la sous-couche concernée et le transfert d'énergie associé.

Soit un électron libre d'énergie E dans le référentiel d'un ion de charge Z^*, tous deux dans un plasma de densité électronique n_e et ionique n_i. Nous avons vu au Chap. 1 que le taux d'ionisation d'une couche k est lié à la section efficace de la façon suivante

$$\nu_k^{\mathrm{CI},i} = |v_{\mathrm{rel}}| n_e \sigma_k^{\mathrm{CI}} \,, \tag{4.12}$$

où $\nu_k^{\mathrm{CI},i}$ est le taux de CI sur une sous-couche k du point de vue des ions, $|v_{\mathrm{rel}}|$ est la norme de la vitesse relative des deux particules et σ_k^{CI} la section efficace de CI sur une sous-couche k. La probabilité totale de CI est alors donnée par la formule suivante [Pérez *et al.*, 2012]

$$P^{\mathrm{CI}} = 1 - \exp\left(-|v_{\mathrm{rel}}| n_e \sigma_{\mathrm{tot}}^{\mathrm{CI}} \Delta t\right) \quad \text{avec } \sigma_{\mathrm{tot}}^{\mathrm{CI}} = \sum_k \sigma_k^{\mathrm{CI}} \,, \tag{4.13}$$

où Δt est une durée arbitraire qui sera le plus souvent égale au pas de temps PIC ou, le cas échéant, à la période d'appel du module de CI dans la simulation.

Nous avons également vu au Chap. 2, Sec. 2.3.3.1 que la méthode de Nanbu, permettant d'appareiller deux macro-particules ayant potentiellement des poids statistiques différents, introduisait la densité croisée, grandeur qui sera dans le cas de la CI notée n_{ei} et définie telle que

$$n_{ei} = \frac{1}{V} \sum_{j=1}^{N_p} \min\left(W_e^j, W_i^j\right) \,, \tag{4.14}$$

avec N_p le nombre de paires électron-ion formées par l'algorithme de Nanbu (on rappelle que $N_p = \max(N_e, N_i)$ avec N_e et N_i respectivement le nombre de macro-électrons et de macro-ions dans une maille de simulation), W_e^j le poids statistique de l'électron de la paire j, W_i^j celui de l'ion et V le volume de la maille. Cette densité croisée nous permet d'opérer une correction sur l'expression de la probabilité de l'Eq. (4.13)

$$P^{\mathrm{CI}} = 1 - \exp\left(-|v_{\mathrm{rel}}| \frac{n_e n_i}{n_{ei}} \sigma_{\mathrm{tot}}^{\mathrm{CI}} \Delta t\right) \,, \tag{4.15}$$

qui sera l'expression utilisée par Calder pour calculer la probabilité de CI. Une fois cette probabilité calculée, le module génère un nombre aléatoire compris entre 0 et 1 puis le compare à la valeur de probabilité P^{CI}. Si le nombre aléatoire est inférieur à la probabilité, on considère que l'évènement a lieu et le code pourra procéder à la suite du processus. Dans le cas inverse, on considère que l'électron et l'ion n'interagissent pas et le module passe alors à la paire électron-ion suivante.

Si l'ionisation a bien lieu, il reste alors à sélectionner quelle sous-couche électronique est effectivement ionisée. Pour cela, nous calculons la fonction de répartition

$$\begin{cases} f(0) = 0 & \text{si} \quad k = 0 \,, \\ f(k) = \dfrac{1}{\sigma_{\mathrm{tot}}^{\mathrm{CI}}} \displaystyle\sum_{j=1}^{k} \sigma_j^{\mathrm{CI}} & \text{si} \quad k > 0 \,. \end{cases}$$

Le module procède alors à un nouveau tirage aléatoire d'un nombre ξ compris entre 0 et 1 et compare la valeur obtenue à la fonction de répartition f. La sous-couche ionisée k sera celle pour laquelle $f(k-1) < \xi \leq f(k)$ si $k > 0$.

4.1.3.2 Création et modification des particules

Dans cette section, nous supposons que la CI a lieu entre l'électron et l'ion de la paire de Nanbu considérée et que l'index de la sous-couche électronique ionisée a été déterminé par la méthode expliquée dans la section précédente. La dernière étape pour le processus de CI consiste en la modification des particules mises en jeu, l'électron et l'ion de la paire, et la création de l'électron secondaire.

En effet, l'électron impactant va transférer une partie de son énergie à un électron lié

à la sous-couche électronique ionisée k pour le libérer dans le continuum avec une énergie W, donnée en Eq. (4.10)[1]. L'électron impactant va être délesté à la fois de cette énergie W mais également de la valeur de l'énergie de liaison de la sous-couche k. En revanche, nous faisons l'hypothèse que sa direction reste inchangée. Le code va également créer un nouvel électron de même poids statistique que l'ion, W_i, dans le but de conserver exactement la charge électrique dans le système. Cet électron secondaire héritera de l'énergie W et nous lui imposerons la même direction que celle de l'électron impactant. Concernant l'ion, sa charge électrique Z^* sera augmentée de 1 et une lacune électronique sera créée sur la sous-couche concernée par l'ionisation. Pour ce faire, le code gardera simplement en mémoire l'index de la sous-couche possédant une lacune. Cette lacune déterminera le processus de désexcitation atomique, abordé dans le prochain chapitre. L'énergie cinétique de l'ion reste inchangée. Nous avons donc finalement une charge électrique totale constante, en accord avec l'hypothèse de quasi-neutralité du plasma, et une diminution de l'énergie cinétique totale.

[1] On rappelle que $\omega = W/B_k$.

Là encore, le fait que les particules n'aient pas le même poids statistique nous oblige à adopter une vision moyennée du processus de CI sur l'ensemble des particules de la simulation. Pour le comprendre, imaginons simplement une simulation où les électrons auraient un poids statistique (W_e) systématiquement plus important que celui des ions (W_i). Si la CI a lieu, l'énergie perdue par l'électron impactant, $W_e(W + B_k)$ serait trop importante au regard de l'énergie de l'électron secondaire, W_iW, et de l'énergie de liaison W_iB_k virtuellement gagnée par l'ion (et qui pourra par exemple être libérée lors de processus de recombinaison[1]). Pour pallier ce déséquilibre, nous n'appliquons pas ces modifications systématiquement, mais avec une probabilité dépendant des poids statistiques des deux particules de la paire. Nous pouvons dénombrer trois cas de figure :

[1] Sec. 4.2.

- $W_e > W_i$: la charge ionique est incrémentée et l'électron secondaire est créé avec une probabilité de 1 alors que la diminution de l'énergie de l'électron impactant sera faite avec une probabilité égale à W_i/W_e ;
- $W_e < W_i$: l'énergie de l'électron impactant est diminuée avec une probabilité de 1 alors que l'ion et l'électron secondaire sont modifiés/créés avec une probabilité égale à W_e/W_i ;
- $W_e = W_i$: la modification/création des particules peut se faire avec une probabilité de 1.

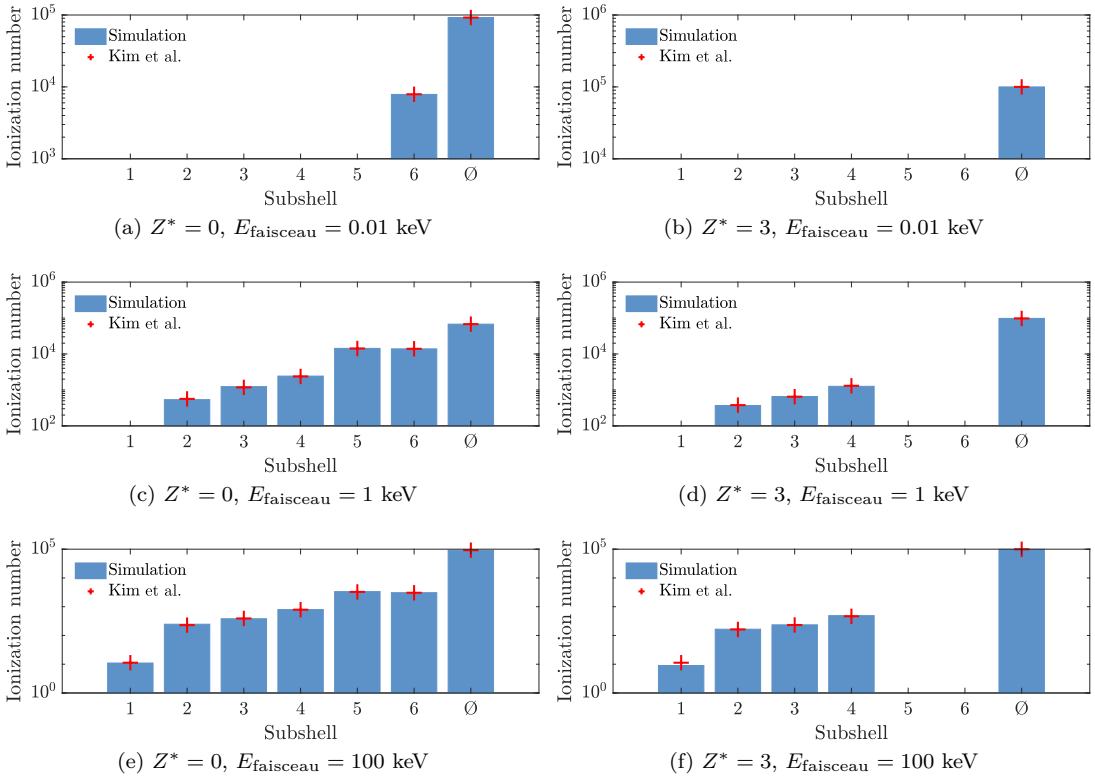
Le module tire donc un nombre aléatoire supplémentaire qu'il va comparer aux rapports W_e/W_i et W_i/W_e afin d'appliquer les modifications. Avec cette méthode, l'énergie totale du système est en moyenne conservée (en prenant en compte l'énergie de liaison virtuellement captée par l'ion) au cours du temps, mais la charge électrique est quant à elle parfaitement conservée puisque l'électron secondaire créé a le même poids que l'ion.

4.1.4 Tests de validation du module

4.1.4.1 Position de la lacune électronique

Ce premier test a pour objectif de tester la bonne reproduction de la distribution des lacunes électroniques, telle que prédite par [Kim *et al.*, 2000]. Pour ce faire, nous considérons un système 0D d'ions d'Aluminium de densité solide ($\rho = 2.7$ g/cm^3 soit $n_i = 6.02 \times 10^{22}$ cm^{-3}), en présence d'un faisceau monoénergétique d'électrons. Les ions sont initialement immobiles et de charge variant de $Z^* = 0$ (atome neutre) à $Z^* = 3$ (degré de charge de l'Al solide[2]). L'énergie du faisceau électronique varie de 10 eV à 100 eV. Ce test inclut également la probabilité de ne pas ioniser l'ion, marquée par le symbole $\varnothing$. Nous ne calculons qu'un seul pas de temps et l'ionisation due aux électrons secondaires n'est donc pas permise.

[2] Chap. 3.



(a) $Z^* = 0$, $E_{\text{faisceau}} = 0.01$ keV

(b) $Z^* = 3$, $E_{\text{faisceau}} = 0.01$ keV

(c) $Z^* = 0$, $E_{\text{faisceau}} = 1$ keV

(d) $Z^* = 3$, $E_{\text{faisceau}} = 1$ keV

(e) $Z^* = 0$, $E_{\text{faisceau}} = 100$ keV

(f) $Z^* = 3$, $E_{\text{faisceau}} = 100$ keV

FIGURE 4.4 – Test de la position de la lacune électronique pour un atome d'Aluminium de charge égale à 0 ou 3. En bleu : nombre de macro-ions ionisés générés dans CALDER après un pas de temps. La probabilité de ne pas ioniser l'ion est marquée par le symbole ∅. Croix rouges : prédictions de [Kim *et al.*, 2000] pour ces paramètres physiques.

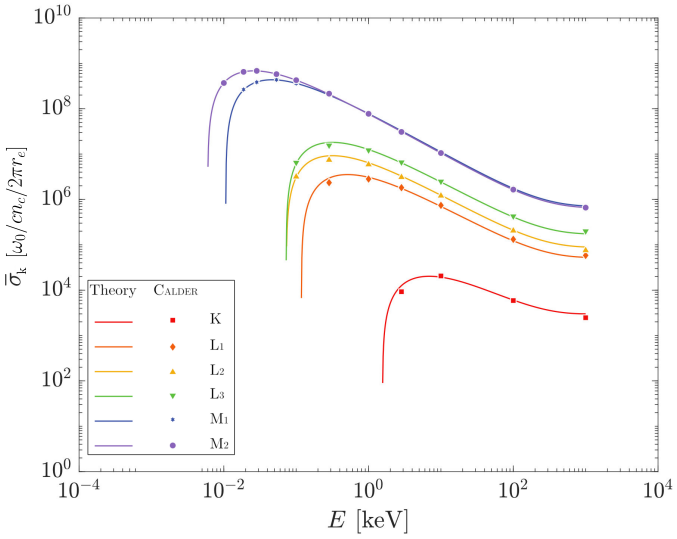


Figure 4.5 – Comparaison des sections efficaces de CI théoriques (formule de [Kim *et al.*, 2000], donnée en Eq. (4.8)) avec les valeurs déduites de Calder pour le cas de l'Aluminium neutre.

La Fig. 4.4 représente la distribution des ions en fonction de la sous-couche ionisée (histogrammes bleus). Elle est comparée aux valeurs issues de [Kim *et al.*, 2000], représentées par des croix rouges. Nous observons pour les cas testés que les résultats obtenus par Calder sont sensiblement égaux à ceux de [Kim *et al.*, 2000].

Ce test illustre quelques comportements attendus au regard des sections précédentes. Dans la Fig. 4.4a, où $Z^* = 0$ et $E_{\text{faisceau}} = 10$ eV, nous voyons que seule la sous-couche $k = 6$, c'est-à-dire la sous-couche M_2, est ionisée. Il s'agit en effet de la seule sous-couche d'énergie de liaison (5.98 eV) inférieure à l'énergie du faisceau (10 eV). Le cas avec une charge initiale $Z^* = 3$, en Fig. 4.4b, ne présente aucune ionisation car la sous-couche M est déjà dépouillée de ses électrons à l'état initial. Pour un faisceau électronique à 1 keV (Figs. 4.4c et 4.4d) toutes les sous-couches peuvent être ionisées, sauf la sous-couche K dont l'énergie de liaison pour l'atome neutre est supérieure à 1 keV ($B_{\text{K}} = 1559.6$ eV). Là encore, l'ionisation des sous-couches initialement vides n'a pas lieu pour $Z^* = 3$ (Fig. 4.4d). Enfin le faisceau à 100 keV permet une ionisation de l'ensemble des couches électroniques, dont la couche K. Nous remarquons sur ces quelques exemples que la tendance observée en Sec. 4.1.2 est vérifiée : plus la sous-couche est profonde, plus la probabilité de l'ioniser est faible et les principales sous-couches sujettes à l'ionisation par impact sont donc les sous-couches électroniques les plus externes. Nous noterons également que l'ionisation par le faisceau à 100 keV est moins efficace que celle par le faisceau à 1 keV (d'environ un ordre de grandeur) ce qui est, là encore, en accord avec les sections efficaces tracées en Fig. 4.2a.

4.1.4.2 Section efficace de CI et énergie de l'électron secondaire

Une autre façon de tester notre algorithme Monte Carlo est de comparer directement les sections efficaces analytiques, tirées de [Kim *et al.*, 2000] et présentées en Eq. (4.8), et celles déduites des résultats de simulation. Comme évoqué en Sec. 4.1.3, lors d'une collision, la première étape de l'algorithme de CI consiste à déterminer si une ionisation se produit. Pour ce faire, nous utilisons la section efficace totale de CI, $\sigma_{\text{tot}}^{\text{CI}}$, qui nous permet de calculer la probabilité d'ionisation donnée en Eq. (4.15). Si l'ionisation se produit, il reste à définir dans quelle sous-couche elle a lieu. Pour cela, les fonctions de distribution construites à partir des sections efficaces résolues sur les sous-couches électroniques, σ_k^{CI}, sont utilisées et la probabilité d'ioniser la sous-couche k, P_k^{CI}, est alors de $P^{\text{CI}} \times \sigma_k^{\text{CI}}/\sigma_{\text{tot}}^{\text{CI}}$. En multipliant cette expression par le nombre total de collisions N_{coll}, on obtient le nombre d'ions $N_{i,k}$ ayant

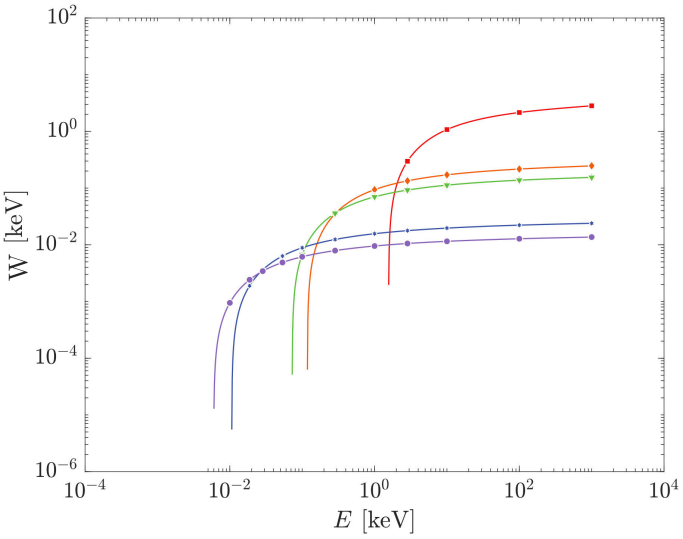


FIGURE 4.6 – Comparaison des énergies théoriques des électrons secondaires (formule de [Kim *et al.*, 2000], donnée en Eq. (4.10)) avec les valeurs déduites de CALDER pour le cas de l'Aluminium neutre.

une lacune sous-couche k. On peut donc en déduire l'expression de la section efficace de CI estimée numériquement

$$\sigma_k^{\text{num}} = \frac{N_{i,k}}{N_{\text{coll}}} \frac{\sigma_{\text{tot}}^{\text{CI}}}{P^{\text{CI}}} = \frac{N_{i,k}}{N_{\text{coll}}} \frac{1}{n_e |v_{\text{rel}}| \Delta t}\,, \tag{4.16}$$

où n_e, v_{rel} et Δt constituent les paramètres initiaux de la simulation.

Nous nous replaçons dans un contexte 0D similaire à celui du cas test précédent avec un plasma d'Aluminium solide ($n_i = 6.02 \times 10^{22}$ cm^{-3}) initialement neutre ($Z^* = 0$) sur lequel on envoie un faisceau d'électrons libres d'énergie variable (nous prendrons une dizaine de valeurs comprises entre 10 eV et 1 MeV). On peut voir sur la Fig. 4.5 que les résultats obtenus par CALDER reproduisent précisément les prédictions théoriques.

De même, il est possible de vérifier si l'énergie transférée aux électrons secondaires par impact des électrons primaires avec l'ion est cohérente avec la formule proposée par [Kim *et al.*, 2000]. Nous pouvons comptabiliser dans CALDER l'énergie des électrons secondaires en fonction de la position de la sous-couche électronique dont ils sont issus. Nous confrontons ces valeurs avec les prédictions théoriques en Fig. 4.6. Nous notons que les énergies fournies à l'électron secondaire sont identiques pour les sous-couches électroniques L_2 et L_3. En effet, dans notre modèle, les sous-couches électroniques se différencient à la fois par leur nombre d'occupation N_k, c'est-à-dire le nombre d'électrons liés qu'elles portent, et par leur énergie de liaison B_k. Or, on remarque en Eq. (4.10) que la dépendance en N_k disparaît, ne laissant plus qu'une dépendance à l'énergie de liaison. Dans notre exemple, ces deux énergies de liaison, B_{L_2} et B_{L_3}, étant très proches (respectivement 72.95 eV et 72.55 eV), les énergie $\langle\omega\rangle_{L_2}$ et $\langle\omega\rangle_{L_3}$ le sont également.

4.1.4.3 Conservation de l'énergie et de la charge électrique

L'algorithme de CI était conçu de telle façon que l'énergie du système conserve parfaitement la charge électrique mais seulement en moyenne l'énergie totale (comprenant l'énergie cinétique et l'énergie de liaison) en présence de particules de poids statistiques différents. Nous avons donc voulu vérifier cette hypothèse de conservation au travers d'une simulation en configuration Monte Carlo 0D avec un plasma d'Aluminium solide ($\rho = 2.7$ g/cm^3) avec une charge initiale $Z^* = 1$. On initialise les ions avec une température $T_i = 5$ eV tandis que

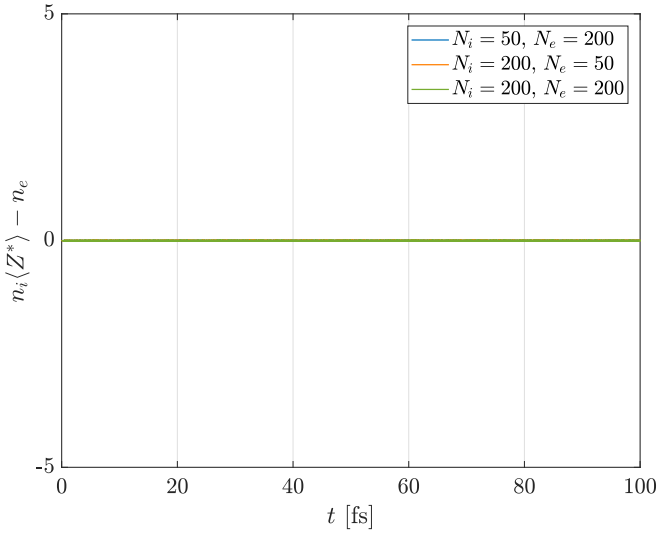


FIGURE 4.7 – Évolution temporelle de la charge électrique totale dans un plasma d'Aluminium solide pour différents nombres de macro-particules par maille.

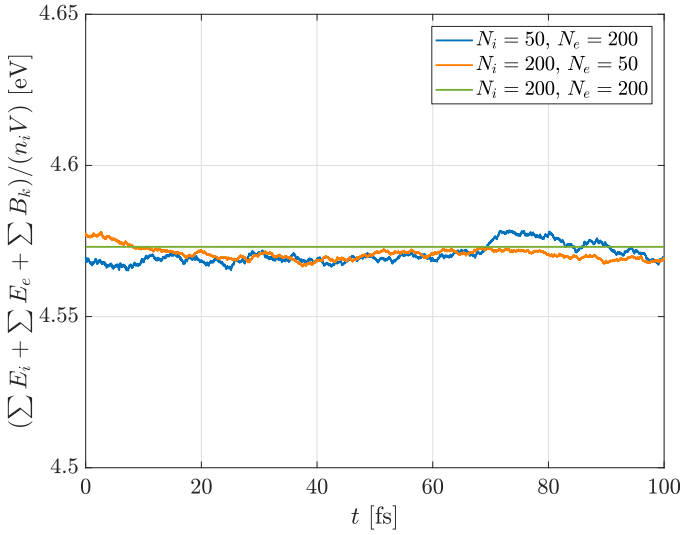


FIGURE 4.8 – Évolution temporelle de l'énergie totale du système (à laquelle on ajoute les pertes liées aux énergies de liaisons) normalisée par le nombre d'ions dans un plasma d'Aluminium solide pour différents nombres de macro-particules par maille.

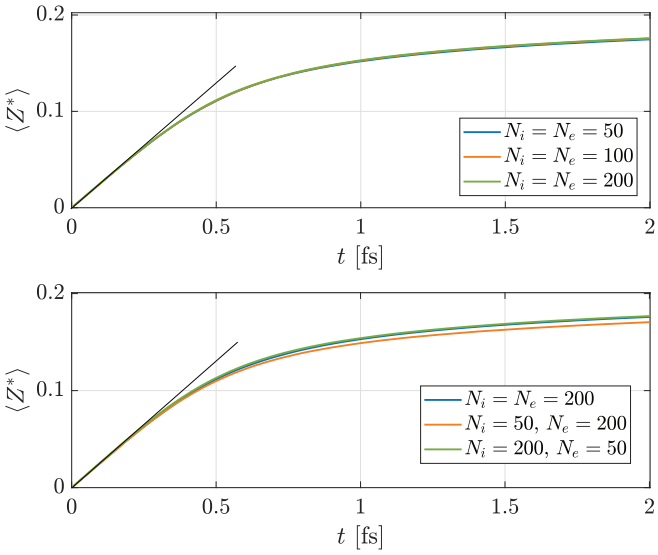


FIGURE 4.9 – Évolution de la charge ionique moyenne $\langle Z^* \rangle$ dans un plasma d'Aluminium solide de température initiale et de charge initiale nulles, pour différents nombres de macro-particules par maille. La courbe noire représente la régression linéaire de ces évolutions pour les instants initiaux de ces simulations.

les électrons libres sont initialisés avec une température $T_e = 300$ eV. Nous n'activons dans cette simulation que les collisions coulombiennes et la CI. Nous laissons alors le plasma relaxer pendant 100 fs en prenant soin de sauvegarder les énergies de liaison associées à chaque événement d'ionisation. La simulation est répétée en changeant le nombre de macro-ions et macro-électrons par maille :

- un cas où $N_i = 50$ et $N_e = 200$ et donc $W_i > W_e$ à l'état initial, en bleu sur les Figs. 4.7 et 4.8 ;
- un cas où $N_i = 200$ et $N_e = 500$, $W_i < W_e$ à l'état initial, en orange sur les Figs. 4.7 et 4.8 ;
- enfin un cas où $N_i = N_e = 200$, $W_i = W_e$ à l'état initial, en vert sur les Figs. 4.7 et 4.8.

La Fig. 4.7 montre que, pour les trois simulations, la charge électrique totale, $n_i\langle Z^* \rangle - n_e$, reste bien inchangée pendant toute la durée de la simulation. Comme nous nous y attendions, l'énergie totale, en Fig. 4.8 présente quant à elle des fluctuations autour de l'énergie totale initialement injectée dans le système. Ces fluctuations s'annulent pour des macro-particules de même poids statistique.

4.1.4.4 Impact de la méthode de Nanbu sur le taux de CI

Nous nous intéressons ici à l'influence du poids statistique des espèces mises en jeu, à savoir les ions et les électrons, pour tester la robustesse de la méthode de Nanbu [Nanbu & Yonemura, 1998] appliquée à la CI. Pour cela, nous nous plaçons dans un contexte numérique proche de celui utilisé en Sec. 4.1.4.1 : nous considérons ici une distribution d'atomes d'Al neutres de densité $n_i = 6.02 \times 10^{22}$ cm^{-3}, en présence d'un faisceau électronique de densité $n_e = 10^{21}$ cm^{-3} et une énergie de 100 eV. L'ionisation due aux électrons secondaires est ici possible (la simulation est faite sur plusieurs pas de temps).

La Fig. 4.9 représente l'évolution temporelle du degré de charge moyen $\langle Z^* \rangle$ dans le cas de poids statistiques électroniques et ioniques égaux (haut) ou différents (bas).

Aux tout premiers instants de la simulation (entre $t = 0$ fs et $t = 0.2$ fs), nous pouvons considérer que l'évolution de la charge ionique moyenne $\langle Z^* \rangle$ est linéaire. Au delà de 0.2 fs, l'ionisation ralentie rapidement en raison de la baisse de l'énergie du faisceau. Un test simple consiste à comparer la pente de cette croissance linéaire de $\langle Z^* \rangle$ au taux de CI total

$\nu_{\mathrm{i,tot}}^{\mathrm{CI}} = |v_{\mathrm{rel}}| n_e \sigma_{\mathrm{tot}}^{\mathrm{CI}}$, obtenu en sommant les taux de CI pour chaque sous-couche k, donnés en l'Eq. (4.12). Nous obtenons pour la pente une valeur de 2.51×10^{14} s^{-1} tandis que le taux théorique nous donne une valeur théorique de 2.59×10^{14} s^{-1}.

De plus, nous pouvons vérifier la convergence pour les poids statistiques asymétriques en bas de la Fig. 4.9, en prenant 50 macro-ions et 20 macro-électrons par cellule et inversement. Les profils obtenus coïncident avec celui associé à $N_i = N_e = 200$, validant notre procédure d'appariement [Nanbu & Yonemura, 1998].

4.1.5 Conclusion

La CI est un processus d'importance capitale dans la physique des systèmes à haute densité d'énergie. Le modèle de [Pérez *et al.*, 2012], utilisé jusqu'alors et basé sur la formule de section efficace proposée par [Kaastra & Mewe, 1993], permettait de prendre en compte de façon moyennée sur les sous-couches électroniques. Les modifications qui ont été apportées à cet algorithme permettent à présent de résoudre la CI sur la structure atomique fine, nous amenant à considérer la création de lacunes électroniques, point de départ de la désexcitation atomique, qui sera traitée dans le chapitre suivant.

Une description complète de l'équilibre de l'ionisation suppose toutefois de prendre en compte le processus inverse de la CI, à savoir la recombinaison à trois corps, objet de la seconde moitié de ce chapitre.

4.2 Recombinaison à trois corps

4.2.1 Recombinaison à trois corps, processus inverse de l'ionisation collisionnelle

Comme tout processus atomique, l'ionisation collisionnelle est associée à un processus inverse, qui est, dans ce cas, la recombinaison à trois corps (que nous abrégeons par TBR en référence à son nom anglais "*Three-Body Recombination*"). La CI fait intervenir un électron libre d'énergie E (l'électron impactant) et un ion de charge Z^* pour produire deux électrons d'énergies respectives W et $E-W-B_k$ (B_k étant l'énergie de liaison de la sous-couche k). La TBR fera donc intervenir deux électrons libres, d'énergies respectives U_1 et U_2, ainsi qu'un ion de charge Z^* possédant une lacune en couche k. Le comblement de celle-ci conduira à un ion de charge Z^*-1 et un électron libre d'énergie $E = U_1 + U_2 + B_k$. Le processus est schématisé en Fig. 4.10.

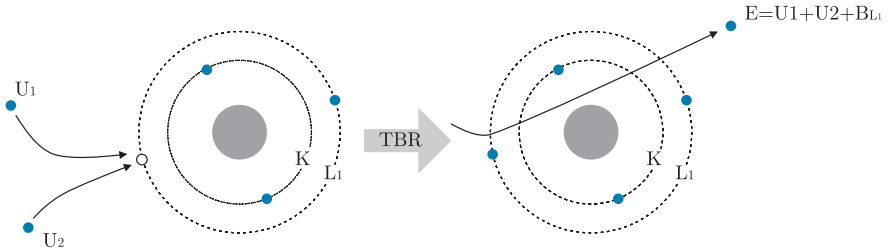


FIGURE 4.10 – Schéma du processus de TBR entre deux électrons libres d'énergie U_1 et U_2 et un ion Be^+. Il résulte de ce processus un électron libre d'énergie $E = U_1 + U_2 + B_{L_1}$ et un atome de Be.

4.2.2 Principe du bilan détaillé et de la micro-réversibilité

En 1872, Ludwig Boltzmann introduit le concept de bilan détaillé (que nous abrégeons par DB pour "*Detailed Balance*") pour prouver son théorème H. Ce théorème de physique statistique prévoit qu'il existe, dans un gaz en cours de relaxation, une grandeur H, généralement définie comme l'opposée de l'entropie, qui évolue de façon monotone au cours du temps. Il fait donc directement référence au deuxième principe de la thermodynamique qui stipule que l'entropie d'un système isolé ne peut que croître.

Le principe, très général, du DB établit par L. Boltzmann stipule qu'à l'équilibre thermodynamique, tous les processus atomiques élémentaires (tels l'ionisation collisionnelle ou la photoionisation) sont à l'équilibre avec leur processus inverse.

Le DB nous permet d'établir une relation entre les taux de CI et de TBR pour une sous-couche électronique k, donnée dans [Faussurier & Blancard, 2017]

$$\nu^{\mathrm{TBR}}_{k,b\to a} = \frac{g_a}{g_b}\nu^{\mathrm{CI}}_{k,\mathrm{a}\to\mathrm{b}}\mathrm{e}^{\beta_e \Delta E_{a\to b}+\eta}\,, \tag{4.17}$$

où a est l'état pré-CI (ou post-TBR) et b l'état pré-TBR (ou post-CI), $\nu^{\mathrm{TBR}}_{k,b\to a}$ et $\nu^{\mathrm{CI}}_{k,\mathrm{a}\to\mathrm{b}}$ sont les taux respectifs de la TBR et de la CI pour la sous-couche k, g_a et g_b les poids statistiques des états a et b, $\beta_e = 1/k_B T_e$ avec k_B la constante de Boltzmann et T_e la température électronique, $\Delta E_{a\to b}$ la variation d'énergie en passant de l'état a à l'état b, correspondant dans notre cas à l'énergie de liaison B_k de la sous-couche k et enfin η le potentiel chimique réduit, défini tel que

$$n_e = \frac{\sqrt{2} m_e^3 c^3 \theta^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \left[F_{1/2}(\eta,\theta) + \theta F_{3/2}(\eta,\theta) \right] , \tag{4.18}$$

avec $\theta = k_B T_e / m_e c^2$, m_e étant la masse d'un électron, c la vitesse de la lumière et

$$F_j(\eta,\theta) = \int_0^\infty \frac{x^j \sqrt{1 - \frac{\theta x}{2}}}{1 + \mathrm{e}^{x-\eta}} \mathrm{d}x \, . \tag{4.19}$$

[Faussurier & Blancard, 2017] établissent une relation entre les sections efficaces de CI et de TBR. La première étape consiste à déterminer l'expression de la densité électronique en fonction de la distribution en énergie des particules. En faisant l'hypothèse d'une distribution de Fermi-Dirac pour les électrons, la densité électronique s'exprime comme suit

$$n_e = 2 \int \frac{\mathrm{d}^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{1 + \mathrm{e}^{\beta E - \eta}} , \tag{4.20}$$

où n_e est la densité électronique, $\mathbf{p}$ le vecteur d'impulsion et E l'énergie cinétique telle que

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m_e^2 c^4} - m_e c^2 \, . \tag{4.21}$$

Nous pouvons exprimer la densité électronique en fonction de la différentielle en énergie dE

$$n_e = \frac{\sqrt{2} m_e^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \mathrm{d}E \lambda(E) \frac{1}{1 + \mathrm{e}^{\beta_e E - \eta}} , \tag{4.22}$$

avec

$$\lambda(E) = \sqrt{E} \sqrt{1 + \frac{E}{2 m_e c^2}} \left(1 + \frac{E}{m_e c^2} \right) . \tag{4.23}$$

Pour déterminer l'expression du taux, il nous faut également exprimer la vitesse des électrons v en fonction de leur énergie E. Pour ce faire, on part de la définition de E en fonction du facteur de Lorentz

$$E = \frac{m_e c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - m_e c^2 \, . \tag{4.24}$$

Par réarrangement, il vient alors

$$\vartheta(E) = \sqrt{\frac{\frac{E}{m_e c^2} \left(\frac{E}{m_e c^2} + 2 \right)}{\left(\frac{E}{m_e c^2} + 1 \right)^2}} , \tag{4.25}$$

avec $\vartheta(E) = v/c$.

Compte tenu de la relation entre le taux de réaction, la vitesse des particules, la densité électronique et la section efficace donnée en Eq. (4.12), nous pouvons déduire l'expression du taux de CI pour une sous-couche k donnée

$$\begin{aligned}\nu^{\mathrm{CI}}_{k,a\to b} =& \frac{\sqrt{2}m_e^{3/2}}{\pi^2\hbar^3}\int_{B_k}^{\infty}\mathrm{d}E\lambda(E)\frac{1}{1+\mathrm{e}^{\beta_e E-\eta}}\int_0^{E-B_k}\mathrm{d}U_1\int_0^{E-B_k}\mathrm{d}U_2 c\vartheta(E)\\ &\times\frac{\mathrm{d}\sigma_k^{\mathrm{CI}}}{\mathrm{d}U_1}\delta(U_1+U_2+B_k-E)\frac{1}{(1+\mathrm{e}^{-\beta_e U_1+\beta})(1+\mathrm{e}^{-\beta_e U_2+\beta})}\,,\end{aligned} \tag{4.26}$$

où E est l'énergie de l'électron impactant, U_1 et U_2 étant les énergies des deux électrons libres résultant de la CI, correspondant aux énergies W et $E - W - B_k$ de la Sec. 4.1.1. La section efficace différentielle de CI est directement fournie par Kim *et al.* [2000], et donnée en Eq. (4.1). On remarque que pour l'électron impactant, la distribution est intégrée entre l'énergie de liaison B_k et l'infini, puisqu'on rappelle que l'ionisation ne peut avoir lieu sur la sous-couche k que si l'électron impactant a une énergie supérieure ou égale à l'énergie de liaison de cette sous-couche. De la même façon, on peut exprimer le taux de TBR en fonction de ces trois énergies

$$\begin{aligned}\nu^{\mathrm{TBR}}_{k,b\to a} =& \mathrm{e}^{\beta_e B_k+\eta}\left(\frac{\sqrt{2}m_e^{3/2}}{\pi^2\hbar^3}\right)^2\int_{B_k}^{\infty}\mathrm{d}E\frac{1}{1+\mathrm{e}^{\beta_e E-\eta}}\int_0^{E-B_k}\mathrm{d}U_1\lambda(U_1)\int_0^{E-B_k}\mathrm{d}U_2\lambda(U_2)\\ &\times c^2\vartheta(U_1)\vartheta(U_2)\mathrm{d}\sigma_k^{\mathrm{TBR}}\delta(U_1+U_2+B_k-E)\frac{1}{(1+\mathrm{e}^{-\beta_e U_1+\eta})(1+\mathrm{e}^{-\beta_e U_2+\eta})}\,,\end{aligned} \tag{4.27}$$

où $\mathrm{d}\sigma_k^{\mathrm{TBR}}$ est la section efficace différentielle de TBR, qui s'exprime en m^4.s. En injectant les taux des Eqs. (4.26) et (4.27) dans la relation du DB en Eq. (4.17), on peut, par identification, établir une relation entre les sections efficaces différentielles de CI et de TBR

$$\mathrm{d}\sigma_k^{\mathrm{TBR}} = \frac{\pi^2\hbar^3}{\sqrt{2}m_e^{3/2}c}\frac{g_a}{g_b}\frac{\lambda(E)}{\lambda(U_1)\lambda(U_2)}\frac{\vartheta(E)}{\vartheta(U_1)\vartheta(U_2)}\frac{\mathrm{d}\sigma_k^{\mathrm{CI}}}{\mathrm{d}U_1}\,, \tag{4.28}$$

qui constitue la relation de micro-réversibilité dite de Fowler. Cette relation entre les deux sections efficaces différentielles présente un atout majeur : comme la section efficace différentielle de CI est résolue sur les sous-couches électroniques de la structure atomique fine, la section efficace différentielle de TBR le sera également, par symétrie.

4.2.3 Modélisation numérique et implémentation dans CALDER

4.2.3.1 Réduction de la recombinaison à trois corps à une paire électron-ion dans un bain électronique

De tous les processus atomiques abordés dans le contexte de cette thèse, la TBR a la particularité de faire intervenir trois particules, constituant une difficulté majeure pour son implémentation dans un code PIC. Pour traiter ce processus d'une façon analogue aux autres processus (à deux corps), il faudrait former des triplets de deux électrons et d'un ion. Pour une maille de simulation PIC comprenant N_i macro-ions et N_e macro-électrons, le nombre de triplets possibles est $N_i N_e(N_e - 1)/2$, un nombre $(N_e - 1)/2$ fois plus élevé que le nombre

de paires électron-ion possibles.

Un premier réflexe serait d'extrapoler la méthode de [Nanbu & Yonemura, 1998] à un système de trois particules, en réduisant le nombre de triplets à $N_T = \max(N_i,\, N_e/2)$ sur le modèle de Nanbu. Néanmoins, il n'est pas établi que la bonne représentativité statistique généralement observée pour la méthode de Nanbu soit toujours valable pour des triplets de particules. Pour s'en convaincre, il suffit de regarder l'évolution du rapport entre le nombre de couples ou triplets théoriquement formables et le nombre de couples ou triplets formés par la méthode de [Nanbu & Yonemura, 1998]. Pour les paires, le rapport est $r_P = \min(N_e,\, N_i)$ tandis que pour les triplets, il devient $r_T = \min(N_i,\, N_e/2)(N_e - 1)$.

Cette extrapolation de la méthode de Nanbu aux triplets électron-électron-ion poserait également problème pour la modification des énergies de macro-particules ayant des poids statistiques différents. Dans le contexte des interactions à deux corps, cette difficulté peut être surmontée en modifiant les macro-particules avec une certaine probabilité qui est fonction des poids statistiques mis en jeu, nous permettant de conserver la charge électrique exactement et l'énergie du système de façon moyennée. Dans le cas d'un triplet, il est difficile d'imaginer pouvoir faire la même chose.

Afin de pallier les deux difficultés mentionnées précédemment, nous proposons, dans notre méthode, de remplacer l'un des deux électrons du triplet par un fond d'électrons environnants, qui sera composé d'un échantillon que nous voulons représentatif des électrons de la maille de simulation, en excluant celui de la paire électron-ion. Les paires électron-ion seront alors formées à l'aide de la méthode de Nanbu. Mathématiquement, cela se traduit par l'intégration de l'Eq. (4.28) sur toutes les valeurs d'énergie possibles pour l'un des deux électrons. On considérera dans la suite de nos calculs que l'électron de la paire est l'électron d'énergie U_2. Il vient alors

$$\sigma^{\mathrm{TBR}}_{k,b\to a} = n_e \int_0^\infty c\vartheta(U_1) f(U_1) \mathrm{d}\sigma^{\mathrm{TBR}}_{k,b\to a} \mathrm{d}U_1 \,, \tag{4.29}$$

avec n_e la densité électronique dans la maille, $\vartheta(U_1)$ la vitesse de l'électron d'énergie U_1 normalisée par la vitesse de la lumière c et définie en Eq. (4.25), et enfin $f(U_1)$ la fonction de distribution en énergie électronique. On voit que la section efficace obtenue, exprimée en m^2, ne dépend plus de l'énergie des deux électrons mais de l'énergie de l'électron de la paire et des propriétés du fond électronique environnant.

Dans les simulations laser-solide[1], la distribution énergétique des électrons peut être fortement non maxwellienne, avec la cohabitation de plusieurs populations, dont les électrons dits "thermiques" (on parlera en anglais souvent d'"*electronic bulk*"), de température modérée allant de quelques eV à quelques keV et assurant le courant de retour, ou encore les électrons supra-thermiques, d'énergie généralement supérieure à la dizaine de keV et pouvant atteindre plusieurs dizaines de MeV dans les cas les plus extrêmes. Ces distributions peuvent être difficilement paramétrées, de sorte qu'il est nécessaire de calculer numériquement l'Eq. (4.29) à la volée, sur le modèle de la CI. Pour cela, σ^{TBR}_k est discrétisée comme suit

[1] Chap. 8.

$$\sigma^{\mathrm{TBR}}_{k,b\to a} = \frac{n_e}{\sum_{j=1}^{N_s} W_e^j} \sum_{j=1}^{N_s} c\vartheta(U_1^j) W_e^j \frac{\pi^2\hbar^3}{\sqrt{2} m_e^{3/2} c} \frac{g_a}{g_b} \frac{\lambda(E)}{\lambda(U_1^j)\lambda(U_2)} \frac{\vartheta(E)}{\vartheta(U_1^j)\vartheta(U_2)} \frac{\mathrm{d}\sigma^{\mathrm{CI}}_{k,a\to b}}{\mathrm{d}U_1^j} \,, \tag{4.30}$$

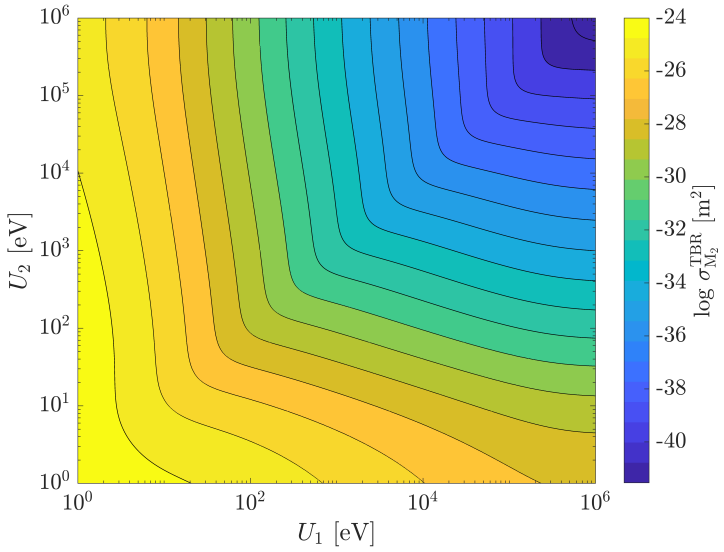


FIGURE 4.11 – Représentation 2D des valeurs de section efficace de TBR pour une lacune électronique en sous-couche M_2 d'un ion Al^+ dans un plasma à densité solide ($\rho = 2{,}7$ g/cm^3) en fonction des énergies électroniques U_1 et U_2 dans le référentiel de l'ion.

où W_e^j est le poids statistique de l'électron j et N_s le nombre de macro-électrons constituant notre échantillon statistique. On peut noter que la fonction de distribution d'énergie du bain électronique a été remplacée par une pondération sur le poids statistique des macro-électrons de fond.

Remarque 4.2.1 En appliquant les normalisations de CALDER (les variables normalisées sont surlignées dans les expressions ci-dessous), on obtient

$$\overline{\sigma^{\mathrm{TBR}}_{k,b\to a}} = \frac{\pi^2\hbar^3 n_c}{\sqrt{2}m_e^3c^3}\frac{g_j}{g_k}\frac{\overline{n_e}}{\sum_{i=1}^{N_s} W_e^i}\sum_{i=1}^{N_s} W_e^i \frac{\lambda'(\overline{E})}{\lambda'(\overline{U_1^i})\lambda'(\overline{U_2})}\frac{\vartheta'(\overline{E})}{\vartheta'(\overline{U_2})}\frac{\overline{\mathrm{d}\sigma^{\mathrm{CI}}_{k,a\to b}}}{\mathrm{d}\overline{U_1^i}}\,, \tag{4.31}$$

avec n_c la valeur de densité critique pour un laser de longueur d'onde égale à 1 nm (soit $1{,}11\times10^{27}$ m^{-3}), $\overline{E}$, $\overline{U_1^j}$ et $\overline{U_2}$ respectivement les énergies E, U_1^j et U_2 normalisées par m_ec^2 et enfin λ' et ϑ' les fonctions dérivées des Eqs. (4.23), (4.25) et définies comme suit

$$\lambda'(x) = \sqrt{x}\sqrt{1+\frac{x}{2}}\,(1+x)\,, \tag{4.32}$$

$$\vartheta'(x) = \sqrt{\frac{x\,(x+2)}{(x+1)^2}}\,. \tag{4.33}$$

Afin d'avoir une première idée des ordres de grandeur de ces sections efficaces de TBR, nous considérons l'exemple simple d'une collision à trois corps électron-électron-ion (ce qui revient à ne considérer qu'un seul macro-électron de fond) pour un ion Al^+ dans son état fondamental (la recombinaison se fera donc en sous-couche M_2) dans un plasma à densité solide ($\rho = 2.7$ g/cm^3). Nous avons tracé en Fig. 4.11 l'amplitude de $\sigma^{\mathrm{TBR}}_{k,b\to a}$ en fonction de l'énergie des deux électrons U_1 et U_2. Si l'on pouvait raisonnablement s'attendre à trouver une symétrie entre les deux électrons, on voit sur cette figure que ça n'est pas tout à fait le cas, car ces deux électrons ne sont pas indifférenciés : la section efficace différentielle de CI est calculée en fonction de l'énergie électronique U_1, comme nous pouvons le voir dans l'Eq. (4.30). Nous verrons dans les cas tests que cette hypothèse n'a finalement que peu

d'impact sur la précision du calcul de la TBR puisque les macro-électrons d'une maille de simulation peuvent jouer successivement le rôle d'électron de la paire et d'électron du bain électronique. Nous y reviendrons en conclusion de ce manuscrit, au Chap. 9, lorsque nous esquisserons des pistes d'amélioration de nos modèles. On voit sur cette figure que la section efficace de TBR décroît de façon monotone avec l'énergie des électrons. À son maximum, pour des températures très faibles (de l'ordre de l'eV), elle atteint 10^{-24} m^2, soit plusieurs ordres de grandeurs de moins que la section efficace de CI pour la même sous-couche électronique[1]. Cette constatation nous a mené à envisager un appel du module de TBR moins fréquent que celui de CI, dans le but de réduire le temps de calcul. Le test présenté en Sec. 4.2.4.5 aura pour objet de mettre en lumière l'effet de la fréquence d'appel de la TBR sur la physique du système et sur le temps de calcul.

[1] Voir la Fig. 4.2a

Sur le modèle du calcul de la probabilité de CI (Eq. (4.15)), on peut finalement estimer, pour chaque couple électron-ion, une valeur de probabilité de TBR

$$P^{\text{TBR}} = 1 - \exp\left(-|v_{\text{rel}}| \frac{n_e n_i}{n_{ei}} \sigma_k^{\text{TBR}} \Delta t\right), \tag{4.34}$$

où v_{rel} est la vitesse relative des deux particules (qui est équivalente à $c\vartheta(U_2)$), n_e et n_i respectivement les densités électronique et ionique, $n_{ei} = \sum \min(W_e, W_i)/V$ la densité croisée avec W_e et W_i les poids statistiques de l'électron et de l'ion et V est le volume d'une maille. Δt est le pas de temps utilisé dans la simulation. Comme décrit en Sec. 4.1.3, on compare alors cette probabilité avec un nombre aléatoire ξ tiré entre 0 et 1, la recombinaison se produisant si $\xi \leq P^{\text{TBR}}$.

4.2.3.2 Sélection des macro-électrons constituant le fond électronique

Si l'ajout du module de coalescence des macro-particules[1] permet dans la majeure partie des cas de limiter grandement le nombre de macro-particules, elle n'est pas toujours suffisante pour maintenir un temps de calcul raisonnable, en particulier pour certaines simulations 2D finement résolues. En effet, nous avons pu constater que la prise en compte de la CI et de la TBR dans les simulations pouvait entraîner une création de macro-particules parfois importante, comme nous le verrons en Sec. 4.2.3.4.

[1] Chap. 2, Sec. 2.4.

Idéalement, le fond électronique devait être constitué de l'ensemble des macro-électrons de la maille de simulation, en excluant bien sûr le macro-électron de la paire. Si cette méthode est théoriquement la plus judicieuse d'un point de vue statistique, nous avons pu constater qu'une augmentation du nombre de macro-électrons pouvait, dans certaines simulations, conduire à des temps de calcul rédhibitoires. Cet effet est intrinsèquement lié au fait que, pour chaque paire électron-ion, nous devons procéder à une boucle sur tous les électrons de la maille. Nous verrons dans la Sec. 4.2.3.4 concernant la modification des macro-particules lors de la TBR que, contrairement à la CI, les modifications doivent se faire au fur et à mesure du processus. Comme les électrons peuvent subir des modifications, la somme exprimée de l'Eq. (4.30) doit être recalculée pour chaque paire électron-ion. Ceci conduit, dans l'hypothèse d'un échantillon correspondant à l'ensemble des macro-électrons de la maille, à un nombre de calculs élémentaires proportionnel à $\max(N_e, N_i) \times (N_e - 1)$. En fixant un nombre fini de macro-électrons de fond, N_s, le nombre de calculs élémentaires devient alors proportionnel à $\max(N_e, N_i)$.

En premier lieu, nous avons vu en Sec. 4.2.3.1 que la section efficace de TBR diminuait rapidement avec l'énergie des électrons. Nous avons donc décidé d'exclure systématiquement les macro-électrons ayant une énergie supérieure à 10 keV, qui, dans l'interaction laser-plasma

relativiste, est généralement l'énergie seuil permettant de distinguer les électrons thermiques des électrons supra-thermiques[2].

[2] Chap. 1, Sec. 1.1.

S'est alors posée la question du critère d'échantillonnage parmi les macro-électrons thermiques. Plusieurs possibilités, plus ou moins élaborées, se présentaient : sélectionner les particules les plus lentes (et donc les plus aptes à recombiner au regard des sections efficaces de TBR), ou alors les particules dont le poids statistique est le plus élevé, etc. Au final, nous avons opté pour le choix le plus simple, consistant à sélectionner les N_s macro-électrons de fond au hasard parmi les macro-électrons de la maille, sans considération d'énergie ou de poids statistique, et qui se révèle être le choix le plus économique en terme de temps de calcul puisqu'il ne nécessite aucun tri mais simplement N_s tirages aléatoires, ce qui est relativement rapide. Ces macro-électrons sélectionnés ont pour but de représenter statistiquement tous les macro-électrons de la maille pour calculer la section efficace de TBR donnée en Eq. (4.30). En revanche, la densité électronique n_e utilisée dans cette même équation est calculée en prenant en compte tous les macro-électrons de la maille. Aussi, nous verrons en Sec. 4.2.3.4 que seuls les macro-électrons échantillonnés feront l'objet de possibles modifications liées à la TBR.

Dans les cas particuliers où le nombre de macro-électrons thermiques est inférieur au nombre d'échantillonnage N_s, nous prendrons l'intégralité des macro-électrons thermiques pour constituer le bain électronique environnant. Pour les simulations les moins coûteuses numériquement, comme par exemple les simulations 0D Monte Carlo, présentées dans la suite de ce chapitre, l'échantillonnage de tous les macro-électrons de la maille, $N_s = N_e$, reste généralement viable en termes de coût numérique.

Dans la Sec. 4.2.4.6, nous nous intéresserons à l'effet de cet échantillonnage des macro-électrons de fond sur la cinétique atomique ainsi que sur le temps de calcul des simulations PIC.

4.2.3.3 Calcul de la dégénérescence des sous-couches électroniques

Le modèle de CI implémenté dans Calder repose sur les sections efficaces résolues sur les sous-couches électroniques fournies par [Kim *et al.*, 2000]. Nous sommes donc en mesure de sélectionner, par le biais d'un tirage Monte Carlo et au regard de ces sections efficaces, quelle sous-couche allait être ionisée. La TBR étant le processus inverse de la CI, elle peut théoriquement se produire dès lors qu'une lacune est présente sur une des sous-couches électroniques de l'ion. Néanmoins, la création d'une lacune électronique sera le point de départ d'un phénomène de désexcitation atomique par cascade, dont le modèle et l'implémentation dans Calder sont présentés au Chap. 5. Nous verrons, en outre, que ce modèle de désexcitation sera instantané, ce qui implique qu'une lacune créée par CI (ou par photoionisation, comme nous le verrons au Chap. 6) est comblée immédiatement. L'ion se trouve donc toujours dans son état fondamental. On considérera alors, dans notre modèle de TBR, que la recombinaison n'est possible que dans la sous-couche électronique incomplète la plus externe.

Dans le cas général, la dégénérescence d'une configuration est égale au produit de la dégénérescence de chaque sous-couche électronique. Dans notre cas, comme les ions sont dans leur état fondamental et que la dégénérescence d'une sous-couche électronique complète est de 1, les facteurs de dégénérescence g_a et g_b, apparaissant dans le calcul de la section efficace de TBR en Eq. (4.30), sont égaux à la dégénérescence de la sous-couche la plus externe des configurations a et b. Pour l'illustrer, nous pouvons nous intéresser à l'exemple d'un atome d'Aluminium dans un état a d'Al^{5+} et un état b d'Al^{6+}. On voit sur la Fig. 4.12 que l'ion Al^{5+} possède deux électrons sur la sous-couche la moins énergétique (L_3) qui peut contenir un maximum de quatre électrons, ce qui correspond à une dégénérescence de $\binom{4}{2} = 6$.

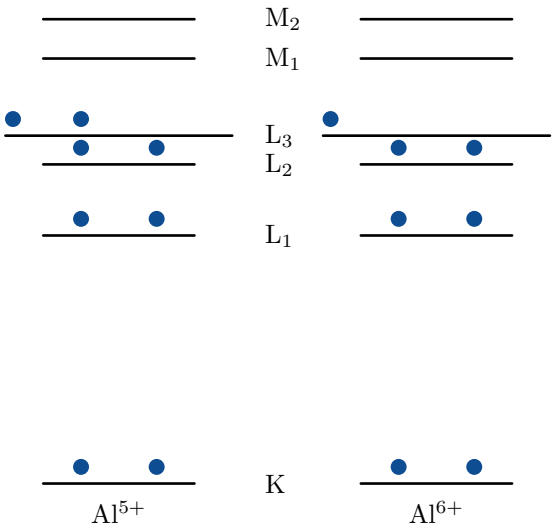


FIGURE 4.12 – Dans notre module pour le calcul de la section efficace de TBR, la dégénérescence d'un état donné, ici Al^{5+} et Al^{6+}, est directement égale à la dégénérescence de la dernière sous-couche électronique incomplète (L_3 dans nos deux exemples).

Pour l'ion Al^{6+}, nous obtiendrons $\binom{4}{1} = 4$.

4.2.3.4 Modification des macro-particules

Plus tôt dans ce chapitre, nous avons expliqué avoir adopté une vision moyennée de la TBR afin de réduire le système à trois corps électron-électron-ion à un système à deux corps, plongé dans un bain électronique constitué de ce que nous appelons les électrons de fond, à savoir un échantillon des macro-électrons de la maille de simulation. Nous avons également vu que, lors de ce processus atomique, un des deux électrons allait combler une lacune électronique d'un ion, ce dernier passant d'une charge électrique Z^* à une charge $Z^* - 1$. Le second électron permet de récupérer le surplus en énergie de l'électron recombinant, plus l'énergie de liaison de la sous-couche électronique concernée. Dans notre modèle réduit, nous avons dû décider qui de l'électron de la paire ou du bain électronique allait recombiner ou recevoir cette énergie. Il nous a paru plus judicieux de transmettre l'énergie à l'électron de la paire plutôt que de la diluer en la distribuant sur l'ensemble du bain électronique. Parallèlement, la disparition de l'électron recombinant sera modélisée par un abaissement du poids statistique des électrons de fond.

Nous avons fait le choix de diminuer le poids statistique des macro-électrons de fond proportionnellement à leur contribution dans le calcul de la section efficace de TBR. On peut en effet réécrire l'Eq. (4.30) sous la forme suivante

$$\sigma^{\mathrm{TBR}}_{k,b\to a} = \frac{1}{\sum\limits_{j=1}^{N_s} W_e^j} \sum_{j=1}^{N_s} W_e^j \sigma_k^{\mathrm{TBR}}(U_1^j)\,, \tag{4.35}$$

où $\sigma_k^{\mathrm{TBR}}(U_1^j)$ est la contribution de l'électron de fond d'énergie U_1^j à la section efficace totale $\sigma^{\mathrm{TBR}}_{k,b\to a}$. Les macro-électrons verront donc leur poids statistique diminué proportionnellement à celui de l'ion et de leur section efficace de TBR spécifique. On peut alors exprimer l'abaissement du poids statistique du bain électronique comme suit

$$W_e^j(t+\Delta t) = W_e^j(t) - \frac{W_i(t)W_e^j(t)\sigma_k^{\mathrm{TBR}}(U_1^j,t)}{\sum_{j=1}^{N_s} W_e^j(t)\sigma_k^{\mathrm{TBR}}(U_1^j,t)}\,, \tag{4.36}$$

où $W_e^j(t)$ et $W_i(t)$ sont respectivement les poids statistiques du j-ème macro-électron du bain électronique et du macro-ion à l'instant t. Grâce à cette méthode, le poids statistique électronique qui disparaît de la simulation est égal au poids de l'ion, permettant une conservation exacte de la charge. En même temps, le macro-électron de la paire reçoit l'énergie perdue par les macro-électrons de fond recombinant et l'énergie de liaison de la sous-couche électronique concernée par la TBR :

$$U_2(t+\Delta t) = U_2(t) + \frac{\sum_{j=1}^{N_s} W_e^j(t)\sigma_k^{\mathrm{TBR}}(U_1^j,t)U_1^j(t)}{\sum_{j=1}^{N_s} W_e^j(t)\sigma_k^{\mathrm{TBR}}(U_1^j,t)} + B_k\,, \tag{4.37}$$

où on rappelle que $U_2(t)$ est l'énergie du macro-électron de la paire de Nanbu dans le référentiel de l'ion, $W_e^j(t)$ et $U_1^j(t)$ respectivement le poids statistique et l'énergie du macro-électron de fond j à l'instant t et B_k l'énergie de liaison de la sous-couche k.

Comme nous voulons éviter que les électrons de fond aient un poids négatif après leur modification par le module de TBR, on déduit de l'Eq. (4.36) la condition suivante :

$$W_i(t) \leq \frac{\sum_{j=1}^{N_s} W_e^j(t)\sigma_k^{\mathrm{TBR}}(U_1^j,t)}{\sigma_k^{\mathrm{TBR}}(U_1^m,t)}\,, \tag{4.38}$$

m étant l'indice de l'électron de fond pour lequel la section efficace particulière est maximale. Cette condition n'est bien sûr pas toujours remplie : si nécessaire, il faudra alors procéder à la fragmentation du macro-ion, créant un fragment de poids statistique exactement égal au terme de droite de l'Eq.(4.38), qui est le fragment recombinant, et un autre fragment dont le poids statistique sera égal à la différence entre le poids statistique avant fragmentation et celui recombinant.

Dans ce cas de figure, le poids statistique du fragment d'ion recombinant est tel que l'abaissement des poids statistiques décrit en Eq. (4.36) engendrera un poids statistique nul pour le macro-électron m. Cette particule de poids nul, que nous appelons "particule fantôme", sera à terme supprimée de la simulation. Pour éviter de possibles artefacts numériques liés à cette suppression, cette dernière se fera, pour toutes les macro-particules fantômes, après le module de TBR.

Comme pour la CI, nous utilisons la méthode décrite dans [Pérez *et al.*, 2012], consistant à appliquer les modifications sur les macro-particules avec une certaine probabilité dépendante des poids statistiques des particules de la paire de Nanbu. Dans le cas où l'ion a un poids statistique inférieur à celui de l'électron, la charge ionique est modifiée et le poids statistique des électrons de fond est réduit avec une probabilité de 1. Le gain d'énergie électronique de la paire sera appliqué avec une probabilité de W_i/W_e. Par contre, si $W_i > W_e$, la modification de l'ion et des électrons de fond sera appliquée avec une probabilité de W_e/W_i tandis que le macro-électron de la paire sera modifié avec une probabilité de 1.

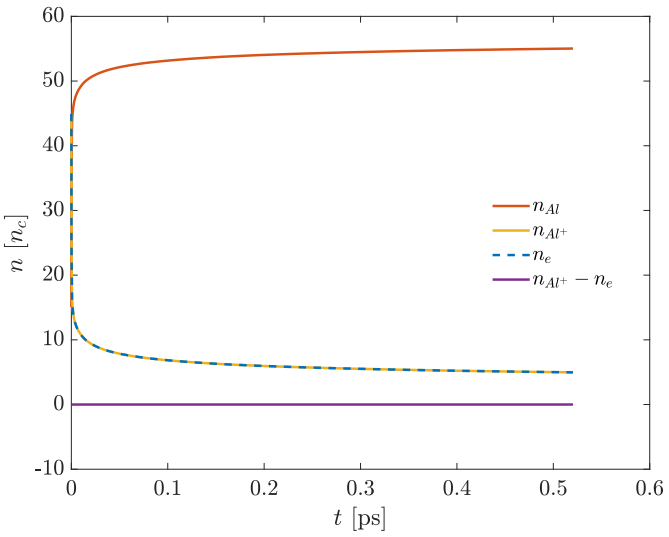


FIGURE 4.13 – Évolution de la densité des atomes d'Al neutre (orange) des ions Al^+ (jaune) et des électrons (bleu). Nous avons tracé en violet l'évolution temporelle de la charge électrique totale $n_{Al^+} - n_e$, que l'on voit rester constante. Ces simulations sont faites dans un plasma d'Al solide ($\rho = 2.7$ g/cm^3) initialement à $T_i = T_e = 1$ eV.

4.2.4 Tests de validation

Nous présentons dans cette section une variété de tests, dans le but de valider les différents aspects du nouveau module de TBR. Nous présentons en Sec. 4.2.4.1 les tests effectués pour la conservation de la charge et de l'énergie. Nous examinons en Sec. 4.2.4.2 la fiabilité des valeurs de section efficace et du taux de recombinaison par une confrontation avec un modèle intégré sur une distribution électronique de type Fermi-Dirac. Dans la Sec. 4.2.4.3, nous mettons en évidence l'effet de la variation du nombre de macro-électrons sur le système physique. La Sec. 4.2.4.4 est consacrée à la comparaison entre le modèle de Saha pour un plasma d'Hydrogène et les résultats de simulation de CALDER. Enfin, les Secs. 4.2.4.5 et 4.2.4.6 illustrent l'impact de la fréquence d'appel du module de TBR et de l'échantillonnage du bain électronique sur la dynamique du plasma et le temps de calcul.

4.2.4.1 Conservation de la charge et de l'énergie

Pour tester la conservation de charge, nous initialisons un plasma d'Al^+ à densité solide correspondant, dans les unités de CALDER[1] à des densités électronique et ionique $n_i = n_e = 60\ n_c$, un nombre de macro-particules par maille $N_i = N_e = 50$ et une température $T_i = T_e = 1$ eV afin de favoriser la TBR, puisque nous avons vu sur la Fig. 4.11 que la TBR était favorisée par des températures faibles. On laisse alors le plasma relaxer pendant quelques centaines de femtosecondes. Nous avons tracé en Fig. 4.13 l'évolution temporelle de la densité des ions Al^+ (jaune), des atomes Al (orange) et des électrons (bleu pointillés) ainsi que la charge totale du système (violet), matérialisée par la quantité $n_{Al^+} - n_e$. Lors de la recombinaison, la quantité d'ions Al^+ diminue, exactement de la même façon que la densité électronique puisque nous avons vu en Sec. 4.2.3.4 que les ions et les électrons du bain électronique (c'est-à-dire les électrons dont le poids diminue lors de la TBR) étaient modifiés de façon parallèle. On constate par ailleurs que la charge totale, représentée par la courbe violette, reste parfaitement constante dans le temps. Symétriquement, on observe bien une augmentation de la densité d'Al neutre due à la recombinaison des ions Al^+.

[1] Voir le Chap. 2.

En ce qui concerne l'énergie, nous voyons sur la Fig. 4.14 que la valeur de l'énergie totale (courbe verte), fluctue autour de la valeur de l'énergie initiale totale (pointillés violets). Ces fluctuations sont dues à la nature Monte Carlo de notre méthode de modification des macro-particules décrite dans la Sec. 4.2.3.4. On voit sur cette figure que l'amplitude de ces fluctuations reste modeste, de l'ordre de 0.016 % pour l'écart le plus important.

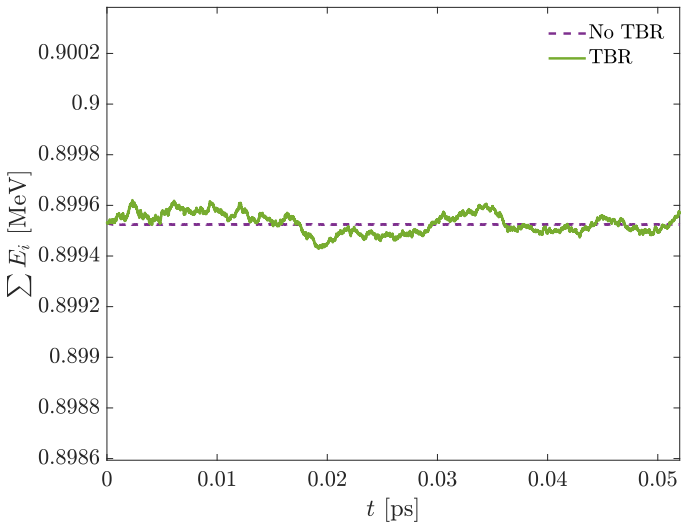


FIGURE 4.14 – Évolution au cours du temps de l'énergie totale du système dans un plasma d'Al solide ($\rho = 2.7$ g/cm^3) sans TBR (violet) et avec TBR (vert).

4.2.4.2 Comparaison avec le taux théorique de TBR et bilan détaillé

La comparaison du taux de TBR calculé par CALDER avec le taux théorique de l'Eq. (4.27), obtenu par double intégration de la section efficace différentielle de TBR sur toutes les valeurs d'énergie possibles pour les électrons, permet d'avoir une bonne idée de la fiabilité de notre module de TBR. Le calcul analytique suppose de faire une hypothèse sur la fonction de distribution des électrons. Nous décidons d'utiliser la même fonction de distribution de Fermi-Dirac que celle donnée dans [Faussurier & Blancard, 2017]. Pour le calcul de ce taux, nous faisons l'approximation que les électrons de fond et les électrons des paires de Nanbu sont identiques, ce qui sera vrai pour le premier pas de temps des simulations puisque tous les électrons seront initialisés de la même façon.

En plus de cette comparaison, nous souhaitons vérifier la validité du DB, donné en Eq. (4.17). Si la valeur des taux de réactions dans CALDER est relativement simple à estimer, il nous faut calculer la valeur du potentiel chimique η dont l'expression, définie en Eq. (4.18), n'est pas triviale. Nous avons vu sur la Fig. 4.11 que la TBR était d'autant plus importante que les énergies des électrons mis en jeu étaient basses et nous nous placerons donc dans un contexte de température modérée (< 1 keV) pour ce test. Cette hypothèse nous permet d'utiliser la forme classique de l'Eq. (4.18) [Faussurier & Blancard, 2017], valable dans les régimes non relativistes

$$n_e \approx 2e^{\eta} \left(\frac{m_e k_B T_e}{2\pi\hbar} \right)^{3/2} . \tag{4.39}$$

Le but de ce test est d'effectuer plusieurs simulations avec différentes températures électroniques soit en partant d'un état a et en n'activant que le processus de CI afin d'estimer le taux de TBR grâce aux Eqs. (4.17) et (4.39), soit en partant d'un état b, lié à l'état a par le mécanisme de micro-réversibilité CI/TBR et en n'activant que la TBR afin, là encore, d'en estimer le taux.

Dans CALDER, les taux de CI et de TBR seront calculés de la même façon que dans la Sec. 4.1.4.4, c'est-à-dire en calculant la dérivée de la charge ionique moyenne $\langle Z^* \rangle$ par rapport au temps. Nous avons effectué ce test grâce à des simulations 0D de type Monte Carlo, avec un plasma d'Al$^+$ (état a) pour les taux de CI et d'Al^{2+} (état b) pour les taux de TBR avec une

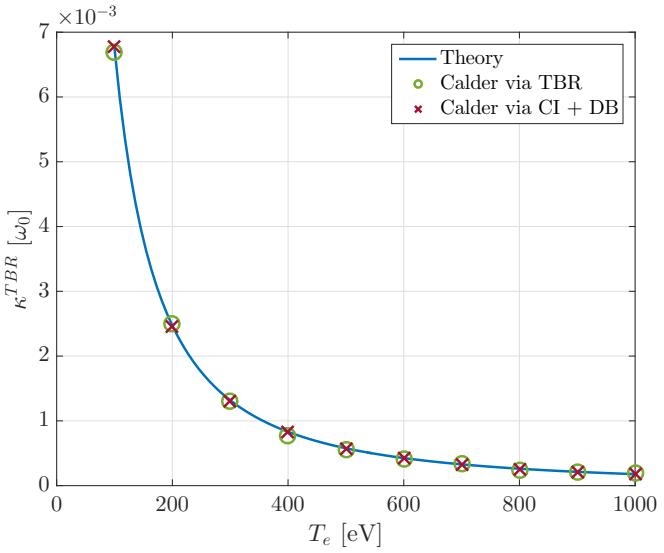


FIGURE 4.15 – Évolution du taux de TBR initial en fonction de la température électronique T_e. La ligne bleue continue correspond au taux théorique tel que défini dans l'Eq. (4.27), les cercles verts sont les valeurs calculées par CALDER via le module de TBR et les croix rouges sont celles calculées via le module de CI et le DB défini en Eq. (4.17).

densité solide ($\rho = 2{,}7$ g/cm^3), un nombre de macro-particules par maille $N_i = N_e = 2000$ sur 10^4 mailles, pour un unique pas de temps avec $\Delta t = 5.2$ as. La température ionique est initialisée à $T_i = 0$ eV et on test plusieurs valeurs pour la température électronique T_e, allant de 100 eV à 1 keV.

Nous voyons sur la Fig. 4.15 que les taux de TBR obtenus par CALDER, soit de façon directe (ronds verts), soit en passant par le DB (croix rouges), coïncident de façon très satisfaisante avec le taux théorique (courbe bleue). On notera également la décroissance du taux avec la température électronique, comme nous pouvions nous y attendre au regard de la Fig. 4.11.

4.2.4.3 Variation du nombre de macro-électrons

Notre modèle de TBR, basé sur la réduction du triplet électron-électron-ion à une paire électron-ion immergé dans un bain électronique, pose légitimement la question de l'impact du nombre de macro-électrons sur les résultats de simulation. Un test simple, dont les résultats sont présentés en Fig. 4.16, consiste à calculer le taux de TBR initial, de la même manière que pour le test précédent (Sec. 4.2.4.2), en fonction du nombre initial de macro-électrons par cellule. Les simulations 0D sont faites dans un plasma d'Aluminium solide ($\rho = 2.7$ g/cm^3), de charge $Z^* = 1$ avec des températures $T_i = 0$ eV et $T_e = 1$ keV. Nous activons seulement les processus de TBR et de collisions coulombiennes. Le nombre de macro-électrons par maille varie de $N_e = 10$ à $N_e = 400$ macro-électrons par maille sur un total de 10^4 mailles de simulation. Pour chacun de ces cas, nous avons également fait varier le nombre de macro-ions par maille en testant les valeurs suivantes : 100, 200 et 300. On voit sur cette figure que les taux de TBR restent proches en fonction du nombre de macro-électrons utilisés, malgré la présence de fluctuations inhérentes à la méthode Monte Carlo.

4.2.4.4 Comparaison avec le modèle de Saha pour l'Hydrogène

Le modèle de Saha décrit la distribution des états ioniques d'un milieu partiellement ionisé à l'équilibre, notamment en donnant la relation directe entre les densités des différentes espèces impliquées en fonction de la température du plasma, des dégénérescences et des énergies de liaison des sous-couches électroniques. Il fournit une base comparative simple pour valider les résultats de CALDER à l'état stationnaire, où la température électronique régit la cinétique atomique.

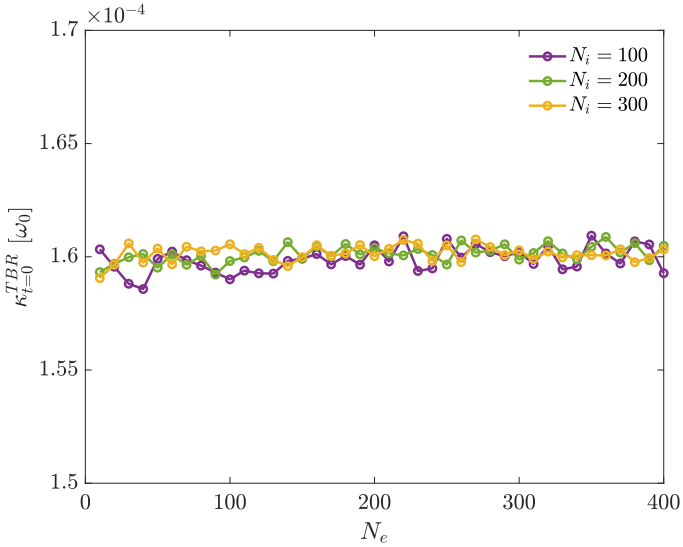


FIGURE 4.16 – Évolution du taux de TBR initial en fonction du nombre initial de macro-électrons pour un nombre initial de macro-ions de 100 (en violet), 200 (en vert) et 300 (en jaune) avec $T_i = 0$ eV, $T_e = 1$ keV et une densité solide (pour l'Aluminium $\rho = 2.7$ g/cm^3).

Pour ce test, nous nous intéressons au cas de l'Hydrogène qui a la particularité de présenter une solution analytique puisque cet élément ne présente que deux états de charge possibles. On suppose un plasma initialement composé d'ions H^+ à haute densité ($n_i = n_e = 1.11 \times 10^{22}$ cm^{-3}). Le but est de déduire, en fonction de la température électronique, la proportion d'atomes neutres ainsi que celle des protons H^+. Dans ce système simple, l'équation de Saha établit une relation entre les densités des espèces en présence :

$$\frac{n_{\mathrm{H}^+} n_e}{n_{\mathrm{H}}} = \frac{2}{\Lambda^3} \frac{g_{\mathrm{H}^+}}{g_{\mathrm{H}}} \exp\left(-\frac{B_{\mathrm{H}}}{k_B T_e}\right) , \tag{4.40}$$

avec n_{H} la densité d'Hydrogène neutre et n_{H^+}, n_{0,H^+} et $n_{0,e}$ les densités initiales des protons et électrons, g_{H} et g_{H^+} les dégénérescences des états neutre et ionisé, B_{H} l'énergie de liaison de l'Hydrogène[1], T_e la température électronique et Λ la longueur d'onde thermique de de Broglie. La somme des densités étant égale à la densité initiale de protons injectés dans notre système

[1] Environ 13,598 eV.

$$n_{\mathrm{H}^+} + n_{\mathrm{H}} = n_{0,\mathrm{H}^+} , \quad n_{0,\mathrm{H}^+} = n_{0,\mathrm{e}} , \tag{4.41}$$

ce qui nous permet de déduire l'évolution de la densité d'atomes H en fonction de la température du plasma

$$n_{\mathrm{H}}^2 - n_{\mathrm{H}} \left(n_{0,\mathrm{H}^+} + n_{0,e} + \frac{2}{\Lambda^3} \frac{g_{\mathrm{H}^+}}{g_{\mathrm{H}}} \exp\left[-\frac{B_{\mathrm{H}}}{k_B T}\right] \right) + n_{0,\mathrm{H}^+} + n_{0,e} = 0 , \tag{4.42}$$

Nous utilisons un nombre de macro-particules par maille $N_i = N_e = 200$ sur 10^4 mailles. Plusieurs valeurs de températures $T_i = T_e$ sont testées et nous n'activons ici que la CI, la TBR et les collisions coulombiennes. Les résultats sont présentés dans la Fig. 4.17. Les simulations nécessitant un temps de calcul relativement long pour atteindre l'équilibre (généralement atteint après plusieurs picosecondes), leur nombre est limité à cinq. Les valeurs de densité prédites par CALDER sont très proches des valeurs théoriques prédites par Saha, ce qui nous permet d'être optimiste sur la description de l'équilibre CI/TBR permise par notre nouveau

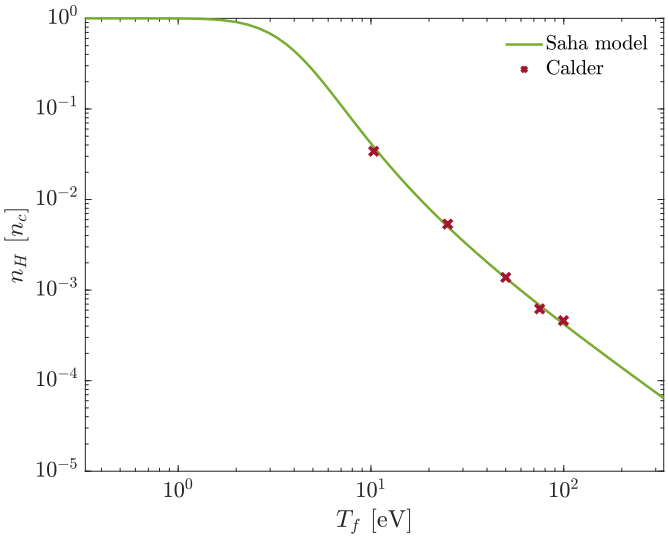


FIGURE 4.17 – Comparaison de la densité d'atomes d'Hydrogène neutres prédite par le modèle théorique de Saha (courbe verte continue) et les simulations CALDER (croix rouges) pour différentes températures d'équilibre du plasma T_f. La densité atomique est fixée à $n_i = n_e = 1.11 \times 10^{22}$ cm^{-3}.

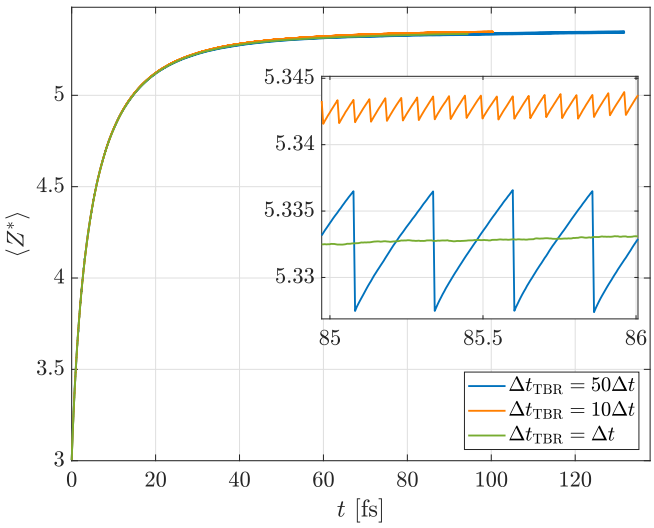


FIGURE 4.18 – Évolution de la charge ionique moyenne en fonction du temps dans un plasma d'Aluminium solide ($\rho = 2{,}7$ g/cm^3) initialement à $Z^* = 3$ et de températures $T_i = T_e = 200$ eV. On fait varier la fréquence d'appel du module de TBR en prenant $\Delta t_{\mathrm{TBR}} = 50\Delta t$ (en bleu), $\Delta t_{\mathrm{TBR}} = 10\Delta t$ (en orange) et $\Delta t_{\mathrm{TBR}} = \Delta t$ (en vert).

module de TBR. Une autre comparaison au modèle de Saha sera effectuée dans la dernière section de ce chapitre, ainsi qu'au Chap. 7.

4.2.4.5 Impact de la fréquence d'appel de la TBR

Le fait que le taux de TBR soit généralement plus faible que celui de CI (Sec. 4.2.3.1) dans nos simulations à haute densité d'énergie nous a amené à considérer la possibilité d'utiliser un pas de temps de TBR plus important que celui de la CI ou, autrement dit, d'appeler le module de TBR avec une période temporelle plus grande que celle du module de CI. La CI n'étant que très peu coûteuse en temps de calcul, elle est souvent appelée à chaque pas de temps PIC (celui-ci étant généralement de l'ordre du centième de femtoseconde). Nous allons simuler ici l'évolution d'un plasma 0D d'Aluminium solide ($\rho = 2.7$ g/cm^3) initialement chargé à $Z^* = 3$ et de températures $T_i = T_e = 200$ eV, un nombre de particules par maille $N_i = N_e = 200$ pour 10^4 mailles. Nous laissons le système relaxer pendant 1 heure de calcul sur 1000 processeurs. Nous n'activons que la CI, la TBR ainsi que les collisions coulombiennes. Pour chaque simulation, nous faisons varier la périodicité d'appel du module de TBR afin de tester les valeurs $\Delta t_{\mathrm{TBR}} = \Delta t$, $10\Delta t$ et $50\Delta t$ avec $\Delta t = 5.2$ as.

Nous avons tracé sur la Fig. 4.18 l'évolution de la charge ionique moyenne $\langle Z^* \rangle$ en fonction

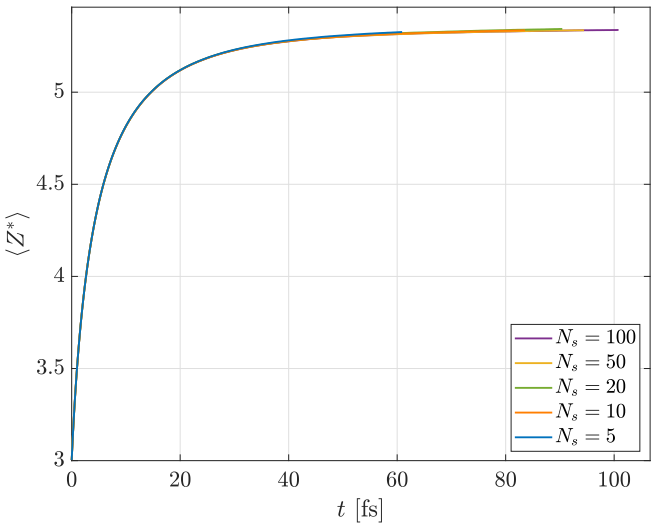


FIGURE 4.19 – Évolution de la charge ionique moyenne en fonction du temps dans un plasma d'Aluminium solide ($\rho = 2.7$ g/cm^3) initialement à $Z^* = 3$ et de températures $T_i = T_e = 200$ eV. On fait varier ici le nombre de macro-électrons dans le bain électronique en prenant $N_s = 100$ (violet), 50 (en jaune), 20 (vert), 10 (orange) et 5 (bleu).

du temps pour ces trois cas. On note premièrement que plus Δt_{TBR} est grand, plus le nombre d'itérations calculées en 1 heure est grand. De plus, et malgré de fortes disparités entre les fréquences d'appel de la TBR, les trois courbes se superposent presque parfaitement ce qui montre que, avec les paramètres physiques choisis pour ce cas test, la période d'appel de la TBR n'a que peu d'impact sur la physique pour $\Delta t_{\text{TBR}} \leq 50\Delta t$. Jouer sur ce paramètre peut donc être potentiellement intéressant pour diminuer le coût de calcul de simulations de plus grande envergure, comme les simulations 2D d'interaction laser-solide présentées au Chap. 8 par exemple.

L'effet de la périodicité d'appel de la TBR peut être observé si l'on regarde le zoom des courbes de la Fig. 4.18. Si $\Delta t_{\text{TBR}} > \Delta t_{\text{CI}}$, nous observons une évolution en dents de scie : la CI va avoir tendance à augmenter la charge ionique moyenne tandis que la TBR va corriger la charge en l'abaissant. Plus la période est grande et plus l'amplitude de ces dents de scie augmente puisqu'on laisse davantage de temps à la CI pour augmenter la charge ionique. Cette amplitude reste néanmoins très raisonnable dans l'exemple considéré.

4.2.4.6 Impact de l'échantillonnage du fond électronique

Sur le modèle du test précédent, nous voulons ici montrer l'impact du nombre de macro-électrons utilisés pour notre échantillonnage du bain électronique. Si nous pouvons, au premier abord, imaginer que le temps de calcul diminue avec le nombre de macro-électrons échantillonnés N_s, nous allons voir que la condition de fragmentation du macro-ion pour assurer la neutralité du plasma, exprimée en Eq. (4.38), peut, au contraire, augmenter le temps de calcul du fait de l'inflation du nombre de macro-ions.

Pour le montrer, nous considérons à nouveau un plasma 0D d'Aluminium solide ($\rho = 2.7$ g/cm^3) initialement chargé à $Z^* = 3$ et de températures $T_i = T_e = 200$ eV. Le nombre de particules par maille vaut toujours $N_i = N_e = 200$ et le système est composé de 10^4 mailles. Là encore, nous laissons le système relaxer pendant 1 heure de calcul sur 1000 processeurs. Le pas de temps de la TBR est le même que le pas de temps PIC ($\Delta t = 0.0098\ \omega_0$). Les processus pris en compte sont la CI, la TBR et les collisions coulombiennes. Nous faisons cette fois varier le nombre de macro-électrons constituant le bain électronique lors de la TBR, en testant les valeurs $N_s = 5$, 10, 20, 50 et 100.

La Fig. 4.19 représente l'évolution de la charge ionique moyenne $\langle Z^* \rangle$ en fonction du temps pour les différents cas. De façon générale, la taille de l'échantillon N_s n'influe que

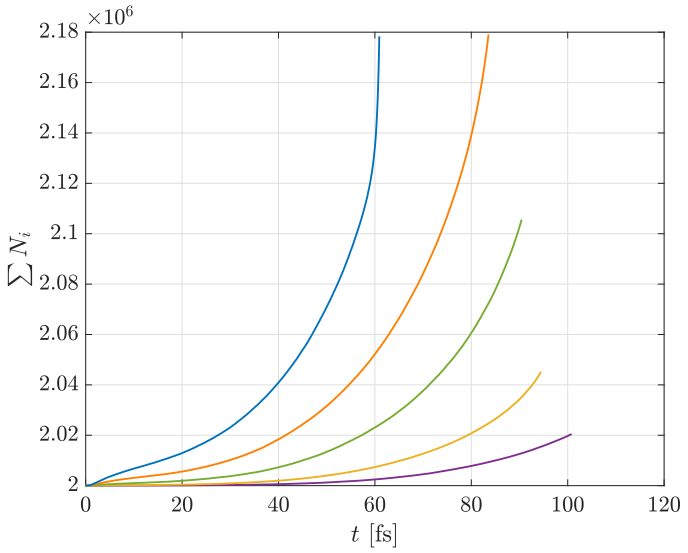


FIGURE 4.20 – Évolution du nombre total de macro-ions dans la simulation en fonction du temps dans un plasma d'Aluminium solide (ρ = 2,7 g/cm^3) initialement à $Z^* = 3$ et de températures $T_i = T_e = 200$ eV. Le nombre de particules par maille vaut initialement $N_e = N_i = 200$. On fait varier ici le nombre de macro-électrons dans le bain électronique en prenant $N_s = 100$ (violet), 50 (en jaune), 20 (vert), 10 (orange) et 5 (bleu).

très peu sur la physique du système, avec nos paramètres de simulation. Cependant, nous remarquons que plus l'échantillon est petit, moins le nombre d'itérations calculées est grand, contrairement à la tendance attendue. Pour le comprendre, nous pouvons regarder la Fig. 4.20 qui représente l'évolution du nombre total de macro-ions dans la simulation au cours du temps. On voit que plus N_s est faible, plus le nombre de macro-ions s'accroît rapidement, ce qui augmente parallèlement le temps de calcul : moins on considère de macro-électrons pour le bain électronique, plus on a de chance que le macro-ion ait un poids supérieur au terme de droite de l'Eq. (4.38). On peut en conclure que le temps de calcul économisé en abaissant le nombre de macro-électrons pour le bain électronique est plus faible que le surcoût numérique engendré par la fragmentation des macro-ions pour respecter le critère de l'Eq. (4.38).

Afin de limiter la création de nouveaux macro-ions due à la fragmentation lors de la TBR, il est nécessaire de coupler un échantillonnage réduit avec le module de coalescence. Pour s'en convaincre, nous avons relancé le cas $N_s = 5$ en appliquant la coalescence pour les ions avec un paramètre de coalescence[1] $n = 5$, une périodicité $\Delta t_{\text{coalescence}} = 50\Delta t$ et un seuil sur le nombre de macro-particules $N_{\min} = 201$. On remarque effectivement sur la Fig. 4.21 que l'application de la coalescence (courbe orange) permet d'augmenter le nombre d'itérations calculées en 1 heure, en comparaison avec le cas sans coalescence (courbe bleue).

[1] Voir le Chap. 2, Sec. 2.4.

En résumé, l'impact des paramètres numériques, Δt_{TBR} et N_s, dépend fortement des paramètres de simulation, qu'ils soient numériques comme le nombre de macro-particules initialisées par maille par exemple, ou physique comme la température des espèces en présence. Aussi, ces exemples ont davantage pour but de montrer des tendances dans un contexte de plasma à densité solide, plutôt que d'établir une règle générale. Pour chaque simulation, l'utilisateur doit prendre soin de réfléchir à un jeu de paramètres pertinents, qui permette de garantir une bonne fiabilité des résultats physiques ainsi qu'un temps de calcul raisonnable.

4.2.5 Effets de la recombinaison à trois corps sur la cinétique des plasmas à densité solide

Cette dernière section vise à mettre en évidence les apports du nouveau module de TBR à la description des systèmes à haute densité. Pour ce faire, nous avons effectué des simulations 0D Monte Carlo d'Aluminium solide ($\rho = 2.7$ g/cm^3) initialement à $Z^* = 3$, un nombre de macro-particules par maille $N_i = N_e = 200$ sur les 10^4 mailles de la grille. Le plasma

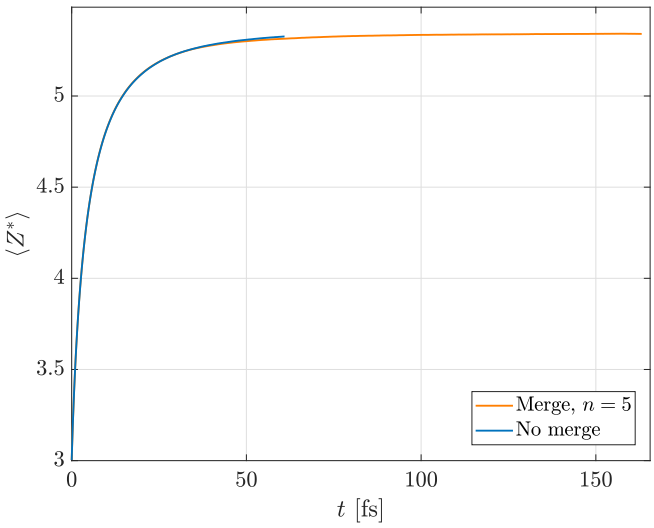


FIGURE 4.21 – Évolution de la charge ionique moyenne en fonction du temps dans un plasma d'Aluminium solide ($\rho = 2.7$ g/cm^3) initialement à $Z^* = 3$ et de températures $T_i = T_e = 200$ eV. Le calcul de la TBR se fait avec $N_s = 30$. La courbe bleue montre le cas sans coalescence des macro-particules tandis que la courbe orange montre le cas avec un paramètre de coalescence $n = 5$.

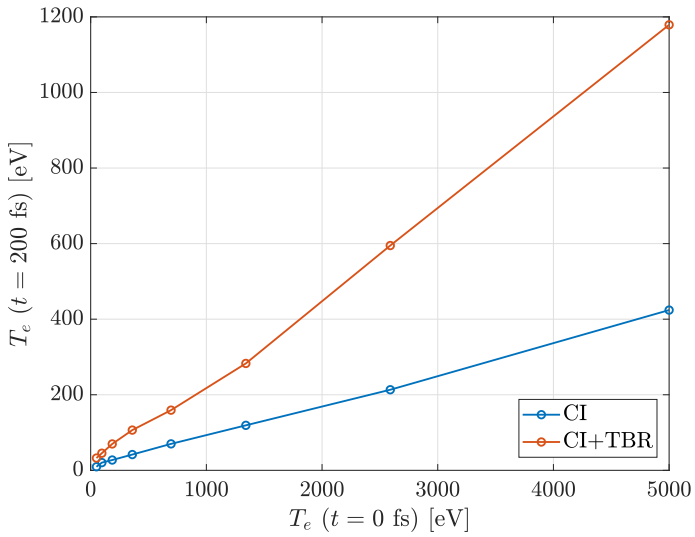


FIGURE 4.22 – Température électronique après 200 fs d'évolution d'un plasma d'Al solide (initialisé avec $Z^* = 3$) en fonction de sa température initiale. En rouge avec CI et TBR, en bleu, avec CI seulement.

est initialisé avec différentes températures : $T_i = T_e = 50$, 97, 187, 360, 695, 1341, 2590, et 5000 eV. Nous appelons le module de TBR tous les 5 pas de temps PIC avec un nombre de macro-électrons $N_s = 30$ pour l'échantillonnage du bain électronique de la TBR. La coalescence est également activée pour les macro-ions et les macro-électrons avec un paramètre de coalescence $n = 5$, une fréquence d'appel $\Delta t_{\text{coalescence}} = 50\Delta t$ et un seuil d'activation sur les macro-particules de $N_{\min} = 201$. Nous laissons le système relaxer pendant 200 fs.

Sur la Fig. 4.22, nous avons représenté l'évolution de la température électronique après 200 fs en fonction de la température initiale en présence de CI et TBR (rouge) ou de CI seulement (bleu). Une dépendance linéaire est observée dans les deux configurations, mais avec une pente plus grande quand les deux processus sont activés. Plus précisément, la température finale est environ 4 fois moins élevée que la température initiale dans le cas avec TBR alors qu'elle était 12 fois moins élevée dans le cas avec la CI uniquement. Ceci est tout simplement dû au fait que la TBR transfère de l'énergie, issue des liaisons électron-ion, aux électrons libres. Au contraire, la CI est un processus où une fraction de l'énergie des électrons libres est dissipée afin de briser la liaison d'un électron lié à l'ion.

La Fig. 4.23 représente quant à elle l'évolution de la charge ionique moyenne $\langle Z^* \rangle$ (courbe

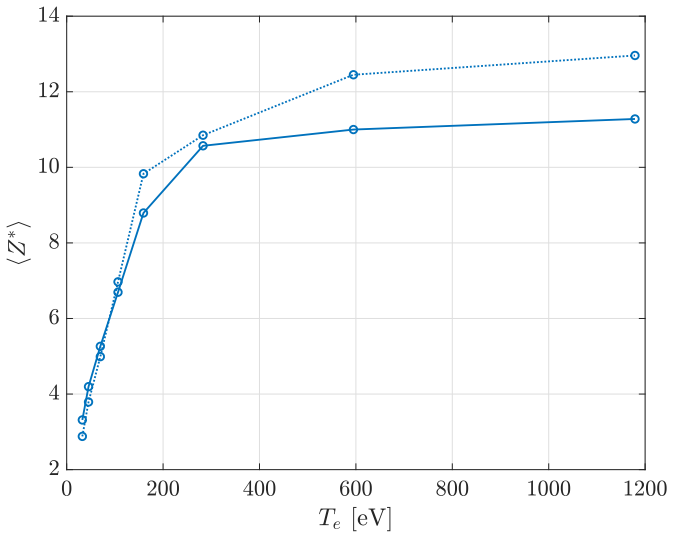


FIGURE 4.23 – Évolution de la charge ionique moyenne $\langle Z^* \rangle$ après 200 fs en fonction de la température électronique dans des simulations d'Aluminium solide ($\rho = 2.7$ g/cm^3) pour différentes températures initiales ($T_i = T_e$). Les résultats de CALDER sont regroupés sur la courbe en trait plein tandis que les valeurs prédites par le modèle de Saha sont représentés en pointillés

pleine) en fonction de la température électronique finale (après 200 fs), ainsi que les prédictions de Saha (pointillés). On remarque que les prédictions faites par Saha en fonction des températures électroniques finales sont relativement proches de celles obtenues par CALDER, en particulier pour les basses températures, témoignant de la bonne description du bilan détaillé entre la CI et la TBR. Nous noterons néanmoins un léger écart pour les températures les plus élevées, qui peut être dû au fait que plus les températures mises en jeu sont élevées, plus l'état stationnaire est long à atteindre et il se peut que les 200 fs de la simulation ne soit pas tout à fait suffisants. Pour nous en convaincre, nous avons prolongé le dernier cas où $T_i = T_e = 5$ keV jusqu'à 2 ps où nous obtenons $\langle Z^* \rangle = 12.48$ et $T_e = 1104$ eV, température pour laquelle Saha prévoit une charge ionique moyenne de 12.95, réduisant fortement l'écart observé à $t = 200$ fs. Dans le Chap. 7, nous procéderons à des simulations plus longues afin d'atteindre un quasi-équilibre thermique.

Si la charge ionique moyenne semble être reproduite de façon satisfaisante, nous pouvons aller plus loin et regarder ce qu'il en est pour la distribution des degrés de charge. Nous prenons comme exemple la simulation avec les températures initiales $T_i = T_e = 695$ eV. Nous avons tracé sur la Fig. 4.24 la distribution ionique issue de CALDER à $t = 200$ fs (en orange) et celle prédite par le modèle de Saha (en bleu). Ces deux distributions montrent un accord raisonnable, avec la présence de quelques écarts d'amplitudes modérées, principalement pour les degrés de charge $Z^* = 6$ et 10.

4.2.6 Conclusion

Nous avons réduit la TBR à une interaction à deux corps plongés dans un bain électronique. Nous avons validé cet algorithme en vérifiant qu'il reproduit le bilan détaillé ainsi que les prédictions du modèle de Saha à l'équilibre thermodynamique.

Le surcoût numérique lié à la boucle sur les électrons de fond a pu en partie être contré par l'utilisation de la coalescence des macro-particules, en jouant parallèlement sur la fréquence d'appel du module de TBR et sur le nombre de macro-électrons utilisés pour constituer le bain électronique. Nous avons vérifié que ces paramètres n'avaient pas d'impact majeur sur la cinétique atomique, à condition de rester dans une gamme raisonnable.

Dans le Chap. 7, nous procéderons à des tests similaires à ceux effectués dans la dernière section de ce chapitre mais en comparant également nos résultats avec des codes de cinétique atomique tels que FLYCHK ou SAPHYR afin de valider l'évolution temporelle de la physique

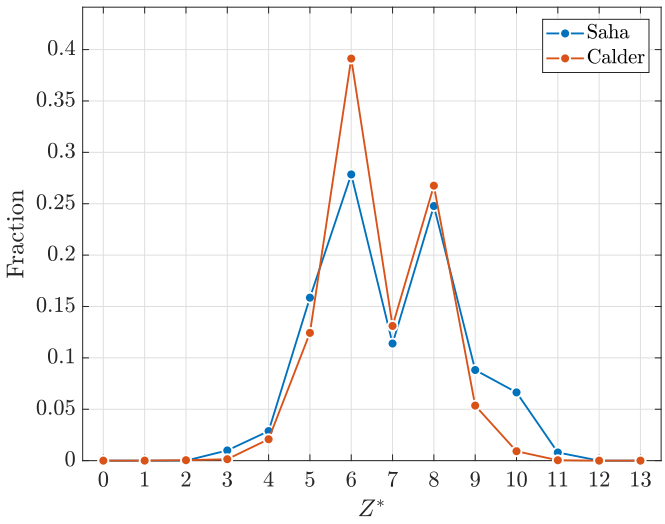


FIGURE 4.24 – Comparaison des distributions des états de charge à $t = 200$ fs pour le cas à $T_i = T_e = 695$ eV entre CALDER (en orange) et le modèle de Saha (en bleu).

atomique dans CALDER. Comme pour les autres nouveaux processus implémentés durant cette thèse, nous examinerons au Chap. 8 les effets de la TBR dans des contextes réalistes d'interaction laser-solide.

Bibliographie

Arber, T. D., Bennett, K., Brady, C. S., Lawrence-Douglas, A., Ramsay, M. G., Sircombe, N. J., Gillies, P., Evans, R. G., Schmitz, H., Bell, A. R. & Ridgers, C. P. (2015). *Contemporary particle-in-cell approach to laser-plasma modelling.* Plasma Physics and Controlled Fusion **57**, no. 11, p. 113001.

Bearden, J. A. & Burr, A. F. (1967). *Reevaluation of X-Ray Atomic Energy Levels.* Reviews of Modern Physics **39**, p. 125–142.

Carlson, T. A., Nestor Jr, C., Wasserman, N. & McDowell, J. (1970). *Calculated ionization potentials for multiply charged ions.* Atomic Data and Nuclear Data Tables **2**, p. 63–99.

Derouillat, J., Beck, A., Pérez, F., Vinci, T., Chiaramello, M., Grassi, A., Flé, M., Bouchard, G., Plotnikov, I., Aunai, N. *et al.* (2018). *Smilei : A collaborative, open-source, multi-purpose particle-in-cell code for plasma simulation.* Computer Physics Communications **222**, p. 351–373.

Faussurier, G. & Blancard, C. (2017). *Degeneracy and relativistic microreversibility relations for collisional-radiative equilibrium models.* Physical Review E **95**, no. 6, p. 063201.

Fonseca, R. A., Silva, L. O., Tsung, F. S., Decyk, V. K., Lu, W., Ren, C., Mori, W. B., Deng, S., Lee, S., Katsouleas, T. & Adam, J. C. (2002). *OSIRIS : A Three-Dimensional, Fully Relativistic Particle in Cell Code for Modeling Plasma Based Accelerators.* Springer Berlin Heidelberg p. 342–351.

Kaastra, J. S. & Mewe, R. (1993). *X-ray emission from thin plasmas. I - Multiple Auger ionisation and fluorescence processes for Be to Zn.* Astronomy and Astrophysics Supplement Series **97**, p. 443–482.

Kim, Y.-K., Santos, J. P. & Parente, F. (2000). *Extension of the binary-encounter-dipole model to relativistic incident electrons.* Physical Review A **62**, no. 5, p. 052710.

Nanbu, K. & Yonemura, S. (1998). *Weighted particles in Coulomb collision simulations based on the theory of a cumulative scattering angle.* Journal of Computational Physics **145**, no. 2, p. 639–654.

Pérez, F., Gremillet, L., Decoster, A., Drouin, M. & Lefebvre, E. (2012). *Improved modeling of relativistic collisions and collisional ionization in particle-in-cell codes.* Physics of Plasmas **19**, no. 8, p. 083104.

Royle, R., Sentoku, Y., Mancini, R. C., Paraschiv, I. & Johzaki, T. (2017). *Kinetic modeling of x-ray laser-driven solid Al plasmas via particle-in-cell simulation.* Physical Review E **95**, no. 6, p. 063203.

Vaughan, D. (1986). *X-ray data booklet. Revision.* Rapport technique, Lawrence Berkeley Lab.

Wu, D., He, X., Yu, W. & Fritzsche, S. (2018). *Particle-in-cell simulations of laser–plasma interactions at solid densities and relativistic intensities : the role of atomic processes.* High Power Laser Science and Engineering **6**.

5
Désexcitation atomique par cascade

5.1 Introduction

Les lacunes électroniques qui résultent de l'ionisation collisionnelle[1] ou de la photoionisation[2] peuvent entrainer des cascades de désexcitation. En effet, lorsqu'une lacune électronique est créée dans une sous-couche interne, un électron lié à une orbitale plus proche du continuum, peut venir combler cette lacune. Comme les deux sous-couches électroniques impliquées n'ont pas la même énergie (on redonne en Fig. 5.1 les niveaux d'énergie de l'Aluminium dans son état fondamental), le surplus en énergie de l'électron va soit être libéré sous forme d'un photon d'énergie $h\nu = \Delta E$ (ΔE étant la différence en énergie des deux orbitales) soit être fourni à un autre électron lié d'une sous-couche supérieure qui se verra éjecté dans le continuum. Nous parlons dans ce deuxième cas d'émission Auger, en référence au physicien français Pierre Auger qui a mis cet effet en évidence en 1923 [Auger, 1925]. Ces deux possibilités ne sont pas équiprobables et dépendent de chaque configuration.

[1] Chap. 4.
[2] Chap. 6.

En changeant de sous-couche électronique, l'électron lié peut créer une nouvelle lacune électronique pouvant donner lieu à de nouvelles émissions radiatives ou Auger et on voit alors se dessiner le phénomène de désexcitation par cascade. Ainsi, pour une lacune électronique donnée sur une sous-couche interne, la relaxation de l'ion jusqu'à son état fondamental peut être à l'origine de la création de plusieurs électrons Auger et photons. La désexcitation atomique est un des ingrédients principaux des spectres d'émission. En particulier, elle correspond à la contribution discrète du spectre (on parle de raies d'émission), par opposition à la contribution continue, due en grande partie au Bremsstrahlung [Reed, 2005] (pour de faibles énergies photoniques) et, dans une moindre mesure, à d'autres processus atomiques tels que la recombinaison radiative, abordée dans le Chap. 6.

Les électrons Auger ont une énergie qui varie de quelques eV à quelques keV. Ils peuvent avoir une importance capitale dans la dynamique du plasma, comme par exemple lors de l'interaction d'un intense faisceau X avec un échantillon solide, où ils vont grandement participer au chauffage du plasma [Rosmej, 2012]. Nous étudions en détail cette application au Chap. 8, Sec. 8.2.

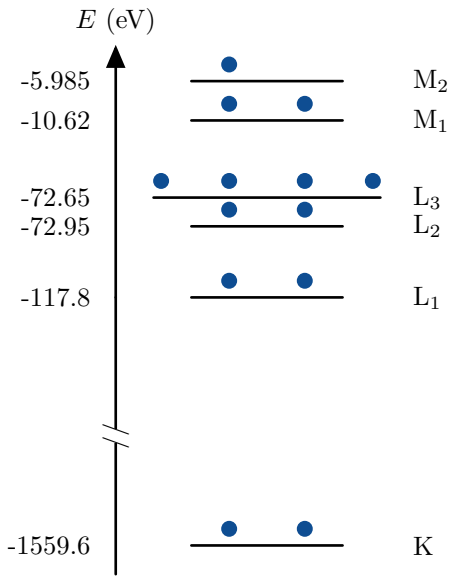


FIGURE 5.1 – Niveaux d'énergie et nombre d'occupation des sous-couches de la structure atomique fine de l'Aluminium dans son état fondamental [Martin & Zalubas, 1979].

Le changement de couche électronique d'un électron lié est soumis aux lois de la mécanique quantique et chaque transition peut être associée à une probabilité, de même que l'on peut associer un ion excité à une durée de vie moyenne [Demas, 2012]. Nous verrons dans la section suivante que le modèle de désexcitation implémenté dans le code CALDER fera l'hypothèse d'une désexcitation instantanée et ne sera donc pas en mesure de décrire ces durées de vie.

5.2 Implémentation dans CALDER

Nous pouvons facilement imaginer la richesse et la complexité du phénomène de désexcitation par cascade tant le nombre de configurations différentes est grand. C'est pourquoi le modèle que nous avons implémenté dans CALDER se limite à la présence d'une unique lacune électronique pour la configuration initiale de l'ion, simplifiant grandement les tables de probabilités d'émission instantanée sur lesquelles notre algorithme est basé. Ces tables sont tirées de [Kaastra & Mewe, 1993], pour des numéros atomiques allant de 4 (Béryllium) à 30 (Zinc). La méthode se décompose en deux temps : (i) le calcul des taux de transition pour une configuration électronique donnée ; (ii) le calcul des probabilités associées à chaque cascade de désexcitation (la cascade signifie ici la succession de transitions, radiatives et Auger, jusqu'à l'obtention d'un ion désexcité, dans son état fondamental) en utilisant ces taux de transition évalués à partir d'une approche non-relativiste du type Hartree-Fock-Slater.

La première table concerne la probabilité d'émettre n électrons Auger en fonction du triplet (Z, Z^*, k), correspondant respectivement au numéro atomique, au degré de charge ionique et à l'index de la sous-couche où se trouve la lacune électronique. La table fournie également l'énergie totale des n électrons émis E_A. La seconde table donne, pour tous les triplets (Z, Z^*, k) possibles, les transitions radiatives existantes, le rendement de fluorescence ω (correspondant à la probabilité d'émission radiative), l'énergie photonique E_p ainsi que le nombre d'électrons Auger potentiellement émis avant cette transition radiative. Pour calculer ces probabilités, [Kaastra & Mewe, 1993] expliquent procéder en deux étapes : une première étape où, à partir d'une lacune électronique unique créée dans l'état fondamental, toutes les combinaisons possibles, entre émissions radiatives et Auger, sont identifiées pour que l'ion

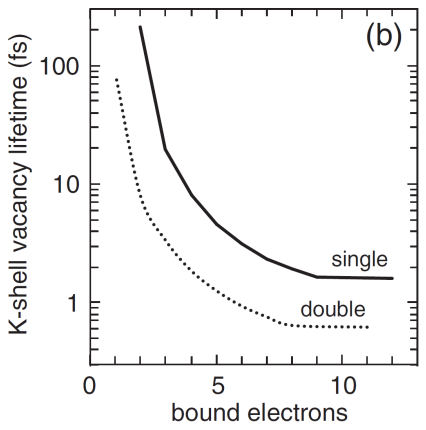


FIGURE 5.2 – Figure tirée de [Royle *et al.*, 2017] montrant l'évolution du temps de vie moyen de la lacune, unique ou double, sur la couche K de l'Aluminium en fonction du nombre d'électrons liés. Nous remarquons que plus l'Aluminium est ionisé, plus le temps de vie des lacunes augmente, phénomène qui n'est à ce jour pas décrit dans CALDER.

recouvre son état fondamental ; une deuxième où la probabilité de chacun de ces chemins est calculée. Ainsi, pour déterminer la probabilité d'une transition (qu'elle soit radiative ou non), il suffit de cumuler les probabilités de tous les chemins où apparaît cette transition. Ces deux tables permettent donc que les créations de photons et d'électrons Auger puissent être décorrélées. Pour une configuration (Z, Z^*, k) donnée, ces deux tables permettent de déduire le nombre d'électrons Auger émis, leur énergie moyenne, le nombre de photons émis ainsi que l'énergie associée à chacun d'eux.

Un autre aspect essentiel de la méthode que nous avons adoptée est de considérer comme instantanée la cascade de désexcitation. Lorsqu'une lacune sera créée sur une couche interne d'un ion, le module de désexcitation entraînera immédiatement le retour de l'ion à l'état fondamental avec la possible émission d'électrons Auger (auquel cas la charge de l'ion se trouvera augmentée) et de photons. Nous savons qu'en réalité, chaque état excité d'un ion a une durée de vie propre (la Fig. 5.2 tirée de [Royle *et al.*, 2017] donne le temps de vie moyen d'une lacune, simple ou unique, en couche K de l'Aluminium en fonction de la charge ionique), pouvant potentiellement excéder la valeur de notre pas de temps PIC (qui sera souvent de l'ordre du centième de femtoseconde). Nous décidons néanmoins, en première approximation, de forcer la désexcitation atomique à chaque pas de temps, dès lors qu'une lacune électronique est présente sur l'ion. Nous pouvons raisonnablement penser qu'une surestimation de la production d'électrons Auger, découlant de ce caractère instantané, pourra être en partie compensée par le processus de recombinaison à trois corps dont le taux augmente avec le nombre d'électrons libres dans le continuum ($\tau_{\text{TBR}} \propto n_e^2$).

Le fait que la tabulation de [Kaastra & Mewe, 1993] ne fournisse que l'énergie totale des électrons Auger émis, E_A, est problématique car l'énergie de ces électrons peut varier (de quelques eV à plusieurs keV), nous empêchant donc de décrire ce processus avec un niveau de raffinement suffisant pour nos simulations. Pour pallier ce déficit d'information, nous avons adapté l'algorithme afin de pouvoir isoler les électrons Auger issus d'une transition dites "KLL", c'est-à-dire une transition résultant d'une lacune initiale en couche K, et d'une délocalisation électronique d'une couche L à une couche K, transmettant son énergie à un électron d'une couche L qui est alors éjecté dans le continuum. En effet, les électrons Auger issus de cette transition sont les plus énergétiques, puisqu'elle implique les deux couches les plus profondes de l'atome et ce sont donc eux qui participeront principalement au chauffage de la cible lors des interactions faisceau X-solide [Royle *et al.*, 2017].

Nous pouvons donc distinguer deux cas de figure selon la localisation de la lacune en couche K ou dans une couche supérieure (L, M, N etc). Dans ce dernier cas, les tables issues de [Kaastra & Mewe, 1993] seront utilisées directement pour créer les particules résultant de

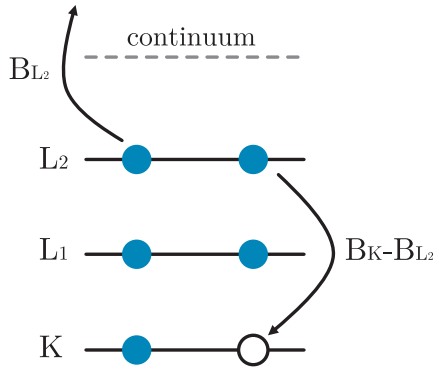


FIGURE 5.3 – Schéma d'une transition Auger de type KL_2L_2 : un électron de la couche L_2 comble la lacune en couche K, qui est alors transférée en couche L_2. L'électron transfère son surplus d'énergie, $B_K - B_{L_2}$, au second électron de la couche L_2 qui est éjecté dans le continuum avec une énergie $B_K - 2B_{L_2}$, dans le référentiel de l'ion.

la désexcitation. Dans le cas où la lacune est en couche K, nous allons diviser la cascade de désexcitation en deux étapes :

— une première consistant à remplir la lacune électronique en couche K, générant selon le tirage aléatoire un photon ou un électron Auger issu d'une transition KL_2L_3 ;

— une seconde consistant en la procédure de désexcitation habituelle via les tables issues [Kaastra & Mewe, 1993] afin de faire recouvrer son état fondamental à l'ion (dont la charge dépend du nombre d'électrons Auger émis).

Le choix d'une transition KL_2L_3 est en partie arbitraire puisque d'autres transitions telles que KL_1L_1, $KL_1L_{2,3}$ ou $KL_{2,3}L_{2,3}$ sont également possibles mais les travaux de [Huttula *et al.*, 2009] prédisent des prépondérances respectives de 2%, 23% et 75% dans le cas de l'Aluminium. De plus, [Asaad & Petrini, 1976] montrent que les transitions KL_2L_3 dominent pratiquement toujours largement les autres transitions KLL possibles. De plus les niveaux L_2 et L_3 ont des énergies relativement proches (avec par exemple une différence de 0.4 eV dans le cas de l'Aluminium neutre). Aussi, le choix d'une transition KL_2L_3 au lieu d'une autre transition KLL n'aura que peu d'impact sur l'énergie de l'électron Auger ainsi créé. Cette transition KL_2L_3 n'est possible que si la sous-couche électronique comporte au moins un électron lié, correspondant, dans le cas d'un ion Aluminium comportant une lacune en couche K, à un degré de charge maximum de 7. Lorsque l'ion considéré aura une charge de 8 ou 9, nous procéderons alors à une transition Auger KL_2L_2 (dont une illustration est donnée en Fig. 5.3) et pour des degrés de charge supérieurs, nous utiliserons directement la valeur tabulée dans [Kaastra & Mewe, 1993] en considérant alors que cet électron Auger est le seul ainsi créé.

Dans le cas d'une première transition radiative, le processus est relativement trivial puisqu'il consiste en un simple déplacement de la lacune électronique, accompagné de l'émission d'un photon. En revanche pour une première transition Auger, il est nécessaire de procéder à un ajustement des probabilités d'émission Auger afin d'assurer l'émission d'au moins un électron Auger. Le calcul de son énergie est fait grâce à la formule de Carlson[1] [Carlson *et al.*, 1970], en considérant, une transition KL_2L_2 : un électron de la sous-couche L_2 va combler une lacune en couche K et transférer une énergie $B_K - B_{L_2}$ à un électron de la sous-couche $L_{2,3}$, lui même devant payer un tribut en énergie $B_{L_{2,3}}$ afin d'être éjecté dans le continuum. Ceci nous permet d'écrire l'expression de l'énergie du premier électron Auger, issu de la transition $KL_2L_{2,3}$, première étape de la cascade de désexcitation :

[1] Chap. 4.

$$\begin{aligned} E_{A1} &= B_K - B_{L_2} - B_{L_{2,3}} \\ &= -B_Z^{Z^*}(Z - Z^*) + B_Z^0(Z - Z^*) + B_Z^0(K) - B_Z^0(L_2) - B_Z^0(L_{2,3})\,. \end{aligned} \tag{5.1}$$

Pour évaluer l'énergie des électrons issus de la suite de la cascade, nous pouvons simplement soustraire l'énergie du premier électron Auger issu de la transition $KL_2L_{2,3}$ à l'énergie totale tabulée dans [Kaastra & Mewe, 1993]

$$E_{A2} = \frac{E_A - E_{A1}}{n-1}\,, \tag{5.2}$$

avec E_A l'énergie totale des électrons Auger émis prédite par les tables de [Kaastra & Mewe, 1993], E_{A1} l'énergie de l'électron Auger issu de la transition $KL_2L_{2,3}$ lors de la première partie de la cascade de désexcitation et calculée via la formule de [Carlson *et al.*, 1970] et enfin n le nombre total d'électron Auger.

L'algorithme du module de désexcitation implémenté dans Calder est illustré en Fig. 5.4.

5.2.1 Cas particuliers

L'adaptation de la méthode proposée par [Kaastra & Mewe, 1993] aux codes PIC nous force à faire quelques approximations en vue de surmonter certaines difficultés.

En effet, il existe certains cas où la présence d'une lacune électronique en couche interne n'implique pas nécessairement d'émission, qu'elle soit radiative ou non. C'est, par exemple, le cas pour une lacune électronique en sous-couche M_1 dans l'Al^+, où l'émission Auger n'est pas possible et où la transition radiative $M_2 \rightarrow M_1$ est négligée dans [Kaastra & Mewe, 1993] en raison d'une trop faible probabilité (inférieure à 10^{-4}). Nous faisons donc, dans ce cas, le choix de forcer la désexcitation sans émission de particule, ce qui revient alors à un simple transfert de la lacune électronique sur la sous-couche électronique la plus externe. Au regard des tables de probabilité d'émission, ces cas sont rares et n'auraient donc pas d'impact majeur sur la cinétique atomique puisque les énergies impliquées sont faibles.

Il est également possible, dans le cas d'une lacune en couche K, que l'énergie calculée pour l'électron Auger issu de la transition $KL_2L_{2,3}$ soit plus grande que l'énergie totale donnée par la table de Kaastra & Mewe ce qui impliquerait que l'énergie E_{A2} définie en Eq. (5.2) soit négative. Cette erreur peut tirer son origine de notre choix d'une transition Auger $KL_2L_{2,3}$, ou de notre calcul l'énergie du premier électron Auger à partir de la formule de [Carlson *et al.*, 1970]. Lorsque cela arrive, nous procédons à la première transition Auger avec l'émission d'un macro-électron d'énergie E_{A1} en négligeant le reste des électrons Auger, que l'on considère d'énergie faible.

5.2.2 Création des particules

Comme pour d'autres processus de physique atomique dans Calder, la désexcitation par cascade est évaluée dans le référentiel des ions. Ainsi, l'énergie des électrons (libérés par ionisation collisionnelle, photoionisation ou par émission Auger) ou des photons (émis par relaxation ou recombinaison radiative) créés sera calculée dans le référentiel de l'ion et il est donc nécessaire de procéder à une transformée de Lorentz vers le référentiel du laboratoire

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}^* + \frac{\gamma_i - 1}{\beta_{\text{lab}}^2}\left(\boldsymbol{\beta}_{\mathbf{lab}} \cdot \mathbf{p}^*\right)\boldsymbol{\beta}_{\mathbf{lab}} - \gamma_e^* \gamma_i \boldsymbol{\beta}_{\mathbf{lab}}\,, \tag{5.3}$$

avec $\mathbf{p}$ l'impulsion de l'électron dans le référentiel du laboratoire, $\mathbf{p}^*$ l'impulsion de l'électron dans le référentiel de l'ion, γ_i le facteur de Lorentz de l'ion dans le référentiel du laboratoire,

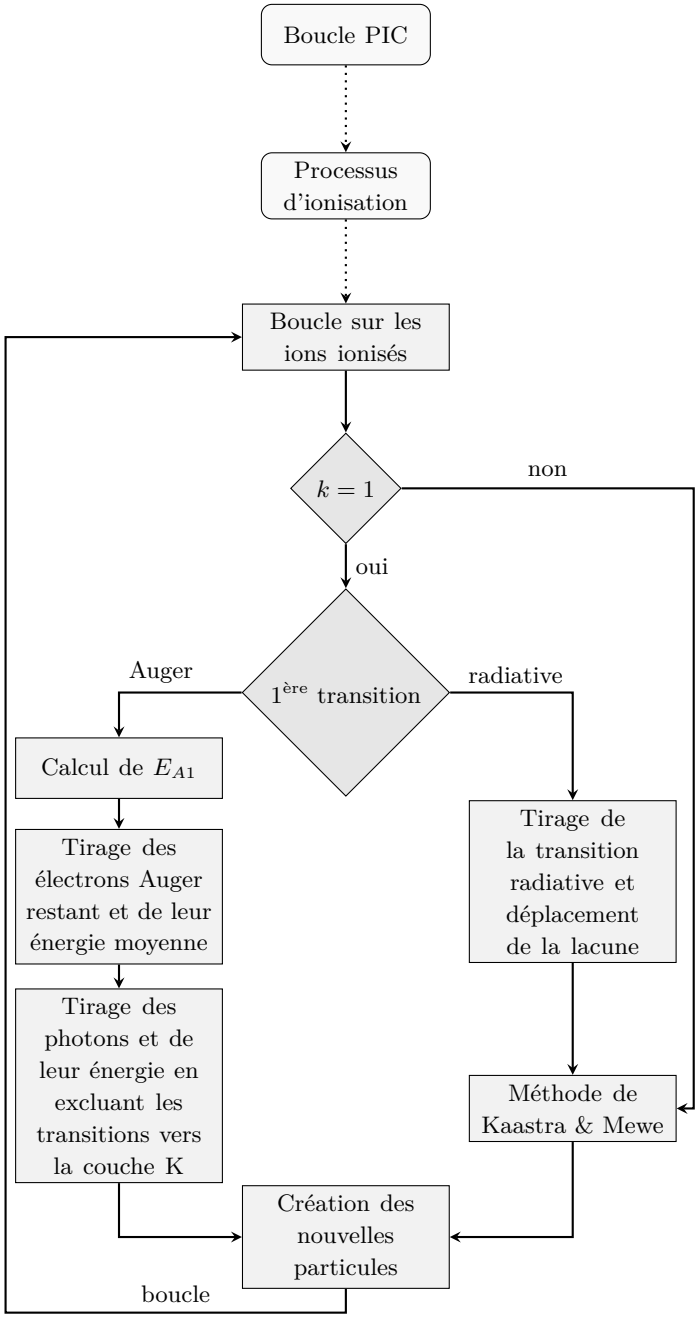


FIGURE 5.4 – Algorithme du module de désexcitation implémenté dans CALDER.

$\boldsymbol{\beta}_{\mathbf{lab}}$ le vecteur vitesse du laboratoire normalisé dans le référentiel de l'ion ($\boldsymbol{\beta}_{\mathbf{lab}} = -\boldsymbol{\beta}_{\mathbf{i}}$ où $\boldsymbol{\beta}_{\mathbf{i}}$ est le vecteur vitesse normalisé de l'ion dans le référentiel du laboratoire), et γ_e^* le facteur de Lorentz de l'électron dans le référentiel de l'ion.

Avant cela, nous devons faire une hypothèse sur la direction de la particule dans le référentiel de l'ion. Le choix le plus simple est d'émettre la particule avec une direction aléatoire dans le référentiel de l'ion. Pour ce faire, le code génère deux angles aléatoires : un angle $\theta \in [0, \pi]$ et un angle $\varphi \in [0, 2\pi]$ tels que

$$\theta^* = \arccos(1 - 2\xi_1) \ , \tag{5.4}$$

$$\varphi^* = 2\pi\xi_2 \ , \tag{5.5}$$

avec ξ_1 et ξ_2 des nombres tirés aléatoirement entre 0 et 1, et l'astérisque indique une évaluation dans le référentiel ionique. L'impulsion électronique est alors donnée par

$$p_x^* = p^* \cos\theta^* \ , \tag{5.6}$$

$$p_y^* = p^* \sin\theta^* \cos\varphi^* \ , \tag{5.7}$$

$$p_z^* = p^* \sin\theta^* \sin\varphi^* \ , \tag{5.8}$$

où p^* est la norme de l'impulsion de la particule, pouvant être égale à l'énergie E^* de la particule dans le cas d'un photon, ou à $p^* = \sqrt{(E^* + 1)^2 - 1}$ dans le cas d'un électron, dans les unités de Calder. Nous pouvons alors procéder à une transformée de Lorentz (là encore en prenant en compte la nature de la particule) afin de déterminer les nouvelles composantes de l'impulsion de la particule dans le référentiel du laboratoire.

Nous verrons en Sec. 5.4.3 que la création des particules dans le référentiel de l'ion permet de décrire l'effet Doppler, qui est une des raisons de l'élargissement des raies sur les spectres d'émission.

5.3 Tests de validation

Afin de valider les différents aspects de notre module de désexcitation atomique, nous avons procédé à un certain nombre de tests qui sont présentés dans cette section. Nous avons pu tester en particulier la faculté de Calder à reproduire les distributions des électrons Auger et des photons prédites par les tables issues de [Kaastra & Mewe, 1993] et ce pour différentes configurations (Z, Z^* ,k).

5.3.1 Tests pour une lacune électronique sur une sous-couche $k > 1$

Ce premier test vise à valider la distribution du nombre d'électrons Auger et de photons produits en fonction d'une configuration (Z, Z^* ,k) donnée (tous les ions ont initialement la même configuration), ainsi que leur énergie. Nous voulons tester ici le schéma standard inspiré de [Kaastra & Mewe, 1993] et nous ne considérons donc pas le cas particulier où la lacune électronique se trouve sur une couche K. Nous considérons le cas simple d'un plasma froid ($T_i = 0$ eV) de Zinc (ce processus ne dépend pas de la densité du plasma : les énergies et probabilités étant tabulées, nous ne pouvons pas prendre en compte la correction de l'IPD) dans une configuration (30 ,1 ,2), correspondant à une lacune électronique en couche L_1 de l'ion Zn^+, et nous ne calculons qu'un seul pas de temps, nécessaire pour désexciter les ions préalablement ionisés artificiellement en imposant la position de la lacune électronique. La

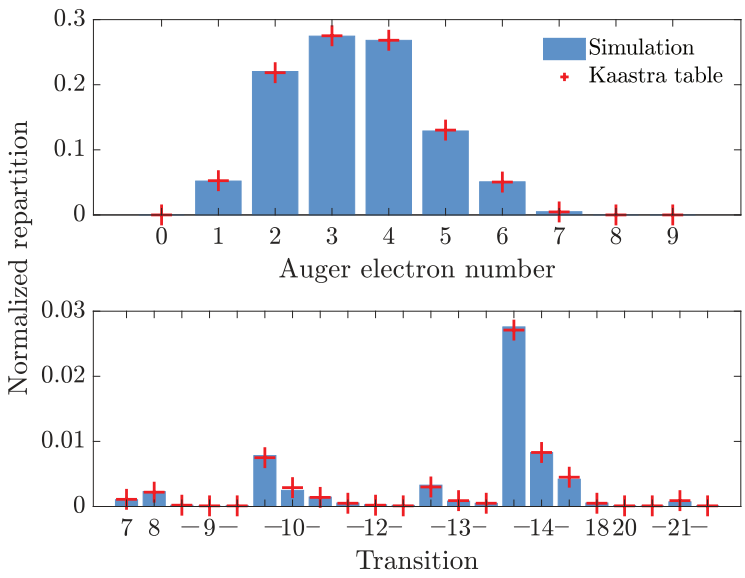


FIGURE 5.5 – Tests de validation des probabilités d'émission Auger (figure du haut) et radiative (figure du bas) pour une lacune électronique initiale dans la couche L_1 du Zn^+ (soit une configuration (30, 1, 2)). Croix rouges : valeurs prédites dans les tables de [Kaastra & Mewe, 1993].

	Auger electrons		**Photons**	
	Calder	**Kaastra**	**Calder**	**Kaastra**
(13,1,2)	67.9180	67.9180	71.2227	71.2227
(13,1,3)	52.6272	52.6272	66.8000	66.8000
(13,2,2)	12.8560	12.8560	74.7342	74.7338
(14,1,2)	88.6760	88.6760	16.0482	16.8352

TABLE 5.1 – Comparaison, pour différentes configurations dans l'$_{13}$Al et le $_{14}$Si, des énergies des particules émises (électrons Auger et photons) entre les résultats de simulation et les valeurs tabulées dans [Kaastra & Mewe, 1993], pour différentes configurations initiales.

simulation est faite sur un total de 800000 macro-ions. Le décompte des particules ainsi créées lors de la désexcitation nous permet de tracer les histogrammes électronique et photonique de la Fig. 5.5, que nous avons comparé directement avec les tables de [Kaastra & Mewe, 1993] (dont les valeurs sont représentées par des croix rouges). Le choix du Zinc n'est pas anodin : il s'agit de l'espèce de plus grand numéro atomique présent dans ces tables et il peut donc potentiellement produire un plus grand nombre d'électrons Auger et de photons. De même, le choix d'une lacune électronique en couche L_1 vise là encore à favoriser l'émission de particules lors de la désexcitation.

Nous constatons sur cette figure que l'implémentation semble correcte puisque le code est capable de reproduire avec une grande fidélité les probabilités fournies par les tables. Nous remarquons la présence de quelques écarts très modérés, principalement pour les photons qui présentent des probabilités d'émission moins importantes que les électrons Auger, écarts qui ont vocation à s'atténuer à mesure que l'on augmente le nombre de macro-ions dans la simulation.

Nous avons réitéré le test pour différentes configurations de l'Aluminium : (13, 1, 2), (13, 1, 3) et (13, 2, 2) et pour le Silicium en configuration (14, 1, 2) afin de valider cette fois l'énergie moyenne transmise aux particules. Les résultats sont regroupés dans le Tab. 5.1. Comme pour l'exemple précédent, les résultats entre CALDER et les tables sont sensiblement les mêmes, malgré un écart modéré pour l'énergie moyenne des photons dans le cas (14, 1, 2) dû aux fluctuations statistiques inhérentes aux tirages aléatoires.

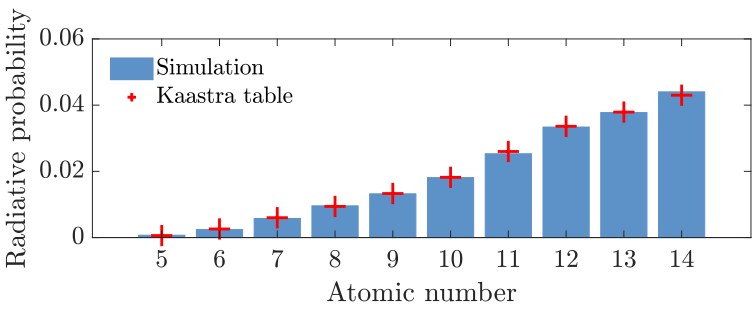
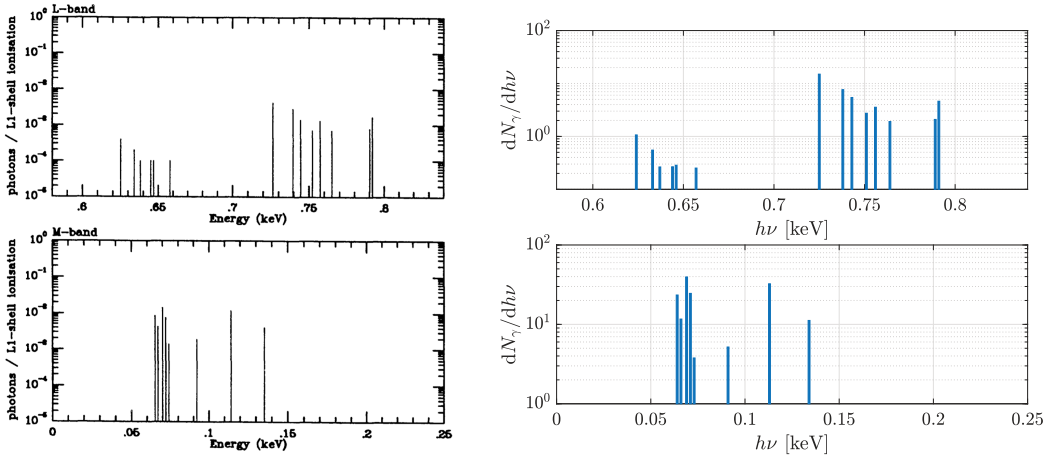


FIGURE 5.6 – Tests de validation pour une lacune électronique en couche K, pour les atomes de numéro atomique allant de 5 (Bore) à 14 (Silicium). En bleu : probabilité d'obtenir une émission radiative en première étape de cascade de désexcitation. Croix rouges : valeurs prédites dans [Kaastra & Mewe, 1993].



(a) Spectres tirés de [Kaastra & Mewe, 1993]

(b) Spectres obtenus par CALDER

FIGURE 5.7 – Comparaison des spectres d'émission pour une lacune électronique en couche L_1 de l'ion Fe^+ (configuration (26, 1, 2)) pour différentes gammes d'énergie.

5.3.2 Cas d'une lacune électronique initiale en couche K ($k = 1$)

Dans cette section, nous considérons la désexcitation d'ions possédant une lacune initiale en couche K, en comparant la probabilité d'avoir une transition radiative en première partie de cascade. Ceci est fait pour différents éléments allant du Bore au Silicium (de numéro atomique respectif 5 et 14). Nous utilisons des paramètres de simulation similaires à ceux utilisés dans la section précédente, en imposant une lacune électronique en couche K.

Nous avons représenté sur la Fig. 5.6 l'évolution de la probabilité d'une transition radiative pour la première partie de la cascade de désexcitation en fonction du numéro atomique. Là encore, les résultats montrent une bonne adéquation avec les tables de probabilités. Ce test permet également de nous rendre compte d'une tendance : plus l'élément chimique est lourd, plus la probabilité de combler la lacune via une transition radiative augmente. Bien que la probabilité de transition radiative reste modeste, même pour le Silicium où elle n'excède pas 5 %, cette tendance se vérifie pour de plus grands numéros atomiques [Kaastra & Mewe, 1993] ce qui permet d'ores et déjà de deviner quels seront les éléments chimiques à favoriser selon que l'on veuille créer préférentiellement des électrons Auger ou des photons. Nous rediscutons de ce choix plus en détails dans le Chap. 8, Sec. 8.2.

5.3.3 Reproduction des spectres d'émission de Kaastra et Mewe

Nous comparons ici les spectres d'émission issus de CALDER avec ceux obtenus par [Kaastra & Mewe, 1993] qui proposent, pour illustrer l'utilisation des tables d'émission, un certain nombre d'exemples de spectres photoniques, dont celui du Fe^+ possédant une lacune élec-

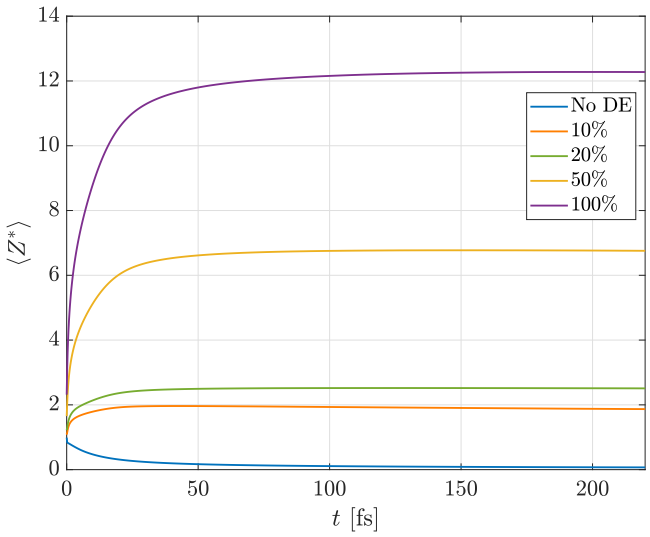


FIGURE 5.8 – Évolution de la charge ionique moyenne au cours du temps dans un plasma à densité solide de Zn^+ initialement à $T_i = T_e = 5$ eV. Nous comparons le cas de référence sans désexcitation atomique (en bleu) avec les cas intégrant la désexcitation en imposant une lacune électronique en couche K pour 10% (orange), 20% (vert), 50% (jaune) et 100% (violet) des ions.

tronique en couche L_1. Sur la Fig. 5.7, nous avons représenté à gauche le spectre issu de [Kaastra & Mewe, 1993] et à droite le spectre fourni par CALDER dans les mêmes conditions. Cette comparaison est concluante, aussi bien au niveau de la position des raies que de leur proportion (on rappelle que l'amplitude est relative au nombre de macro-particules utilisées dans la simulation).

Sur ce spectre, on peut tenter de retrouver, grâce aux tables, les transitions à l'origine des raies. Nous pouvons raisonnablement regrouper les raies en cinq groupes distincts : un premier allant de 620 eV à 660 eV dû aux transitions $M_1 \to L_2$ et $M_1 \to L_3$; un deuxième entre 720 eV et 770 eV dû aux transitions $M_4 \to L_2$, $M_4 \to L_3$ et $M_5 \to L_3$; les deux raies observées vers 790 eV sont dues aux transitions $M_2 \to L_1$ et $M_3 \to L_1$; les raies présentes dans la gamme d'énergie allant de 60 eV à 80 eV ont pour origine les transitions $M_4 \to M_2$ et $M_4 \to M_3$; enfin, trois raies à respectivement 92.2 eV, 114.2 eV et 135.2 eV sont dues à la même transition $M_5 \to M_3$ mais pour différents nombre d'électrons Auger émis lors de la cascade de désexcitation.

5.4 Effets de la désexcitation atomique sur la dynamique d'un plasma

Nous allons à présent montrer, par le biais de quelques exemples, l'impact potentiel de la désexcitation atomique par cascade sur la dynamique du plasma.

5.4.1 Lacune électronique initiale en couche K

Dans ce premier exemple, on se propose de mesurer l'effet de lacunes électroniques en couche K sur la dynamique d'un plasma de Zn^+, en particulier sur la charge ionique moyenne et les énergies cinétiques moyennes ionique et électronique. Le but est de reproduire, de façon très simplifiée, le chauffage causé par l'interaction d'un faisceau photonique avec un solide où l'ionisation se ferait principalement en couche K, comme c'est le cas dans les interactions faisceau X-solide[1] [Rosmej, 2012].

[1] Chap. 8, Sec. 8.2.

Pour ce faire, nous nous plaçons dans une configuration Monte-Carlo 0D, avec un plasma solide de Zn ($Z = 30$, $\rho = 7.13$ g/cm^3) ionisé une fois ($Z^* = 1$), avec une température $T_i = T_e = 5$ eV. Dans un premier temps, nous n'activons pas le module de désexcitation et

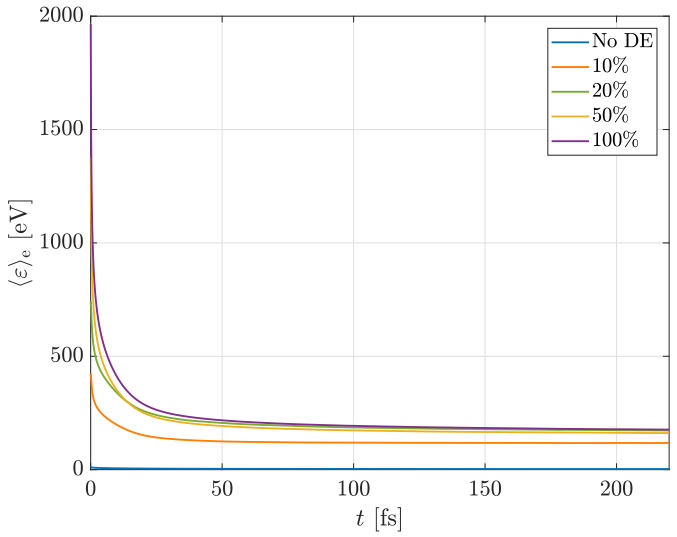


FIGURE 5.9 – Évolution temporelle de l'énergie cinétique électronique moyenne dans un plasma à densité solide de Zn^+ initialement (avant désexcitation) à $T_i = T_e = 5$ eV. Nous comparons le cas de référence sans désexcitation atomique (en bleu) avec les cas intégrant la désexcitation en imposant une lacune électronique en couche K pour 10 % (orange), 20 % (vert), 50 % (jaune) et 100 % (violet) des ions.

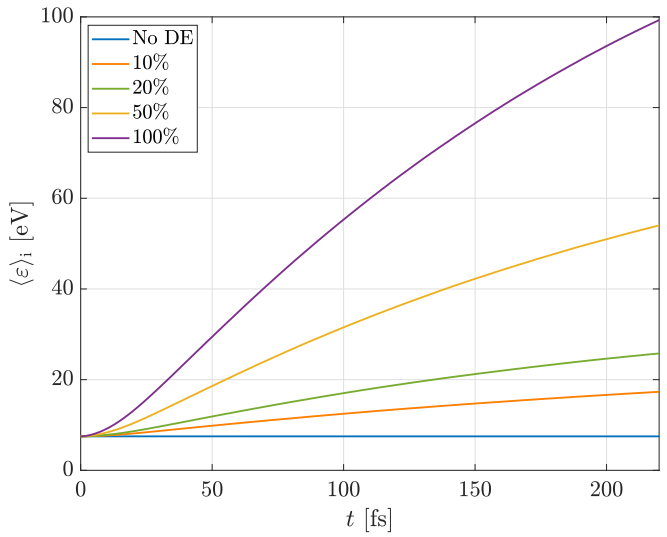


FIGURE 5.10 – Évolution temporelle de l'énergie cinétique ionique moyenne dans un plasma à densité solide de Zn^+ initialement (avant désexcitation) à $T_i = T_e = 5$ eV. Nous comparons le cas de référence sans désexcitation atomique (en bleu) avec les cas intégrant la désexcitation en imposant une lacune électronique en couche K pour 10 % (orange), 20 % (vert), 50 % (jaune) et 100 % (violet) des ions.

l'ion va alors se désexciter sans aucune émission. Dans les autres cas, nous activons le module avec différentes proportions d'ions possédant une lacune électronique initiale en couche K : 10 %, 20 %, 50 % et 100 % afin de tester différentes efficacités d'ionisation, qui est ici artificielle. Dans ces simulations, nous activons l'ionisation collisionnelle, la recombinaison à trois corps ainsi que les collisions coulombiennes, mais ne prenons pas en compte l'abaissement des potentiels d'ionisation. Nous laissons alors le plasma relaxer sur une durée totale de 220 fs.

La Fig. 5.8 représente l'évolution de la charge ionique moyenne du plasma $\langle Z^* \rangle$ au cours du temps pour le cas sans désexcitation (en bleu) et les cas avec désexcitation pour 10% de lacunes en couche K (orange), 20% (vert), 50% (jaune) et 100% (violet). On remarque que le cas de référence, sans désexcitation, tend à recombiner pour passer de $\langle Z^* \rangle = 1$ à $\langle Z^* \rangle = 0$. Dans les cas prenant en compte la désexcitation par cascade, on note une augmentation de la charge ionique au cours du temps, augmentation qui est d'autant plus forte que la proportion d'ions possédant une lacune en couche K est élevée. La lacune en couche K, entraîne la production d'électrons Auger issus de transition KL_2L_3, dont l'énergie proche de 7600 eV est largement suffisante pour ioniser par la suite plusieurs sous-couches électroniques du Zinc [Sugar & Musgrove, 1995].

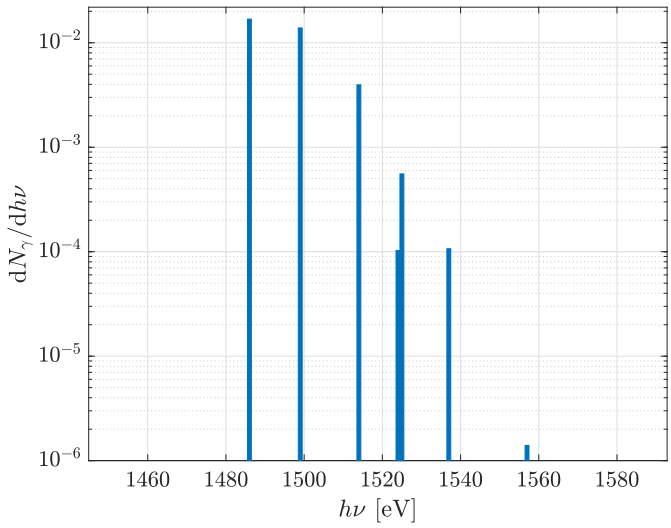


FIGURE 5.11 – Spectre d'émission obtenu après relaxation d'un plasma d'Al^+ solide, initialement à $T_i = T_e = 5$ eV, où est imposée une température de 5 keV pour 1 % des électrons libres. Le spectre est zoomé sur une fenêtre allant de 1460 eV à 1580 eV, gamme d'énergie des électrons Auger de type KLL.

Pour nous en convaincre, nous avons tracé en Fig. 5.9 l'évolution de l'énergie cinétique moyenne des électrons, ainsi que celle des ions en Fig. 5.10. A l'état initial, c'est-à-dire juste après la désexcitation des lacunes en couche K, nous remarquons que l'énergie moyenne électronique augmente en fonction de la proportion d'Auger KLL produite, comme attendu. Quelle que soit cette proportion, l'énergie cinétique électronique moyenne diminue en fonction du temps. Ceci est dû aux pertes liées à l'ionisation collisionnelle, puisque nous avons vu que la charge ionique moyenne augmentait au cours du temps, mais aussi aux collisions coulombiennes avec les ions. Nous remarquons en effet sur la Fig. 5.10 un chauffage des ions. Comme pour le degré de charge moyen, le chauffage ionique est d'autant plus important que le nombre d'électrons Auger est grand.

5.4.2 Spectres d'émission d'un plasma hors équilibre

Le module de désexcitation permet de décrire le spectre X résultant de la relaxation des lacunes électroniques créées au cours de l'évolution d'un plasma hors équilibre. Pour illustrer cette capacité, nous simulons la dynamique d'un plasma d'Al^+ solide ($\rho = 2.7$ g/cm^3), initialement à 5 eV. Nous supposons que 1 % des électrons libres du système ont été chauffés à 5 keV, les 99 % restants étant à la même température que les ions (5 eV). Comme pour l'exemple précédent, nous n'activons ici que l'ionisation collisionnelle, la recombinaison à trois corps, les collisions coulombiennes ainsi que la désexcitation par cascade.

En Fig. 5.11, nous avons représenté le spectre d'émission intégré sur la durée de la simulation (environ 20 fs), pour une gamme d'énergie s'étendant de 1460 eV à 1580 eV (d'autres raies sont présentes dans une gamme d'énergie plus faible mais nous ne voulons ici montrer que le principe général de l'exploitation des spectres). Six raies peuvent être identifiées (nous confondons les deux raies juxtaposées). Les cinq premières raies (en partant de la gauche), en 1486 eV, 1499 eV, 1514 eV, 1525 eV et 1537 eV, correspondent toutes à des transitions $L_2 \rightarrow K$ ou $L_3 \rightarrow K$ respectivement dans l'Al^+, l'Al^{2+}, l'Al^{3+}, l'Al^{4+} et l'Al^{5+}. La raie en 1557 eV correspond, elle, à une transition $M_2 \rightarrow K$ dans l'Al^+. Presque toutes ces raies sont associées à la même transition radiative résultant d'une lacune en couche K, mais pour différents degrés d'ionisation de l'Aluminium. Plus le degré de charge est élevé et plus l'écart en énergie entre les niveaux s'accroît en raison d'un écrantage moins efficace dû aux électrons liés.

Nous notons également que les amplitudes de raie ne sont pas les mêmes. Elles dépendent

à la fois de la probabilité de la transition mais aussi de la proportion du degré de charge dans le plasma. Dans notre exemple, les cinq premières raies ont un rendement de fluorescence équivalent ($\sim$ 0.013 pour la transition $L_2 \rightarrow K$ et $\sim$ 0.026 pour la transition $L_3 \rightarrow K$) donc l'amplitude des raies reflète ici la population des états de charge. Ceci est globalement confirmé lorsqu'elles sont comparées aux densités des états de charge à la fin de la simulation, où nous trouvons 38 % d'Al, 30 % d'Al^{+}, 27 % d'Al^{2+}, 3.8 % d'Al^{3+}, 0.4 % d'Al^{4+} et 0.007 % d'Al^{5+}. L'amplitude très faible de la dernière raie s'explique par la faible probabilité ($\sim$ 0.0004).

5.4.3 Effet Doppler dans les spectres d'émission de CALDER

Les spectres d'émission obtenus expérimentalement possèdent des raies présentant une certaine largeur d'origine expérimentale (résolution instrumentale) ou physique.

La première cause d'élargissement physique que nous pouvons citer est l'élargissement dit "naturel" des raies. Nous avons évoqué en introduction de ce chapitre le fait qu'un atome ou un ion excité pouvait être associé à une durée de vie moyenne avant de recouvrer son état fondamental [Demas, 2012] s'accompagnant d'un possible changement de charge (dû à l'émission d'électrons Auger). Ce sont précisément les fluctuations autour de cette durée de vie moyenne qui vont donner naissance à l'élargissement naturel, formant des profils de raie lorentziens [Krainov *et al.*, 2005]. Notre modèle de désexcitation n'a pas la capacité de prendre en compte cette composante. Il pourrait être envisageable d'introduire une variation aléatoire de l'énergie photonique (décrite par une lorentzienne) afin de pallier ce défaut.

Lorsque l'atome n'est pas isolé, les collisions pouvant survenir avec d'autres particules sont susceptibles de modifier légèrement les énergies des sous-couches électroniques. C'est ce que l'on appelle l'élargissement par collision [Hess, 1972]. Le modèle de désexcitation que nous venons de présenter n'est pas en mesure de décrire ce phénomène.

L'élargissement est également dû à un effet quantique appelé effet Stark [Voslamber, 1969] : la présence d'un champ électrique suffisamment fort peut lever la dégénérescence de certains niveaux d'énergie, permettant ainsi de nouvelles transitions possibles, accompagnées d'émissions radiatives d'énergies photoniques proches.

On peut enfin citer comme dernière contribution à l'élargissement des raies spectrales l'effet Doppler [Hess, 1972]. Les photons étant émis dans le référentiel de l'ion, leur énergie dans le référentiel du laboratoire (référentiel dans lequel est fait la capture du spectre d'émission) dépendra de la distribution des vitesses ioniques. Pour une distribution maxwellienne, nous obtiendrons un profil de raie gaussien dont l'écart-type est donné par la formule suivante dans le cas non-relativiste

$$\frac{\Delta h\nu}{h\nu_0} = \sqrt{\frac{k_B T_i}{m_i c^2}}\,, \tag{5.9}$$

avec $\Delta h\nu$ l'écart-type en énergie du profil de raie gaussien, $h\nu_0$ l'énergie du photon dans le référentiel de l'ion, T_i la température ionique, m_i la masse de l'ion et c la vitesse de la lumière. Nous avons évoqué dans la Sec. 5.2.2 le fait que notre implémentation permettait de prendre en compte cet effet Doppler, l'émission radiative se faisant dans le référentiel de l'ion.

En prenant une température ionique d'une centaine d'eV dans un plasma d'Aluminium, typiquement du même ordre de grandeur que celles que nous obtiendrons dans nos applications numériques (interaction laser UHI-solide, faisceau X-solide) présentées au Chap. 8, nous obtenons, pour une raie à 1600 eV (correspondant à une raie K_α pour l'Aluminium fai-

blement ionisé), un écart-type $\Delta h\nu \sim 0.1$ eV. Notre diagnostic spectral ayant une résolution de l'ordre de l'eV, les raies d'émission ainsi obtenues seront le plus souvent piquées.

5.5 Conclusion

Nous avons introduit un module de désexcitation par cascade d'un ion présentant une lacune électronique, basé sur les tabulations fournies par [Kaastra & Mewe, 1993] et valables pour un ion isolé. Ce module décrit la distribution complète d'électrons Auger et de photons émis lors des processus successifs de désexcitation. Nous avons adapté ces tabulations afin de mieux décrire la relaxation de lacunes en couche K, critiques dans certains contextes connus comme par exemple l'interaction faisceau X-matière. L'accès à des spectres d'émission est un diagnostic inédit dans le code Calder. Notre modèle présente toutefois deux limitations majeures : (i) l'hypothèse d'une relaxation immédiate ; (ii) la non prise en compte des effets d'environnement sur les processus de relaxation.

Bibliographie

Asaad, W. & Petrini, D. (1976). *Relativistic calculation of the K-LL Auger spectrum.* Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences **350**, no. 1662, p. 381–404.

Auger, P. (1925). *Sur l'effet photoélectrique composé.* Journal de Physique et le Radium **6**, no. 6, p. 205–208.

Carlson, T. A., Nestor Jr, C., Wasserman, N. & McDowell, J. (1970). *Calculated ionization potentials for multiply charged ions.* Atomic Data and Nuclear Data Tables **2**, p. 63–99.

Demas, J. (2012). *Excited State Lifetime Measurements.* Elsevier.

Hess, S. (1972). *Kinetic theory of spectral line shapes. The transition between doppler broadening and collisional broadening.* Physica **61**, no. 1, p. 80–94.

Huttula, M., Partanen, L., Mäkinen, A., Kantia, T., Aksela, H. & Aksela, S. (2009). *KLL Auger decay in free aluminum atoms.* Physical Review A **79**, p. 023412.

Kaastra, J. S. & Mewe, R. (1993). *X-ray emission from thin plasmas. I - Multiple Auger ionisation and fluorescence processes for Be to Zn.* Astronomy and Astrophysics Supplement Series **97**, p. 443–482.

Krainov, V. P., Reiss, H. R. & Smirnov, B. M. (2005). *Radiative Processes in Atomic Physics* p. 62–70.

Martin, W. C. & Zalubas, R. (1979). *Energy levels of aluminum, Al I through Al XIII.* Journal of Physical and Chemical Reference Data **8**, no. 3, p. 817–864.

Reed, S. J. B. (2005). *Electron Microprobe Analysis and Scanning Electron Microscopy in Geology.* Cambridge University Press.

Rosmej, F. B. (2012). *Exotic states of high density matter driven by intense XUV/X-ray Free Electron Lasers.* Free Electron Laser p. 187–212.

Royle, R., Sentoku, Y., Mancini, R. C., Paraschiv, I. & Johzaki, T. (2017). *Kinetic modeling of x-ray laser-driven solid Al plasmas via particle-in-cell simulation.* Physical Review E **95**, no. 6, p. 063203.

Sugar, J. & Musgrove, A. (1995). *Energy levels of zinc, Zn I through Zn XXX.* Journal of Physical and Chemical Reference Data **24**, no. 6, p. 1803–1872.

Voslamber, D. (1969). *Unified model for Stark broadening.* Zeitschrift für Naturforschung A **24**, no. 10, p. 1458–1472.

6
Modélisation du transport radiatif

Le transport radiatif (ou transfert radiatif) est un champ de la physique s'attachant à décrire l'évolution des photons dans la matière, qu'il s'agisse d'un gaz, d'un liquide, d'un solide ou d'un plasma. Il se manifeste au quotidien en donnant par exemple sa couleur bleue au ciel par diffusion Rayleigh ; il est également à l'origine de l'effet de serre par interaction des rayons solaires avec la haute et basse atmosphère. Ce domaine est historiquement lié à l'astrophysique, en particulier pour l'étude des plasmas stellaires, mais il est également devenu incontournable dans d'autres champs de recherche plus récents comme l'interaction laser-plasma ou pour l'interaction faisceau X-plasma, qui feront l'objet de la Sec. 8.2 dans le Chap. 8.

Dans la matière, les photons vont pouvoir interagir avec d'autres particules, par exemple via la photoionisation des atomes, ou via l'interaction Compton avec les particules chargées. L'ensemble de ces processus, dont la probabilité dépend de la densité et de l'énergie des particules et des photons mis en jeu, va être à l'origine de la modification des caractéristiques des photons interagissant, soit par leur absorption, soit par leur diffusion.

Dans ce dernier chapitre concernant les nouveaux processus, nous présentons l'implémentation au sein du code PIC Calder des processus radiatifs de photoionisation (Sec. 6.1), recombinaison radiative (Sec. 6.2) et diffusion Compton (Sec. 6.3). Comme dans les chapitres précédents, nous introduisons brièvement les bases de ces processus pour nous concentrer sur leur modélisation de type Monte Carlo dans Calder. Nous présenterons enfin les différents tests de validation effectués.

6.1 Photoionisation

6.1.1 Introduction

Le premier processus considéré est celui de la photoionisation (PI). Comme son nom le suggère, la PI fait intervenir un photon et un ion. Si son énergie $h\nu$ est suffisamment importante, le photon peut être absorbé par un des électrons liés à l'ion (supposé en couche

k et d'énergie de liaison B_k), qui est alors éjecté dans le continuum avec une énergie égale à $h\nu - B_k$.

6.1.2 Formule de Verner *et al.* pour la section efficace de photoionisation

Contrairement à l'ionisation collisionnelle (CI), présentée au Chap. 4, il n'existe pas encore de modèle universel de photoionisation permettant de calculer la section efficace de PI quelque soient les paramètres du photon et de l'ion. Il est toutefois possible de trouver dans la littérature des calculs de sections efficaces de PI basés sur la théorie quantique pour des éléments et des régimes bien précis, montrant parfois des profils exotiques, laissant deviner la complexité singulière de ce processus.

Pour pallier ce vide théorique, [Verner & Yakovlev, 1995] proposent une formule approchée de la section efficace de PI en fonction de l'énergie du photon dans le référentiel de l'ion, et ce pour tous les éléments dont le numéro atomique est compris entre 1 (Hydrogène) et 30 (Zinc). Contrairement à la CI et la recombinaison à trois corps (TBR) résolues dans Calder sur la structure $n\ell j$, cette formule n'est résolue que sur la structure $n\ell$ (où on rappelle que n est le nombre quantique principal et ℓ est le nombre quantique azimutal, renseignant sur la couche électronique), pour les ions dans leur état fondamental. Elle utilise des coefficients d'ajustements basés sur des calculs quantiques et s'exprime comme suit

$$\sigma_{n\ell}^{\mathrm{PI}}(h\nu) = \sigma_0 F\left(\frac{h\nu}{E_0}\right) , \tag{6.1}$$

où F est la fonction d'ajustement

$$F(y) = \left[(y-1)^2 + y_{\mathrm{w}}^2\right] y^{-Q} \left(1 + \sqrt{\frac{y}{y_{\mathrm{a}}}}\right)^{-P} , \tag{6.2}$$

$h\nu$ est l'énergie du photon impactant dans le référentiel de l'ion, $y = h\nu/E_0$, tandis que E_0, σ_0, y_{w}, y_{a} et P sont des paramètres d'ajustement donnés par [Verner & Yakovlev, 1995] pour chaque élément. Q est défini en fonction de la couche électronique tel que

$$Q = 5.5 + \ell - 0.5P . \tag{6.3}$$

[Verner & Yakovlev, 1995] précisent que cette formule est établie pour des régimes non relativistes, c'est-à-dire pour des énergies photoniques n'excédant pas la centaine de keV. Bien qu'elle nous permette de modéliser la PI dans un grand nombre d'éléments, cette section efficace a été obtenue dans un contexte d'atome isolé pour lequel il n'existe pas d'effet de l'environnement plasma. Du fait de ces paramètres d'ajustement, elle est utilisée comme une boite noire où il nous est impossible d'intégrer les paramètres du milieu tels que la densité du plasma par exemple.

Bien qu'adaptée à la description de la PI pour des couches électroniques internes, cette section efficace analytique voit sa précision se dégrader pour les couches électroniques externes, en particulier lorsque l'énergie du photon avoisine l'énergie d'ionisation de cette couche, ce que l'on voit dans la Fig. 6.1, représentant la section efficace totale de PI pour pour l'Oxygène neutre. On remarque sur cette même figure la présence de pics de forte amplitude par le modèle issus de *The Opacity Project* [Seaton, 1995] (TOP). Ces pics rendent compte d'un effet de résonance par phénomène d'auto-ionisation des électrons liés, et sont lissés par la

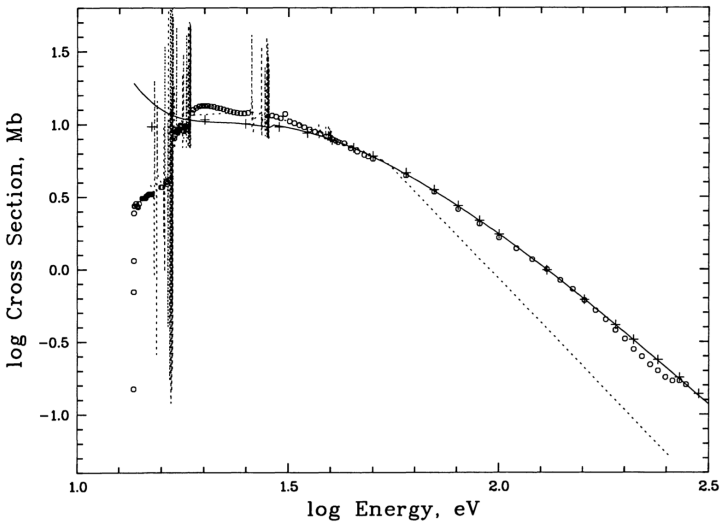


FIGURE 6.1 – Section efficace totale de PI (trait plein) donnée par l'Eq. (6.1), comparée aux calculs théoriques issus de *The Opacity Project* (pointillés) et de [Reilman & Manson, 1979] (croix) et aux données expérimentales issues de [Angel & Samson, 1988] (cercles) et [Marr & West, 1976] (triangles) pour l'Oxygène neutre. La figure est tirée de [Verner & Yakovlev, 1995].

section efficace de [Verner & Yakovlev, 1995]. Enfin, on remarque que lorsque l'énergie du photon s'éloigne de l'énergie de liaison des couches électroniques, la section efficace tend vers une asymptote de la forme

$$\sigma_{n\ell}^{\mathrm{PI}}(E) \propto (h\nu)^{-3.5-\ell}\,, \tag{6.4}$$

Pour raffiner leur modèle dans ces cas particuliers, [Verner *et al.*, 1996] proposent alors, pour le traitement de ces couches externes, l'utilisation d'une formule légèrement différente de celle présentée en Eq. (6.2), permettant d'intégrer les données issues de TOP dont la précision est nettement accrue pour une sélection d'espèces (H, He, Li, Be, B, C, N, O, F, Ne, Na, Mg, Al, Si, S, Ar, Ca et Fe). La fonction F s'exprime alors comme suit

$$F(y) = \left[(x-1)^2 + y_{\mathrm{w}}^2\right] y^{0.5P-5.5} \left(1 + \sqrt{\frac{y}{y_{\mathrm{a}}}}\right)^{-P}\,, \tag{6.5}$$

avec $y = \sqrt{x^2 + y_1^2}$, $x = h\nu/E_0 - y_0$ et y_1 un paramètre d'ajustement supplémentaire. Cette correction est utilisée lorsque l'énergie du photon est comprise entre l'énergie de liaison de la couche électronique externe et l'énergie de liaison de la première couche interne. La Fig. 6.2, tirée de [Verner *et al.*, 1996], montre l'amélioration apportée par cette correction pour la photoionisation du Carbone neutre avec des photons de basse énergie (< 33 eV).

Remarque 6.1.1 Le modèle utilisé par TOP permet de décrire les résonances, comme nous pouvons le voir sur les Figs. 6.1 et 6.2, mais l'incertitude sur la position des pics (1 à 2 %) est supérieure à leur largeur et il est donc préférable de lisser la section efficace de PI sur ces fluctuations.

6.1.3 Implémentation de la photoionisation dans CALDER

L'implémentation du processus de PI suit le même schéma que pour la CI : pour chaque cellule de simulation, nous formons max (N_γ,N_i) paires, N_γ étant le nombre de macro-photons et N_i celui des macro-ions, selon la méthode de [Nanbu & Yonemura, 1998], présentée au Chap. 2. Une fois les paires photon-ion formées, nous calculons leur section efficace de PI

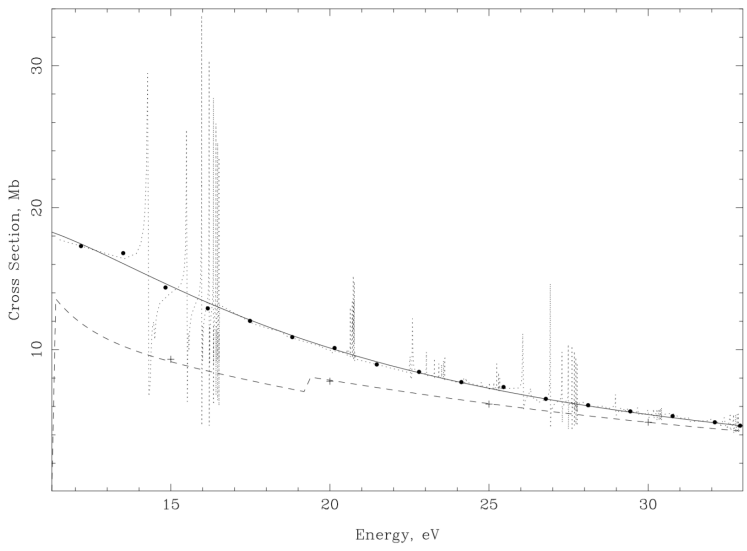


FIGURE 6.2 – Section efficace totale de PI corrigée par TOP (trait plein) comparée à la version non corrigée (tirets), aux calculs de TOP (cercles) et de [Reilman & Manson, 1979] (croix) pour le Carbone neutre. La figure est tirée de [Verner *et al.*, 1996].

associée. Nous en déduisons la probabilité d'interaction grâce à la formule usuelle

$$P^{\mathrm{PI}} = 1 - \exp\left(-v_{\mathrm{rel}}\sigma_{\mathrm{tot}}^{\mathrm{PI}}\frac{n_i n_\gamma}{n_{i\gamma}}\Delta t\right) , \tag{6.6}$$

avec $\sigma_{\mathrm{tot}}^{\mathrm{PI}}$ la section efficace totale de PI, sommée sur les couches électroniques $n\ell$, n_i la densité ionique, n_γ la densité photonique, $n_{i\gamma}$ la densité croisée issue de la correction de la méthode de [Nanbu & Yonemura, 1998], Δt le pas de temps et v_{rel} la vitesse relative entre le macro-photon et le macro-ion que l'on peut exprimer comme suit

$$v_{\mathrm{rel}} = |\mathbf{v}_\gamma - \mathbf{v}_i| = c\,(1 - \boldsymbol{\beta}_i \cdot \boldsymbol{\Omega}) , \tag{6.7}$$

où $\boldsymbol{\beta}_i = \mathbf{v}_i/c$ et $\boldsymbol{\Omega} = \mathbf{v}_\gamma/c$.

L'algorithme génère un nombre aléatoire ξ_1 compris entre 0 et 1 qu'il compare à la probabilité de photoionisation estimée grâce à l'Eq. (6.6). Si $\xi_1 \leq P^{\mathrm{PI}}$, on considère que l'interaction a lieu. Nous construisons alors la fonction de répartition en sommant les sections efficaces de PI sur les différentes couches électroniques $n\ell$:

$$\begin{cases} f(0) = 0 & \text{si} \quad k = 0\,, \\ f(k) = \dfrac{1}{\sigma_{\mathrm{tot}}^{\mathrm{PI}}}\displaystyle\sum_{j=1}^{k}\sigma_j^{\mathrm{PI}} & \text{si} \quad k > 0\,. \end{cases}$$

Un second nombre aléatoire ξ_2 est généré et comparé à la fonction $f(k)$ afin de déterminer la couche électronique effectivement ionisée, telle que $f(k-1) < \xi_2 \leq f(k)$.

L'algorithme procède alors à la modification des macro-particules avec une probabilité dépendant du rapport de leur poids statistique [Nanbu & Yonemura, 1998; Pérez *et al.*, 2012; Martinez *et al.*, 2019] :

- si $W_i < W_\gamma$, alors la charge de l'ion est incrémentée et un électron secondaire est créé avec une probabilité égale à W_i/W_γ et le macro-photon est supprimée avec une probabilité de 1 ;
- si $W_\gamma < W_i$, le macro-photon est supprimé avec une probabilité de W_γ/W_i, la charge

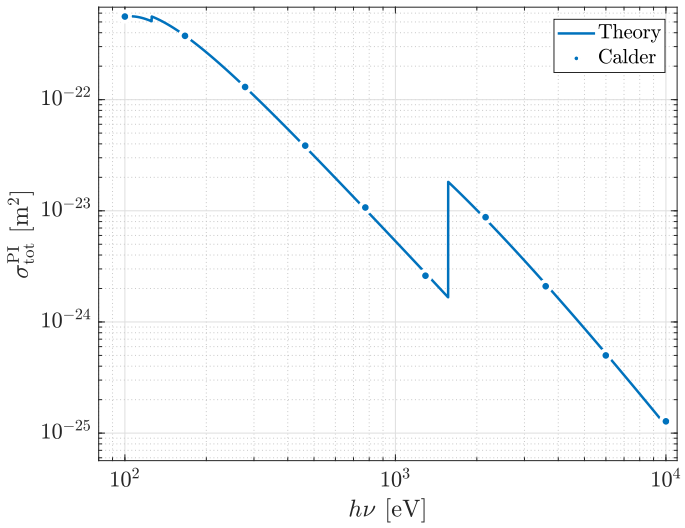


FIGURE 6.3 – Comparaison entre la section efficace théorique totale de PI (trait plein) et celle issue des données de simulation CALDER (ronds) en fonction de l'énergie photonique $h\nu$ pour l'Aluminium neutre à densité solide ($\rho = 2.7$ g/cm^3).

de l'ion est incrémentée et le macro-électron secondaire est créé avec une probabilité de 1 ;

- ◇ si $W_i = W_\gamma$, le macro-photon est supprimé et la charge de l'ion est incrémentée.

6.1.4 Tests de validation

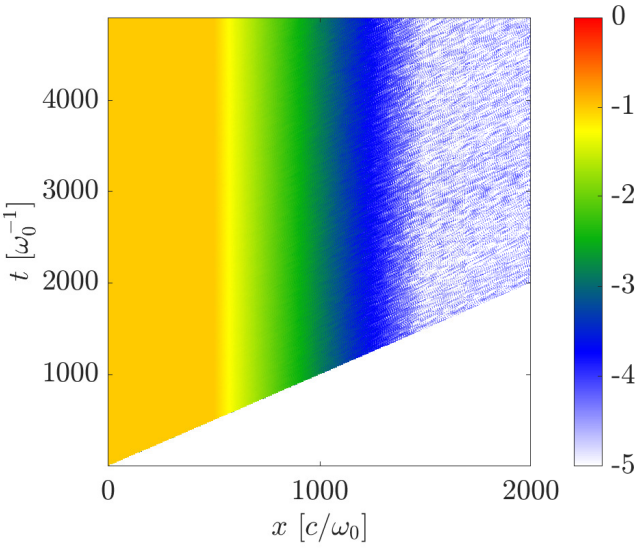
6.1.4.1 Reproduction de la section efficace théorique

Nous vérifions tout d'abord la bonne reproduction de la section efficace de [Verner *et al.*, 1996]. Pour cela, on se place dans une configuration simple : une simulation 0D Monte Carlo d'Aluminium neutre à $T = 0$ eV et à densité solide $\rho = 2.7$ g/cm^3. Les ions sont représentés par $N_i = 100$ macro-particules par maille tandis que le faisceau de photons est choisi mono-énergétique avec $N_\gamma = 100$, sur un total de 10000 mailles. Après un pas de temps ($\Delta t = 5.2$ as), on compte le nombre de photons restant, nous permettant de déduire la probabilité d'interaction et donc de remonter à la section efficace totale de PI grâce à l'Eq. (6.6). Nous procédons à plusieurs simulations en faisant varier l'énergie $h\nu$ du faisceau photonique de 100 eV à 10 keV.

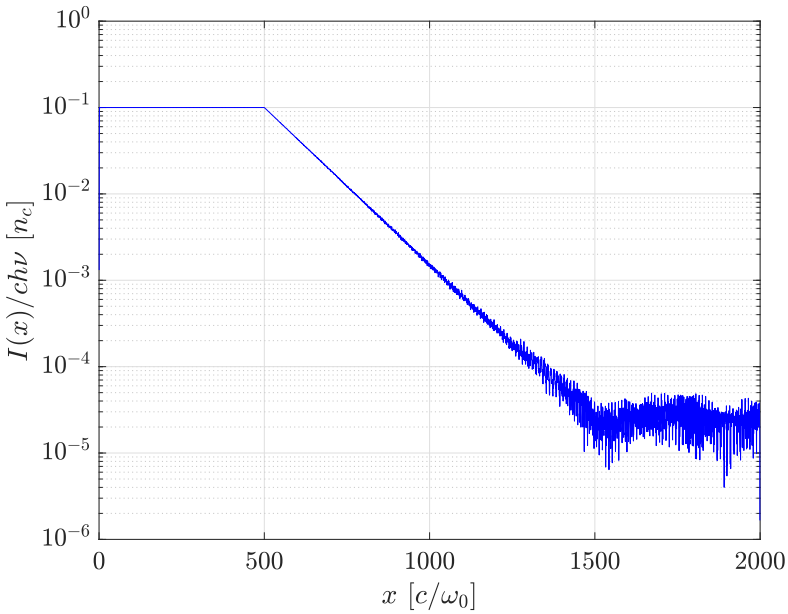
La Fig. 6.3 montre un très bon accord entre résultats PIC et prédictions théoriques. Les sauts visibles à 126 eV et 1567 eV correspondent aux seuils d'ionisation des couches 2s et 2p ainsi qu'à la couche 1s. Entre ces sauts, la section efficace décroît de façon monotone lorsque l'énergie photonique croît.

6.1.4.2 Atténuation d'un faisceau photonique mono-énergétique dans un solide

Nous comparons ici les valeurs d'opacité déduites des résultats de simulation avec celles proposées par les bases de données de référence, comme celles du NIST [Hubbell & Seltzer, 1995]. Pour ce faire, nous procédons à des simulations 1D où une cible d'Aluminium neutre solide ($\rho = 2.7$ g/cm^3) est initialisée entre $x = 500\ c/\omega_0$ et $x = 1500\ c/\omega_0$. Nous y injectons un flux photonique de densité $n_\gamma = 0.1\ n_c$ et d'énergie variable. On utilise $N_i = N_\gamma = 500$ macro-particules par mailles sur 20000 mailles de taille $\Delta x = 16$ nm ainsi qu'un pas de temps $\Delta t = 52$ as. Comme attendu, la Fig. 6.4 montre une décroissance exponentielle du flux photonique au cours de sa propagation dans le milieu, que l'on exprime sous la forme



(a)



(b)

FIGURE 6.4 – (a) Évolution temporelle du profil spatial de densité du faisceau photonique lors de son passage dans une cible solide d'Aluminium neutre solide ($\rho = 2.7$ g/cm^3). La cible se trouve entre $x = 500\ c/\omega_0$ et $x = 1500\ c/\omega_0$. (b) Profil spatial de la densité photonique à $t = 3000\ \omega_0^{-1}$ montrant une décroissance exponentielle.

$$\frac{I(x)}{I_0} = \exp\left(-\frac{\mu}{\rho}x\right) , \tag{6.8}$$

où $I(x)$ est l'intensité du faisceau photonique mesurée au point x, I_0 est l'intensité initiale du faisceau et μ/ρ est le coefficient d'atténuation de l'échantillon (avec ρ la masse volumique).

En répétant la simulation en faisant varier l'énergie photonique, nous pouvons tracer, en Fig. 6.5a l'évolution du coefficient d'atténuation μ/ρ en fonction de l'énergie photonique $h\nu$ pour l'Aluminium solide. Nous avons également tracé sur cette même figure les valeurs fournies par le NIST, qui se superposent presque parfaitement avec les résultats de Calder. Ce test de validation a été effectué pour d'autres éléments chimiques, comme le Carbone solide ($\rho = 2.25$ g/cm^3), dont les résultats sont présentés dans la Fig. 6.5b.

6.2 Recombinaison radiative

6.2.1 Introduction

La recombinaison radiative (RR) fait intervenir un électron libre et un ion (possédant donc au minimum une lacune électronique) dans son état fondamental. L'électron libre va pouvoir combler une lacune présente sur la dernière couche électronique peuplée. Contrairement à la TBR, l'électron recombinant ne va pas transmettre le surplus d'énergie (correspondant à son énergie avant impact additionnée à l'énergie de liaison de la couche-électronique concernée) à un autre électron libre mais à un photon. Naturellement, la recombinaison a pour effet de diminuer la charge électrique de l'ion.

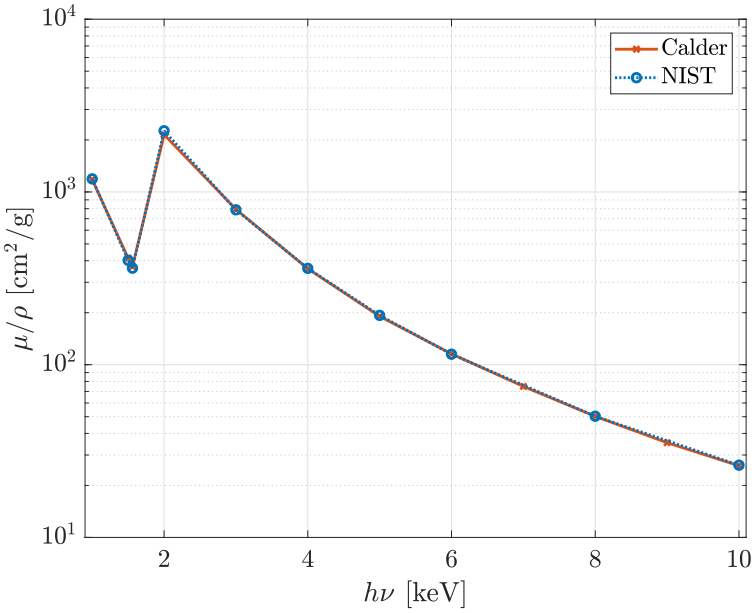
Ce processus va donc participer, comme le Bremsstrahlung ou la désexcitation atomique, à la constitution du spectre d'émission du plasma simulé. Si le processus de Bremsstrahlung participe à la composante purement continue du spectre, à l'inverse de la désexcitation atomique qui s'illustre par la présence de raies atomiques, comme présenté au Chap. 5, l'énergie des photons issus de la recombinaison radiative est déterminée par l'énergie de l'électron impactant, qui est généralement continue en raison des collisions coulombiennes, et par les niveaux discrets des couches électroniques.

6.2.2 Section efficace

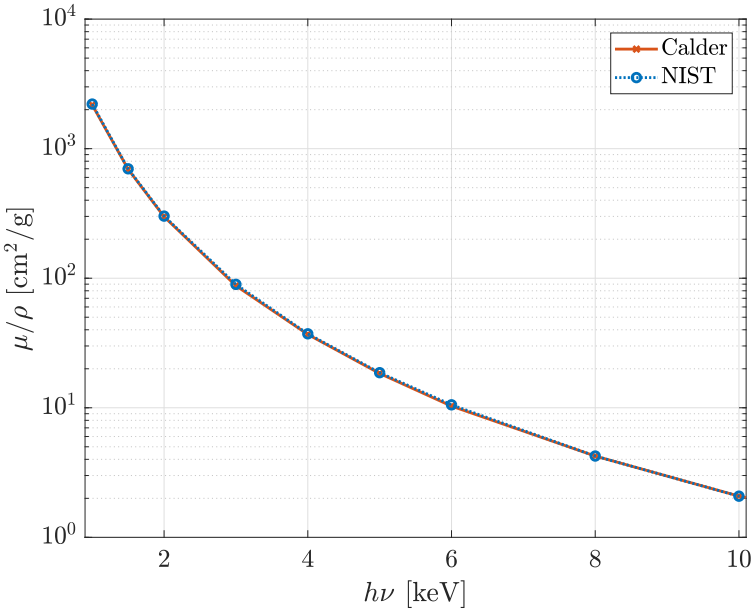
Comme pour la TBR, nous allons, pour déterminer la section efficace de RR, nous baser sur le principe du bilan détaillé, reliant les taux d'interaction de deux processus inverses, en l'occurrence ici la PI et la RR. On part donc de la relation donnée dans [Faussurier & Blancard, 2017]

$$\nu^{\mathrm{RR}}_{k,b\to a} = \frac{g_a}{g_b}\nu^{\mathrm{PI}}_{k,a\to b}\mathrm{e}^{\beta_e \Delta E_{a\to b}+\eta} , \tag{6.9}$$

où $\nu^{\mathrm{RR}}_{k,b\to a}$ et $\nu^{\mathrm{PI}}_{k,a\to b}$ sont respectivement les taux de RR et de PI pour la couche électronique k (on rappelle que la photoionisation n'est pas définie sur les sous-couches électroniques $n\ell j$ mais sur les couches $n\ell$, contrairement à la CI par exemple : il en sera donc de même pour la RR), g_a et g_b sont respectivement les dégénérescences des états a (pré-ionisation/post-recombinaison) et b (post-ionisation/pré-recombinaison), $\beta_e = 1/k_B T_e$, T_e étant la température électronique, $\Delta E_{a\to b}$ la variation d'énergie de l'ion passant de l'état a à l'état b (correspondant ici à l'énergie de liaison B_k) et enfin η le potentiel chimique réduit, défini au Chap. 4.



(a)



(b)

FIGURE 6.5 – Évolution du coefficient d'atténuation d'un faisceau photonique dans une cible (a) d'Aluminium et (b) de Carbone. Les résultats de CALDER sont représentés par le trait plein orange et les données issues de [Hubbell & Seltzer, 1995] par le trait bleu en pointillés.

[Faussurier & Blancard, 2017] donnent l'expression du taux de RR

$$\nu^{\mathrm{RR}}_{k,b\to a} = \mathrm{e}^{\beta_e B_k+\eta}\frac{\sqrt{2}m_e^{3/2}}{\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty \mathrm{d}E\lambda(E)c\vartheta(E)\sigma^{\mathrm{RR}}_{k,b\to a}(E)B_{T_e}(E+B_k) \times \frac{h^2c^2}{2(E+B_k)^3}\frac{1}{\mathrm{e}^{-\beta_e E+\eta}+1}\,, \tag{6.10}$$

où E est l'énergie de l'électron libre dans le référentiel de l'ion avant recombinaison, $\sigma^{\mathrm{RR}}_{k,b\to a}$ est la section efficace de RR, $\lambda(x)$ et $\vartheta(x)$ sont des fonctions définies au Chap. 4, et $B_{T_e}(x)$ est une fonction telle que

$$B_{T_e}(x) = \frac{2x^3}{h^2c^2}\frac{1}{\mathrm{e}^{\beta_e x}-1}\,. \tag{6.11}$$

Parallèlement, le taux de PI

$$\nu^{\mathrm{PI}}_{k,a\to b} = \frac{4\pi}{h}\int_0^\infty \mathrm{d}E\sigma^{\mathrm{PI}}_{k,a\to b}(E+B_k)\frac{B_{T_e}(E+B_k)}{E+B_k}\frac{1}{1+\mathrm{e}^{-\beta_e E+\eta}}\,, \tag{6.12}$$

où $\sigma^{\mathrm{PI}}_{k,a\to b}$ est la section efficace de photoionisation, pour laquelle nous avons opté pour le modèle de [Verner & Yakovlev, 1995].

En injectant les taux de RR et de PI, définis en Eqs. (6.10) et (6.12), dans l'Eq. (6.9) du bilan détaillé entre ces deux processus, on peut, par identification, déterminer la relation entre leur section efficace

$$\sigma^{\mathrm{RR}}_{k,b\to b}(E) = \frac{g_a}{g_b}\frac{(E+B_k)^2}{\sqrt{2}m_e^{3/2}c^3}\frac{1}{\lambda(E)\vartheta(E)}\sigma^{\mathrm{PI}}_{k,a\to b}(E+B_k)\,. \tag{6.13}$$

En résumé, lorsque l'on considère la RR d'un électron libre d'énergie E (dans le référentiel de l'ion) sur une lacune se trouvant sur une couche électronique k, il suffira de calculer la section efficace de PI pour un photon d'énergie $h\nu = E + B_k$ et de la multiplier par les coefficients adéquats, tels que présentés dans l'Eq. (6.13).

6.2.3 Implémentation dans CALDER

Contrairement à la TBR, la RR est un processus à deux corps qui ne présente pas de difficulté particulière pour son implémentation puisque l'on peut utiliser directement la méthode d'appariement, présentée au Chap. 2 et exploitée à plusieurs reprises dans ce manuscrit.

Comme décrit au Chap. 4, Sec. 4.2, la TBR n'a lieu que sur la dernière sous-couche électronique incomplète de l'ion puisque, notre modèle de désexcitation atomique étant instantané, l'ion est toujours considéré dans son état fondamental. Il en va de même pour la RR : dans une maille de simulation, l'algorithme va, pour chaque paire électron-ion formée par la méthode de [Nanbu & Yonemura, 1998], commencer par identifier la couche électronique $n\ell$ (incomplète) la plus externe, siège potentiel de la recombinaison. Nous appellerons cette couche "k". On peut alors estimer la valeur de la section efficace de RR pour cette couche grâce à l'Eq. (6.13). Ceci nous permet de calculer, par la méthode habituelle, la probabilité d'interaction

$$P_k^{\mathrm{RR}} = 1 - \exp\left(-|v_{\mathrm{rel}}|\sigma_k^{\mathrm{RR}}\frac{n_e n_i}{n_{ei}}\Delta t\right) , \tag{6.14}$$

où $v_{\mathrm{rel}} = |\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_e|$ est la vitesse relative entre le macro-électron impactant et le macro-ion, σ_k^{RR} la section efficace de RR pour la couche électronique k, n_e et n_i les densités électronique et ionique, n_{ei} la densité croisée associée [Eq. (2.74)] et Δt le pas de temps. Un nombre aléatoire $\xi_1 \in [0, 1]$ est généré est comparé à la probabilité de RR : l'interaction a lieu si $\xi_1 \leq P_k^{\mathrm{RR}}$.

Il reste alors à appliquer les modifications sur les macro-particules. Pour tous nos processus, nous avons fait le choix de conserver la charge électrique totale de façon exacte pour chaque interaction, contrairement à l'énergie que l'on conserve en moyenne seulement. Par définition, la RR fait disparaître un électron libre (qui devient lié) et réduit d'autant la charge électrique de l'ion ($Z^* \to Z^* - 1$). Or, nous faisons interagir des macro-particules ayant une grande chance de ne pas présenter les mêmes poids statistiques. Il n'y a, pour conserver la charge, pas d'autre choix que de procéder à une fragmentation de la plus grosse macro-particule de la paire (c'est-à-dire celle présentant le plus gros poids statistique).

Si $W_i > W_e$, alors on fragmente le macro-ion en deux fragments tels que $W_i = W_{i,1} + W_{i,2}$, avec $W_{i,1} = W_e$. On procède ensuite à la recombinaison du macro-électron et du macro-ion de poids statistique égal à $W_{i,1}$. Le macro-ion de poids $W_{i,2}$ reste inchangé. Dans le cas où $W_e > W_i$, on fragmente le macro-électron. Enfin, dans le cas rare où les deux macro-particules ont le même poids, l'interaction a lieu sans fragmentation. Cette méthode a l'inconvénient d'augmenter le nombre de macro-particules mais cet effet pourra être contré en activant la coalescence des macro-particules[1].

[1] Chap. 2, Sec. 2.4.

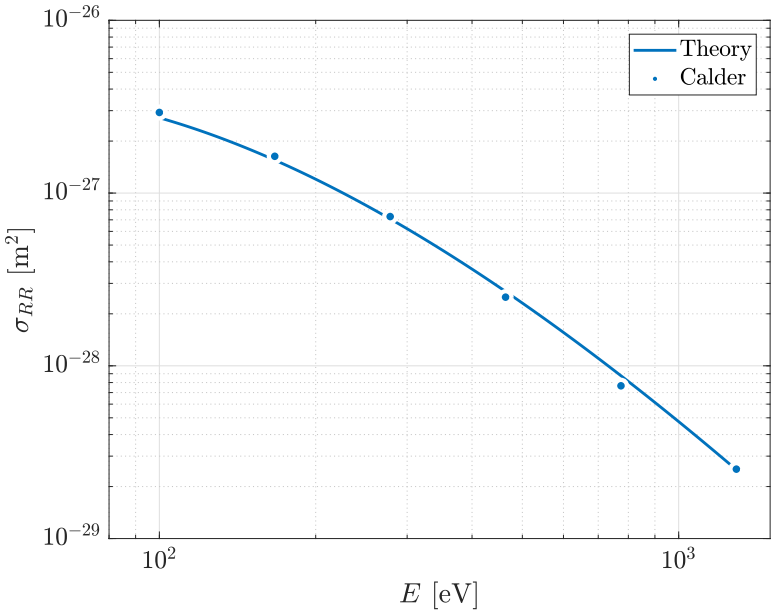
Ce processus va avoir pour effet de supprimer le macro-électron recombinant, d'abaisser le degré de charge du macro-ion de 1 et un macro-photon de poids statistique égal à $\min(W_e, W_i)$ est créé avec une énergie égale à $E + B_k$ où E est l'énergie de l'électron libre avant recombinaison dans le référentiel de l'ion et B_k est l'énergie de liaison de la couche électronique k subissant la RR. Le photon est créé avec une distribution angulaire isotrope dans le référentiel ionique.

6.2.4 Tests de validation

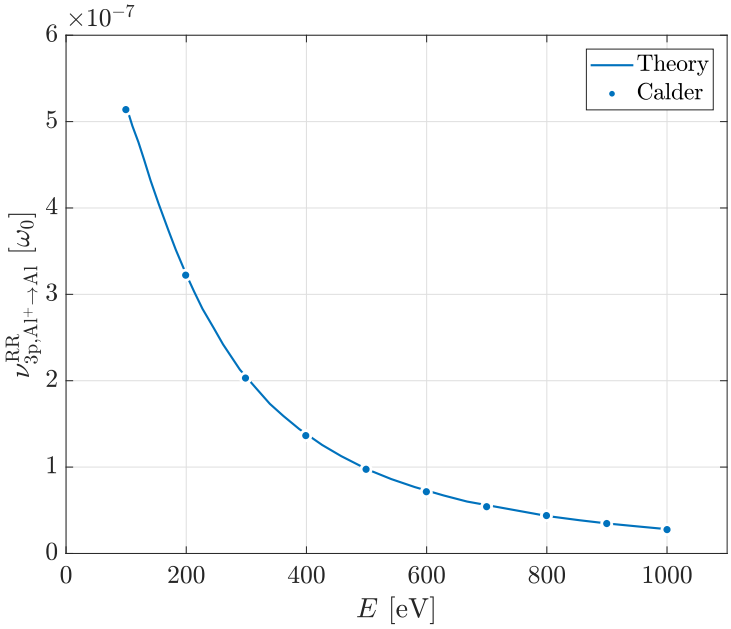
6.2.4.1 Reproduction de la section efficace théorique

Nous vérifions d'abord la bonne reproduction par notre algorithme de la section efficace donnée en Eq. (6.13). Pour ce faire, nous avons procédé à des simulations 0D Monte Carlo d'Al^+ à densité solide ($\rho = 2.7$ g/cm^3) avec $n_i = n_e = 54.25\ n_c$, des macro-ions immobiles et des macro-électrons libres dont on fera varier l'énergie. On utilise $N_i = N_e = 500$ macro-particules par maille sur un total de 10000 mailles et un pas de temps $\Delta t = 5.2$ as. Nous faisons varier l'énergie cinétique des macro-électrons en leur imposant une dérive initiale selon $\mathbf{U}_x$. Pour chacune des simulations, on compte après un pas de temps la proportion d'ions Al^+ ayant recombiné, ce qui nous permet de déduire la probabilité d'interaction pour le processus de RR. Connaissant pour chaque cas la vitesse relative entre les particules, les densités et le pas de temps, il est possible de remonter à la valeur de la section efficace de RR, que l'on compare avec les prédictions théoriques dans la Fig. 6.6a.

Un test complémentaire consiste à s'intéresser au taux moyen de réaction, dont l'expression théorique est donnée en Eq. (6.10) en fonction de la température de la distribution électronique. On procède à des simulations similaires aux précédentes mais en déduisant cette fois le taux de la façon suivante



(a)



(b)

FIGURE 6.6 – Comparaison des valeurs de (a) section efficace et (b) taux de RR tirées des simulations Calder (ronds) et données par les Eqs. (6.13) et (6.10) (trait plein). Le milieu considéré est un plasma d'Al^+ à densité solide $\rho = 2.7$ g/cm^3. Dans (b), le taux de RR est exprimé en unité de $\omega_0 = 1.88 \times 10^{15}$ s^{-1}.

$$\nu_{\text{PIC}}^{\text{RR}} = \frac{1}{W_{\text{Al}} + W_{\text{Al}^+}} \frac{\Delta W_{\text{Al}}}{\Delta t} , \tag{6.15}$$

où W_{Al} et W_{Al^+} sont les poids totaux d'atomes Al et d'ions Al^+ respectivement. La comparaison est donnée en Fig. 6.6b.

Les Figs. 6.6a et 6.6b montrent que la probabilité de RR diminue rapidement lorsque l'énergie des électrons dans le référentiel ionique augmente, à l'instar de la TBR[1]. Nous remarquons également que pour l'intervalle des valeurs d'énergie électroniques testées, le taux de RR, (de l'ordre de 10^{-7} ω_0), est bien plus faible que le taux de TBR obtenu pour un cas test similaire au Chap. 4, Sec. 4.2.4.2 (environ 10^{-3} ω_0). Cette différence importante s'explique en partie par le fait que la TBR est basée sur la section efficace de CI (via le modèle de [Kim *et al.*, 2000]) qui est d'autant plus grande que la sous-couche électronique considérée est externe. En revanche, la RR est basée sur la section efficace de PI (via le modèle de [Verner & Yakovlev, 1995]) qui décroît pour les couches électroniques externes.

[1] Voir le Chap. 4.

6.3 Diffusion Compton

6.3.1 Introduction

La diffusion Compton (qui sera abrégée CS pour *Compton Scattering*) est une collision élastique faisant intervenir un photon et un électron. Il en résulte un transfert d'énergie, qu'il soit du photon vers l'électron (Compton direct) ou de l'électron vers le photon (Compton inverse) et donc une variation de leur impulsion, illustrée par la Fig. 6.7.

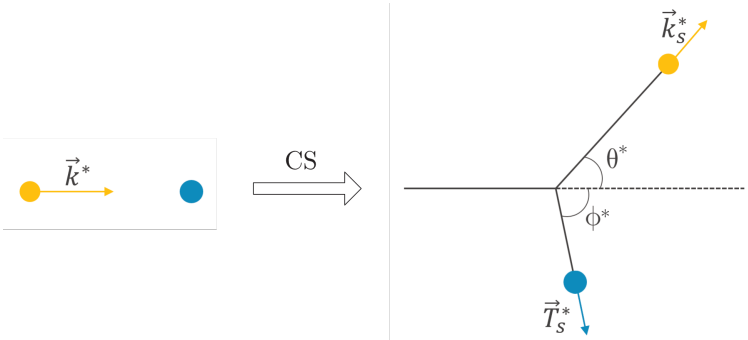


FIGURE 6.7 – Schéma de la diffusion Compton (dans le référentiel de l'électron) consistant en une collision élastique entre un photon et un électron et lors de laquelle un transfert d'énergie a lieu (du photon vers l'électron pour la CS directe ou de l'électron vers le photon pour la CS inverse) ainsi qu'un changement de direction des deux particules.

6.3.2 Section efficace

Lors de cette collision, l'énergie et l'impulsion totales de la paire sont conservées :

$$k^* = k_s^* + T_s^* , \tag{6.16}$$

$$\mathbf{p}_\gamma^* = \mathbf{p}_{\gamma,s}^* + \mathbf{p}_{e,s}^* , \tag{6.17}$$

avec k et T les énergies photoniques et électroniques et $\mathbf{p}_\gamma$ et $\mathbf{p}_e$ les impulsions photoniques et électroniques. L'indice "s" indique la valeur finale de chaque quantité, tandis que l'astérisque

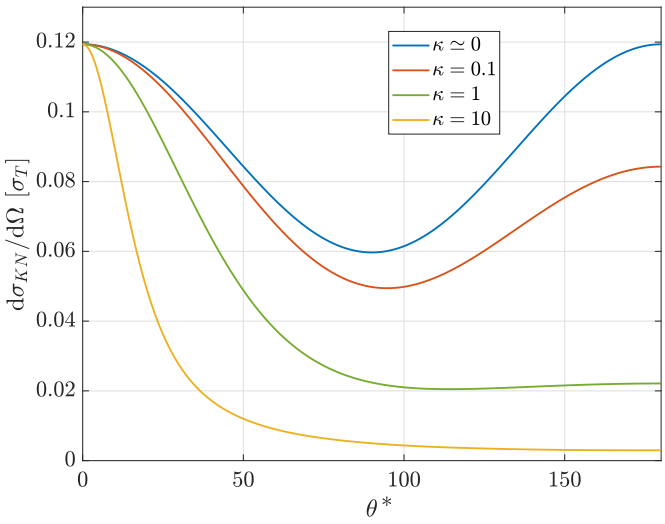


FIGURE 6.8 – Évolution de la section efficace différentielle angulaire de [Klein & Nishina, 1929] en fonction de l'angle polaire θ^* et pour différentes énergies photoniques κ.

"$*$" dénote une quantité calculée dans le référentiel initial de l'électron. En introduisant les angles θ^* et ϕ^* que font les impulsions finales avec la direction initiale du photon, illustrés en Fig. 6.7, le postulat de Planck-Einstein nous permet d'écrire la relation suivante

$$k_s^* = \frac{k^*}{1 + k^*(1 - \cos\theta^*)} \,. \tag{6.18}$$

On a également, d'après l'Eq. (6.16)

$$T_s^* = k^* - k_s^* = k^* \frac{k_s^*(1 - \cos\theta^*)}{1 + k_s^*(1 - \cos\theta^*)} \,, \tag{6.19}$$

permettant alors de déduire également l'expression de l'angle de diffusion de l'électron ϕ^* tel que

$$\cot\phi^* = (1 + k^*)\tan(\theta^*/2) \,. \tag{6.20}$$

Afin d'estimer la probabilité d'interaction pour une paire photon-électron, nous nous basons sur l'expression de la section efficace différentielle de [Klein & Nishina, 1929] ($\mathrm{d}\Omega = \sin\theta^* \mathrm{d}\theta^* \mathrm{d}\varphi^*$)

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{KN}}^*}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{3}{16\pi}\sigma_{\mathrm{T}} \left(\frac{k_s^*}{k^*}\right)^2 \left(\frac{k^*}{k_s^*} + \frac{k_s^*}{k^*} - \sin^2\theta^*\right) \,, \tag{6.21}$$

où σ_{T} est la section efficace de Thomson $\sigma_{\mathrm{T}} = 8\pi/3r_0^2$, avec r_0 le rayon classique électronique. La Fig. 6.8 représente l'évolution de cette section efficace différentielle en fonction de l'angle polaire θ^*, et ce pour différentes valeurs de $\kappa = k^*/m_e c^2$.

En l'intégrant sur les angles solides, on obtient l'expression de la section efficace totale [Ghisellini, 2013]

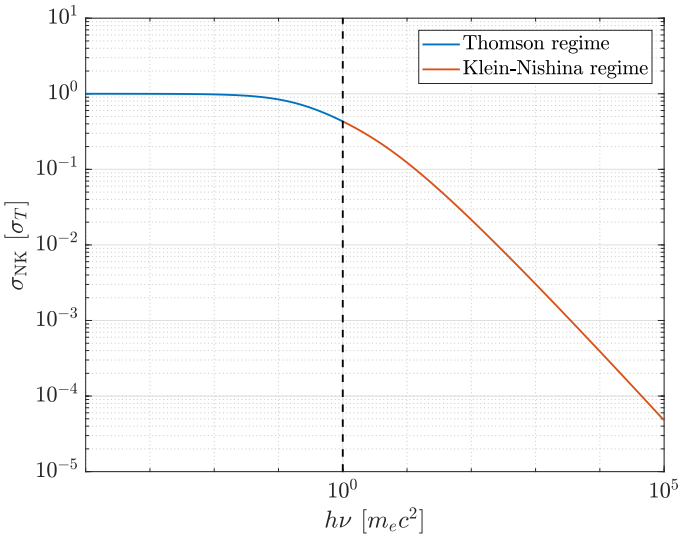


FIGURE 6.9 – Évolution de la section efficace de diffusion Compton, telle que définie par le formalisme de Klein & Nishina [1929], en fonction de l'énergie du photon impactant dans le référentiel de l'électron pre-diffusion.

$$\sigma^*_{\rm KN} = \frac{3}{4}\sigma_{\rm T}\left\{\frac{1+\kappa}{\kappa^3}\left[\frac{2\kappa(1+\kappa)}{1+2\kappa} - \ln(1+2\kappa)\right] + \frac{1}{2\kappa}\ln(1+2\kappa) - \frac{1+3\kappa}{(1+2\kappa)^2}\right\}. \tag{6.22}$$

Cette formule est tracée en Fig. 6.9. Nous y distingons deux régimes : le régime Thomson (bleu), pour de petites énergies photoniques ($\kappa \ll 1$) et où $\sigma^*_{\rm KN} \approx \sigma_{\rm T}$ et le régime de Klein-Nishina (orange) associé à $\kappa \geq 1$ et où $\sigma^*_{\rm KN} \approx 3\sigma_{\rm T}/(8\kappa)[\ln(2\kappa) + 1/2]$. Le régime Thomson se traduit essentiellement par une déviation de la trajectoire du photon impactant, tandis que le régime de Klein-Nishina induit un transfert important d'énergie du photon vers l'électron (dans le référentiel électronique). L'Eq. (6.18) montre un transfert maximal d'énergie pour une collision frontale, soit $\theta = \pi$, permettant d'obtenir une énergie cinétique électronique post-diffusion $T^*_{s,e} = k^*/2$.

L'évaluation des formules données en Eqs. (6.21) et (6.22) fait appel à l'impulsion photonique dans le référentiel initial de l'électron, donnée par la transformée de Lorentz

$$\mathbf{p}^*_\gamma = \mathbf{p}_\gamma + \frac{\gamma_e - 1}{\beta_e^2}(\boldsymbol{\beta}_e \cdot \mathbf{p}_\gamma)\beta_e - \gamma_\gamma\gamma_e\boldsymbol{\beta}_e\,. \tag{6.23}$$

6.3.3 Implémentation dans CALDER

6.3.3.1 Algorithme PIC Monte Carlo

La CS faisant intervenir un macro-photon et un macro-électron, l'expression de la probabilité d'interaction va être proche de celle établie pour la photoionisation, présentée au début de ce chapitre. En suivant le formalisme de [Pérez *et al.*, 2012], déjà présenté à plusieurs reprises dans ce manuscrit, il vient

$$P^{\rm CS} = 1 - \exp\left(-c\,(1 - \boldsymbol{\beta}_e \cdot \boldsymbol{\Omega})\,\sigma^*_{\rm KN}\frac{n_e n_\gamma}{n_{e\gamma}}\Delta t\right)\,, \tag{6.24}$$

où on rappelle que $\boldsymbol{\beta}_e$ et $\boldsymbol{\Omega}$ sont les vecteurs vitesse normalisés par c du macro-électron et du macro-photon respectivement, n_e et n_γ sont les densités électronique et photonique.

Afin de déterminer si la diffusion a effectivement lieu, l'algorithme génère un nombre

aléatoire ξ compris entre 0 et 1 et le compare à la valeur de probabilité P^{CS} : si $\xi \leq P^{\text{CS}}$, alors l'évènement a bien lieu et l'algorithme passe à l'étape suivante, à savoir le calcul du transfère d'énergie et des angles de diffusion, abordée dans la section suivante.

Lors de la CS, il faut déterminer à la fois la quantité d'énergie échangée entre le photon et l'électron mais également les angles de diffusion des deux particules. Pour ce faire, nous nous basons sur une méthode mathématique baptisée méthode mixte (puisqu'elle combine en réalité les méthodes Monte Carlo directe et de rejet [Robert & Casella, 2010]), qui est celle utilisée dans le code Monte Carlo Geant4 [Truscott *et al.*, 2000].

La méthode mixte est une méthode Monte Carlo permettant d'approcher des densités de probabilités dont les fonctions de répartition sont particulièrement difficiles à inverser. Elle est bien adaptée à des fonctions pouvant être factorisées selon

$$h(x) = f(x)g(x)\,, \tag{6.25}$$

où $f(x)$ est facile à inverser et $g(x) > 0$. L'algorithme peut être décomposé comme suit [Carlier, 2009] :

1. les fonctions f et g sont normalisées en $\tilde{f}$ et $\tilde{g}$ telles que

$$\int_{x_1}^{x_2} \tilde{f}(x)\mathrm{d}x = 1 \quad \text{et} \quad \tilde{g}(x) \leq 1 \quad \forall x \in [x_1,\, x_2]\,; \tag{6.26}$$

2. on génère une valeur de x en utilisant $\tilde{f}(x)$ comme fonction de distribution : pour ce faire, on tire un nombre aléatoire ξ_1 compris entre 0 et 1 et on en déduit x tel que $x = \tilde{f}^{-1}(\xi_1)$ (méthode directe) ;
3. on teste cette valeur de x pour $\tilde{g}$ (méthode de rejet) : l'algorithme tire un second nombre aléatoire $\xi_2 \in [0,\, 1]$, si $\xi_2 \leq \tilde{g}(x)$, on accepte la valeur de x, sinon nous recommençons à partir de l'étape 2.

La section efficace différentielle de [Klein & Nishina, 1929] se prête particulièrement bien à l'exercice puisqu'il est possible de la factoriser selon

$$\frac{\mathrm{d}\sigma^*_{\text{KN}}}{\mathrm{d}\varepsilon} = \pi r_0^2 \frac{m_e c^2}{k^*}\left(\frac{1}{\varepsilon} + \varepsilon\right)\left(1 - \frac{\varepsilon \sin^2(\theta)}{1+\varepsilon}\right) = \pi r_0^2 \frac{m_e c^2}{k^*} f(\varepsilon) g(\varepsilon)\,, \tag{6.27}$$

où $\varepsilon = k_s^*/k^*$ est le rapport entre l'énergie photonique après et avant diffusion, r_0 le rayon classique électronique, m_e la masse électronique, c la vitesse de la lumière et θ l'angle de diffusion polaire du photon. Afin de simplifier encore davantage le problème, on peut décomposer $f(\varepsilon)$ comme suit

$$f(\varepsilon) = N_1 f_1(x) + N_2 f_2(x)\,, \tag{6.28}$$

avec $f_1(\varepsilon) = 1/N_1\varepsilon$ et $f_2(\varepsilon) = \varepsilon/N_2$. N_1 et N_2 sont deux coefficients tels que $N_1 = \ln(1/\varepsilon_0)$ avec $\varepsilon_0 = 1/(1+2\kappa)$, $\kappa = k^*/m_e c^2$, et $N_2 = (1-\varepsilon_0^2)/2$. On notera que les fonctions f_1 et f_2 sont définies sur $[\varepsilon_0,\, 1]$ et que g, la fonction de rejet, est encadrée de sorte que $0 \leq g(\varepsilon) \leq 1$.

La méthode mixte appliquée à la CS consistera donc en les étapes suivantes :

1. trois nombres aléatoires ξ_1, ξ_2 et ξ_3 sont générés entre 0 et 1 ;
2. ξ_1 est comparé avec le rapport $N_1/(N_1+N_2)$: si $\xi_1 \leq N_1/(N_1+N_2)$, alors on considérera seulement le produit $f_1(\varepsilon)g(\varepsilon)$. Dans le cas inverse, on considérera plutôt $f_2(\varepsilon)g(\varepsilon)$;

3. ε est déduit par la méthode directe : $\varepsilon = \exp(-N_1\xi_2)$ si f_1 a été sélectionnée ou $\varepsilon^2 = \varepsilon_0^2 + (1+\varepsilon_0^2)\xi_2$ si f_2 a été sélectionnée ;
4. l'angle polaire θ est calculé tel que $\sin^2(\theta) = t(2-t)$ avec $t = (1-\varepsilon)/\kappa\varepsilon$;
5. ξ_3 est comparé avec $g(\varepsilon)$: si $\xi_3 \leq g(\varepsilon)$, on accepte la valeur de ε, sinon on recommence à partir de l'étape 1.

6.3.3.2 Modification des macro-particules

La CS étant une interaction élastique, elle se prête a priori à la méthode d'appariement de [Nanbu & Yonemura, 1998], et donc à sa correction probabiliste dans le cas où le photon et l'électron en interaction présentent des poids statistiques différents. Cependant, nous verrons que le régime Compton nécessite des densités photoniques très importantes pour que ses effets soient visibles, ce qui suppose d'initialiser des macro-photons de poids statistique élevé. L'impulsion des photons étant modélisée avec une probabilité inversement proportionnelle à leur poids, on peut craindre que cela n'arrive que très rarement, d'où une mauvaise description statistique.

Pour remédier à ce problème, nous avons décidé de procéder à une fragmentation systématique des macro-photons lorsque leur poids statistique, W_γ, est supérieur à celui du macro-électron de leur paire, W_e, en divisant le macro-photons en un fragment ayant le même poids statistique que le macro-électron et un second portant le poids statistique restant. En revanche, si $W_\gamma \leq W_e$, on ne procède à aucune fragmentation et on appliquera les modifications suivant la méthode de [Pérez *et al.*, 2012], exposée, entre autres, pour la CI au Chap. 4, Sec. 4.1.

Lorsque la CS a effectivement lieu, on modifie l'énergie du macro-photon grâce à la valeur de ε^* calculée via la méthode mixte, présentée dans la section précédente. L'angle de diffusion polaire θ^* est, comme nous l'avons vu, également déterminé par cette même méthode et il reste donc à générer aléatoirement l'angle azimutal tel que

$$\varphi^* = 2\pi\xi\,, \tag{6.29}$$

où ξ est un nombre aléatoire tiré entre 0 et 1. On en déduit donc l'impulsion photonique finale

$$p^*_{\gamma,s,x} = \varepsilon k^* \cos\theta^*\,, \tag{6.30}$$
$$p^*_{\gamma,s,y} = \varepsilon k^* \sin\theta^* \cos\varphi^*\,, \tag{6.31}$$
$$p^*_{\gamma,s,z} = \varepsilon k^* \sin\theta^* \sin\varphi^*\,, \tag{6.32}$$

L'impulsion finale du macro-électron est directement obtenue par la conservation de la quantité de mouvement donnée par l'Eq. (6.17) :

$$\mathbf{p}^*_{e,s} = \mathbf{p}^*_\gamma - \mathbf{p}^*_{\gamma,s}\,. \tag{6.33}$$

La dernière étape consiste à calculer les impulsions finales dans le référentiel du laboratoire en utilisant la transformée de Lorentz inverse

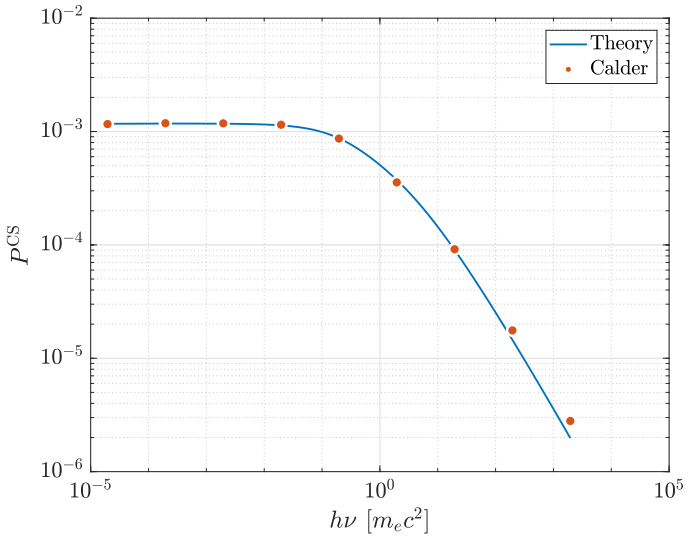


FIGURE 6.10 – Comparaison de la densité de probabilité de diffusion Compton [Eq. (6.24)] et de celle déduite de la simulation PIC. Le système consiste en un faisceau électronique de densité $n_e = 10\ n_c$ et d'impulsion $\mathbf{p}_e = -10^{-2}\ m_e c\ \mathbf{U}_x$ interagissant frontalement avec un faisceau photonique de densité $n_\gamma = 10\ n_c$ et d'impulsion $\mathbf{p}_\gamma = h\nu/c\ \mathbf{U}_x$.

$$\mathbf{p}_{\gamma,s} = \mathbf{p}^*_\gamma + \frac{\gamma_e - 1}{\beta_e^2}(\boldsymbol{\beta}_e \cdot \mathbf{p}^*_{\gamma,s})\boldsymbol{\beta}_e + \boldsymbol{\beta}_e \gamma_e \gamma^*_{\gamma,s}\,, \tag{6.34}$$

$$\mathbf{p}_{e,s} = \mathbf{p}^*_{e,s} + \frac{\gamma_e - 1}{\beta_e^2}(\boldsymbol{\beta}_e \cdot \mathbf{p}^*_{e,s})\boldsymbol{\beta}_e + \boldsymbol{\beta}_e \gamma_e \gamma^*_{e,s}\,. \tag{6.35}$$

6.3.4 Confrontation du module CALDER avec des modèles théoriques

La CS est un phénomène qui a été abondamment étudié depuis sa découverte en 1923 et on recense aujourd'hui de nombreux modèles théoriques permettant d'en prédire les effets dans divers contextes physiques. Nous avons sélectionné certains d'entre eux, présentés dans cette section, afin de mettre à l'épreuve notre module Monte Carlo.

6.3.4.1 Comparaison avec la probabilité d'interaction théorique

Avant de s'intéresser aux modèles analytiques proposés dans la littérature, nous pouvons, dans un premier temps, procéder au même test simple que nous avons effectué quasi-systématiquement pour chacun des nouveaux processus introduits dans CALDER, à savoir la comparaison des valeurs de probabilité d'interaction issues des simulations avec les valeurs prédites par la formule théorique, donnée en Eq. (6.24).

On effectue pour cela plusieurs simulations 1D dans lesquelles on initialise un faisceau photonique de direction $\mathbf{U}_x$, d'énergie variable et de densité $n_\gamma = 10\ n_c$ ainsi qu'un faisceau électronique de direction $-\mathbf{U}_x$ (la collision est donc frontale), avec une impulsion $p_e = 10^{-3}\ m_e c^2$ et de densité $n_e = 10\ n_c$. On utilise $N_\gamma = N_e = 5000$ macro-particules par maille sur un total de 1000 mailles. Nous prenons un pas de temps très grand ($\Delta t = 10^4\ \omega_0^{-1}$) afin d'exacerber l'effet de la CS.

Les résultats sont résumés dans la Fig. 6.10 où l'on a représenté avec un trait bleu les valeurs théoriques et les probabilités tirés de CALDER avec des points oranges. On remarque une très bonne correspondance sur la très grande plage d'énergie photonique considérée. Le plus grand écart est observé pour l'énergie photonique maximale ($\sim 10^3\ m_e c^2$) où la probabilité d'interaction a chuté de près de trois ordres de grandeur par rapport à sa valeur dans le régime de Thomson.

6.3.4.2 Variation de l'énergie photonique post-diffusion

Nous considérons ici la diffusion entre un photon d'énergie initiale $\hbar\omega_0$ se propageant suivant le vecteur $\mathbf{n}_0$ et un électron de vitesse β_e et de facteur de Lorentz γ. Notre but est de prédire l'énergie photonique post-diffusion $\hbar\omega$ en faisant varier à la fois les énergies photoniques et électroniques initiales mais aussi l'angle de collision entre les deux particules. On se base pour cela sur l'article de [Barbosa, 1982] dans lequel l'auteur commence par introduire l'énergie du photon (normalisée) dans le référentiel de l'électron, $x = \frac{\hbar\omega_0}{m_e c^2}\gamma(1 - \boldsymbol{\beta}_e \cdot \mathbf{n}_0)$, ainsi que le moment d'ordre n de la section efficace de CS tel que

$$\sigma^n = \int \mathrm{d}\Omega \left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^n \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\,, \tag{6.36}$$

où $\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega$ est la section efficace différentielle angulaire de Klein-Nishina, définie en Eq. (6.21). On peut alors exprimer la variation d'énergie relative du photon

$$\frac{\Delta\omega}{\omega_0} = \frac{\sigma^1 - \sigma^0}{\sigma_0}\,, \tag{6.37}$$

avec

$$\sigma^0 = 2\pi r_0^2 \left[\frac{x^2 - 2x - 2}{2x^3}\ln(1+2x) + \frac{(1+2x)^2 + (1+x)^2(1+2x) - x^3}{x^2(1+2x)^2}\right]\,, \tag{6.38}$$

correspondant en fait à la section efficace totale de CS, et

$$\begin{aligned}\sigma^1 - \sigma^0 =& \pi r_0^2 \left[\gamma^2(\beta_e^2 - \mathbf{n}_0 \cdot \boldsymbol{\beta}_e) - x\right] \\ &\times \left[\frac{(x-3)(x+1)}{x^4}\ln(1+2x) + \frac{2\left(3 + 17x + 31x^2 + 17x^3 - \frac{10}{3}x^4\right)}{x^3(1+2x)^3}\right]\,.\end{aligned} \tag{6.39}$$

Nous procédons à des simulations 1D avec des paramètres similaires à ceux de la Sec. 6.3.4.1. en considérant deux cas pour l'angle de collision : $\pi/4$ et π. Pour trois valeurs différentes de facteur de Lorentz pour les macro-électrons, $\gamma = 10$, 100 et 1000, on déduit des résultats de simulation la variation moyenne de l'énergie photonique sur un pas de temps. Afin de faciliter le diagnostic, on décide de fixer la probabilité d'interaction à 1 (la probabilité d'interaction a été testée dans la section précédente).

Nous traçons en Fig. 6.11 l'échelle logarithmique l'évolution théorique de $(\sigma^1 - \sigma^0)/\sigma^0$ en fonction de x. Outre le très bon accord obtenu, que ce soit pour $\pi/4$ (Fig. 6.11a) ou pour $\theta = \pi$ (Fig. 6.11b), on observe pour toutes ces courbes trois régimes :

- un premier pour $x < 0$ ($h\nu < m_e c^2$) qui correspond en fait au régime de Thomson, caractérisé par une section efficace totale constante ;
- un deuxième régime de décroissance exponentielle présentant la même pente quel que soit l'énergie électronique, correspondant au régime de Klein-Nishina ;
- un dernier régime où la variation d'énergie s'effondre à partir d'une énergie x d'autant plus grande que l'énergie électronique est élevée : nous verrons dans la suite que, suivant l'énergie des particules mises en jeu, le transfert d'énergie peut se faire dans un sens

ou dans l'autre et on parlera soit de diffusion Compton (lorsque $\hbar\omega \gg m_e c^2$), soit de diffusion Compton inverse (lorsque $\gamma\hbar\omega \ll m_e c^2$).

6.3.4.3 Taux de variation d'énergie photonique dans un bain thermique électronique : régime de diffusion Thomson

[Barbosa, 1982] obtient également une formule du taux de variation de l'énergie d'un photon $\langle \Delta\omega/\tau \rangle$ dans une distribution électronique thermalisée et dans le cas d'un régime de diffusion Thomson, c'est-à-dire en faisant l'hypothèse d'une énergie photonique faible devant $m_e c^2$. Ce taux est défini tel que

$$\left\langle \frac{\Delta\omega}{\tau} \right\rangle = \omega_0 c \int \mathrm{d}\mathbf{p}\,(1 - \mathbf{n}_0 \cdot \boldsymbol{\beta}_e)\,(\sigma^1 - \sigma^0) f(\mathbf{p})\,, \tag{6.40}$$

où $f(\mathbf{p})$ est la distribution des impulsions électroniques, données par la fonction de Maxwell-Jüttner [Jüttner, 1911]

$$f(\mathbf{p}) = \frac{\mu n_e}{4\pi (m_e c)^3 K_2(\mu)} \exp\left(-\mu\sqrt{1 + |\mathbf{p}|^2}\right)\,, \tag{6.41}$$

avec K_n la fonction de Bessel modifiée de seconde espèce, μ l'inverse de la température électronique normalisée, $1/\mu = k_B T_e/(m_e c^2)$, et n_e la densité électronique. En introduisant l'énergie photonique normalisée $\alpha = \hbar\omega/(m_e c^2)$, [Barbosa, 1982] procède à un développement limité à l'ordre 2 de l'Eq. (6.40) permettant, après intégration sur l'angle solide, d'obtenir l'expression suivante

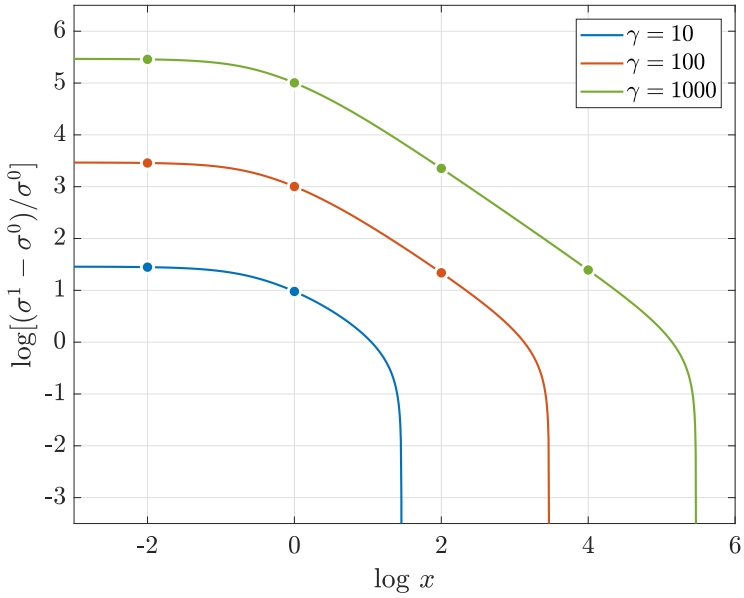
$$\begin{aligned}\left\langle \frac{\Delta\omega}{\tau} \right\rangle =& \frac{\omega_0 c}{l_t}\left[\frac{4K_3(\mu)}{\mu K_2(\mu)} - \alpha\left(\frac{K_3(\mu)}{K_2(\mu)} + \frac{21K_4(\mu)}{\mu K_2(\mu)}\right)\right.\\ &\left. + \frac{21}{5}\alpha^2\left(1 + \frac{27K_3(\mu)}{\mu K_2(\mu)} + \frac{168K_4(\mu)}{\mu^2 K_2(\mu)}\right)\right]\,,\end{aligned} \tag{6.42}$$

avec $l_t = 1/(\sigma_{\mathrm{T}} n_e)$ (on rappelle que $\sigma_{\mathrm{T}} = 8\pi r_0^2/3$ est la section efficace de diffusion Thomson). En nous plaçant dans le cas d'une température électronique non relativiste ($\mu \gg 1$), l'Eq. (6.42) se simplifie comme suit

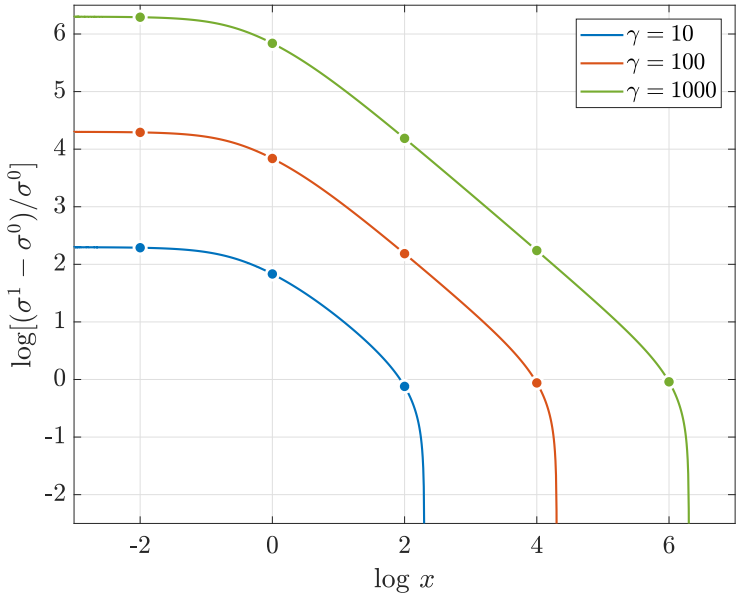
$$\left\langle \frac{\Delta\omega}{\tau} \right\rangle \approx \frac{\omega_0 c}{l_t}\left(\frac{4}{\mu} - \alpha\right)\,. \tag{6.43}$$

Nous avons procédé à des simulations 0D avec les mêmes paramètres que précédemment en initialisant un faisceau photonique de densité $n_\gamma = 10\ n_c$ et d'énergie variable (nous avons pris $\log(\alpha) = -5$, -4, -3 et -2), ainsi qu'un bain électronique de densité $n_e = 10\ n_c$ et de température $T_e = 10$ keV ($\approx 0.02\ m_e c^2$).

Nous représentons sur la Fig. 6.12 à la fois la formule de taux [Eq. (6.42)] à l'ordre 2 et son approximation pour une température électronique faible, donnée en Eq. (6.43), ainsi que les taux de variation tirés des simulations Calder, qui présentent un bon accord avec les courbes théoriques. Les pics présents pour des énergies photoniques élevées font en fait état de changements de signe pour le taux de variation, traduisant des transitions entre diffusion Compton et diffusion Compton inverse.



(a) $\theta = \pi/4$



(b) $\theta = \pi$

FIGURE 6.11 – Évolution théorique du rapport $(\sigma^1 - \sigma^0)/\sigma^0$ correspondant à la variation relative de l'énergie du photon $(\Delta\omega/\omega_0)$ en fonction de l'énergie du photon dans le référentiel de l'électron, x pour différentes valeurs d'énergies électroniques ($\gamma = 10$, 100 et 1000) et pour une collision (a) d'angle $\pi/4$ et (b) π (collision frontale) [Barbosa, 1982]. Les valeurs prédites par CALDER sont représentées par des points.

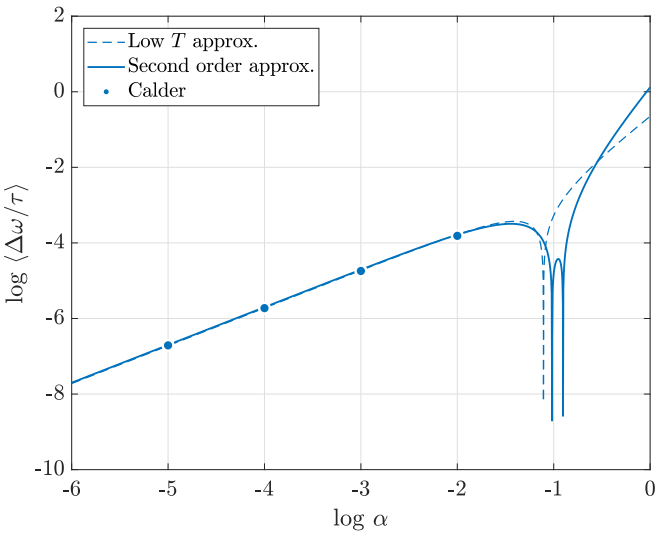


FIGURE 6.12 – Évolution en échelles logarithmiques des taux de variation de l'énergie photonique post-diffusion en fonction de l'énergie photonique initiale normalisée α du faisceau dans le référentiel des électrons où $n_\gamma = n_e = 10\ n_c$ et $T_e = 10$ keV. Le trait plein représente le développement limité à l'ordre 2 de l'Eq. (6.42), le trait en pointillés l'approximation de l'Eq. (6.43) pour de faibles températures électronique et les points représentent les résultats de CALDER.

6.3.4.4 Taux de variation d'énergie photonique dans un bain thermique électronique : régime de diffusion général

Une formule générale du taux de variation de l'énergie photonique, sans hypothèse sur l'énergie du photon et sur la température du bain électronique, a été obtenue par [Shestakov *et al.*, 1988] :

$$\frac{\mathrm{d}h\nu}{\mathrm{d}t} = \int_0^\infty \alpha^3 n(\alpha,t) R(\alpha,t) \mathrm{d}\alpha\,, \tag{6.44}$$

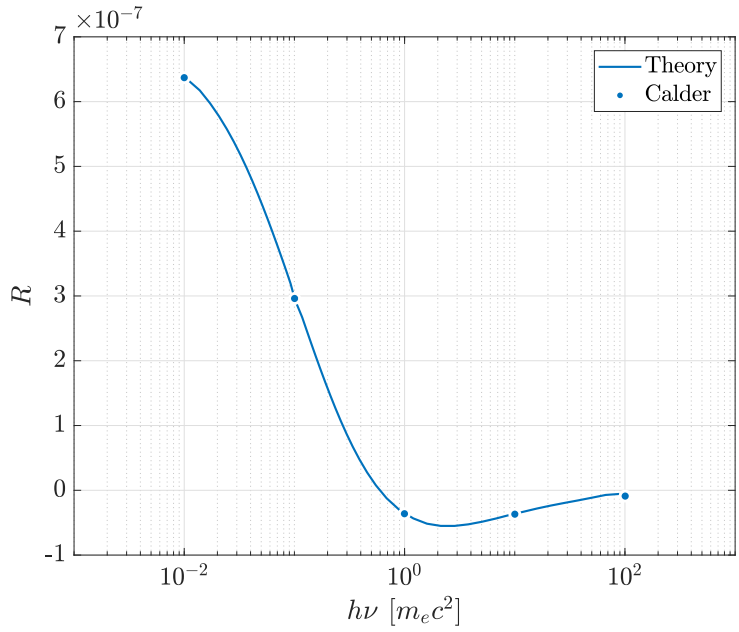
où on rappelle que $\alpha = h\nu/(m_e c^2)$ est ici l'énergie photonique normalisée, $n(\alpha,t)$ la fonction de distribution des photons et $R(\alpha,t)$ le taux de variation de l'énergie d'un photon possédant une énergie initiale égale à $h\nu$. En faisant l'hypothèse d'une propagation photonique selon $\mathbf{U}_z$, ce taux est exprimé dans l'article comme suit

$$R = \frac{1}{2\alpha K_2(\mu)} \int_0^\infty \mathrm{d}z \left[\frac{z^2}{2} + \left(\frac{1}{\mu} - \alpha\right) z - \frac{1}{2}\right] \alpha z f_0(\alpha z) \exp\left[-\frac{\mu}{2}\left(z + \frac{1}{z}\right)\right]\,, \tag{6.45}$$

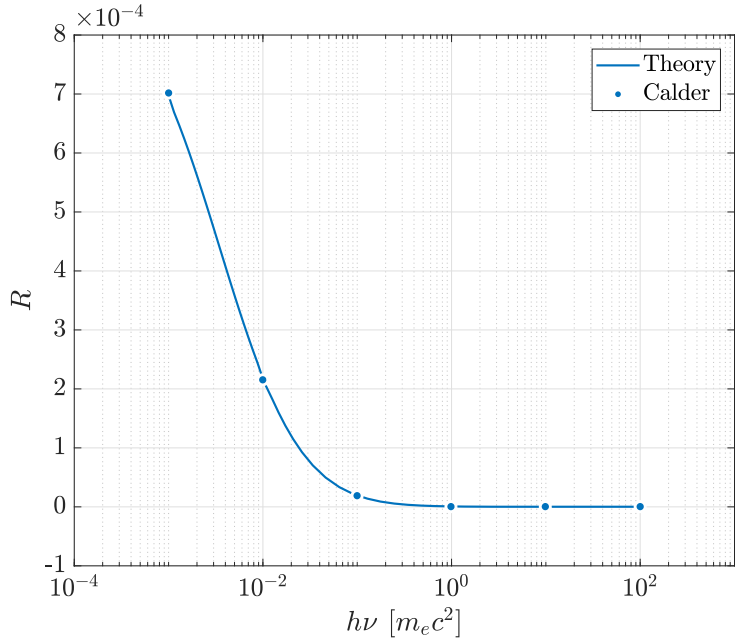
avec f_0 une fonction telle que

$$x f_0(x) = \frac{3}{8x^3}(x-3)(x-1)\ln(2x+1) - \frac{10x^4 - 51x^3 - 93x^2 - 51x - 9}{4x^2(2x+1)^3}\,. \tag{6.46}$$

Nous avons procédé à plusieurs simulations dont les paramètres spatiaux et temporels restent inchangés par rapport à la la Sec. 6.3.4.1, dans lesquelles nous initialisons un faisceau photonique de densité $n_\gamma = 10\ n_c$ et d'énergie variable (on prendra $h\nu = 10^{-3}$, 10^{-2}, 10^{-1}, 1, 10 et 100 $m_e c^2$) ainsi qu'un bain électronique de densité $n_e = 10\ n_c$ et de température $T_e = 100$ keV dans un premier cas puis $T_e = 5$ MeV dans un second. Comme pour les cas précédents, nous calculons la différence d'énergie pré et post-diffusion de la population photonique, que l'on divise par le pas de temps pour obtenir les résultats sont regroupés sur la Fig. 6.13a pour $T_e = 100$ keV et sur la Fig. 6.13b pour $T_e = 5$ MeV. On observe dans les deux



(a)



(b)

FIGURE 6.13 – Évolution du taux de variation R défini en Eq. (6.45) en fonction de l'énergie photonique $h\nu$ pour (a) $T_e = 100$ keV et (b) $T_e = 5$ MeV. Les résultats des simulations (points) sont comparés aux préditions théoriques de [Shestakov *et al.*, 1988] (trait plein).

cas un accord excellent entre les données CALDER et le taux R prédit par la théorie. Pour $T_e = 100$ keV, on observe une première phase de décroissance, avec R devenant négatif pour $h\nu \approx 0.6\ m_e c^2$, puis la courbe présente un minimum pour $h\nu = 2\ m_e c^2$ et croît enfin vers 0. Ce changement de signe traduit la transition entre les régimes de Compton inverse et direct dans le référentiel du laboratoire. Dans le référentiel de l'électron, le transfert d'énergie se fait toujours du photon vers l'électron. En revanche, lorsque l'on repasse dans le référentiel du laboratoire via une transformée de Lorentz inverse, le transfert peut se faire dans les deux sens, suivant les énergies initiales des deux particules. Dans le cas d'une distribution électronique relativiste à $T_e = 5$ MeV, le transfert d'énergie des électrons aux photons reste positif sur la gamme d'énergie photonique considérée.

6.3.4.5 Accélération électronique par diffusion Compton

Nous avons voulu tester notre implémentation plus finement encore, en nous intéressant ici à la variation temporelle des composantes du vecteur d'impulsion des électrons lors de leur interaction élastique avec les photons. Nous avons adopté pour cela le modèle proposé par [Blumenthal & Tucker, 1974] : un électron, d'impulsion $\mathbf{P}$, se déplaçant initialement selon $\mathbf{U}_z$, interagit avec un photon d'impulsion $\mathbf{p}$ contenu dans le plan (x, z) et faisant un angle θ avec $-\mathbf{U}_z$. Ce même article établit les expressions de la dérivée temporelle des composantes du vecteur d'impulsion de l'électron pour une distribution photonique

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}P_x}{\mathrm{d}t} \right\rangle = \sigma_{\mathrm{T}} \int \mathrm{d}u F(\eta^*) \sin\theta^* \left(1 + \beta_e \cos\theta^*\right) , \tag{6.47}$$

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}P_y}{\mathrm{d}t} \right\rangle = 0 , \tag{6.48}$$

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}P_z}{\mathrm{d}t} \right\rangle = -\gamma_e^2 \sigma_{\mathrm{T}} \int \mathrm{d}u F(\eta^*) \left(1 + \beta_e \cos\theta^*\right) \left[\cos\theta^* + \beta_e - \frac{\beta_e \eta^* (1 + \beta_e \cos\theta^*)}{1 + \eta^*}\right] , \tag{6.49}$$

où on rappelle que σ_{T} est la section efficace de diffusion Thomson, $\beta_e = v_e/c$ la vitesse normalisée de l'électron, u la densité d'énergie photonique telle que $\mathrm{d}u = k\mathrm{d}n_\gamma$ (k étant le vecteur d'onde du photon et n_γ la densité photonique), η^* un paramètre tel que

$$\eta^* = \frac{\gamma_e k (1 + \beta_e \cos(\theta))}{m_e c^2} , \tag{6.50}$$

et enfin F une fonction définie comme suit

$$\begin{aligned} F(x) = & \frac{3(1+x)}{4x^3} \left[1 + \frac{1}{2x}(x^2 - 2x - 3)\ln(1+2x) + \frac{-x^2 + 4x + 3}{1 + 2x} \right. \\ & \left. + \frac{x^3 - x^2 - 3x - 1}{1 + 2x^2} - \frac{x^2(4x^2 + 6x + 3)}{3(1+2x)^3}\right] , \end{aligned} \tag{6.51}$$

Nous avons procédé, dans CALDER, à des simulations 1D avec encore une fois les mêmes paramètres que précédemment[1] en initialisant ici un faisceau électronique mono-énergétique de densité $n_e = 50\ n_c$ de facteur de Lorentz $\gamma_e = 10$ et de direction $\mathbf{U}_z$ ainsi qu'un faisceau photonique de densité $n_\gamma = 50\ n_c$, d'énergie variable ($h\nu = 10^{-3}$, 10^{-2}, 0.1, 1, 10 et 100 $m_e c^2$), mono-directionnel faisant un angle $\theta = \pi/4$ avec le vecteur $-\mathbf{U}_z$. Grâce aux sorties de CALDER, on peut facilement estimer la variation moyenne des composantes de l'impulsion

[1] Sec. 6.3.4.1.

électronique pour un pas de temps.

Les comparaisons avec le modèle théorique de [Blumenthal & Tucker, 1974] sont données en Fig. 6.14a pour $\langle \mathrm{d}P_x/\mathrm{d}t \rangle$ et en Fig. 6.14b pour $\langle \mathrm{d}P_z/\mathrm{d}t \rangle$. Outre le bon accord visible, on remarque la présence d'un minimum local pour l'évolution de la composante en z de l'impulsion, vers $h\nu \approx 0.6\ m_e c^2$, ce qui n'est pas le cas pour la composante en x. Cette maximisation de la perte d'impulsion dans un axe préférentiel a donné naissance au concept de "*Compton Rocket*" [Cheng & Odell, 1981] consistant à accélérer une distribution électronique ($\langle (\gamma_e \beta_e)^2 \rangle > 3/2$) par diffusion Compton inverse grâce à un faisceau photonique peu énergétique ($\hbar\omega \ll m_e c^2$). En réalité, cet effet n'est possible que si le temps de refroidissement par Compton inverse est inférieur au temps mis par les photons pour traverser le gradient de pression du plasma (plus ou moins équivalent à l'épaisseur de la cible).

Nous avons réitéré le cas test en considérant cette fois non plus un faisceau photonique mono-directionnel mais un bain photonique mono-énergétique et de distribution angulaire isotrope. Les résultats sont présentés sur la Fig. 6.14c représentant le taux de la variation de la composante en z de l'impulsion électronique, et où les valeurs théoriques ont été obtenues par intégration de l'Eq. (6.49) sur toutes les valeurs possibles de θ. Là encore, les résultats tirés de Calder présentent un bon accord avec prédictions théoriques.

6.3.4.6 Loi de distribution photonique dans un bain électronique non relativiste

Pour finir, nous nous intéressons aux travaux de [Kompaneets, 1957] ayant pour objectif de décrire l'évolution temporelle de la distribution photonique. Pour un bain électronique maxwellien de température modérée ($T_e \ll m_e c^2$), cette évolution peut s'exprimer sous la forme suivante

$$\frac{\partial n_\gamma}{\partial t} = \frac{c}{\mu l_t \omega^2} \frac{\partial}{\partial \omega} \left\{ \omega^4 \left[\frac{\partial n_\gamma}{\partial \omega} + \frac{\hbar}{k_B T_e} n_\gamma (1 + n_\gamma) \right] \right\} , \tag{6.52}$$

où on rappelle que n_γ est la distribution des photons, $\mu = m_e c^2/(k_B T_e)$, $l_t = 1/(\sigma_\mathrm{T} n_e)$, n_e étant la densité électronique et σ_T la section efficace de diffusion Thomson. Par définition, l'état d'équilibre est atteint lorsque $\partial n_\gamma/\partial t = 0$, ce qui est vrai lorsque le terme entre crochets s'annule. On peut facilement montrer que tel est le cas si la distribution photonique est de la forme

$$n_\gamma(\alpha) \propto \alpha^2 \exp(-\alpha\mu) , \tag{6.53}$$

avec $\alpha = \hbar\omega/(m_e c^2)$ l'énergie normalisée du photon. Cette distribution particulière est généralement connue sous le nom de distribution de Wien.

Nous avons effectué une simulation 1D d'un domaine composé de 1000 mailles avec $\Delta x = 10^5\ c/\omega_0$, $\Delta t = 10^4\ \omega_0^{-1}$ dans lequel nous initialisons un bain électronique maxwellien de densité $n_e = 50\ n_c$ et de température $T_e = 5$ keV, ainsi qu'un bain photonique isotrope monochromatique de densité $n_\gamma = 0.1\ n_c$ et d'énergie $h\nu = 4 \times 10^{-3}\ m_e c^2$. Le nombre de macro-particules est fixé à $N_\gamma = N_e = 500$ par maille. On laisse le système relaxer sur un total de 50000 pas de temps (~ 0.27 µs). Afin de garder un bain électronique inchangé au cours de la simulation, nous désactivons les effets de la CS sur les macro-électrons.

La Fig. 6.15 représente en orange la distribution de Wien telle que définie dans l'Eq. (6.53) ainsi que, en bleue, la distribution photonique obtenue à la fin de la simulation et renormalisée par rapport à la valeur maximum de la distribution de Wien. Un bon accord est obtenu entre

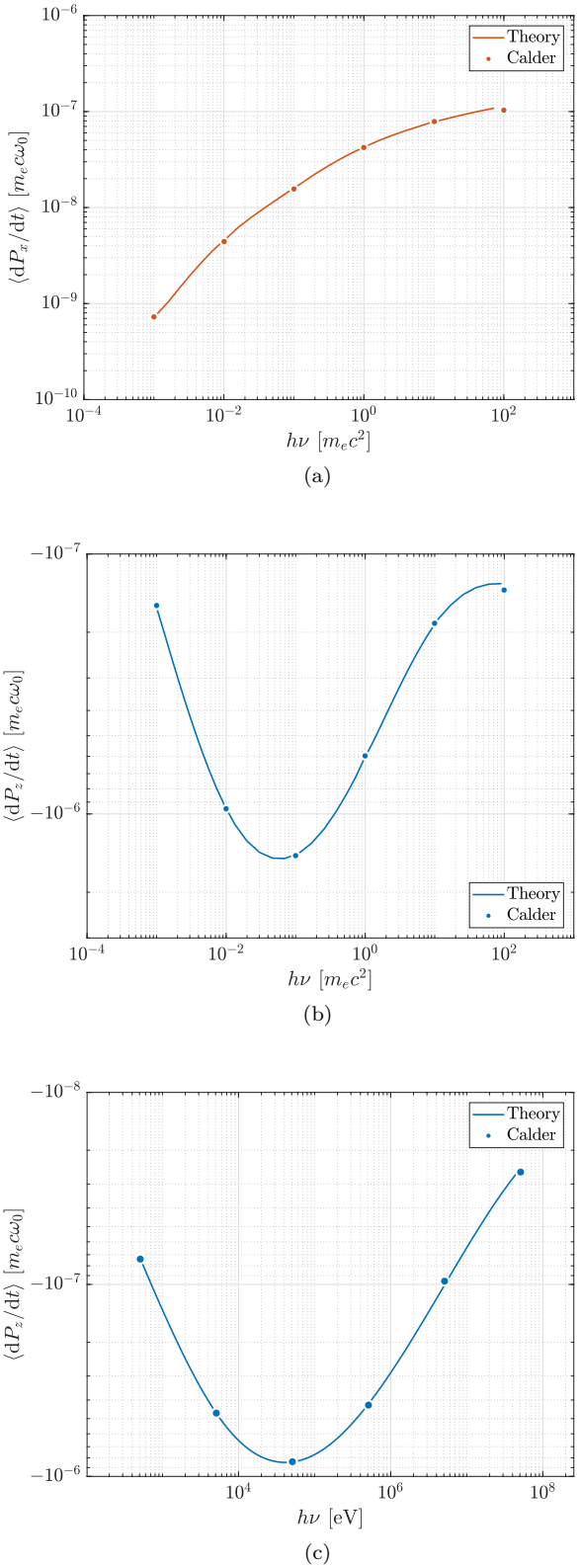


FIGURE 6.14 – Évolution du taux de variation de l'impulsion (a) en x et (b) en z en fonction de l'énergie photonique lors de l'interaction d'un faisceau électronique ($\gamma_e = 10$, $n_e = 50\ n_c$) avec un faisceau photonique ($n_\gamma = 50\ n_c$, $\theta = \pi/4$). (c) Le faisceau photonique est ici remplacé par un bain photonique isotrope de même énergie.

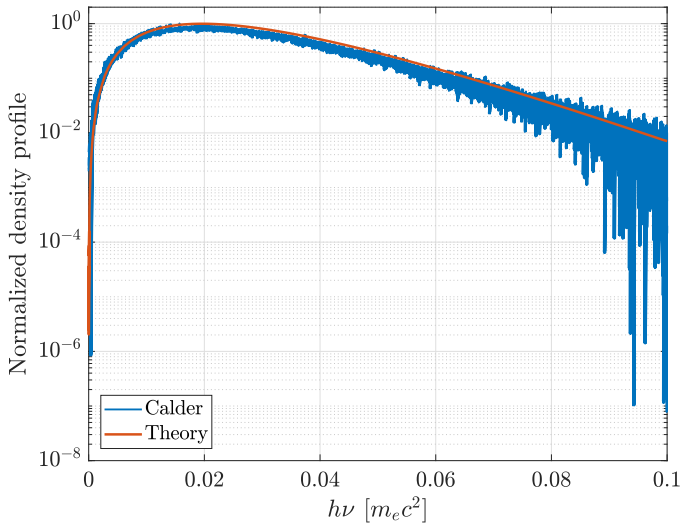


FIGURE 6.15 – Comparaison entre la distribution de Wien théorique (orange), avec la distribution photonique renormalisée issue de CALDER (bleu), obtenue par relaxation d'un bain photonique interagissant avec une distribution électronique maxwellienne à $T_e = 5$ keV pendant 0.27 µs.

les deux courbes théorique et numérique.

6.4 Conclusion

L'implémentation des nouveaux processus radiatifs présentés dans ce chapitre, et tout particulièrement de la PI, a été une étape décisive pour la suite de ces travaux de thèse. Elle est en effet la condition *sine qua non*, à l'instar de la désexcitation atomique, à la description de l'interaction entre un faisceau de macro-photons et un échantillon de matière, ce qui sera la base de notre étude sur le chauffage engendré par l'irradiation de solides par des flashes X (issus des XFELs), que nous présenterons au Chap. 8, Sec. 8.2.

Nous verrons dans ce même chapitre que la CS aura en réalité peu d'impact dans les régimes d'intérêt de l'interaction laser UHI (et faisceau X) avec la matière. La Sec. 8.3, consacrée à la génération d'instabilités par la CS, montrera en effet que les intensités requises pour que la diffusion ait lieu à nos échelles spatiale et temporelle sont généralement bien plus conséquentes (de l'ordre de 10^{22-23} W/cm^2) que celles générés par les lasers UHI ou les flashes X simulés (de l'ordre de 10^{17-20} W/cm^2), pour les tailles de cibles considérées ($\sim$ µm). Si ce processus n'a pas de potentiel impact pour le régime d'interaction précédemment cités (la CS ne sera pas activé pour ces simulations), il peut néanmoins être vu comme un élargissement de la fenêtre de description de CALDER en permettant la simulation de systèmes soumis à des flux photoniques importants, tels que rencontrés en astrophysique par exemple.

Comme nous l'avons vu, l'ensemble de ces nouveaux processus a été, comme les précédents, soumis à des tests de validation poussés qui nous permettent d'être confiants quant aux capacités prédictives de CALDER, qui s'en voient ainsi accrues.

Ce chapitre clôt la série de présentation des nouveaux modules implémentés dans CALDER au cours de ces trois années. Nous nous intéresserons, dans le prochain chapitre, à l'effet de la prise en compte de l'ensemble (ou presque) de ces processus afin de quantifier leur impact sur la cinétique atomique dans des contextes physiques simples, en comparant les résultats de simulations avec des codes atomiques tels que FLYCHK et SAPHYR, déjà évoqués au Chap. 3, Sec. 3.3.

Bibliographie

Angel, G. & Samson, J. A. (1988). *Total photoionization cross sections of atomic oxygen from threshold to 44.3 a.* Physical Review A **38**.

Barbosa, D. (1982). *A note on Compton scattering.* The Astrophysical Journal **254**, p. 301–308.

Blumenthal, G. & Tucker, W. (1974). *Compact X-ray sources.* Annual Review of Astronomy and Astrophysics **12**, no. 1, p. 23–46.

Carlier, T. (2009). *Reconstruction 3D complète par modélisation Monte Carlo de la matrice système. Apport aux approches quantitatives à l'iode 131* .

Cheng, A. & Odell, S. (1981). *Compton losses, Compton rockets.* The Astrophysical Journal **251**, p. L49–L54.

Faussurier, G. & Blancard, C. (2017). *Degeneracy and relativistic microreversibility relations for collisional-radiative equilibrium models.* Physical Review E **95**, no. 6, p. 063201.

Ghisellini, G. (2013). *Radiative processes in high energy astrophysics.* Lecture Notes in Physics **873**.

Hubbell, J. H. & Seltzer, S. M. (1995). *Tables of X-ray mass attenuation coefficients and mass energy-absorption coefficients 1 keV to 20 MeV for elements $Z = 1$ to 92 and 48 additional substances of dosimetric interest.* National Inst. of Standards and Technology-PL .

Jüttner, F. (1911). *Das Maxwellsche Gesetz der Geschwindigkeitsverteilung in der Relativtheorie.* Annalen der Physik **339**.

Kim, Y.-K., Santos, J. P. & Parente, F. (2000). *Extension of the binary-encounter-dipole model to relativistic incident electrons.* Physical Review A **62**, no. 5, p. 052710.

Klein, O. & Nishina, Y. (1929). *Über die Streuung von Strahlung durch freie Elektronen nach der neuen relativistischen Quantendynamik von Dirac.* Zeitschrift für Physik **52**, no. 11, p. 853–868.

Kompaneets, A. (1957). *The establishment of thermal equilibrium between quanta and electrons.* Soviet Physics Journal of Experimental and Theoretical Physics **4**, no. 5, p. 730–737.

Marr, G. V. & West, J. B. (1976). *Absolute photoionization cross-section tables for helium, neon, argon, and krypton in the VUV spectral regions.* Atomic Data and Nuclear Data Tables **18**.

Martinez, B., Lobet, M., Duclous, R., d'Humières, E. & Gremillet, L. (2019). *High-Energy Radiation and Pair Production by Coulomb Processes in Particle-in-Cell Simulations.* Physics of Plasmas **26**, no. 10, p. 103109.

Nanbu, K. & Yonemura, S. (1998). *Weighted particles in Coulomb collision simulations based on the theory of a cumulative scattering angle.* Journal of Computational Physics **145**, no. 2, p. 639–654.

Pérez, F., Gremillet, L., Decoster, A., Drouin, M. & Lefebvre, E. (2012). *Improved modeling of relativistic collisions and collisional ionization in particle-in-cell codes.* Physics of Plasmas **19**, no. 8, p. 083104.

Reilman, R. F. & Manson, S. T. (1979). *Photoabsorption cross sections for positive atomic ions with Z equal to or less than 30.* The Astrophysical Journal Supplement Series **40**.

Robert, C. & Casella, G. (2010). *Introducing Monte Carlo Methods with R.* Springer.

Seaton, M. J. (1995). *The Opacity Project.* AIP Conference Proceedings **322**, p. 117–128.

Shestakov, A., Kershaw, D. & Prasad, M. (1988). *Evaluation of integrals of the Compton scattering cross-section.* Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **40**, no. 5, p. 577–589.

Truscott, P., Lei, F., Dyer, C., Ferguson, C., Gurriaran, R., Nieminen, P., Daly, E., Apostolakis, J., Giani, S., Pia, M. *et al.* (2000). *Geant4-a new Monte Carlo toolkit for simulating space radiation shielding and effects.* Institute of Electrical and Electronics Engineers p. 147–152.

Verner, D., Ferland, G. J., Korista, K. & Yakovlev, D. (1996). *Atomic Data for Astrophysics. II. New Analytic FITS for Photoionization Cross Sections of Atoms and Ions.* The Astrophysical Journal **465**.

Verner, D. & Yakovlev, D. (1995). *Analytic FITS for partial photoionization cross sections.* Astronomy and Astrophysics Supplement Series **109**, p. 125–133.

7

Validation et effets des nouveaux modules CALDER sur la thermalisation d'un plasma dense

7.1 Introduction

Ce chapitre est d'abord dédié à une présentation de l'état de l'art de la modélisation des processus atomiques dans les principaux codes de type *particle-in-cell*, permettant de simuler l'interaction laser-matière. Nous justifions le fait que cette étude bibliographique n'apparaisse qu'à ce stade du manuscrit par notre volonté que le lecteur puisse avoir, grâce aux chapitres précédents, une idée plus éclairée de la nature de ces processus, de leur régime d'intérêt et des problématiques sous-jacentes à leur implémentation dans un code cinétique. Outre la présentation de ces codes, nous commenterons dans cette section le choix des processus inclus (ou non) et les algorithmes utilisés.

Les Chaps. 3, 4, 5 et 6 ont été consacrés aux nouveaux modules physiques implémentés dans le code PIC Calder lors de cette thèse. Pour chacun d'eux, nous avons procédé à un certain nombre de tests de validation mais en ne considérant à chaque fois que le processus concerné. La deuxième section de ce chapitre sera l'occasion de procéder à des simulations intégrant l'ensemble de ces processus dans un contexte physique simple, à savoir la thermalisation d'un plasma d'Aluminium à densité solide.

Enfin, la troisième section aura pour but d'évaluer l'impact du module de coalescence des macro-particules[1] sur la cinétique atomique mais aussi sur le temps de calcul, en fonction des paramètres de coalescence choisis.

[1] Chap. 2, Sec. 2.4.

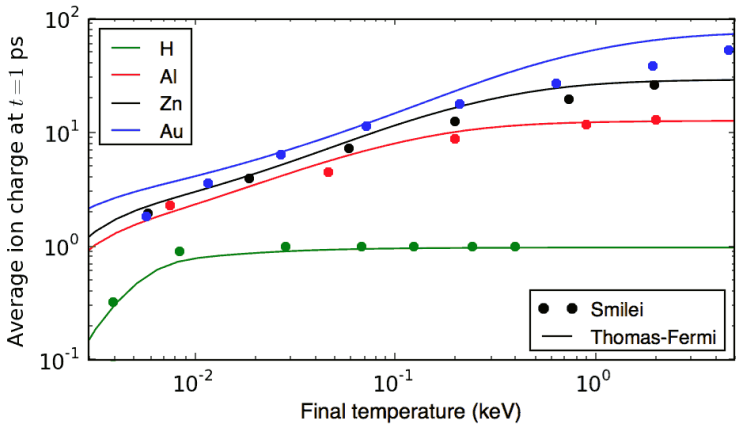


FIGURE 7.1 – Évolution de la charge ionique moyenne en fonction de la température d'équilibre du plasma, obtenue pour différents éléments : l'Hydrogène (vert), l'Aluminium (rouge), le Zinc (noir) et l'Or (bleu). Les résultats du code SMILEI sont représentés par des points et les prédictions du modèle théorique de Thomas-Fermi sont représentés par les traits pleins. La figure est tirée du site internet [Smilei, 2021].

7.2 État de l'art de la physique atomique dans les codes *particle-in-cell*

Si les codes PIC constituent aujourd'hui un outil courant pour l'étude de la cinétique des plasmas, tous ne se destinent pas aux mêmes systèmes physiques. Ainsi, si certains sont conçus pour la description des plasmas froids (comme pour la propulsion spatiale par exemple [Croes, 2017]), d'autres le sont plutôt pour la simulation des plasmas générés dans les tokamaks [Ogando *et al.*, 2008], ou des problèmes astrophysiques [Nishikawa *et al.*, 2021], etc.

Parmi eux figurent également les codes se destinant à la description de l'interaction laser-matière tels que VLPL [Pukhov, 1999], WARP [Vay *et al.*, 2002], SMILEI [Derouillat *et al.*, 2018], EPOCH [Arber *et al.*, 2015], OSIRIS [Fonseca *et al.*, 2002], LAPINE [Wu *et al.*, 2018], PICLS [Royle *et al.*, 2017] et OCEAN [Nuter & Tikhonchuk, 2013]. Dans cette section, nous nous intéressons aux codes les plus riches en termes d'intégration de processus atomiques et avec lesquels nous avons pu comparer les résultats issus de simulations CALDER.

7.2.1 SMILEI

Le cas du code SMILEI est particulier puisque son développement est en lien étroit avec celui de CALDER. On dénombre ainsi de très nombreuses similitudes entre les deux codes concernant les processus atomiques et radiatifs inclus dans SMILEI, à savoir les collisions coulombiennes, l'ionisation collisionnelle (CI), la création de paires (selon le processus de Breit-Wheeler), ou encore l'émission synchrotron. Le modèle de collisions binaires est basé, à l'instar de CALDER, sur les travaux de [Pérez *et al.*, 2012], lui même inspiré de l'algorithme proposé par [Nanbu & Yonemura, 1998] (adaptant la méthode issue de [Takizuka & Abe, 1977] à des macro-particules de poids différents) et utilise la section efficace de collision coulombienne relativiste tirée de [Frankel *et al.*, 1979][1].

[1] Chap.2, Sec. 2.3.3.2.

La CI est également basée sur le modèle présenté dans [Pérez *et al.*, 2012] consistant à calculer la probabilité totale d'ionisation pour une paire électron-ion, en utilisant la section efficace issue de [Kim *et al.*, 2000]. Cette approche ne permet pas de décrire la présence de lacunes électroniques, et donc la désexcitation atomique. C'est la raison pour laquelle nous avons procédé au raffinement du modèle sur la structure atomique fine[2]. Comme déjà montré dans [Pérez *et al.*, 2012], la seule prise en compte de la CI permet, à l'échelle temporelle typique d'une simulation laser-plasma, d'obtenir des résultats relativement proches des prédictions du modèle de Thomas-Fermi [Desjarlais, 2001] (basé sur l'algorithme de [Lee & More, 1984]), comme le montre la Fig. 7.1. On notera néanmoins que le cas test présenté

[2] Chap. 4, Sec. 4.1.

est effectué à une densité égale à dix fois la densité critique, ce qui est inférieur à la densité solide, où l'effet de la recombinaison – et en particulier de la recombinaison à trois corps (TBR) – est moindre. On peut donc craindre que SMILEI ne soit pas en mesure de fournir une aussi bonne concordance de ses résultats avec les modèles théoriques pour des densités plus élevées. Il montre néanmoins que, pour une densité modérée, la CI seule semble, en première approximation, suffisante pour la description de la cinétique atomique.

Comme mentionné précédemment, SMILEI est également en mesure de décrire l'émission radiative par effet synchrotron et la création de paire électron-positron (par un photon) via le processus de Breit-Wheeler grâce à un modèle présenté dans [Lobet *et al.*, 2016], d'abord implémenté dans CALDER[1].

[1] Chap. 2, Sec. 2.3.2.

7.2.2 LAPINE

LAPINE est un code PIC développé depuis plus de vingt ans et dont l'une des ambitions est de décrire au mieux l'évolution des plasmas à densité solide à des températures inférieures au keV. Il est, en ce sens, l'un des deux codes s'approchant le plus (avec PICLS, que nous présentons au prochain paragraphe) du code CALDER. Les différents processus inclus dans ce code sont présentés dans [Wu *et al.*, 2018]. Ils comprennent la CI, dont l'algorithme est basé, là encore, sur le calcul de la section efficace totale en utilisant cette fois l'expression proposée par [Lotz, 1970]

$$\sigma^{\mathrm{CI}} = \sum_{i=1}^{N} a_i q_i \frac{\ln(E/P_i)}{EP_i} \left\{1 - b_i \exp[-c_i(E/P_i - 1)]\right\} , \tag{7.1}$$

avec E l'énergie de l'électron impactant, P_i l'énergie de liaison d'un électron se trouvant sur la i-ième couche électronique, q_i le nombre d'électrons se trouvant sur la i-ième couche électronique et enfin a_i (exprimée en 10^{-14} cm^{2}eV^2), b_i et c_i des constantes déterminées par des mesures expérimentales et des calculs théoriques [Lotz, 1970]. Ceci permet d'estimer le taux de CI

$$\nu_i^{\mathrm{CI}} = \langle \sigma_i^{\mathrm{CI}} v_e \rangle n_e , \tag{7.2}$$

où σ_i^{CI} est la section efficace de CI pour la couche électronique i, v_e est la vitesse électronique et enfin n_e la densité électronique dans la maille. L'algorithme consiste à générer un nombre aléatoire compris entre 0 et 1 pour chaque ion de la simulation et à le comparer à une probabilité d'interaction calculée via la formule usuelle

$$P_i^{\mathrm{CI}} = 1 - \exp(-\nu_i^{\mathrm{CI}} \Delta t) , \tag{7.3}$$

où Δt est le pas de temps choisi dans la simulation. Lorsque le nombre aléatoire est inférieur ou égal à la probabilité, la charge électrique de l'ion est augmentée de 1 et un nouveau macro-électron est généré, possédant le même poids statistique, la même vitesse et la même position que le macro-ion lui donnant naissance. Une correction en énergie est alors appliquée sur l'ensemble des macro-électrons de la maille afin d'assurer la conservation de l'énergie (en prenant en compte l'énergie de liaison transmise à l'électron lié pour l'éjecter dans le continuum).

En plus de la CI, la recombinaison est également prise en compte via un modèle reposant

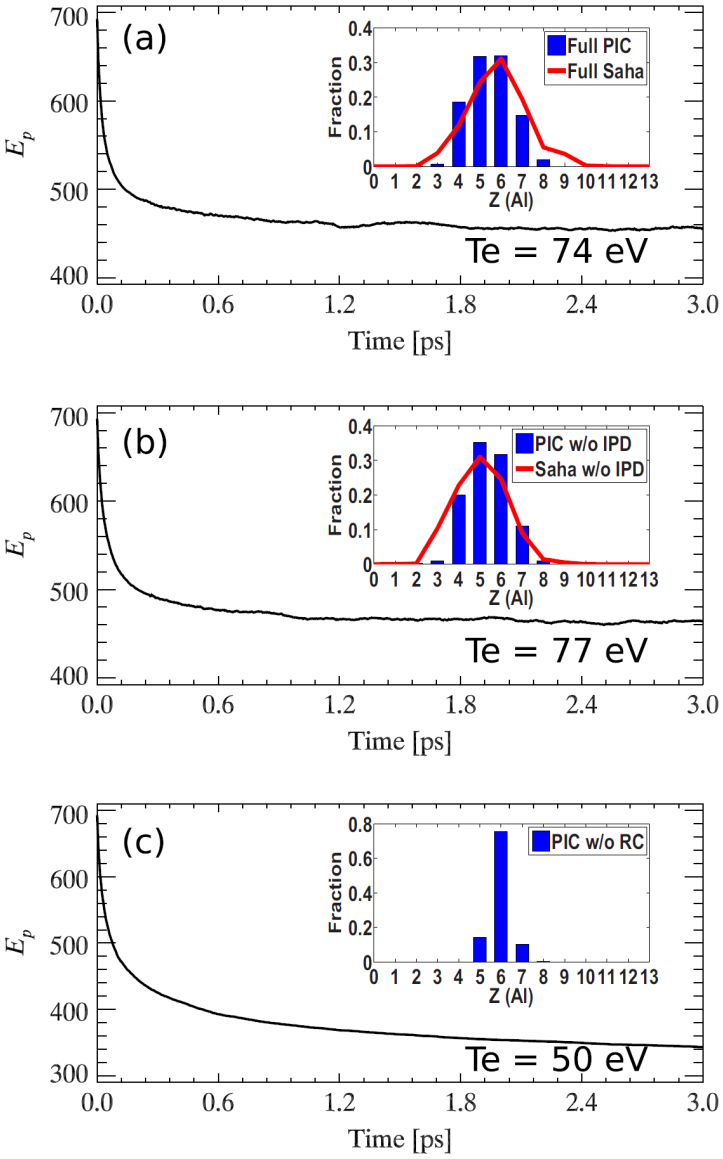


FIGURE 7.2 – Évolution de l'énergie cinétique électronique moyenne en fonction du temps et comparaison de la distribution des états de charge avec le modèle de Saha pour une simulation de la relaxation d'un plasma solide d'Aluminium ($\rho = 2{,}7\ g/cm^3$) de charge initiale $Z^* = 4$ et de température initiale $T_e = T_e = 150$ eV via le code LAPINE. La Fig. (a) présente les résultats de la simulation intégrant les collisions coulombiennes, la CI, la recombinaison et l'abaissement des potentiels d'ionisation (IPD). La Fig. (b) présente les résultats d'un cas similaire au précédent mais où l'IPD a été désactivé. La Fig. (c) présente enfin les résultats pour une simulation ne considérant que les collisions coulombiennes et la CI. La figure est tirée de [Wu *et al.*, 2018].

sur l'équilibre de Saha-Boltzmann [Hahn, 1997] et le principe du bilan détaillé, permettant de déterminer le taux de recombinaison en fonction du taux de CI

$$\nu_{i+1}^{\mathrm{RE}} = \frac{g_i}{g_e g_{i+1}} (\lambda_e)^3 n_e \exp\left(\frac{P_i}{k_B T_e}\right) \nu_i^{\mathrm{CI}}\,, \tag{7.4}$$

avec $\lambda_e = \sqrt{h^2/2\pi m_e k_B T_e}$ la longueur d'onde de de Broglie, g_e et g_i les poids statistiques de l'électron et de l'ion respectivement, ν_i^{CI} le taux de CI donné en Eq. (7.2) et T_e la température électronique. [Wu *et al.*, 2018] précisent que la température est en fait remplacée par l'énergie cinétique moyenne des électrons en faisant l'hypothèse d'un système à l'équilibre thermodynamique ($\langle E \rangle = 3/2 k_B T_e$). En utilisant la même méthode de calcul de probabilité que précédemment, la charge des ions est abaissée si le nombre aléatoire généré est inférieur à la probabilité et une correction en énergie et en poids statistique est appliquée sur l'ensemble des macro-électrons de la maille.

Enfin, LAPINE est pourvu d'un algorithme d'IPD, utilisant les modèles de [Stewart & Pyatt Jr, 1966] et de [Ecker & Kröll, 1963][1]. Si l'équilibre d'ionisation repose dans ce code

[1] Chap. 3, Sec. 3.1.3

sur l'hypothèse forte de l'équilibre thermodynamique, [Wu *et al.*, 2018] montrent néanmoins que ce modèle de recombinaison permet d'obtenir des résultats satisfaisants (Fig. 7.2). La prise en compte de la recombinaison et de l'IPD permet d'obtenir une distribution des états de charge ionique (histogramme en bleu) proche de celle prédite par le modèle de Saha-Boltzmann (trait rouge). Ces comparaisons sont faites après 6 ps (un temps long à l'échelle des simulations classiques d'interaction laser-matière). La cinétique atomique, s'illustrant entre autres par l'évolution temporelle de la charge ionique moyenne, n'est cependant pas comparée à un modèle hors équilibre (tel que le propose par exemple le code Flychk) ce qui ne permet pas de quantifier l'impact de l'hypothèse d'équilibre sur la dynamique d'ionisation dans le code Lapine.

7.2.3 PICLS

Picls est probablement le code le plus complet en termes de physique atomique et de transport radiatif, lui permettant de décrire un grand nombre de systèmes d'interaction, en particulier l'interaction entre les faisceaux X, issus des XFELs, avec des cibles solides, sur laquelle nous reviendrons dans le Chap. 8. [Royle *et al.*, 2017] présentent les différents processus inclus, parmi lesquels la CI, la recombinaison (à trois corps ou radiative), l'IPD, la photoionisation (PI), la production d'électrons Auger et enfin un modèle de transport radiatif adoptant une vision proche d'un code Vlasov, c'est-à-dire basée sur la résolution de l'équation de transport radiatif issu de [Mihalas, 1979] (au contraire de Calder qui utilise des macro-photons).

Si la méthode d'appariement pour les collisions binaires se base là encore sur le modèle proposé par [Takizuka & Abe, 1977], le modèle de Picls ne repose pas sur la section efficace de [Frankel *et al.*, 1979] ni sur la correction à faible température proposée dans [Pérez *et al.*, 2012], mais utilise la formule de Spitzer [Kerr, 1956] pour des températures supérieures à une température seuil T_0 [Sentoku & Kemp, 2008]

$$\nu_{\alpha\beta} = \frac{4\pi(e_\alpha e_\beta)^2 n_l L}{p_{\mathrm{rel}}^2 v_{\mathrm{rel}}}\,, \tag{7.5}$$

avec $\nu_{\alpha\beta}$ la fréquence de collision entre les particules chargées α et β, p_{rel} et v_{rel} respectivement l'impulsion et la vitesse relative entre ces particules, e_α et e_β leur charge électrique, $n_l = \min(n_\alpha, n_\beta)$ la densité minimale entre la densité de l'espèce α et la densité de l'espèce β et enfin $L = \log(1/\theta_{\min})$ avec $\theta_{\min}$ l'angle minimal pour lequel le processus de collision peut être considéré comme étant à angle faible. En revanche, si la vitesse relative est inférieure à la vitesse de Fermi, alors le système est considéré comme étant dégénéré et la fréquence de collision devient constante

$$\nu_{\alpha\beta} = \frac{4 m_e Z e^4 L}{3\pi\hbar^3}\,, \tag{7.6}$$

où m_e est la masse électronique et e la charge électrique élémentaire.

Le modèle de CI est similaire à celui utilisé par Lapine : il s'agit d'un algorithme de type Monte Carlo basé sur le calcul de la section efficace de [Lotz, 1970], en utilisant les paramètres électroniques moyennés sur la cellule de simulation considérée. En revanche, la recombinaison ne repose cette fois pas sur une approche probabiliste mais déterministe. En effet, dans chaque cellule de simulation, Picls calcule la charge moyenne ionique $\langle Z^* \rangle$ qu'il compare avec une charge moyenne théorique, prédite à l'équilibre par une équation d'état (EOS pour *Equation*

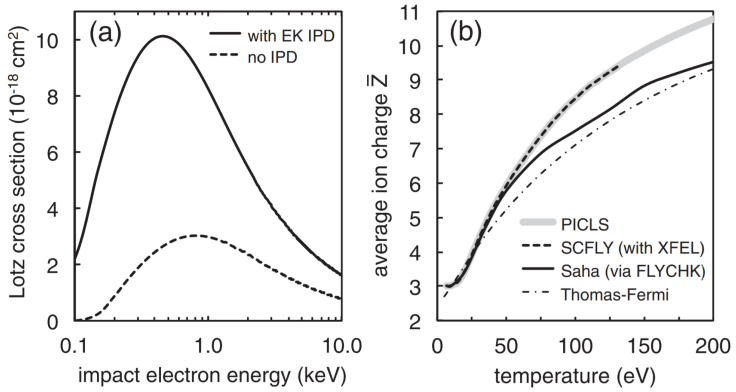


FIGURE 7.3 – (a) Section efficace de CI de l'Al^{3+} selon le modèle de [Lotz, 1970] avec (trait plein) et sans (trait en pointillés) activation de l'IPD (modèle de [Ecker & Kröll, 1963]). (b) Illustration de l'équation d'état $\overline{Z}(T_e)$ dans l'Aluminium solide prédite par le modèle de Thomas-Fermi, le modèle de Saha via le code FLYCHK, et par le code de cinétique atomique SCFLY. La figure est tirée de [Royle *et al.*, 2017].

Of State) $\langle Z^* \rangle_{\text{EOS}}$, dépendant de la densité ionique et de la température électronique. Lorsque $\langle Z^* \rangle > \langle Z^* \rangle_{\text{EOS}}$, une fraction des ions, sélectionnés aléatoirement, recombine avec des macro-électrons également choisis de façon aléatoire, de sorte que la charge ionique moyenne de la simulation converge vers la prédiction déterministe.

Le module d'IPD de PICLS utilise le modèle de [Ecker & Kröll, 1963][1], lui permettant de considérer des cibles à densité solide.

[1] Chap. 3, Sec. 3.1.3

Les sections efficaces de PI sont calculées via un code de physique atomique (la suite de code de Los Alamos [Fontes *et al.*, 2015]) permettant de déterminer, pour une couche électronique $n\ell$ donnée, la probabilité totale de PI

$$P_s = c\Delta t N_b \sum_{i=1}^{N_{h\nu}} n_{h\nu}(h\nu_i)\sigma_s(h\nu_i)\,, \tag{7.7}$$

où c est la vitesse de la lumière, Δt est le pas de temps PIC, N_b est le nombre d'électrons sur la couche électronique s, $N_{h\nu}$ un nombre d'énergies photoniques $h\nu_i$ échantillonnées, $n_{h\nu}$ la densité photonique et σ_s la section efficace de PI pour la couche électronique s, calculée via le code de physique atomique sus-cité [Fontes *et al.*, 2015]. Cette probabilité P_s est comparée à un nombre généré aléatoirement : dans le cas où ce nombre est inférieur ou égal à la probabilité, la PI de l'ion considéré a lieu. Un second nombre aléatoire est alors généré et comparé à la fonction de répartition, correspondant à la somme cumulée de la contribution de chaque énergie photonique à la probabilité totale, afin de sélectionner la fraction de la distribution photonique à l'origine de la PI. Un macro-électron est créé avec une énergie correspondant à la différence entre l'énergie photonique sélectionnée et l'énergie de liaison de la couche électronique concernée par la PI et l'énergie photonique est retranchée à l'énergie radiative de la cellule.

PICLS intègre également un modèle décrivant les lacunes en couche K (qui peuvent présenter 0, 1 ou 2 lacunes électroniques), lacunes qui sont associées à un temps de vie moyen. Ce dernier est exprimé pour une super-configuration (SC) donnée, tel que

$$\langle \tau_K \rangle_{\text{SC}} = \frac{1}{\langle \Gamma_a \rangle_{\text{SC}} + \langle \Gamma_x \rangle_{\text{SC}}}\,, \tag{7.8}$$

où $\langle \Gamma_a \rangle_{\text{SC}}$ et $\langle \Gamma_x \rangle_{\text{SC}}$ sont les taux d'émission Auger et d'émission radiative respectivement, moyennés sur la super configuration. Ces taux sont calculés en amont pour chaque degré d'ionisation Z^* et pour différents nombres de lacunes présentes sur la couche K. Ce temps

de vie permet d'estimer une probabilité d'émission (radiative et non radiative) pendant un intervalle de temps Δt donné tel quel $P_{\text{decay}} = \Delta t/\tau_K$, en prenant soin de choisir $\Delta t \ll \tau_K$. Cette probabilité est comparée à un nombre aléatoire : si ce nombre est inférieur ou égal à P_{decay}, il reste à déterminer si l'émission est radiative ou Auger. PICLS estime alors la probabilité d'émission Auger ($P_a = \langle\Gamma_a\rangle_{\text{SC}}/(\langle\Gamma_a\rangle_{\text{SC}} + \langle\Gamma_x\rangle_{\text{SC}})$), qu'il compare à un second nombre aléatoire. Encore une fois, si le nombre aléatoire est inférieur ou égal à cette probabilité, l'émission est non radiative, avec production d'un macro-électron KLL, sinon elle est radiative, avec une augmentation de l'énergie radiative de la cellule. [Royle *et al.*, 2017] précisent que ce modèle n'est approprié que pour des ions de faible numéro atomique, où la désexcitation Auger pour des couches électroniques supérieures à la couche K est négligeable. L'ensemble de ces processus permet à PICLS de décrire la cinétique atomique en bon accord avec les codes de cinétique atomique comme FLYCHK (Fig. 7.3).

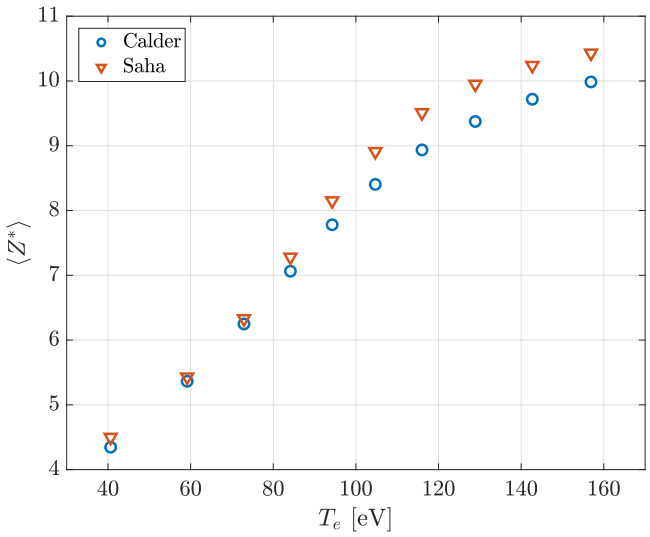


FIGURE 7.4 – Charges ioniques moyennes issues des simulations PIC (ronds bleus) et du modèle stationnaire de Saha (triangles oranges) pour différents cas de relaxation d'un plasma d'Aluminium solide ($\rho = 2.7$ g/cm^3), de charge initiale $Z^* = 4$ avec différentes températures initiales, en fonction de la température électronique de quasi-équilibre.

7.3 Thermalisation du plasma dense et comparaison avec les modèles de Saha et FLYCHK

Nous souhaitons dans ce chapitre tester les modules de physique atomique inclus dans CALDER, dans le cas simple d'un plasma de densité solide en cours de thermalisation. Dans un premier temps, nous évaluerons en Sec. 7.3.1 l'effet de l'IPD sur l'équilibre d'ionisation CI/TBR lors de la relaxation d'un plasma d'Aluminium. Dans la Sec. 7.3.2, les simulations de relaxation du plasma intégrerons cette fois l'ensemble des nouveaux modules, à savoir l'IPD, la CI, la TBR, la désexcitation par cascade, la PI et la recombinaison radiative (RR). Nous excluons la diffusion Compton qui n'a d'effet que dans des régimes de très forte densité photonique[1]). Nous proposerons là encore des comparaisons avec le modèle de Saha intégrant l'IPD mais également avec le code instationnaire FLYCHK afin de tester cette fois la cinétique atomique du plasma lors de sa relaxation. Enfin, nous tenterons d'évaluer dans la Sec. 7.3.3 l'impact de la coalescence des macro-particules, toujours dans un contexte de relaxation, en testant plusieurs jeux de paramètres plus ou moins restrictifs.

[1] Chap. 6, Sec. 6.3.

7.3.1 Effet de l'abaissement des potentiels d'ionisation

Dans un premier temps, nous avons voulu vérifier la reproduction de la charge ionique moyenne $\langle Z^* \rangle$ prédite par le solveur Saha en intégrant l'IPD, une fois l'équilibre atteint. Pour ce test, outre l'IPD, nous n'avons activé que la CI et la TBR que l'on suppose prépondérants dans ces conditions physiques, à savoir un plasma d'Aluminium solide à des températures modérées (quelques centaines d'eV).

Plusieurs simulations ont été menées dans lesquelles un plasma d'Aluminium solide ($\rho = 2.7$ g/cm^3), initialement à $Z^* = 4$ et de température initiale variable ($T_i = T_e$), relaxe. À l'état stationnaire (établi après plusieurs milliers de pas de temps selon le cas considéré), nous relevons les charges ioniques moyennes et les températures électroniques afin de les confronter aux prédictions du modèle de Saha. Les résultats sont regroupés dans la Fig. 7.4. Les deux codes présentent des résultats similaires bien que l'on observe un léger écart pour les plus hautes températures. En effet, plus le plasma est chaud, plus la thermalisation est longue, or, les diagnostics sont effectués dans un état de quasi-équilibre (pour des raisons de temps de calcul) et nous pouvons raisonnablement penser que l'écart se réduirait pour des simulations plus longues.

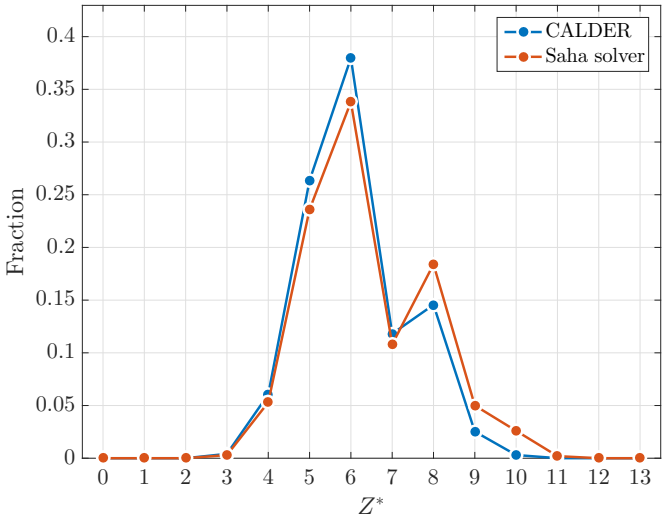


FIGURE 7.5 – Comparaison de la distribution des états de charge entre le code CALDER (bleu) et le solveur de l'équation de Saha (orange) pour un plasma d'Aluminium solide ($\rho = 2.7$ g/cm^3) avec une température initiale $T_i = T_e = 150$ eV, une charge initiale $Z^* = 4$. La température électronique atteint $T_e \approx 74$ eV et la charge ionique moyenne $\langle Z^* \rangle \approx 6.1$ ($\langle Z \rangle_{\text{Saha}} = 6.4$) après 100 fs.

Nous avons également voulu comparer les distributions des états de charge de l'Aluminium calculées respectivement par CALDER et le solveur de Saha. Les distributions obtenues après 100 fs sont représentées en Fig. 7.5 avec une température finale $T_e \approx 74$ eV (associée à une température initiale $T_i = T_e = 150$ eV). Les deux distributions sont globalement très proches avec $\langle Z^* \rangle = 6.1$ pour CALDER et $\langle Z^* \rangle = 6.4$ pour Saha. On remarque néanmoins quelques écarts modérés pour certains degrés de charge que l'on peut attribuer au biais statistique inhérent à la méthode Monte Carlo. On remarque également la présence d'un creux dans la distribution pour $Z^* = 7$. Ceci est dû à la différence des poids statistiques entre les niveaux (rappelons que nous ne considérons les ions que dans leur état fondamental puisque la désexcitation est supposée instantanée[2]) qui, dans le cas présent, ont tendance à favoriser le peuplement des états $Z^* = 6$ et $Z^* = 8$. En effet, dans son état fondamental, l'Al^{7+} présente une couche L_2 remplie et une couche L_3 vide ce qui favorise à la fois l'ionisation de la couche L_2 et la recombinaison de la couche L_3.

[2] Chap. 5.

7.3.2 Simulations de relaxation plasma intégrant l'ensemble des nouveaux processus de physique atomique

Nous tenons compte désormais de l'ensemble des processus atomiques intégrés dans CALDER. Nous avons effectué des simulations 0D aux paramètres proches de ceux utilisés dans la section précédente, à savoir un plasma d'Aluminium de densité $\rho = 2.7$ g/cm^3 qui est cette fois ionisé initialement trois fois, avec un nombre de macro-particules par maille $N_i = N_e = 200$ sur un ensemble de 10000 mailles, le module de coalescence est appelé tous les 50 pas de temps PIC avec un paramètre $n = 5$ pour les macro-électrons et les macro-ions et un seuil minimal de 300 macro-particules. Nous avons effectué la simulation pour plusieurs valeurs de températures initiales ($T_e = T_i$) : 200 eV, 400 eV, 600 eV, 800 eV, 1000 eV et 1200 eV. Afin de pouvoir apprécier l'effet des nouveaux processus, nous avons en parallèle effectué les mêmes simulations en n'activant que la CI et les collisions coulombiennes, autrement dit les deux processus déjà implémentés dans CALDER avant ces travaux de thèse. Nous laissons le système se thermaliser pendant 250 fs, soit environ 48000 pas de temps avec $\Delta t = 5.2$ as. Un quasi-équilibre thermodynamique est alors atteint.

Les Figs. 7.6 et 7.7 comparent, pour différentes températures initiales, la distribution des charges ioniques prédite par le modèle de Saha (trait en pointillés), incluant l'IPD [Stewart

& Pyatt Jr, 1966], et celles simulées par CALDER (trait plein), soit en ne tenant compte que de la CI et des collisions coulombiennes (courbes de gauche en orange), soit en décrivant tous les nouveaux processus (courbes de droite en bleu). D'un point de vue général, on remarque que les cas intégrant tous les nouveaux processus ont tendance à épouser davantage le profil prédit par le solveur de Saha. Quand seule la CI est traitée, CALDER peut soit sous-estimer soit surestimer l'ionisation. On voit par exemple sur la Fig. 7.6a, relative à une température initiale de 200 eV, que la distribution tirée de la simulation PIC est décalée vers les hautes valeurs d'état de charge tandis que l'inverse se produit sur la Fig. 7.6e, où la température initiale vaut 600 eV. Ceci est dû au fait que pour les températures les plus basses, l'absence de recombinaison tend à surestimer la charge ionique finale alors que pour des températures plus fortes, c'est l'absence d'IPD (censée amplifier l'ionisation) qui semble dominer. Les profils obtenus avec uniquement la CI présentent presque systématiquement une forme de pointe, contrairement aux courbes issues des simulations PIC intégrées et aux prédictions théoriques qui peuvent présenter des creux, en raison des dégénérescences des états et du fait que l'on ne considère les ions que dans leur état fondamental.

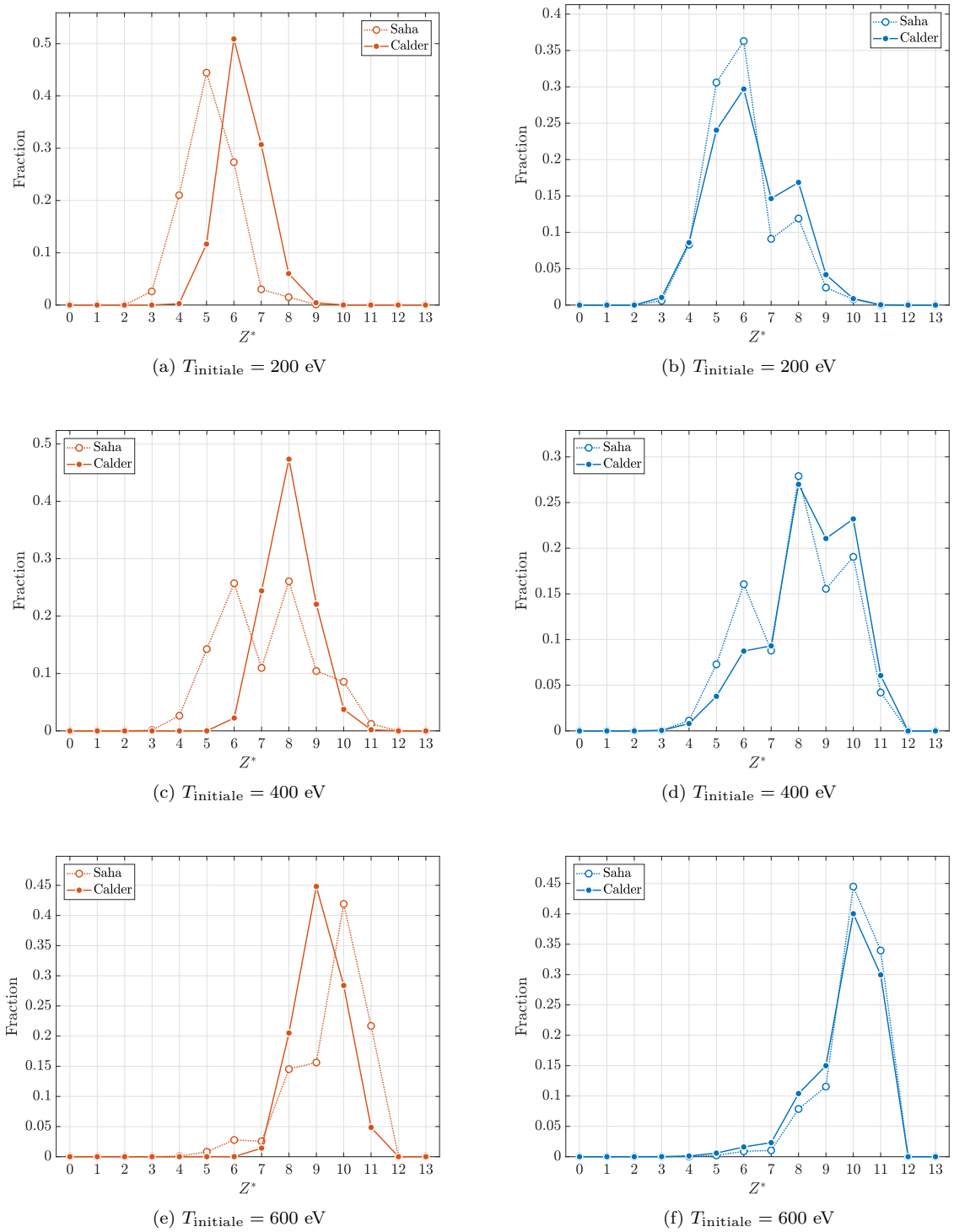
Les écarts entre les résultats PIC intégrés et le modèle de Saha peuvent avoir plusieurs origines potentielles. Ils peuvent en effet être issus du bruit statistique généré par la nature probabiliste des algorithmes Monte Carlo, mais aussi du fait que ces distributions de charge sont issues de systèmes en quasi-équilibre thermodynamique et que la thermalisation n'est pas totalement achevée. Dans une moindre mesure, ces distributions peuvent également être affectées par l'activation de la coalescence des macro-particules, comme nous le verrons dans la Sec. 7.3.3. Il faut également garder à l'esprit que notre module de recombinaison n'est pas basé sur l'équilibre de Saha-Boltzmann, comme tel est le cas dans le code LAPINE, mais sur le calcul des sections efficaces de CI et de TBR, liées par la formule de micro-réversibilité de Fowler.

Sur les Figs. 7.6 et 7.7, les écarts entre résultats théoriques et PIC tendent à s'effacer à mesure que la température augmente et ceci même en présence de la seule CI. On remarque d'ailleurs que pour $T = 1200$ eV, la distribution PIC se superpose presque parfaitement avec la courbe théorique dans les deux configurations. Ceci fait écho à une propriété de l'IPD[1] : l'ionisation est un processus physique présentant un effet de seuil car il faut fournir une énergie minimale, l'énergie de liaison, pour éjecter un électron lié dans le continuum. Dans le cas de l'Aluminium à densité solide, les énergies de liaison de la couche K sont beaucoup plus importantes que pour les autres couches (de l'ordre de quelques dizaines d'eV) et la correction de l'IPD (de l'ordre de la centaine d'eV) joue un rôle mineur.

[1] Chap. 3, Sec. 3.3.2

Ces différentes comparaisons montrent comme attendu une nette amélioration de la description de l'équilibre thermodynamique dans l'Aluminium solide. Les résultats de ces différentes simulations sont également regroupées dans le Tab. 7.1

Vérifions maintenant que l'évolution du système de l'état initial jusqu'à son état quasi-stationnaire est correctement décrite. A cette fin, nous avons comparé la dynamique de la charge ionique moyenne avec la prédiction faite par le code de cinétique atomique FLYCHK [Chung *et al.*, 2005]. Il faut pour cela fournir à ce dernier l'évolution temporelle des températures électroniques et ioniques pour qu'il puisse déduire la valeur de la charge ionique moyenne associée, via un modèle de physique atomique et radiative bien plus riche que celui inclus dans CALDER. Ces comparaisons sont données en Fig. 7.8 où sont représentées les évolutions temporelles de $\langle Z^* \rangle$ données par CALDER en tenant compte de tous les processus atomiques (trait plein bleu) ou seulement des collisions élastiques et de la CI (trait plein orange) ainsi que les prédictions de FLYCHK dans les deux cas (traits pointillés bleu et orange). La température initiale est soit fixée à 200 eV (Fig. 7.8a), soit à 1 keV (Fig. 7.8b).



(a) $T_{\text{initiale}} = 200$ eV

(b) $T_{\text{initiale}} = 200$ eV

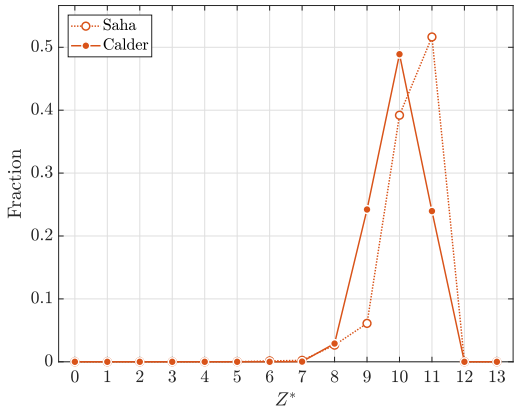
(c) $T_{\text{initiale}} = 400$ eV

(d) $T_{\text{initiale}} = 400$ eV

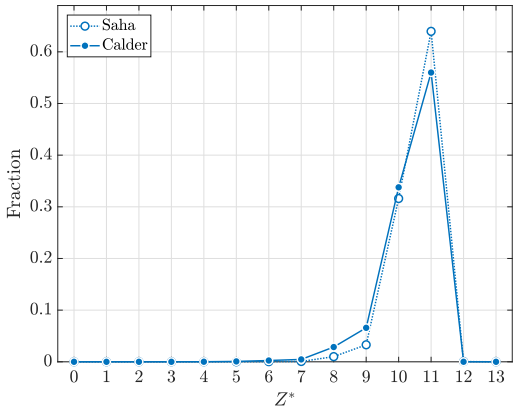
(e) $T_{\text{initiale}} = 600$ eV

(f) $T_{\text{initiale}} = 600$ eV

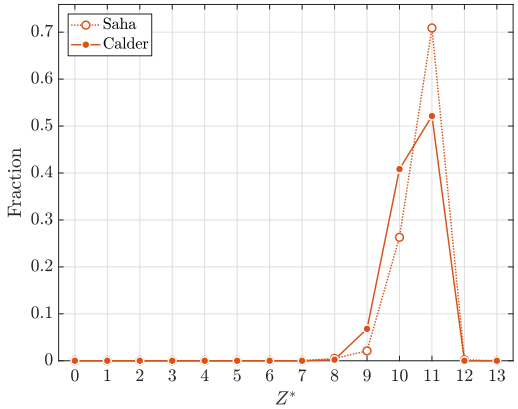
FIGURE 7.6 – Comparaison entre les distributions des états de charge de l'Aluminium dans le cas où seules la CI et les collisions coulombiennes sont prises en compte (trait plein en orange) et dans le cas où tous les nouveaux processus sont pris en compte (trait plein en bleu) à savoir les collisions coulombiennes, la CI, l'IPD, la TBR, la désexcitation atomique, la PI et la RR. La prédiction de Saha (intégrant l'IPD avec le modèle de [Stewart & Pyatt Jr, 1966]) est donnée en pointillés.



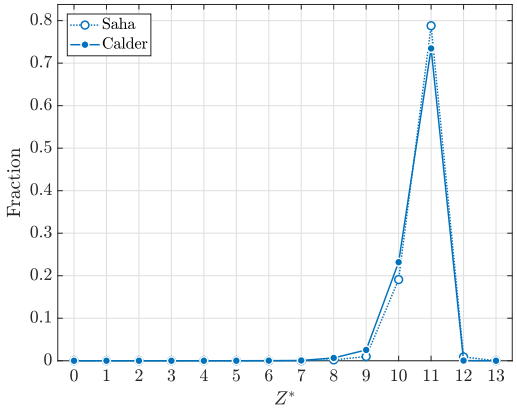
(a) $T_{\text{initiale}} = 800$ eV



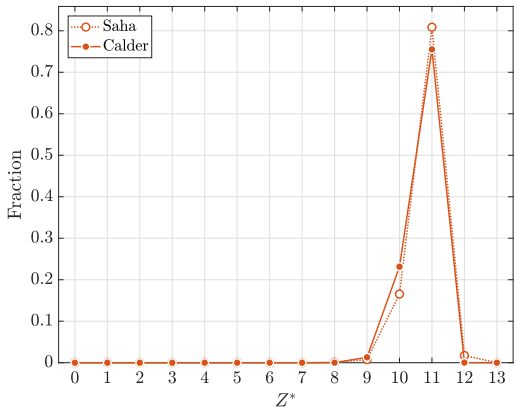
(b) $T_{\text{initiale}} = 800$ eV



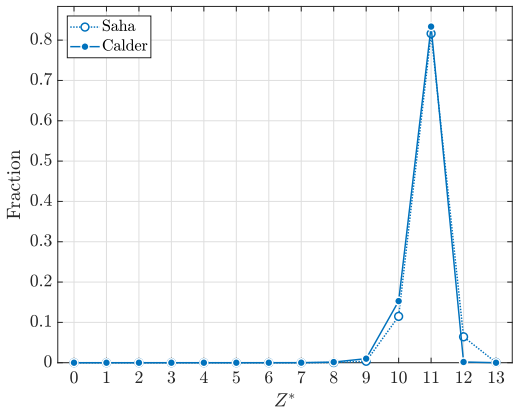
(c) $T_{\text{initiale}} = 1000$ eV



(d) $T_{\text{initiale}} = 1000$ eV



(e) $T_{\text{initiale}} = 1200$ eV



(f) $T_{\text{initiale}} = 1200$ eV

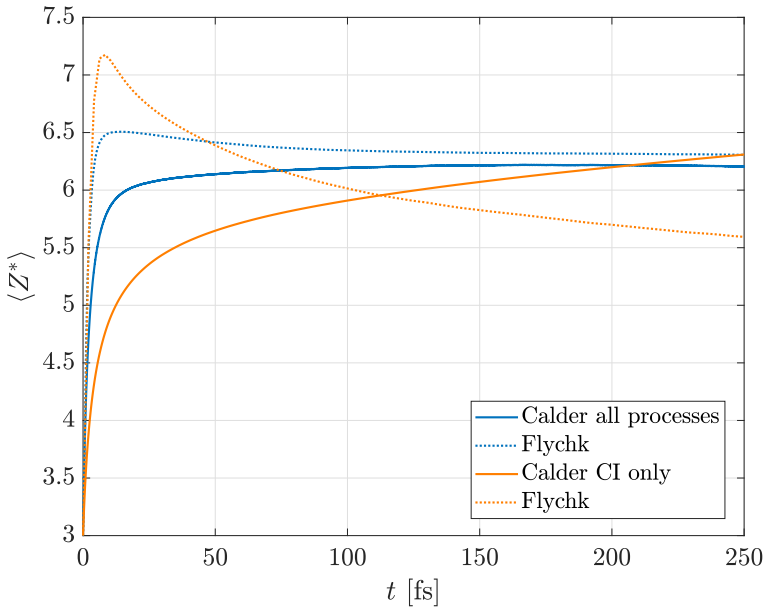
FIGURE 7.7 – Comparaison entre les distributions des états de charge de l'Aluminium dans le cas où seules la CI et les collisions coulombiennes sont prises en compte (trait plein en orange) et dans le cas où tous les nouveaux processus sont pris en compte (trait plein en bleu) à savoir les collisions coulombiennes, la CI, l'IPD, la TBR, la désexcitation atomique, la PI et la RR. La prédiction de Saha (intégrant l'IPD avec le modèle de [Stewart & Pyatt Jr, 1966]) est donnée en pointillés.

	Température initiale [eV]	200	400	600	800	1000	1200
Tous les processus	Température électronique finale [eV]	59	92	130	176	225	277
	Charge moyenne CALDER	6.2	8.4	9.8	10.4	10.7	10.8
	Charge moyenne Saha	6.0	8.0	10.0	10.6	10.8	10.9
Ionisation collisionnelle et collisions coulombiennes	Température électronique finale [eV]	47	83	117	154	194	239
	Charge moyenne CALDER	6.3	8.0	9.1	9.9	10.4	10.7
	Charge moyenne Saha	5.1	7.2	9.5	10.4	10.7	10.8

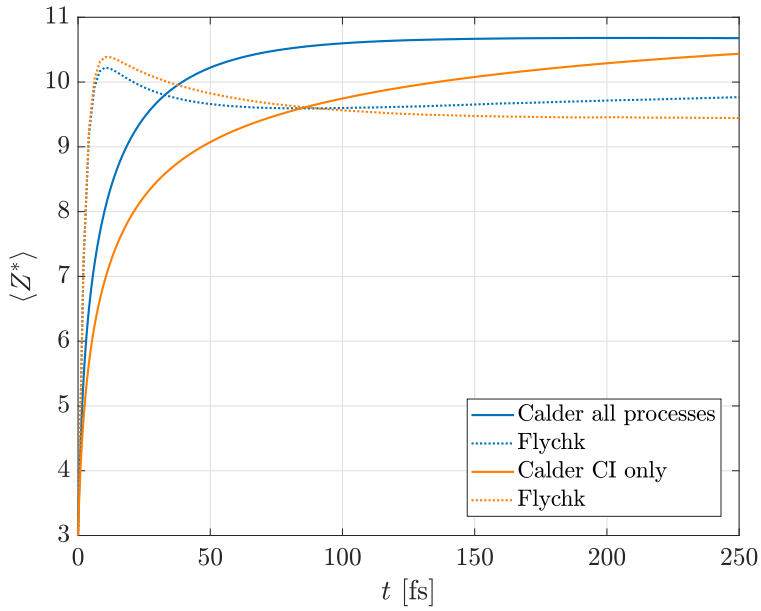
TABLE 7.1 – Valeur de température électronique finale ($t = 250$ fs) et de charge ionique moyenne obtenues dans les différents cas tests, selon les processus atomiques inclus dans les simulations. Apparaissent aussi les charges ioniques moyennes prédites par le modèle de Saha intégrant l'IPD (via le modèle de [Stewart & Pyatt Jr, 1966]).

Les deux simulations montrent un comportement similaire : l'intégration de tous les processus permet d'atteindre rapidement un état stationnaire alors que $\langle Z^* \rangle$ continue à croître au bout de 250 fs quand seules les collisions élastiques et la CI sont décrites. Dans les deux cas, FLYCHK prévoit une augmentation plus rapide de $\langle Z^* \rangle$ que CALDER, une différence peut-être due au modèle de CI [Lotz, 1970] utilisé dans FLYCHK au lieu de [Kim *et al.*, 2000] dans CALDER. Elle pourrait également être due à la prise en compte d'un plus grand nombre de processus dans FLYCHK[2]. Néanmoins, lorsque tous les processus atomiques de CALDER sont activés, les deux codes prédisent des valeurs asymptotiques de $\langle Z^* \rangle$ comparables (~ 6.2) pour une température initiale $T = 200$ eV. Une température initiale de 1 keV conduit à un écart plus important mais cependant modéré.

[2] Chap. 3



(a)



(b)

FIGURE 7.8 – Comparaison des évolutions temporelles de la charge ionique moyenne $\langle Z^* \rangle$ entre CALDER (trait plein) et FLYCHK (trait en pointillés) lorsque seules les collisions coulombiennes et la CI sont activées (en orange) et lorsque tous les nouveaux processus sont pris en compte (en bleu). (a) Cas où la température initiale est fixée à 200 eV. (b) Cas où la température initiale est fixée à 1 keV.

7.3.3 Effet de la coalescence des macro-particules

Cette dernière section est consacrée à l'impact du modèle de coalescence sur les simulations précédentes, décrivant de relaxation d'un plasma d'Aluminium solide. Nous examinons pour cela séparément l'effet des différents paramètres de ce module.

7.3.3.1 Effet du paramètre n

Nous nous intéressons d'abord au paramètre n, qui sert à dimensionner la grille des impulsions utilisée pour la coalescence, selon $\Delta p_\alpha = \delta p_\alpha / n$ avec Δp_α la taille des cellules en impulsion dans la dimension α et δp_α l'écart type en impulsion calculé selon la méthode proposée dans le Chap. 2, Sec. 2.4. Plus n est faible, plus la taille des cellules en impulsion sera grande et plus le nombre de particules coalescées sera grand ce qui à la fois réduit le temps de calcul mais dégrade la statistique de la simulation. À l'inverse, un paramètre n trop grand peut conduire à des cellules en impulsion trop fines, n'englobant que très peu de macro-particules et donc contre-productive. Il est donc utile d'étudier l'impact de n sur le temps de calcul et sur la précision de la simulation afin d'aboutir à un bon compromis entre ces deux critères.

Pour ce faire, nous avons mené une série de simulations 0D de la thermalisation d'un plasma d'Aluminium solide ($\rho = 2.7$ g/cm^3) de charge initiale $Z^* = 3$ et de température initiale $T_i = T_e = 200$ eV. Nous utilisons un nombre de macro-particules $N_i = N_e = 200$ par maille sur un total de 10000 mailles. La simulation est faite sur un total de 50000 itérations avec $\Delta t = 5.2$ as. Nous activons les modules de collisions coulombiennes, CI, TBR, IPD, désexcitation atomique, PI, et RR. Concernant la coalescence, nous l'appelons à tous les pas de temps pour les macro-ions et les macro-électrons, sans seuil sur le nombre minimal de macro-particules par maille et avec un paramètre n variable selon les simulations, avec $n = 1$, 2, 3, 4, 5, 6 ou 7. Nous avons également effectué une simulation de référence sans activer la coalescence.

La Fig. 7.9a montre la réduction du temps de calcul par rapport à la simulation sans coalescence, en fonction du paramètre n. Comme attendu, la réduction du temps de calcul est d'autant plus importante que n est faible. En effet, $n = 1$ entraîne une réduction de 92.3 % alors que $n = 7$ donne lieu à une réduction de 46.2 %. On remarque également que cette réduction semble linéaire avec n.

La Fig. 7.9b trace la variation avec n de l'erreur relative moyenne

$$\langle \varepsilon \rangle(n) = \frac{1}{N_t} \sum_t^{N_t} \frac{|\langle Z^* \rangle_{\text{ref}}(t) - \langle Z^* \rangle_n(t)|}{\langle Z^* \rangle_{\text{ref}}(t)} , \tag{7.9}$$

avec $\langle \varepsilon \rangle(n)$ l'erreur moyenne pour la simulation utilisant le paramètre de coalescence n, N_t le nombre de pas de temps (ici $N_t = 50000$), $\langle Z^* \rangle_{\text{ref}}(t)$ la charge ionique moyenne dans la simulation de référence à l'instant t et $\langle Z^* \rangle_{\text{ref}}(t)$ celui pour la simulation de paramètre n. Là encore, le résultat est celui attendu, à savoir une diminution de l'erreur à mesure que n augmente, avec une erreur maximale de 27 % pour $n = 1$ et une erreur minimale de 0.9 % pour $n = 7$. La variation de l'écart n'est pas linéaire : si le passage de $n = 6$ à $n = 7$ fait passer la réduction du temps de calcul de 59 % à 46 %, l'erreur moyenne sur $\langle Z^* \rangle$ ne passe que de 1.3 % à 0.9 %, rendant le cas $n = 6$ numériquement plus intéressant.

La Fig. 7.9c présente l'évolution temporelle du nombre total de macro-électrons dans la simulation. Cette quantité croît continûment en l'absence de coalescence, alors même que nous avons vu à la section précédente que l'équilibre d'ionisation est atteint très rapidement

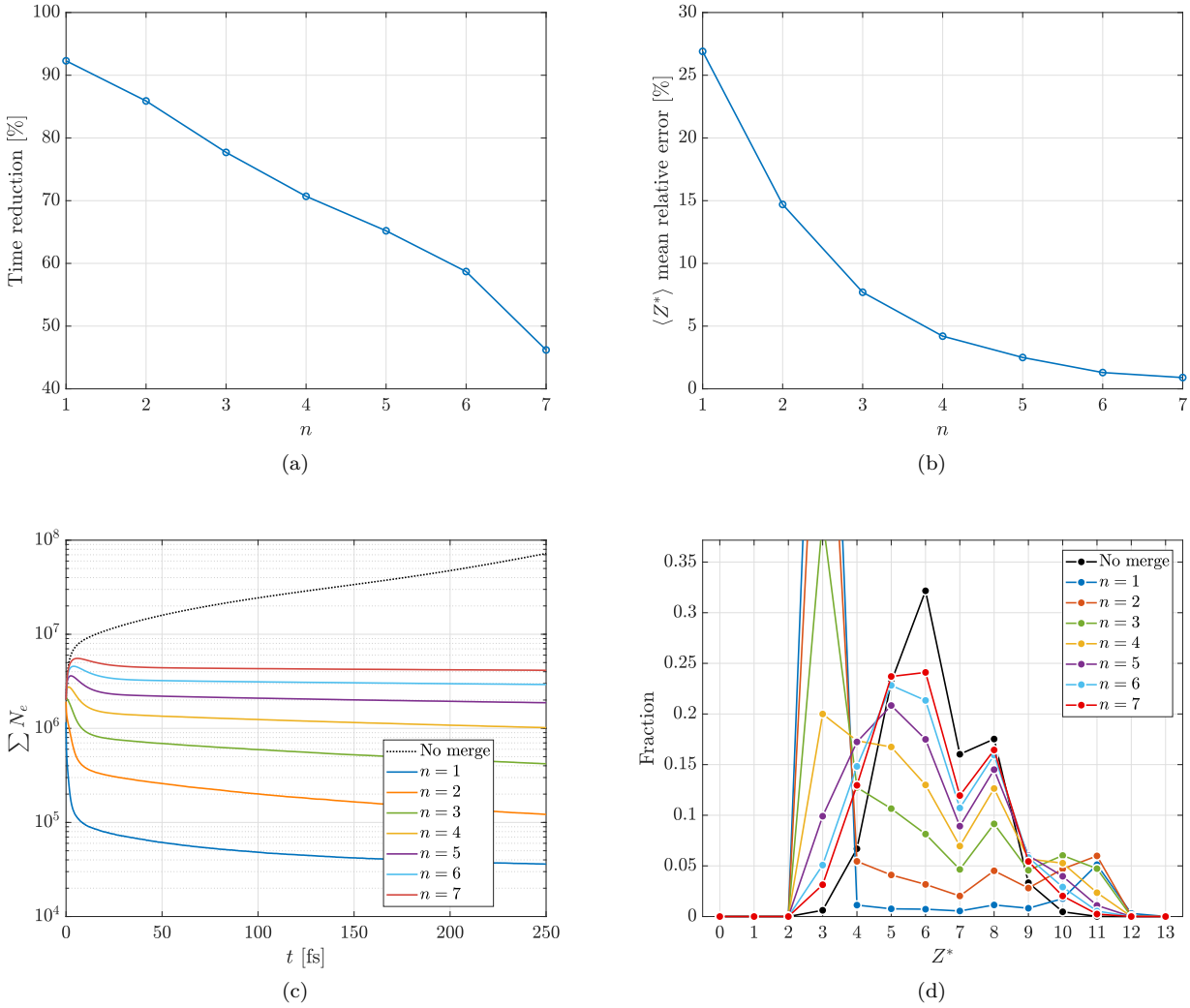


FIGURE 7.9 – (a) Réduction du temps de calcul en fonction du paramètre de coalescence n par rapport au cas de référence sans coalescence. (b) Erreur moyenne sur la charge ionique moyenne en fonction de n. (c) Comparaison de l'évolution du nombre de macro-électrons en fonction du temps pour différentes valeurs de n. (d) Comparaison des distributions des états de charge de l'Aluminium à $t = 250$ fs pour différentes valeurs de n.

pour une température initiale de 200 eV. Cette inflation de macro-particules est principalement due au fait que nous produisons des nouveaux macro-électrons lors de la CI mais que nous ne supprimons pas (ou seulement dans de très rares cas) de macro-électrons lors de la TBR. Comme attendu, l'activation de la coalescence entraîne une diminution plus ou moins drastique du nombre de macro-particules en fonction du paramètre n, jusqu'à plus de trois ordres de grandeurs à la fin de la simulation pour $n = 1$. On notera enfin que les simulations avec $n = 5$, 6 et 7 ont atteint un état quasi-stationnaire alors que les autres cas décroissent continûment jusqu'à la fin de la simulation.

Enfin, la Fig. 7.9d compare les distributions des états de charge de l'Aluminium à la fin des différentes simulations. De petites valeurs de n (≤ 3) conduisent à des différences assez importantes avec la simulation de référence, notamment une surabondance d'ions Al^{3+}. Augmenter n conduit à un meilleur accord sans pour autant parvenir à une parfaite coïncidence (pour $n \leq 7$).

Pour tenter de comprendre ce comportement, examinons l'évolution temporelle de la distribution en énergie des électrons. Ces spectres intégrés sont représentés sur la Fig. 7.10. Si les trois dernières Figs. 7.10f, 7.10g et 7.10h présentent une évolution très proche du cas de référence (Fig. 7.10a), les autres cas conduisent à un refroidissement progressif à mesure que le temps s'écoule. Ce refroidissement, d'origine numérique, est d'autant plus rapide que la coalescence est forte. Après vérification, ce phénomène semble lié aux collisions coulombiennes en présence de macro-particules très disparates, conséquence d'une coalescence trop agressive. Ceci fait écho aux travaux récents de [Higginson *et al.*, 2020] qui ont pointé l'imprécision du schéma collisionnel de [Nanbu & Yonemura, 1998] dans de telles conditions. La correction proposée par [Higginson *et al.*, 2020] n'est à ce jour pas encore implémentée dans le code Calder et nous prendrons donc soin, pour nos simulations futures, de choisir un jeu de paramètres numériques n'entraînant pas l'interaction de macro-particules de poids trop différents.

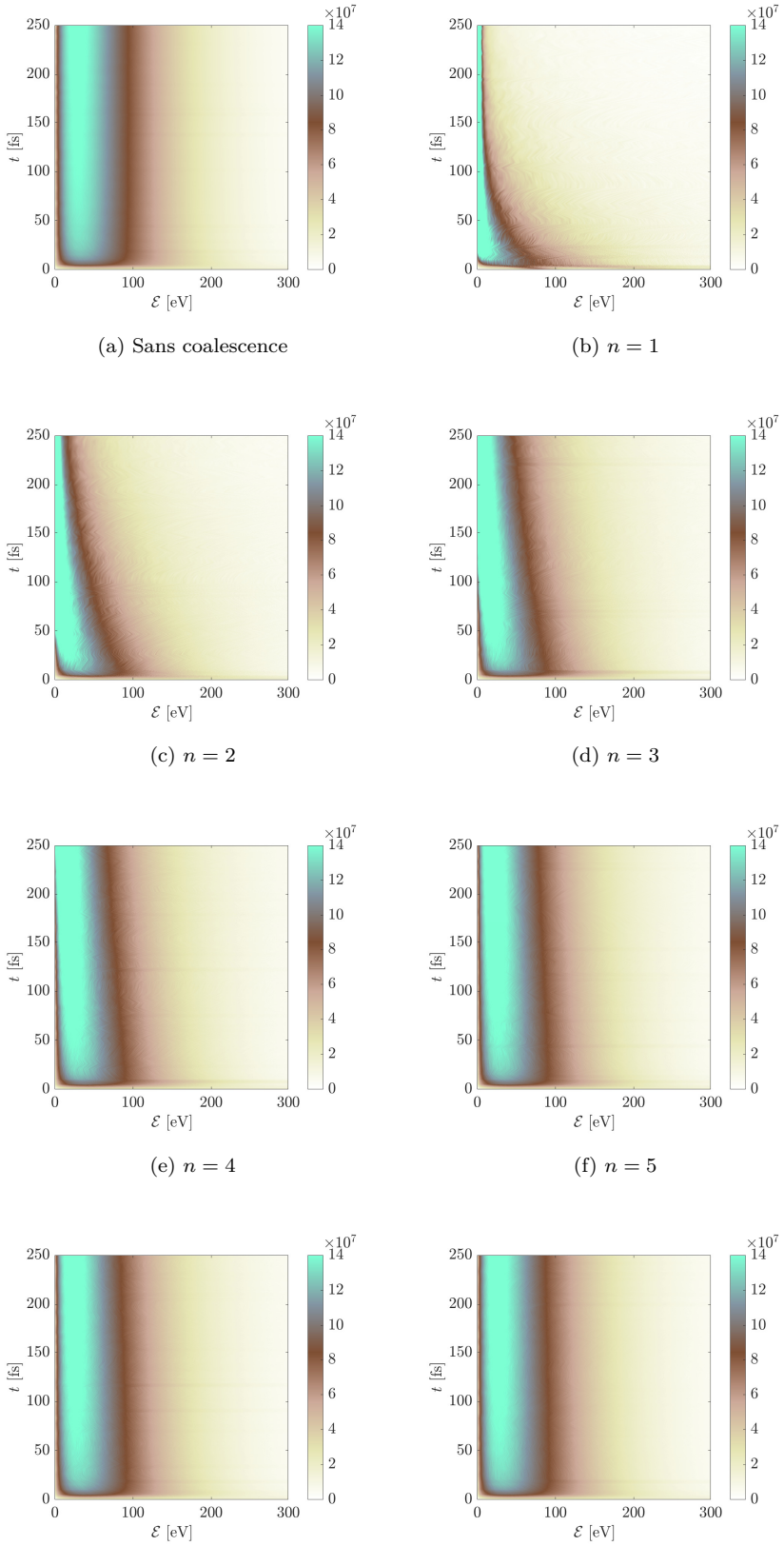
Une discrétisation trop grossière de la grille en impulsion pour la coalescence peut donc fortement dégrader les résultats de la simulation, notamment en causant un refroidissement anormal, source de recombinaison non physique. Les calculs présentés dans cette section tendent cependant à surestimer ces effets car, contrairement aux simulations suivantes, la coalescence est appliquée à chaque pas de temps, indépendamment du nombre total de macro-particules.

7.3.3.2 Effet de la période d'appel

Examinons maintenant l'influence de la période d'appel du module de coalescence. Nous répétons pour cela les simulations précédentes, mais avec un paramètre de coalescence fixé à $n = 5$ et en variant sa période d'appel $\Delta t_{\mathrm{m}} = 1$, 5, 20, 50 et 100 Δt. Là encore, nous n'imposons pas de seuil sur le nombre de macro-particules minimal.

Les diagnostics effectués sont similaires à ceux présentés en Fig. 7.9d : la réduction du temps de calcul est tracée en Fig. 7.11a, l'erreur moyenne calculée via l'Eq. (7.9) en Fig. 7.11b, l'évolution temporelle du nombre total de macro-électrons en Fig. 7.11c et enfin la distribution des états de charge en Fig. 7.11d.

Logiquement, la Fig. 7.11a montre que plus la fréquence d'appel de coalescence est élevée, plus la réduction du temps de calcul est importante mais avec un gain modeste dans l'intervalle considéré puisque nous obtenons une réduction de 65 % pour $\Delta t_{\mathrm{m}} = 1\ \Delta t$ et de 49 % pour $\Delta t_{\mathrm{m}} = 100\ \Delta t$, soit une différence de seulement 16 %. Il en est de même pour l'erreur moyenne sur $\langle Z^* \rangle$ qui diminue à mesure que Δt_{m} augmente. Là encore, la variation est assez faible avec une erreur de 2.5 % pour $\Delta t_{\mathrm{m}} = 1\ \Delta t$ et de 0.2 % pour $\Delta t_{\mathrm{m}} = 100\ \Delta t$.



(a) Sans coalescence

(b) $n = 1$

(c) $n = 2$

(d) $n = 3$

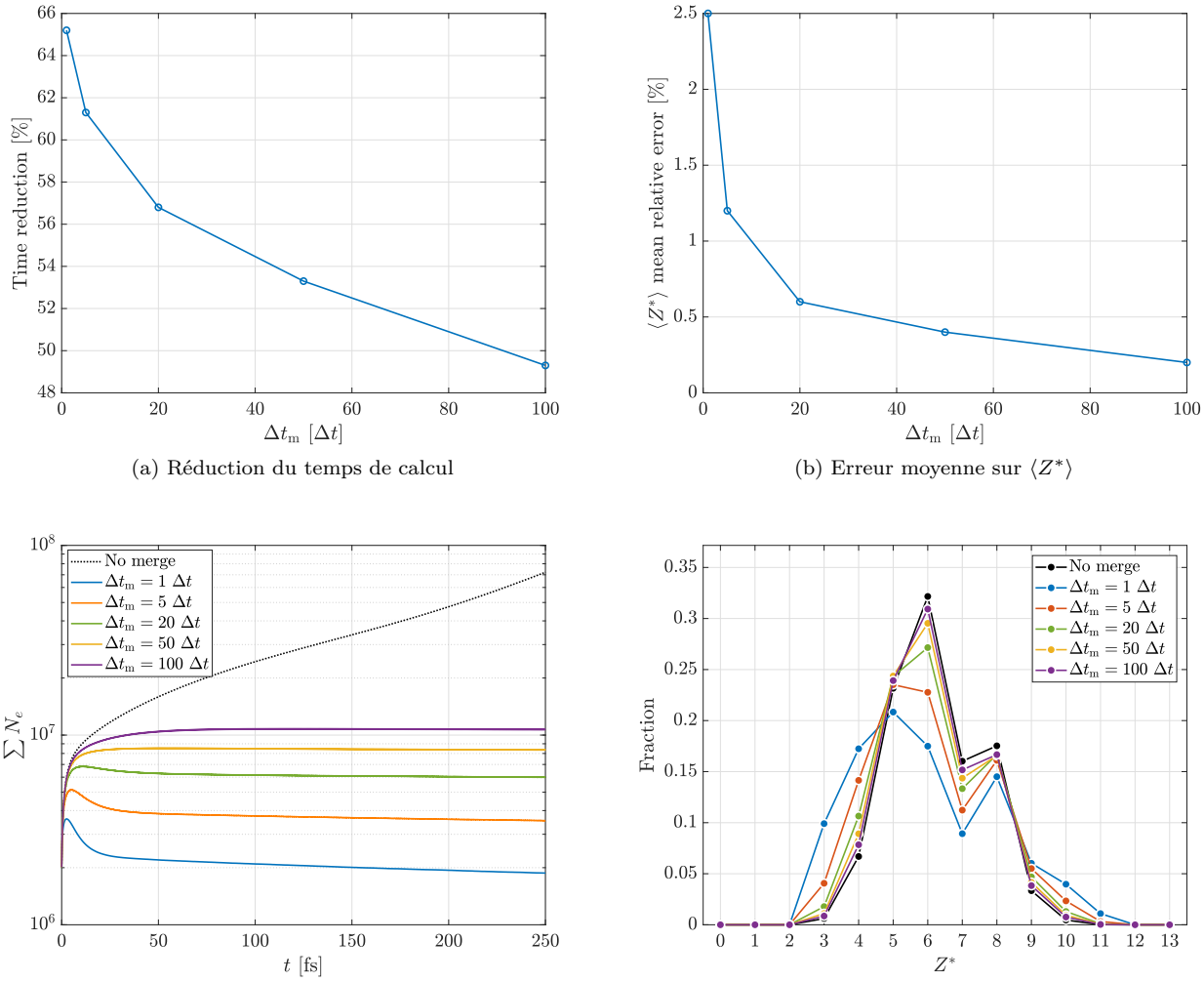
(e) $n = 4$

(f) $n = 5$

(g) $n = 6$

(h) $n = 7$

FIGURE 7.10 – Évolution temporelle du spectre en énergie électronique pour le cas de référence sans coalescence et pour différentes valeurs du paramètre n.



(a) Réduction du temps de calcul

(b) Erreur moyenne sur $\langle Z^* \rangle$

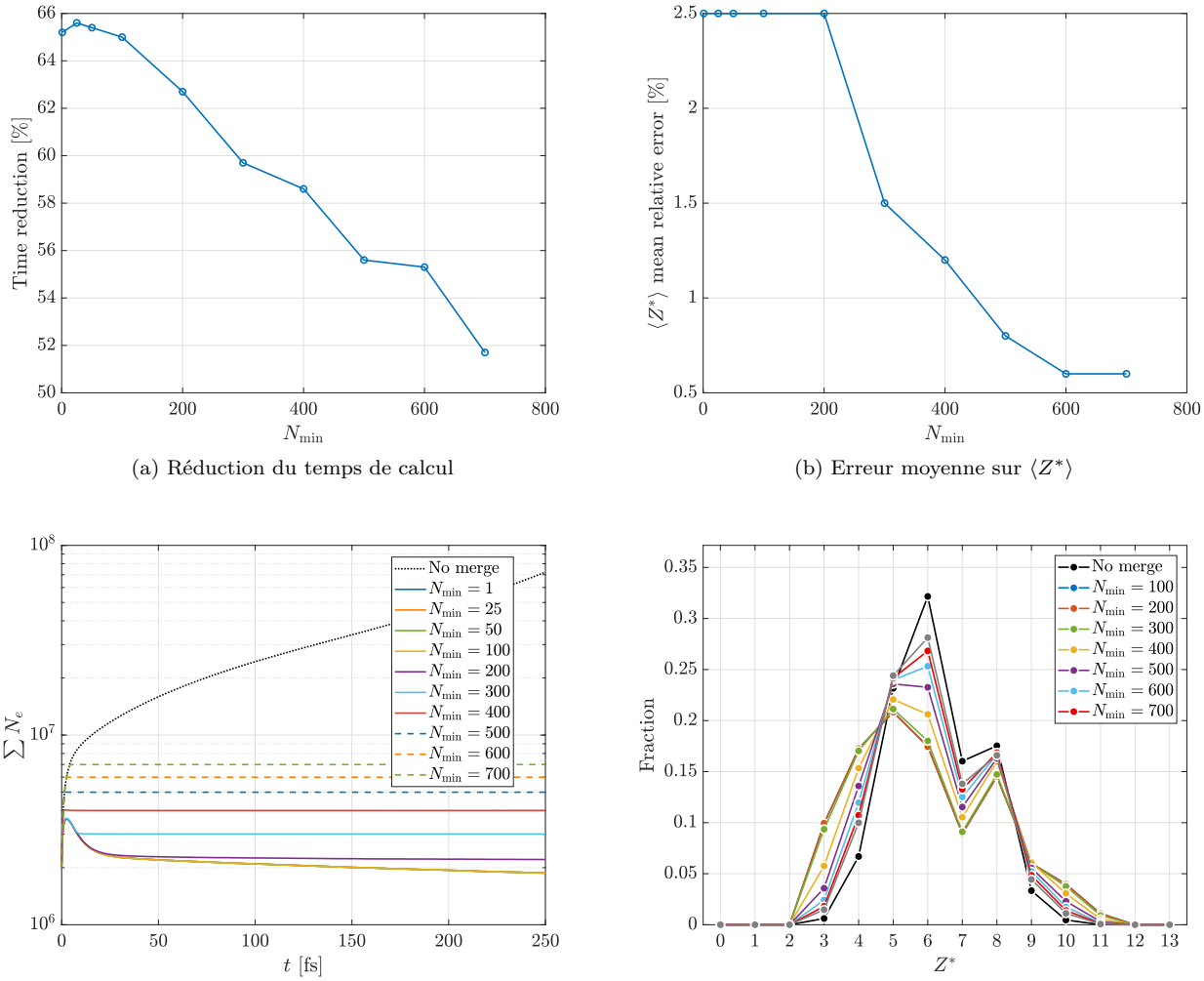
(c) Nombre total de macro-électrons

(d) Distribution des états de charge

FIGURE 7.11 – (a) Réduction du temps de calcul en fonction du paramètre de coalescence Δt_m par rapport au cas de référence sans coalescence. (b) Erreur moyenne sur la charge ionique moyenne en fonction de Δt_m. (c) Comparaison de l'évolution du nombre de macro-électrons en fonction du temps pour différentes valeurs de Δt_m. (d) Comparaison des distributions des états de charge de l'Aluminium à $t = 250$ fs pour différentes valeurs de Δt_m.

On voit sur la Fig. 7.11c que l'efficacité du module de coalescence en matière de réduction du nombre de macro-particules augmente avec sa fréquence d'appel, ce qui est en adéquation avec les résultats observés dans les deux figures précédentes. Enfin, la Fig. 7.11d montre que le profil des états de charge de l'Aluminium tend vers celui de la simulation de référence (sans coalescence) à mesure que Δt_m augmente, avec un bon accord à partir de $\Delta t_m = 20\ \Delta t$ et une quasi-coïncidence pour $\Delta t_m \geq 50$.

Nous voyons d'ores et déjà, en nous basant sur les deux seuls paramètres n et Δt_m, que le choix d'un jeu de paramètres pertinents n'est pas immédiat. En effet, au regard de nos tests, choisir par exemple $n = 5$ et $\Delta t_m = 5\ \Delta t$ permet, comparativement au cas où $n = 6$ et $\Delta t_m = 1\ \Delta t$, à la fois d'obtenir une meilleure réduction du temps de calcul (61 % contre 59 %) et meilleure précision (1.2 % d'erreur contre 1.3 %). De même, le cas à $n = 5$ et $\Delta t_m = 50\ \Delta t$ concilie un meilleur temps de calcul et une meilleur précision que le cas à $n = 7$ et $\Delta t_m = 1\ \Delta t$.



(a) Réduction du temps de calcul

(b) Erreur moyenne sur $\langle Z^* \rangle$

(c) Nombre total de macro-électrons

(d) Distribution des états de charge

FIGURE 7.12 – (a) Réduction du temps de calcul en fonction du paramètre de coalescence $N_{\min}$ par rapport au cas de référence sans coalescence. (b) Erreur moyenne sur la charge ionique moyenne en fonction de $N_{\min}$. (c) Comparaison de l'évolution du nombre de macro-électrons en fonction du temps pour différentes valeurs de $N_{\min}$. (d) Comparaison des distributions des états de charge de l'Aluminium à $t = 250$ fs pour différentes valeurs de $N_{\min}$.

7.3.3.3 Effet du seuil de coalescence

Dans cette ultime série de tests, nous souhaitons apprécier l'impact d'un seuil minimal de macro-particules dans les cellules pour activer la coalescence. Nous nous plaçons dans le même contexte physique et numérique que pour les tests précédents (à savoir une simulation 1D de la relaxation d'un plasma d'Al^{3+} solide ($\rho = 2.7$ g/cm^3) de température initiale $T_i = T_e = 200$ eV. Nous utilisons un nombre initial de macro-particules $N_i = N_e = 200$ par maille sur un total de 10000 mailles. La simulation est faite sur un total de 50000 itérations avec $\Delta t = 5.2$ as. Le paramètre n est une nouvelle fois fixé à 5, le pas de temps de coalescence à $\Delta t_{\mathrm{m}} = 1\ \Delta t$ et nous testons plusieurs seuils pour le nombre minimal de macro-particules, à savoir $N_{\min} = 1$, 25, 50, 100, 300, 400, 500, 600 et 700 macro-particules par maille.

Les diagnostics sont les mêmes que précédemment. On voit sur la Fig. 7.12a que les plus basses valeurs de $N_{\min}$ donnent des réductions du temps de calcul sensiblement égales. Il en est d'ailleurs de même pour l'erreur moyenne sur $\langle Z^* \rangle$, présenté en Fig. 7.12b où les cas

$N_{\min} = 1$, 25, 50, 100 et 200 donnent tous une erreur moyenne de 2.5 %. En effet, le nombre de macro-particules par maille ne tombe jamais sous ces valeurs pour un paramètre $n = 5$, ce qui est confirmé par la Fig. 7.12c représentant le nombre total de macro-électrons en fonction du temps, et la coalescence est de ce fait appelée à chaque pas de temps. Lorsque le seuil est supérieur à 100, la réduction du temps de calcul diminue à mesure que $N_{\min}$ augmente. L'erreur moyenne sur $\langle Z^* \rangle$ suit la même évolution. Comme pour les tests précédents, ces résultats sont corrélés directement au nombre de macro-particules présentes dans la simulation : plus ce nombre est élevé, plus l'erreur est faible et moins la réduction du temps de calcul est importante. On notera tout de même que $N_{\min} = 700$ conduit à la même erreur moyenne que $N_{\min} = 600$ alors que ces deux cas ne présentent pas le même temps de calcul. Encore une fois, on devine l'importance, pour l'utilisateur, de choisir un jeu de paramètres pertinent assurant le meilleur équilibre entre réduction du temps de calcul et précision des résultats. Enfin, la Fig. 7.12d montre les distributions des états de charge ionique à la fin des simulations. Sans surprise, on observe là encore une amélioration de la description lorsque le seuil sur le nombre de macro-particules minimal augmente.

En résumé, les paramètres de coalescence n (déterminant la taille des cellules en impulsion), Δt_{m} (la période d'appel de la coalescence) et $N_{\min}$ (désactivant l'appel de la coalescence lorsque le nombre de macro-particules par maille est insuffisant), jouent tous les trois sur le temps de calcul et sur la précision des résultats en modifiant, de façon plus ou moins prononcée, le nombre de macro-particules par maille. De façon générale, nous constatons qu'une utilisation pertinente de ce module repose sur l'équilibre de ces paramètres : dans la grande majorité des simulations présentées dans le prochain chapitre, nous avons pu constater qu'un paramètre $n = 4$ ou 5, un pas de temps Δt_{m} entre 20 et 50 et un seuil minimal $N_{\min} \approx 1.5\ N_{i,e}$, permettent d'atteindre un équilibre satisfaisant.

7.4 Conclusion

Nous avons souligné les différences majeures entre les algorithmes de physique atomique implémenté dans Calder et les deux autres codes de référence que sont Lapine [Wu *et al.*, 2018] et Picls [Royle *et al.*, 2017]. Ces deux codes utilisent le modèle de [Lotz, 1970] pour le calcul de la section efficace de CI tandis que Calder est basé sur le modèle de [Kim *et al.*, 2000]. Nous avons également pu voir que le module de recombinaison de ces deux codes repose sur une méthode déterministe, à savoir la résolution d'une équation d'état permettant d'estimer la charge ionique moyenne en fonction de la densité ionique et de la température électronique. Une autre différence majeure concerne le traitement de la désexcitation atomique dans Picls : restreinte aux lacunes en couches K mais tenant compte de leur durée de vie finie.

Nous avons présenté une série de simulations Calder de la relaxation d'un plasma dense et chaud d'Aluminium en présence de tout ou partie des processus atomiques. Les résultats obtenus, relatifs à la dynamique du plasma et à son état asymptotique, reproduisent de façon satisfaisante les prédictions du modèle stationnaire de Saha (intégrant l'IPD) et du code instationnaire Flychk.

Enfin, nous avons examiné l'effet des paramètres du module de coalescence de macro-particules sur le coût et la précision de ces simulations de relaxation.

Bibliographie

Arber, T. D., Bennett, K., Brady, C. S., Lawrence-Douglas, A., Ramsay, M. G., Sircombe, N. J., Gillies, P., Evans, R. G., Schmitz, H., Bell, A. R. & Ridgers, C. P. (2015). *Contemporary particle-in-cell approach to laser-plasma modelling.* Plasma Physics and Controlled Fusion **57**, no. 11, p. 113001.

Chung, H.-K., Chen, M., Morgan, W., Ralchenko, Y. & Lee, R. (2005). *FLYCHK : Generalized population kinetics and spectral model for rapid spectroscopic analysis for all elements.* High Energy Density Physics **1**, no. 1, p. 3–12.

Croes, V. (2017). *Plasma discharge 2D modeling of a Hall thruster* .

Derouillat, J., Beck, A., Pérez, F., Vinci, T., Chiaramello, M., Grassi, A., Flé, M., Bouchard, G., Plotnikov, I., Aunai, N. *et al.* (2018). *Smilei : A collaborative, open-source, multi-purpose particle-in-cell code for plasma simulation.* Computer Physics Communications **222**, p. 351–373.

Desjarlais, M. P. (2001). *Practical Improvements to the Lee-More Conductivity Near the Metal-Insulator Transition.* Contributions to Plasma Physics **41**.

Ecker, G. & Kröll, W. (1963). *Lowering of the ionization energy for a plasma in thermodynamic equilibrium.* The Physics of Fluids **6**, no. 1, p. 62–69.

Fonseca, R. A., Silva, L. O., Tsung, F. S., Decyk, V. K., Lu, W., Ren, C., Mori, W. B., Deng, S., Lee, S., Katsouleas, T. & Adam, J. C. (2002). *OSIRIS : A Three-Dimensional, Fully Relativistic Particle in Cell Code for Modeling Plasma Based Accelerators.* Springer Berlin Heidelberg p. 342–351.

Fontes, C., Zhang, H., Abdallah Jr, J., Clark, R., Kilcrease, D., Colgan, J., Cunningham, R., Hakel, P., Magee, N. & Sherrill, M. (2015). *The Los Alamos suite of relativistic atomic physics codes.* Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics **48**, no. 14, p. 144014.

Frankel, N., Hines, K. & Dewar, R. (1979). *Energy loss due to binary collisions in a relativistic plasma.* Physical Review A **20**, no. 5, p. 2120.

Hahn, Y. (1997). *Plasma density effects on the three-body recombination rate coefficients.* Physics Letters A **231**, no. 1-2, p. 82–88.

Higginson, D. P., Holod, I. & Link, A. (2020). *A corrected method for Coulomb scattering in arbitrarily weighted particle-in-cell plasma simulations.* Journal of Computational Physics **413**, p. 109450.

Kerr, D. E. (1956). *Physics of Fully Ionized Gases.* Journal of the American Chemical Society **78**, no. 19, p. 5133–5134.

Kim, Y.-K., Santos, J. P. & Parente, F. (2000). *Extension of the binary-encounter-dipole model to relativistic incident electrons.* Physical Review A **62**, no. 5, p. 052710.

Lee, Y. T. & More, R. (1984). *An electron conductivity model for dense plasmas.* The Physics of Fluids **27**, no. 5, p. 1273–1286.

Lobet, M., d'Humières, E., Grech, M., Ruyer, C., Davoine, X. & Gremillet, L. (2016). *Modeling of radiative and quantum electrodynamics effects in pic simulations of ultra-relativistic laser-plasma interaction.* Journal of Physics : Conference Series **688**, no. 1, p. 012058.

Lotz, W. (1970). *Electron-impact ionization cross-sections for atoms up to Z= 108.* Zeitschrift für Physik A Hadrons and nuclei **232**, no. 2, p. 101–107.

Mihalas, D. (1979). *Theory of stellar atmospheres.* Transactions of the International Astronomical Union, Series A **17**, p. 193.

Nanbu, K. & Yonemura, S. (1998). *Weighted particles in Coulomb collision simulations based on the theory of a cumulative scattering angle.* Journal of Computational Physics **145**, no. 2, p. 639–654.

Nishikawa, K., Duţan, I., Köhn, C. & Mizuno, Y. (2021). *PIC methods in astrophysics : Simulations of relativistic jets and kinetic physics in astrophysical systems.* Living Reviews in Computational Astrophysics **7**, no. 1, p. 1–117.

Nuter, R. & Tikhonchuk, V. (2013). *Prepulse suppression and optimization of backward Raman amplification with a chirped pump laser beam.* Physical Review E **87**, no. 4, p. 043109.

Ogando, F., Heikkinen, S. J. J., Kiviniemi, T., Leerink, S. & Nora, M. (2008). *Domain decomposition performance on ELMFIRE plasma simulation code.* Proceedings of CUG 2008 Conference, Helsinki (Finland) .

Pérez, F., Gremillet, L., Decoster, A., Drouin, M. & Lefebvre, E. (2012). *Improved modeling of relativistic collisions and collisional ionization in particle-in-cell codes.* Physics of Plasmas **19**, no. 8, p. 083104.

Pukhov, A. (1999). *Three-dimensional electromagnetic relativistic particle-in-cell code VLPL (Virtual Laser Plasma Lab).* Journal of plasma physics **61**, no. 3, p. 425–433.

Royle, R., Sentoku, Y., Mancini, R. C., Paraschiv, I. & Johzaki, T. (2017). *Kinetic modeling of x-ray laser-driven solid Al plasmas via particle-in-cell simulation.* Physical Review E **95**, no. 6, p. 063203.

Sentoku, Y. & Kemp, A. J. (2008). *Numerical methods for particle simulations at extreme densities and temperatures : Weighted particles, relativistic collisions and reduced currents.* Journal of Computational Physics **227**, no. 14, p. 6846–6861.

Smilei (2021). *Collisional Ionization.* Particle Merging - Smilei 4.6 documentation .

Stewart, J. C. & Pyatt Jr, K. D. (1966). *Lowering of ionization potentials in plasmas.* The Astrophysical Journal **144**, p. 1203.

Takizuka, T. & Abe, H. (1977). *A binary collision model for plasma simulation with a particle code.* Journal of Computational Physics **25**, no. 3, p. 205–219.

Vay, J.-L., Colella, P., McCorquodale, P., Van Straalen, B., Friedman, A. & Grote, D. (2002). *Mesh refinement for particle-in-cell plasma simulations : Applications to and benefits for heavy ion fusion.* Laser and Particle Beams **20**, no. 4, p. 569–575.

Wu, D., He, X., Yu, W. & Fritzsche, S. (2018). *Particle-in-cell simulations of laser–plasma interactions at solid densities and relativistic intensities : the role of atomic processes.* High Power Laser Science and Engineering **6**.

8

Application à des configurations d'interaction laser UHI-solide et faisceau X-solide

8.1 Interaction laser-solide à ultra-haute intensité

8.1.1 Introduction

Si l'implémentation de l'ensemble des processus atomiques a montré une nette amélioration de la cinétique d'un plasma hors équilibre thermodynamique[1], il nous a semblé intéressant d'illustrer son effet sur la physique de l'interaction entre un laser UHI et une cible solide, qui va engendrer dans la matière des états transitoires exotiques. L'étude de telles interactions est d'intérêt majeur pour diverses thématiques comme le chauffage isochore de plasmas denses [Dervieux *et al.*, 2015], l'accélération ionique [Raffestin *et al.*, 2021], la production de sources X par effet Bremsstrahlung [Cowan *et al.*, 2000], l'étude d'instabilités astrophysiques [Raj *et al.*, 2020], la génération d'ondes basse-fréquence [Déchard *et al.*, 2020] et bien d'autres encore. Ces systèmes en évolution rapide, et où les mécanismes collectifs jouent un rôle souvent important, sont couramment étudiés via la simulation numérique, en particulier grâce à l'utilisation des codes PIC, particulièrement bien adaptés aux échelles spatiales ($\sim$ µm jusqu'à plusieurs centaines de µm) et temporelles (de la fs jusqu'à la ps) et à la caractérisation des phénomènes cinétiques. Récemment, des efforts importants ont été fournis par la communauté pour raffiner la description des processus collisionnels dans les plasmas laser de très haute densité d'énergie [Sentoku *et al.*, 2011; Pérez *et al.*, 2012; Hoarty *et al.*, 2013; Davis & Petrov, 2014; Lobet *et al.*, 2016; Martinez *et al.*, 2018; Wu *et al.*, 2018].

[1] Chap. 7, Sec. 7.3.2.

Ces systèmes hors-équilibre sont le siège d'une physique riche où plusieurs populations électroniques vont coexister. Le champ électromagnétique intense de l'impulsion laser à la surface de la cible va entraîner, à des énergies relativistes (typiquement $\varepsilon \sim a_0 m_e c^2$ où $a_0 = [I\lambda e^2/2\pi^2\varepsilon_0 m_e^2 c^5]^{1/2}$ est l'intensité laser normalisée), l'accélération d'une fraction des électrons libres (les électrons *chauds* ou *rapides*) dans le sens du faisceau laser (avant ré-

flexion). Ce courant induit un courant de retour, constitué des électrons thermiques, dans le sens opposé, de sorte que la somme des courants tend à s'annuler. La superposition de ces deux courants peut donner lieu à la naissance d'instabilités dont certaines seront caractérisées dans ce chapitre. Les électrons chauds vont être assez énergétiques pour s'aventurer au-delà des limites de la cible, créant là encore, par effet de gaine avec les ions, de forts champs électriques. Selon leur énergie, ces électrons peuvent échapper à l'attraction des champs ou être réfléchis vers la cible. Parallèlement, les ions, également soumis à ces champs, sont accélérés vers l'extérieur de la cible, entrainant la détente de cette dernière. Ainsi, plus les électrons sont énergétiques, plus la gaine va être étendue, plus le champ électrique aux bords de la cible sera intense et donc plus sa détente sera rapide.

Outre la génération de courants électriques par accélération de charges, le laser va également pouvoir ioniser la cible par effet tunnel, générant un nombre important d'électrons secondaires. Ces derniers vont être susceptibles d'entrer en collision, élastiques ou inélastiques, avec les autres particules.

Nous nous proposons dans cette section d'effectuer plusieurs simulations PIC 1D et 2D d'interaction laser-plasma à ultra-haute intensité avec des cibles d'Aluminium. Nous avons considéré pour cela des impulsions laser femtosecondes d'intensité relativiste ($\sim 10^{18-20}$ W/cm^2) désormais accessibles dans de nombreux laboratoires. Nous activerons, ou non, les nouveaux modules de physique atomique afin d'apprécier leur effet sur diverses grandeurs physiques du problème. Plus exactement, nous avons mené à chaque fois trois simulations : une première n'incluant que les collisions coulombiennes et l'ionisation collisionnelle, que nous baptisons "CI", une deuxième où nous activons en plus l'abaissement des potentiels d'ionisation (décrite via le modèle de Stewart-Pyatt), baptisée "IPD", et enfin une troisième où le reste des processus est activé, soit la recombinaison (à trois corps et radiative), la désexcitation atomique et la photoionisation, que nous appellerons "FULL".

8.1.2 Simulations 1D

La première série de simulations décrit l'interaction entre un laser UHI d'intensité $I = 5.47 \times 10^{18}$ W/cm^2 ($a_0 = 2$) de longueur d'onde $\lambda = 1$ µm et de durée $\tau = 57\ \omega_0^{-1}$ ($\approx$ 30 fs) avec une cible d'Aluminium solide ($\rho = 2.7$ g/cm^3). Le pic laser atteint la cible à $t = 185\ \omega_0^{-1}$ ($\approx$ 145 fs). Cette cible, de largeur $L = 62.77\ c/\omega_0$ ($\approx$ 10 µm) présente également un pré-plasma exponentiel s'étendant sur le bord gauche avec une longueur de gradient $L_p = 23.23\ c/\omega_0$ ($\approx$ 3.7 µm) (le pré-plasma sert ici à modéliser une détente préliminaire de la cible due au piédestal du laser, comme souvent observé expérimentalement). La charge est initialisée à $Z^* = 3$ et la température à $T_i = T_e = 10$ eV. Nous utilisons $N_i = N_e = 100$ macro-particules par maille sur un total de 15000 mailles de taille $\Delta x = 0.02\ c/\omega_0$ ($\approx$ 3.2 nm). La coalescence est toujours activée pour les macro-ions et les macro-électrons avec un paramètre $n = 5$, une périodicité $\Delta t_{\mathrm{m}} = 20\ \Delta t$ et un nombre minimal de macro-particules par maille $N_{\min} = 150$. La simulation est lancée sur un total de 100000 pas de temps avec $\Delta t = 0.019\ \omega_0^{-1}$ ($\approx$ 10.1 as), soit une durée totale de 1900 ω_0^{-1} ($\approx$ 1 ps). Nous utilisons des conditions aux limites absorbantes en $\pm x$ pour les champs et particules.

La Fig. 8.1 représente l'évolution temporelle de la charge moyenne dans la cible (Figs. 8.1a, 8.1c et 8.1e), et celle de la température moyenne des électrons thermiques ($<$ 10 keV) (Figs. 8.1b, 8.1d et 8.1f). Ces figures regroupent les résultats pour le cas CI (Figs. 8.1a et 8.1b), le cas IPD (Figs. 8.1c et 8.1d) et le cas FULL (Figs. 8.1e et 8.1f). Concernant la charge ionique moyenne (Figs. 8.1a, Figs. 8.1c et Figs. 8.1e), on remarque sur les trois cas que son profil reste inchangé sur une durée d'environ 100 ω_0^{-1}, correspondant à la durée pendant laquelle le laser voyage du bord gauche du domaine de simulation jusqu'au bord gauche de la

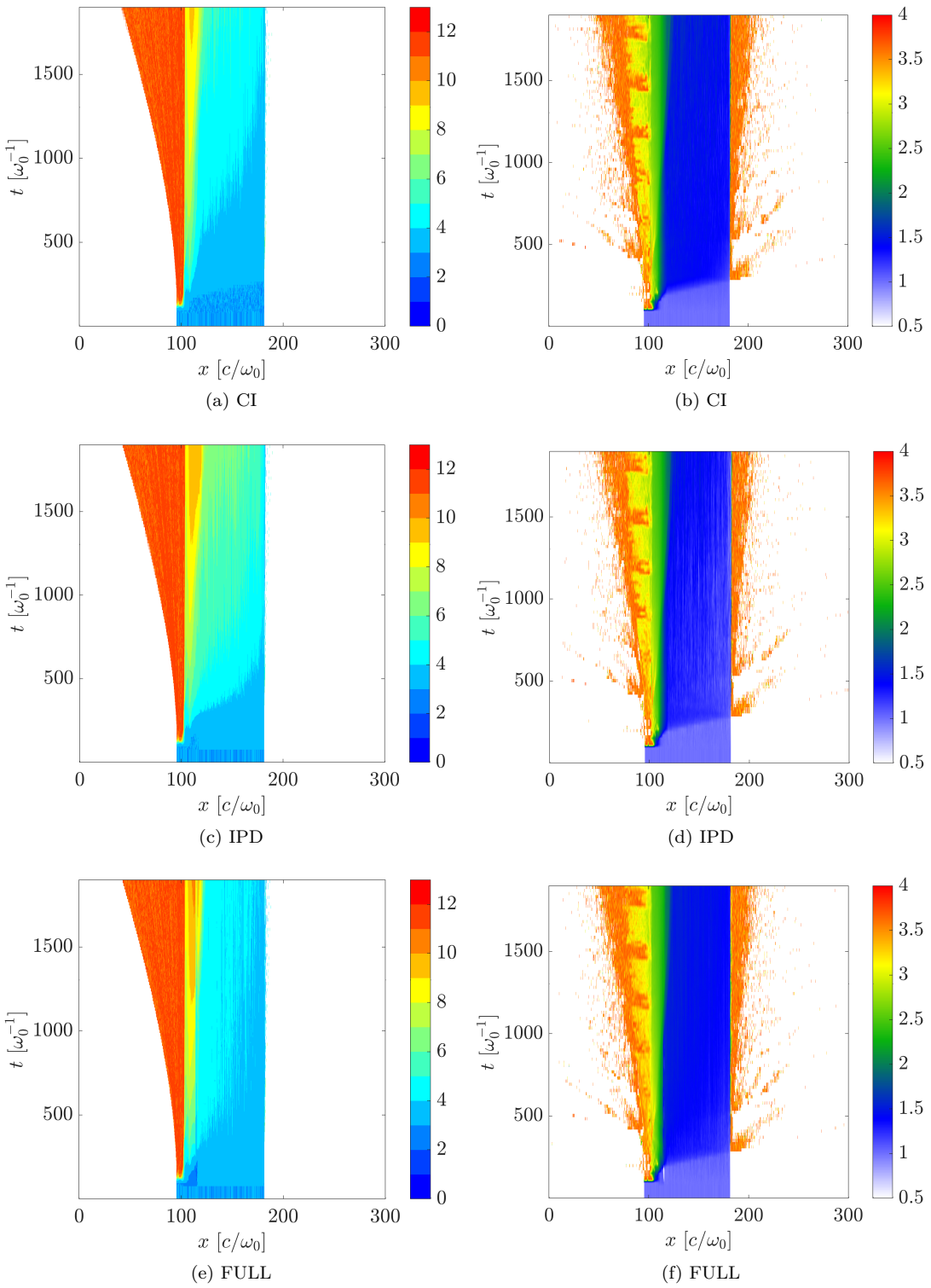


FIGURE 8.1 – Évolution temporelle du profil (a, c, e) de charge ionique moyenne et (b, d, f) de température d'électrons d'énergie inférieure à 10 keV (la carte de couleur représente le logarithme de la température électronique exprimée en eV), pour les cas (a, b) CI, (c, d) IPD et (e, f) FULL, dans une cible d'Aluminium solide irradiée par un laser de $a_0 = 2$. Le coefficient d'absorption du laser est ici de 11 %.

cible. Le degré de charge de la cible est initialisé à $Z^* = 3$ mais les fluctuations statistiques inhérentes à la méthode PIC font que certaines cellules présentent une charge moyenne légèrement inférieure à 3 (bleu foncé) quand d'autres présentent au contraire une charge moyenne légèrement supérieure à 3 (bleu plus clair), d'où la striation observée avec notre échelle de couleur (une couleur pour chaque degré de charge). Dès le début de l'interaction du laser avec le pré-plasma, on observe une ionisation importante sur le bord gauche de la cible. L'inertie des ions, résultant de leur masse importante, implique une mise en mouvement beaucoup plus tardive que pour les électrons. Ces ions, fortement dépouillés de leurs électrons, sont par la suite accélérés en $-x$ en face avant, en raison du champ électrostatique créé par le gradient de pression électronique.

Concernant le cœur de la cible, à densité solide, on observe pour chacun des cas l'augmentation progressive de la charge moyenne, plus ou moins tôt selon la position en x. On observe également sur le bord gauche de la cible (dans le pré-plasma), une zone fine (entre 10 et 20 c/ω_0) d'ionisation forte où $\langle Z^* \rangle$ peut atteindre des valeurs élevées (8, 9, 10 voir 11 pour le cas FULL) tandis que l'ionisation du cœur de la cible n'excède pas 7.

Les Figs. 8.1b, 8.1d et 8.1f représentent l'évolution de la température électronique moyenne, en ne nous intéressant qu'aux électrons thermiques, c'est-à-dire, selon notre critère, aux électrons ayant une énergie inférieure à 10 keV. Il est intéressant de regarder séparément cette population thermique puisque, du fait de sa "faible" énergie (comparativement à celle, relativiste, des électrons rapides) et sa forte densité, c'est elle qui va être au cœur des processus de physique atomique. Les profils de température sont, comme attendu, étroitement corrélés à ceux de la charge moyenne. Aux instants initiaux, avant l'arrivée du laser, la température est à l'équilibre dans la cible avec $T_i \approx T_e \approx 10$ eV. Dès la première interaction avec le laser, des électrons sont chauffés jusqu'à plusieurs keV dans le pré-plasma. Vers $t = 200\ \omega_0^{-1}$, quand cesse l'interaction de l'impulsion avec la cible, on observe une première onde de chauffage, faisant passer les électrons d'une température de 10 eV à une température d'environ 50 eV, correspondant simplement à la propagation des électrons rapides dans la cible, à une vitesse proche de c. Le chauffage de la partie solide est faible car l'impulsion laser est brève et modérément relativiste, ce qui conduit, en 1D, à une absorption de l'énergie laser modérée (mesurée ici à 11 % en comparant l'énergie électromagnétique de l'impulsion avant et après l'interaction). Dans le cœur solide de la cible, on remarque que la température varie peu, sauf dans une fine zone sur le bord gauche où la température atteint plusieurs centaines d'eV (en vert), zone qui coïncide par ailleurs avec la zone d'ionisation exacerbée, observée sur les cartes de charge ionique moyenne. Cette onde de chauffage progresse à une vitesse $6.5 \times 10^{-3}\ c$.

De part et d'autre de la cible, la majorité des électrons rapides traversant une interface sont réfléchis par le champ électrostatique créé dans le vide ; une fraction d'entre eux est néanmoins assez énergétique pour atteindre les bords du domaine de simulation (et échapper ainsi artificiellement à la réflexion). Ce phénomène est particulièrement visible quand on s'intéresse directement à l'évolution temporelle de la température des électrons chauds, représentée en Fig. 8.2, pour le cas CI, où l'on voit les allers et retours de ces électrons. Nous voyons en rouge sur cette même figure une première éjection d'électrons très chauds (avec une température de l'ordre du MeV), s'enfuir de la cible par la face avant (bord gauche sur la coupe), formant un faisceau strié : il s'agit des électrons piégés et accélérés par le champ laser réfléchi par la cible.

Cette première série de simulation avec une amplitude laser modérée ($a_0 = 2$) montre déjà quelques différences selon les processus activés. En effet, l'activation de l'IPD favorise l'ionisation du cœur de la cible avec un passage plus précoce d'un degré de charge $\langle Z^* \rangle$ de

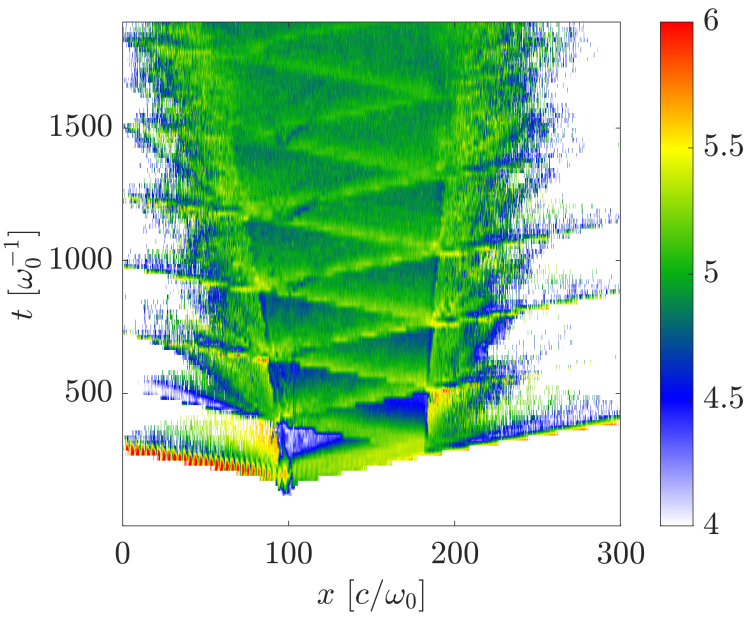
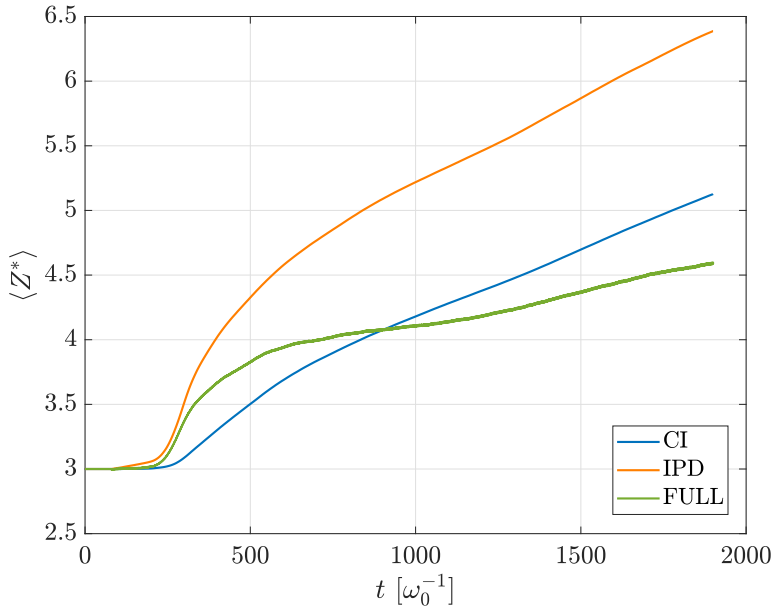


FIGURE 8.2 – Évolution temporelle du profil de température électronique pour les électrons dont l'énergie est supérieure à 10 keV (la carte de couleur représente le logarithme de la température électronique exprimée en eV). Nous distinguons les allers et retours des électrons chauds, accélérés initialement par le laser et réfléchis à chaque traversée des bords. En géométrie 1D, la barrière de potentiel finira toujours par réfléchir les électrons si on leur laisse assez de distance de propagation : ici, ceux qui semblent s'échapper sont tout simplement ceux qui ont atteint les bords de la boîte avant d'être réfléchis.

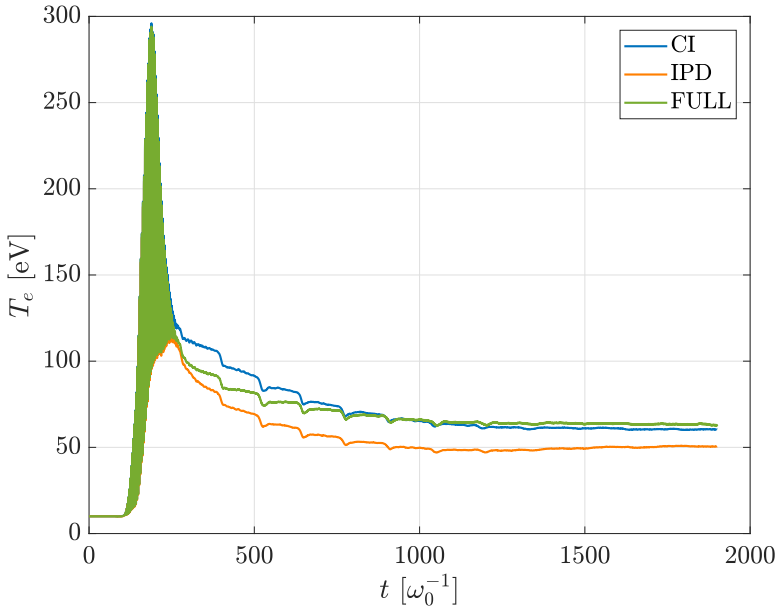
3 à 4 (Fig. 8.1c) puis l'apparition d'ions Al^{5+}, créés marginalement à la toute fin du cas CI (Fig. 8.1a). Cette ionisation accrue est simplement due à la diminution des énergies de liaison résultant de l'IPD et est également visible sur la carte de température des électrons thermiques (Fig. 8.1d) : celle-ci diminue légèrement (≤ 10 eV) à l'arrière de la cible, contrairement à ce que montre la Fig. 8.1b, où la température reste supérieure à 50 eV dans toute la cible à la fin de la simulation. Cependant, lorsque tous les processus sont activés, (Fig. 8.1e), l'effet de l'IPD semble totalement contré par la recombinaison, avec une charge ionique maximale égale à $\langle Z^* \rangle = 4$ dans le cœur de la cible. Les résultats obtenus sont alors proches de ceux du cas CI. Nous noterons tout de même que la face arrière conserve alors une charge ionique moyenne de 3 sur une épaisseur environ égale à 20 c/ω_0 (≈ 3.2 µm). Cet effet visible de la recombinaison semble se retrouver là encore au travers de la température électronique (Fig. 8.1f) où le cœur de la cible est plus chaud que pour le cas IPD car la recombinaison radiative relâche de l'énergie (l'énergie de liaison) dans le système. Dans la partie avant de la région solide, où l'on observe la propagation de l'onde de chauffage, l'ionisation, accrue lorsque l'IPD est ajoutée, l'est encore davantage quand le reste des processus est activé avec l'apparition d'Al^{11+}.

Les comportements décrits précédemment se retrouvent dans les évolutions temporelles de la charge moyenne et de la température électronique (calculée via le flux d'impulsion), respectivement intégrées sur tous les ions et électrons de la simulation, que nous avons représentées en Fig. 8.3. Nous voyons effectivement sur la Fig. 8.3a que l'activation de l'IPD tend à amplifier l'ionisation, dont il résulte une charge ionique moyenne plus élevée (courbe orange) que dans le cas CI (courbe bleue). Le cas FULL (en vert) montre, quant à lui, une ionisation plus importante dans les premiers instants de la simulation, résultat que l'on peut attribuer à l'IPD, mais affiche par la suite une charge moyenne moins grande que dans le cas CI, en raison de la recombinaison collisionnelle. Les conditions de densité et de température semblent ici favorables à une recombinaison appréciable.

La Fig. 8.3b montre une évolution initiale similaire de la température moyenne puisque le chauffage est principalement dû à l'impulsion laser, qui n'est pas affectée par les nouveaux modules. En revanche, on voit par la suite que le cas IPD affiche une température électronique moyenne moins importante que le cas CI car l'ionisation collisionnelle, qui se traduit par une



(a)



(b)

FIGURE 8.3 – Évolution temporelle de (a) la charge ionique moyenne intégrée sur l'ensemble des macro-ions et (b) de la température électronique moyenne intégrée sur l'ensemble des macro-électrons, pour $a_0 = 2$, pour les cas CI (en bleu), IPD (en orange) et FULL (en vert).

conversion d'énergie cinétique électronique en énergie de liaison, est favorisée. Le cas FULL montre quant à lui un comportement proche du cas CI car la recombinaison à trois corps se traduit à l'inverse par une conversion d'énergie de liaison en énergie cinétique électronique.

Une seconde série de simulations a été effectuée sur le modèle de la précédente (utilisant donc les mêmes paramètres physiques et numériques) mais avec cette fois une impulsion laser de plus forte intensité $I = 3.42 \times 10^{19}$ W/cm^2 ($a_0 = 5$). Les résultats sont présentés dans la Fig. 8.4. Bien que l'ionisation et le chauffage soient exacerbés en raison d'une intensité laser plus importante (et avec un coefficient d'absorption ici de 18 %), nous retrouvons globalement des comportements proches de ceux décrits précédemment, à savoir un cas IPD montrant une ionisation accrue par rapport au cas CI, à tel point que l'Aluminium n'est présent que dans son état Al^{11+} à la fin de la simulation dans le cas IPD. Là encore, cet effet est atténué quand l'ensemble des processus atomiques est activé, mais il en résulte alors néanmoins une ionisation plus élevée qu'en tenant compte uniquement de la CI. Les évolutions des températures électroniques moyennes sont ici quasi identiques. On notera tout de même un chauffage légèrement plus important dans le pré-plasma pour le cas IPD, en comparaison avec les deux autres cas.

Comme pour la série précédente, nous avons représenté en Fig. 8.5 la charge ionique et la température électronique moyenne, respectivement intégrées sur l'ensemble des ions et électrons du plasma. Nous retrouverons ici la tendance observée sur les évolutions des profils temporels, à savoir une augmentation du taux d'ionisation lorsque l'IPD est activée (courbe orange) par rapport au cas CI (courbe bleue) puis une compensation partielle de cette augmentation par la recombinaison dans le cas FULL (courbe verte). Contrairement au cas où $a_0 = 2$, ici la charge moyenne du cas FULL reste toujours supérieure à celle du cas CI : comme l'impulsion laser est plus intense, le chauffage du cœur de la cible est plus efficace et le taux de recombinaison est donc moindre (on rappelle que le taux de recombinaison diminue avec l'énergie des électrons libres). L'évolution de la température électronique est proche dans les trois cas ; des écarts apparaissent cependant après l'irradiation, les cas IPD et FULL étant légèrement moins chauds que le cas CI, en raison de l'ionisation collisionnelle qui est dans ces deux cas favorisée par l'IPD.

8.1.3 Simulations 2D

Les simulations 1D précédentes incluant tout ou une partie des processus atomiques n'ont montré le plus souvent que des différences subtiles, dues notamment à la compétition entre IPD et recombinaison. Nous pouvons légitimement nous questionner sur l'effet de ces processus dans une configuration 2D. En effet, si la configuration 1D, en confinant les électrons rapides sur le seul axe spatial, tend naturellement à surestimer le chauffage de la cible, la configuration 2D, où le laser a une tache focale finie, peut présenter des zones où le plasma reste à des températures modérées, constituant une réserve d'électrons libres susceptibles de recombiner.

Sur le modèle des simulations 1D, nous avons effectué une série de trois simulations, CI, IPD et FULL. Le domaine de simulation est de taille $L_x = 122.5\ c/\omega_0$ (≈ 19.5 µm) et $L_y = 245\ c/\omega_0$ (≈ 39 µm) avec $\Delta x = \Delta y = 0.035\ c/\omega_0$ (≈ 5.58 nm). Nous utilisons des conditions aux bords absorbantes pour les champs et particules. Le laser, dirigé vers les x croissants et focalisé sur la face avant de la cible avec une tache focale de 18.83 c/ω_0 (≈ 3 µm), est initialisé avec une intensité $I = 1.36 \times 10^{20}$ W/cm^2 ($a_0 = 10$), de longueur d'onde $\lambda = 1$ µm et une durée $\tau = 57\ \omega_0^{-1}$ (≈ 30 fs). Le pic laser atteint la surface de la cible à $t = 155\ \omega_0^{-1}$ (≈ 82 fs). Celle-ci est composée d'Aluminium à densité solide où $n_i = 54.25\ n_c \approx 6.02 \times 10^{22}$ cm^{-3} ($\rho = 2.7$ g/cm^3), de charge initiale $Z^* = 3$. Son épaisseur

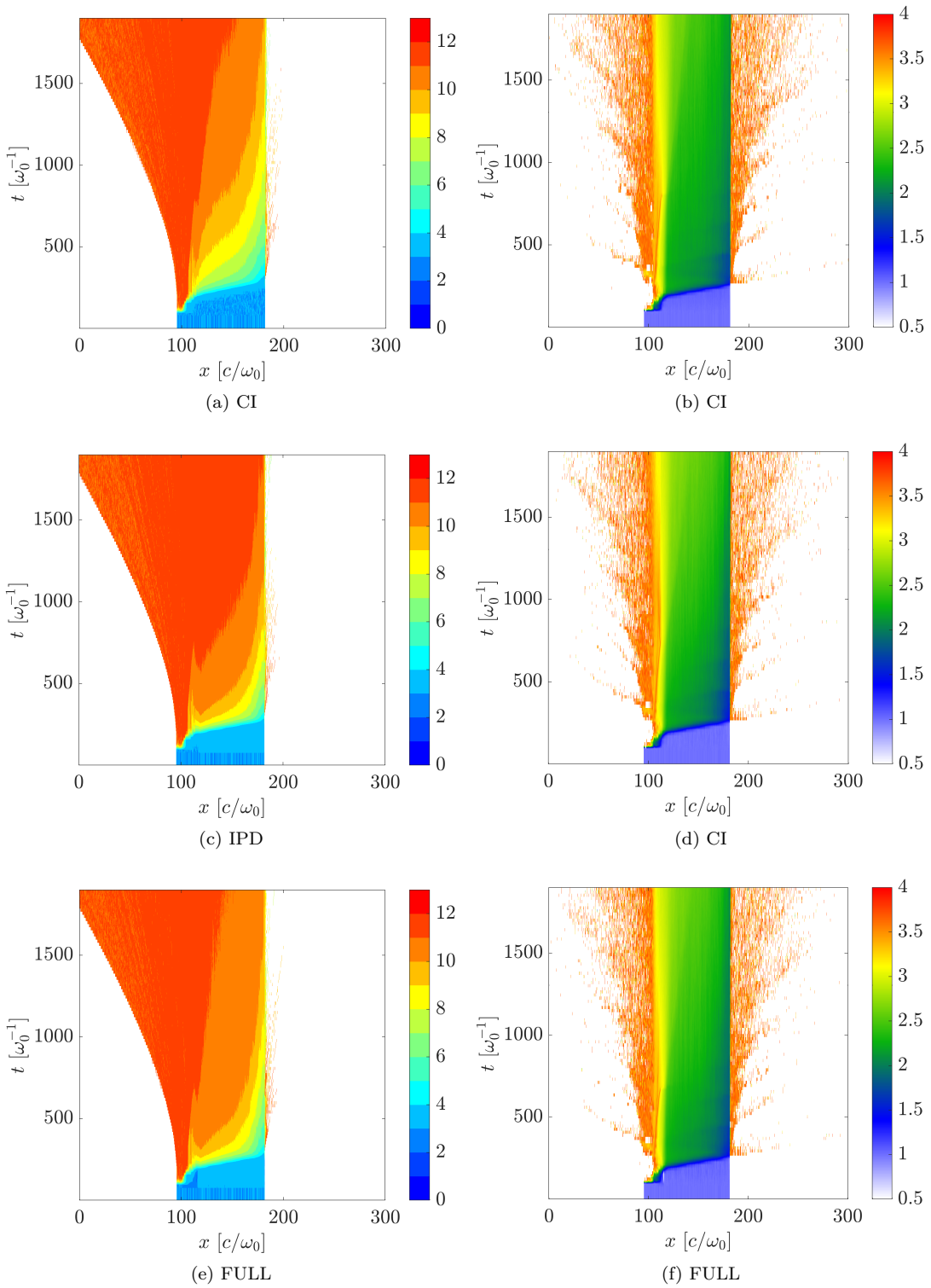
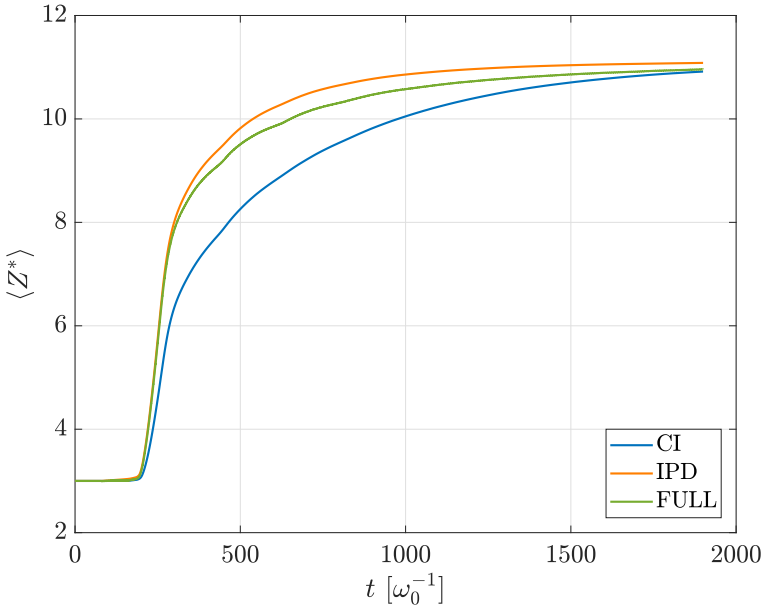
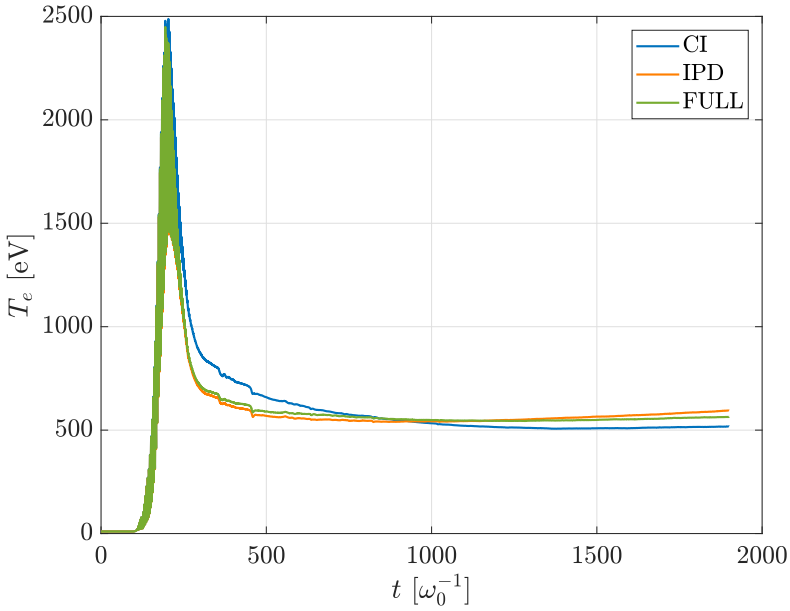


FIGURE 8.4 – Évolution temporelle du profil (a, c, e) de charge ionique moyenne et (b, d, f) de température des électrons d'énergie inférieure à 10 keV (la carte de couleur représente le logarithme de la température électronique exprimée en eV), pour les cas (a, b) CI, (c, d) IPD et (e, f) FULL, dans une cible d'Aluminium solide irradiée par un laser de $a_0 = 5$. Le coefficient d'absorption du laser est ici de 18 %.



(a)



(b)

FIGURE 8.5 – Évolution temporelle de (a) la charge ionique moyenne intégrée sur l'ensemble des macro-ions et (b) de la température électronique moyenne intégrée sur l'ensemble des macro-électrons, pour $a_0 = 5$, pour les cas CI (en bleu), IPD (en orange) et FULL (en vert).

est de 18.83 c/ω_0 ($\approx$ 3 µm) avec un pré-plasma de profil exponentiellement décroissant sur une longueur de gradient de 11.6 c/ω_0 ($\approx$ 1.85 µm). Nous utilisons $N_i = N_e = 40$ macro-particules par maille avec des paramètres de coalescence identiques pour toutes les espèces, soient $n = 4$, $\Delta t_{\mathrm{m}} = 10\ \Delta t$ avec $\Delta t = 0.0315\ \omega_0^{-1}$ ($\approx$ 16.7 as) et $N_{\min} = 70$. Comme pour les simulations 1D, le modèle utilisé pour l'IPD est le modèle de [Stewart & Pyatt Jr, 1966], le module de TBR est appelé tous les 20 pas de temps (dans le cas FULL) avec un fond électronique composé de $\max(N_e, 30)$ macro-électrons.

8.1.3.1 Dynamique de chauffage

Intéressons-nous dans un premier temps aux cartes de charge ionique moyenne représentées aux instants $t = 220.5\ \omega_0^{-1}$ ($\approx$ 117.1 fs) en Fig. 8.6 et $t = 409.5\ \omega_0^{-1}$ ($\approx$ 217.4 fs) en Fig. 8.7. Sur la Fig. 8.6, les électrons chauds ont déjà traversé la cible une première fois. On observe dans les trois cas une forte ionisation du pré-plasma, près de la tache focale en $y = 0$ avec de nombreux ions Al^{11+} et quelques ions Al^{12+} et Al^{13+}. Dans la partie solide de la cible, l'ionisation est plus modérée que dans le pré-plasma. On observe ici une différence importante entre le cas CI, où peu d'ions Al^{11+} sont présents, et les cas IPD et FULL montrant une ionisation plus intense et plus étendue. Cette ionisation accrue est, comme en 1D, le fruit de l'IPD. On remarque également dans le cas FULL la présence d'une zone étroite située dans le pré-plasma (en dehors de la tache focale) où la charge ionique moyenne est nulle. Le pré-plasma est en effet initialisé avec la même charge ionique initiale que la partie solide, mais avec un profil de densité exponentiel. Ainsi, il existe une zone du pré-plasma suffisamment dense pour autoriser la recombinaison mais trop diluée pour que l'IPD puisse aboutir au même degré de charge qu'à densité solide. Cet effet, qui n'a en fait que peu d'impact sur la dynamique du plasma, pourrait être évité en initialisant le pré-plasma avec un gradient sur la charge ionique, dépendant de la densité ionique.

La Fig. 8.7, à $t = 409.5\ \omega_0^{-1}$ montre pour les trois cas, comme attendu, une ionisation plus marquée qu'à l'instant précédent, de même que l'expansion des surfaces avant et arrière de la cible. Le cas CI montre toujours une ionisation moins importante que les cas IPD et FULL mais ces deux derniers diffèrent toutefois : le cas FULL donne lieu à une ionisation plus faible que le cas IPD, suggérant un effet de la recombinaison qui, par essence, limite l'augmentation de la charge ionique moyenne.

Les profils moyennés en y autour de l'axe laser sur l'intervalle $[-10, 10]\ c/\omega_0$ pour ces trois instants sont respectivement représentés sur les Figs. 8.8a et 8.8b. On retrouve sur ces coupes la tendance observée sur les cartes 2D et dans les simulations 1D : l'activation de l'IPD tend à favoriser l'ionisation, le cas IPD (courbe orange) affichant donc une charge moyenne plus élevée que le cas CI (courbe bleue) à l'arrière de la cible ($\langle Z^* \rangle \approx 10.9$ contre 10.1 à $t = 220.5\ \omega_0^{-1}$). La recombinaison, activée dans le cas FULL (vert), tend ici à compenser partiellement l'effet de l'IPD et il en résulte une charge moyenne intermédiaire entre les cas CI et FULL ($\langle Z^* \rangle \approx 10.6$ à $t = 220.5\ \omega_0^{-1}$).

Les Figs. 8.9 et 8.10 représentent (en échelle $\log_{10}$) les cartes de température des électrons "froids" (< 10 keV). A $t = 220.5\ \omega_0^{-1}$, le laser a fortement chauffé le pré-plasma avec l'éjection d'électrons en face avant, mais également en face arrière. Pour le cas CI (Fig. 8.9), le cœur de la cible est chauffé à une température de quelques centaines d'eV entre $y = -50\ c/\omega_0$ et $y = 50\ c/\omega_0$ et jusqu'à 1 keV en $y = 0$. A $t = 409.5\ \omega_0^{-1}$ (Fig. 8.10), davantage d'électrons libres ont été accélérés hors de la cible, en face avant et en face arrière.

Globalement, les différences de température sont ici à peine perceptibles, ce qui est confirmé sur les profils moyens représentés en Figs. 8.11a et 8.11b. Nous noterons tout de même sur ces figures que le cas FULL, intégrant tous les processus, est celui qui présente

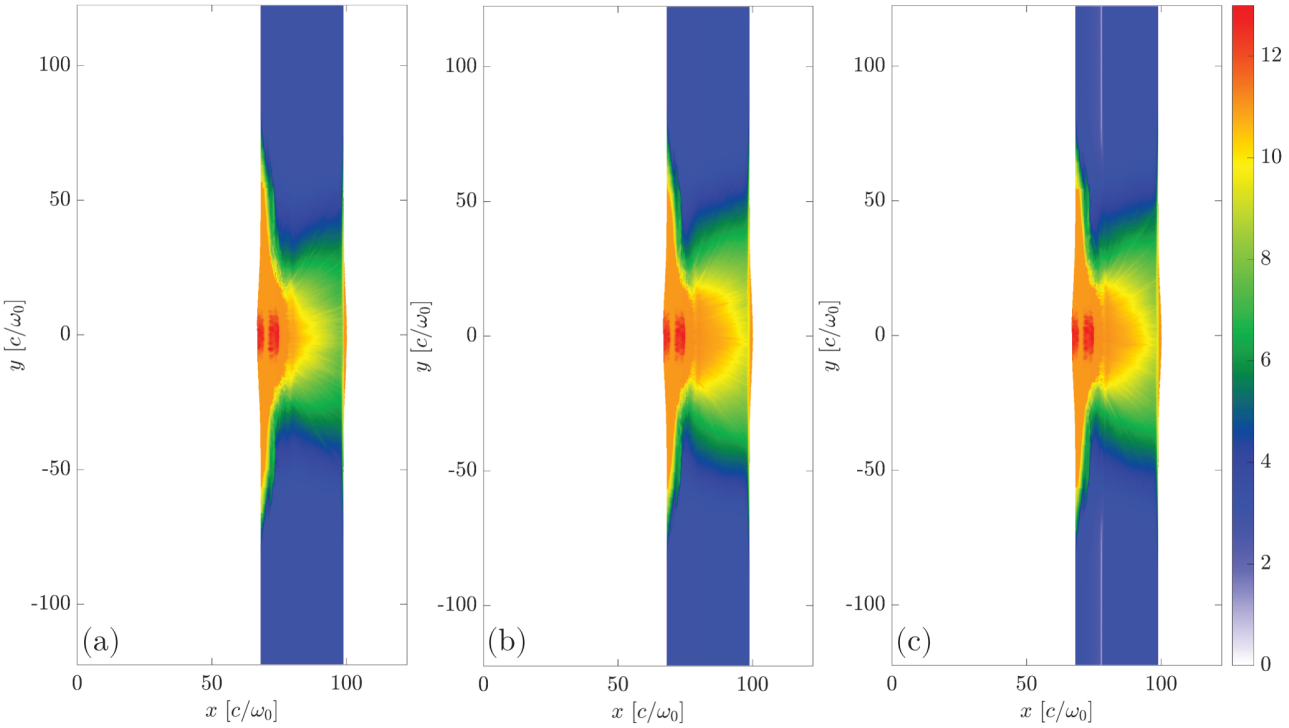


FIGURE 8.6 – Carte 2D de la charge ionique moyenne à $t = 220.5\ \omega_0^{-1}$ pour le cas (a) CI, (b) IPD et (c) FULL.

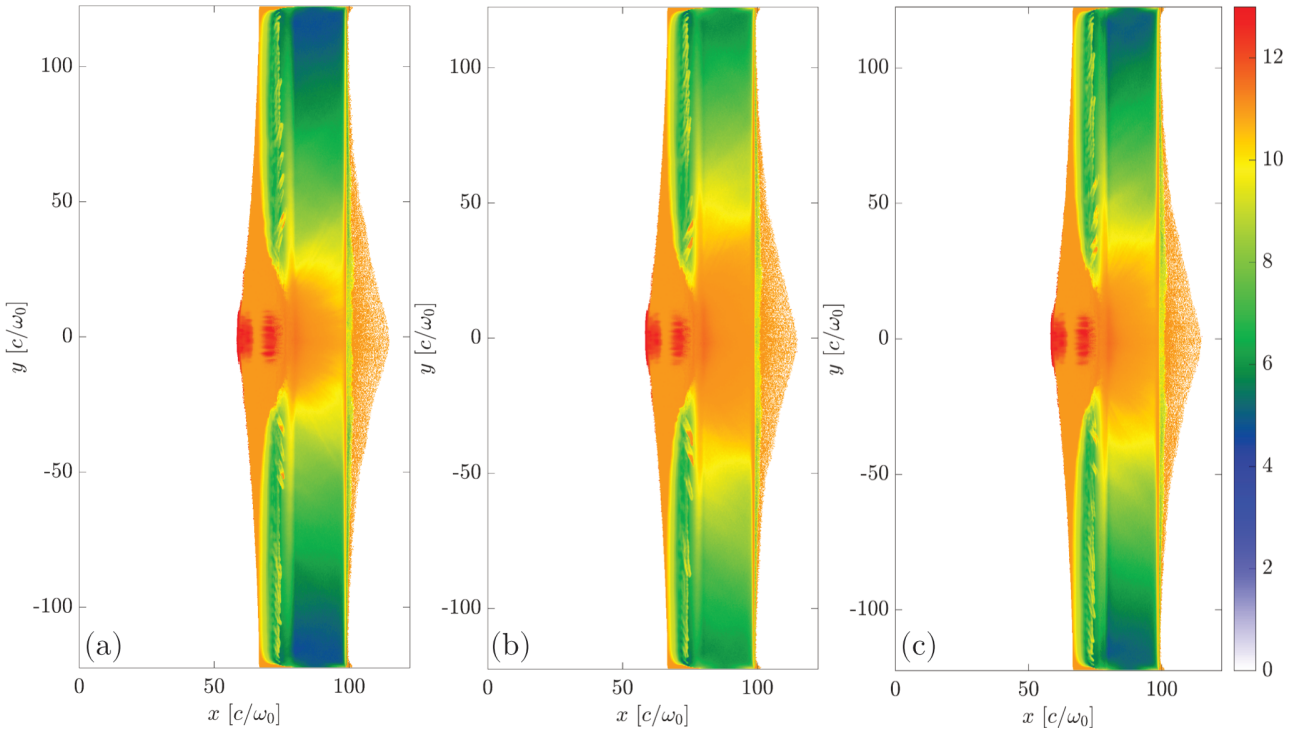
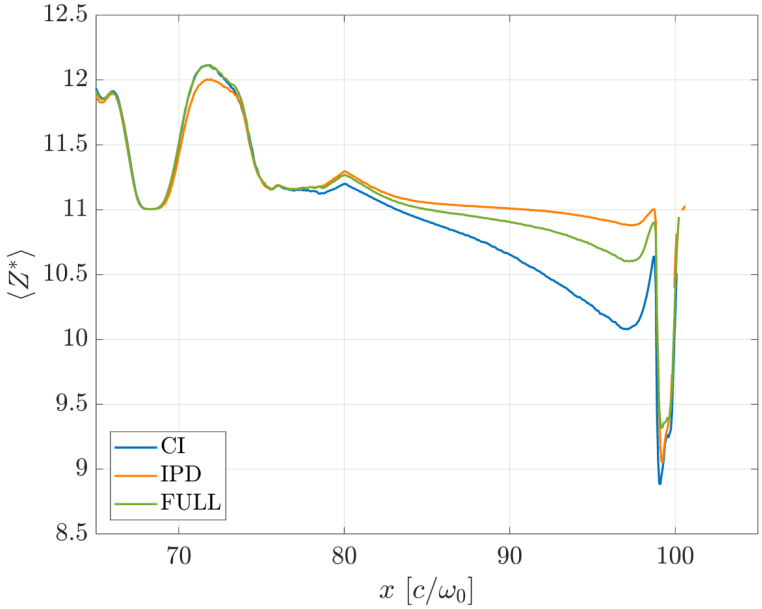
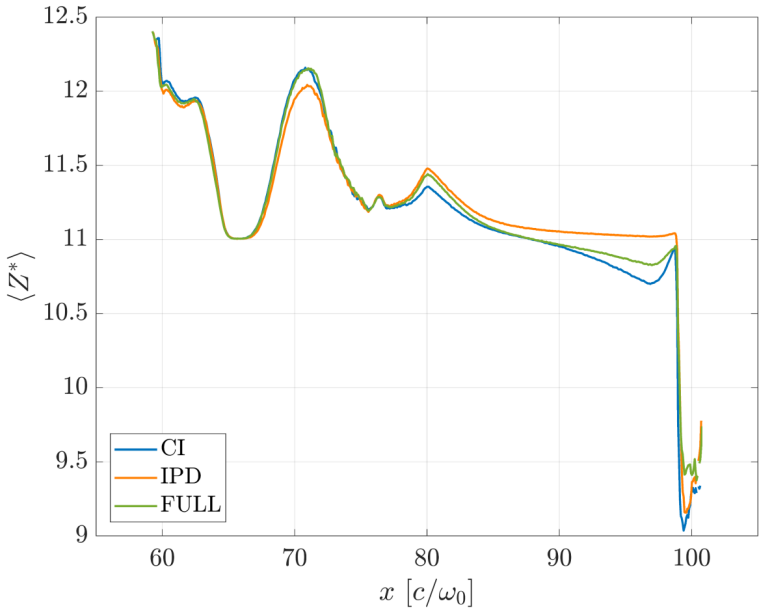


FIGURE 8.7 – Carte 2D de la charge ionique moyenne à $t = 409.5\ \omega_0^{-1}$ pour le cas (a) CI, (b) IPD et (c) FULL.



(a)



(b)

FIGURE 8.8 – Profils spatiaux longitudinaux moyennés entre $y = -10\ c/\omega_0$ et $y = -10\ c/\omega_0$ de la charge ionique moyenne à (a) $t = 220.5\ \omega_0^{-1}$ et (b) $t = 409.5\ \omega_0^{-1}$. Le cas CI est représenté par les courbes bleues, le cas IPD par les courbes oranges et le cas FULL par les courbes vertes.

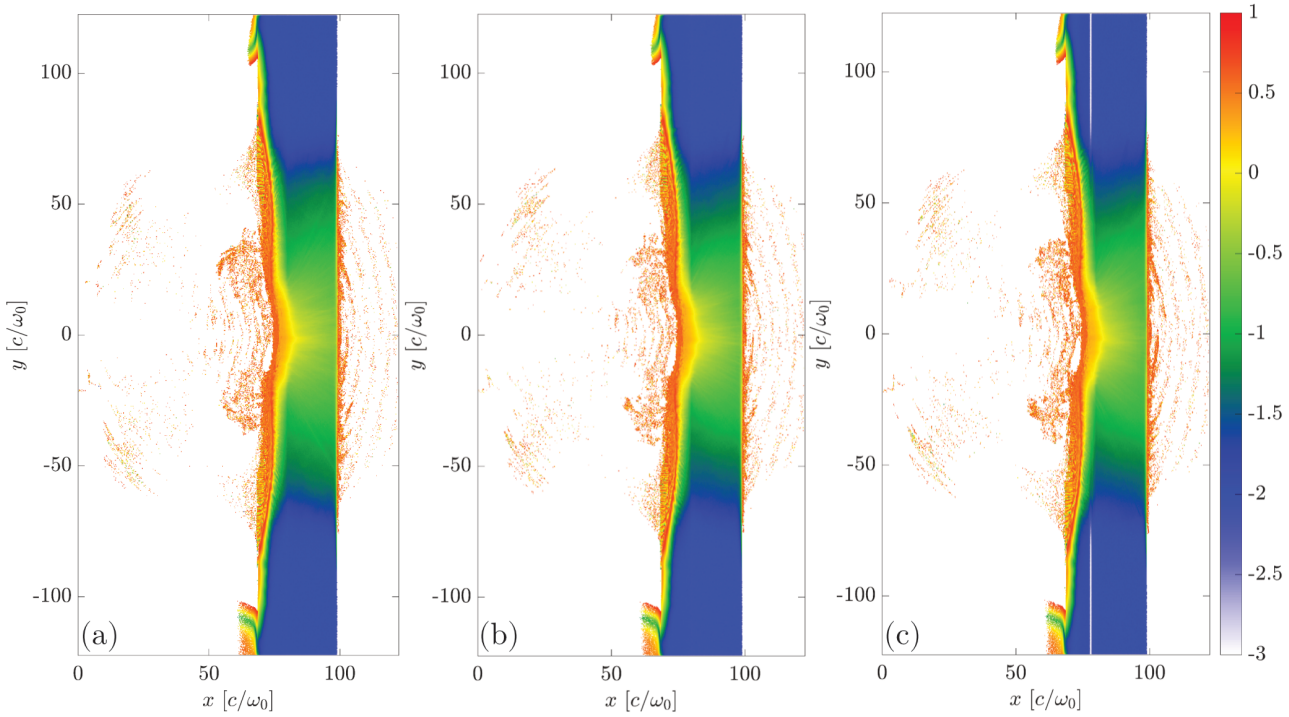


FIGURE 8.9 – Carte 2D de la température des électrons d'énergie inférieure à 10 keV, à $t = 220.5\ \omega_0^{-1}$ pour le cas (a) CI, (b) IPD et (c) FULL. La carte de couleur représente le logarithme de la température exprimée en keV.

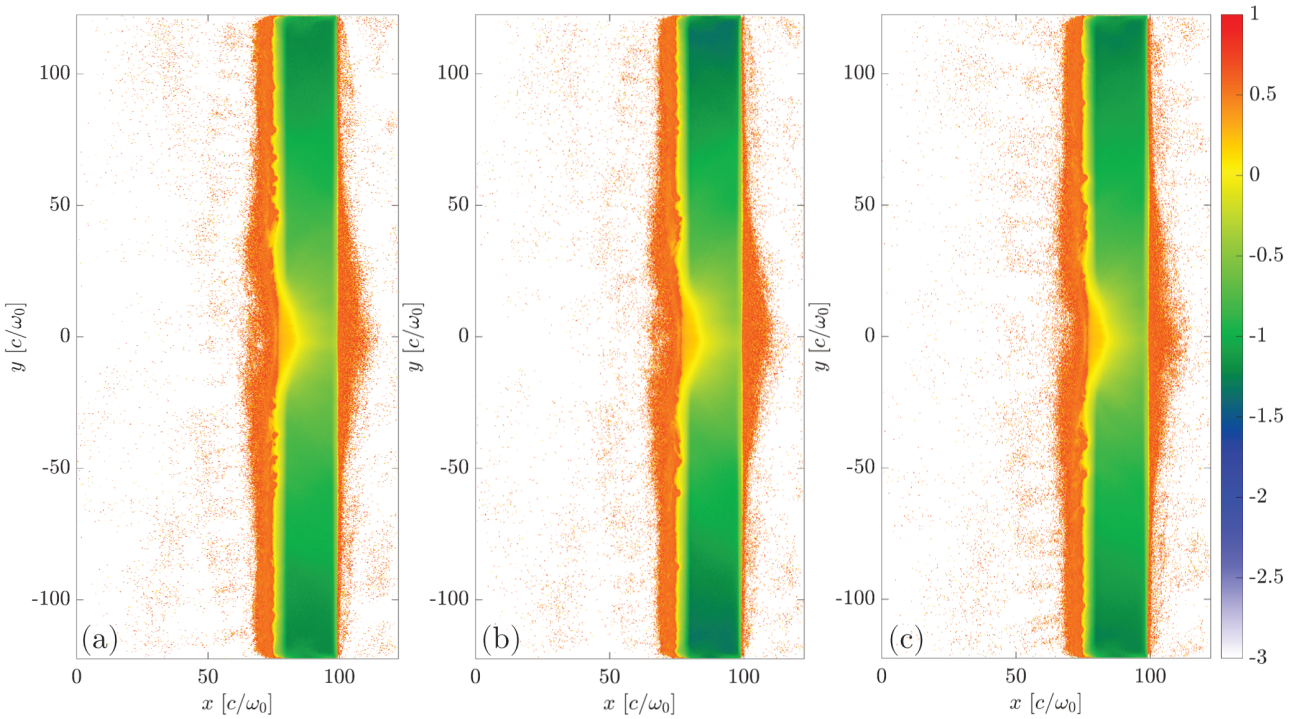


FIGURE 8.10 – Carte 2D de la température des électrons d'énergie inférieure à 10 keV, à $t = 409.5\ \omega_0^{-1}$ pour le cas (a) CI, (b) IPD et (c) FULL. La carte de couleur représente le logarithme de la température exprimée en keV.

à chaque fois la température la plus faible, en particulier dans la zone arrière de la cible qui affiche une température électronique $T_e \approx 220$ eV contre $T_e \approx 300$ eV dans le cas CI à $t = 220.5\ \omega_0^{-1}$. Si la différence entre ces profils s'amenuise à $t = 409.5\ \omega_0^{-1}$, on remarque néanmoins que la température électronique du cas IPD est alors devenue très légèrement supérieure à celle du cas CI, ainsi qu'une différence de plusieurs dizaines d'eV en face arrière entre le cas IPD et le cas FULL.

8.1.3.2 Génération de champs quasi statiques

Les forts courants électroniques résultant de l'irradiation laser sont une source de champs électroniques et magnétique quasi statiques (comparativement à l'oscillation rapide du champ laser) dans la cible [Robinson *et al.*, 2014]. Nous avons représenté sur la Fig. 8.12 les champs quasi statiques (moyennés sur la période laser et exprimés en $m_e c\omega_0/e$) $\langle E_x \rangle$ et $\langle E_y \rangle$ à $t = 189\ \omega_0^{-1}$, lorsque le champ électrique est maximum (après la première traversée de la cible par les électrons rapide) et le champ $\langle B_z \rangle$ (exprimé en $m_e\omega_0/e$) à $t = 409.5\ \omega_0^{-1}$, dont l'intensité croît durant la simulation. Nous observons une intensification de ces champs lorsque l'ensemble des processus est activé. Plus précisément, la prise en compte de l'IPD fait croître le champ électrostatique de $\langle E_x \rangle_{\max} \approx 6.4 \times 10^9$ V/m à $\langle E_x \rangle_{\max} \approx 9.6 \times 10^9$ V/m près de la face arrière. La différence est encore plus marquée pour le champ magnétostatique $\langle B_z \rangle$ (Figs. 8.12g, 8.12h et 8.12i) : sa distribution spatiale présente de fortes modulations transverses, conséquence de l'instabilité de filamentation déclenchée par les électrons rapides [Gremillet *et al.*, 2002], dont l'amplitude passe de $\langle B_z \rangle_{\max} \approx 440$ T pour le cas IPD et CI à $\langle B_z \rangle_{\max} \approx 963$ T pour le cas FULL. Cette observation est confirmée par la comparaison des coupes transverses de $\langle B_z \rangle$ en $x = 95\ c/\omega_0$.

Dans un plasma dense et collisionnel, le taux de croissance de l'instabilité de filamentation croît avec la résistivité du plasma [Gremillet *et al.*, 2002; Robinson *et al.*, 2014]. Or, les Figs. 8.8 et 8.11 ont permis de constater que le cas intégrant tous les nouveaux processus atomiques (FULL) conjuguait en face arrière une charge ionique moyenne plus élevée et une température électronique plus faible que le cas CI. En faisant l'hypothèse d'un régime de Spitzer (variable à densité solide pour une température des électrons thermiques $\geq 50 - 100$ eV), la résistivité électrique du plasma varie selon $\eta \propto \langle Z^* \rangle / T_e^{3/2}$, indiquant que le cas FULL présente une résistivité plus importante que le cas CI. L'équation de génération du champ magnétique dépend du courant électrique et de la résistivité tel que [Gremillet *et al.*, 2002]

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \boldsymbol{\nabla} \wedge \eta \mathbf{j}_f - \boldsymbol{\nabla} \wedge \left(\frac{\eta}{\mu_0} \boldsymbol{\nabla} \wedge \mathbf{B} \right) , \tag{8.1}$$

où $\boldsymbol{\nabla} \wedge \eta \mathbf{j}_f$ est un terme source avec $\mathbf{j}_f$ le courant d'électrons rapides et $-\boldsymbol{\nabla} \wedge (\eta/\mu_0 \boldsymbol{\nabla} \wedge \mathbf{B})$ un terme de diffusion résistive. Ainsi, une différence dans la résistivité devrait normalement conduire à une différence visible au niveau des champs, en particulier pour la face arrière, ce que nous observons effectivement pour la filamentation magnétique au cœur de la cible, (Figs. 8.12i et 8.13), qui semble plus intense et collimatée. La Fig. 8.13 montre également que la largeur des filaments magnétiques reste relativement constante entre les différents cas avec $\langle L_f \rangle \approx 2.2\ c/\omega_0 \approx 0.35$ µm.

Une autre hypothèse est que cette filamentation accrue dans le cas FULL serait en fait le résultat d'un plus fort courant des électrons rapides aux premiers instants de la simulation (avant que leur réflexion en face arrière n'en atténue le courant net). On voit cependant sur la Fig. 8.15 que les trois flux d'électrons rapides (> 100 keV) représentés ici à $t = 157.5\ \omega_0^{-1}$ sont quasi identiques. Comme évoqué précédemment, le courant d'électrons rapides produit

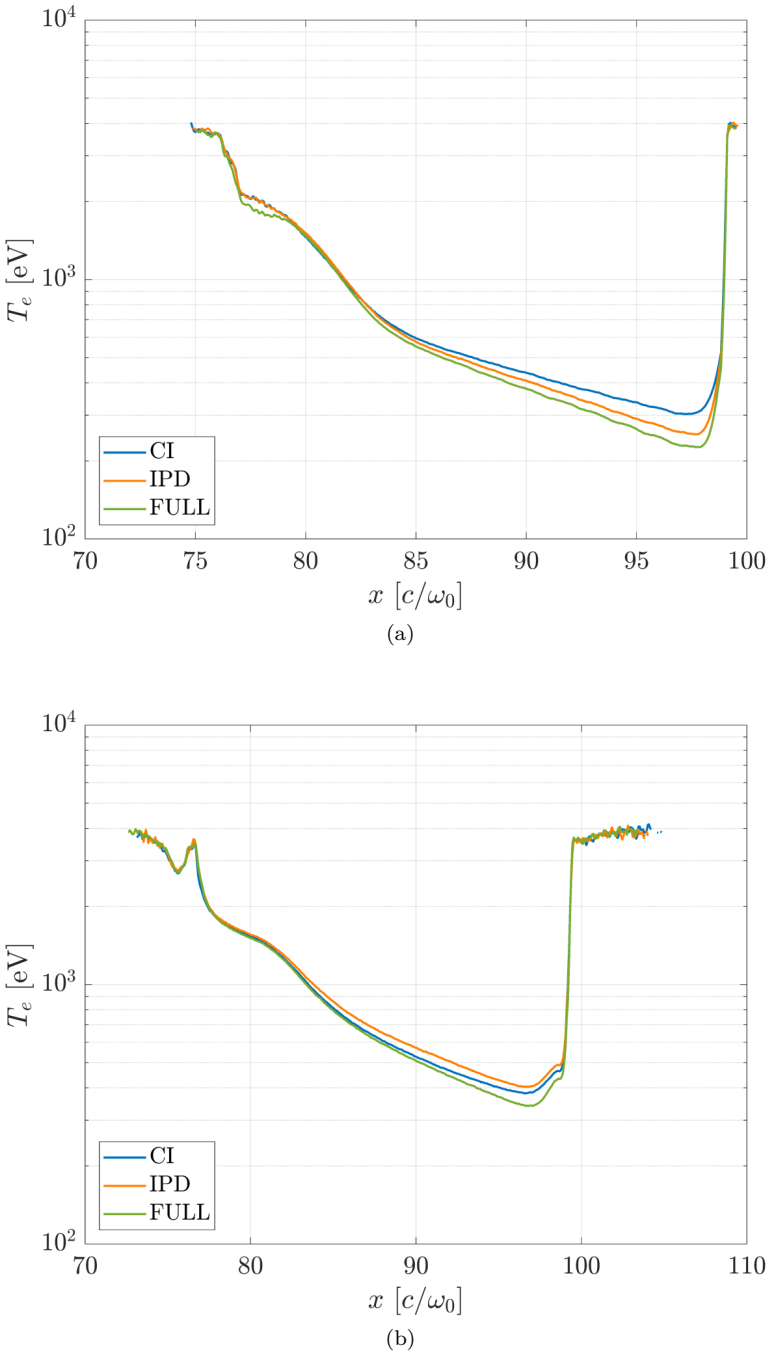
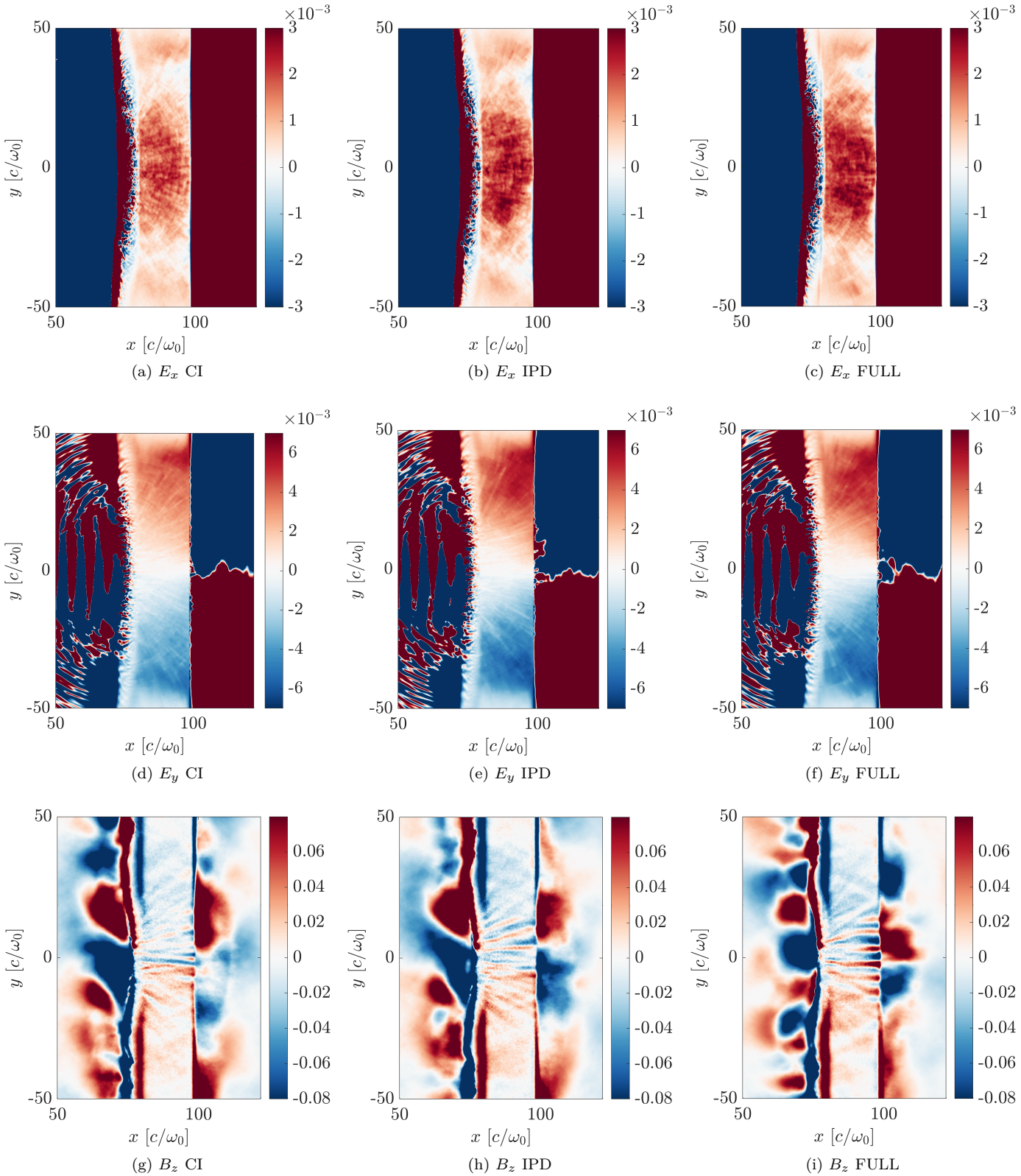


FIGURE 8.11 – Profils spatiaux longitudinaux moyennés entre $y = -10\ c/\omega_0$ et $y = -10\ c/\omega_0$ de la température des électrons d'énergie inférieure à 10 keV, à (a) $t = 220.5\ \omega_0^{-1}$ et (b) $t = 409.5\ \omega_0^{-1}$. Le cas CI est représenté par les courbes bleues, le cas IPD par les courbes oranges et le cas FULL par les courbes vertes.



(a) E_x CI (b) E_x IPD (c) E_x FULL

(d) E_y CI (e) E_y IPD (f) E_y FULL

(g) B_z CI (h) B_z IPD (i) B_z FULL

FIGURE 8.12 – Cartes 2D (a, b, c) des champs électriques quasi statiques (normalisés par $m_e c\omega_0/e$) $\langle E_x \rangle$ à $t = 189\ \omega_0^{-1}$, (d, e, f) et $\langle E_y \rangle$ à $t = 189\ \omega_0^{-1}$, et (g, h, i) magnétostatique $\langle B_z \rangle$ (normalisé par $m_e\omega_0/c$) à $t = 409.5\ \omega_0^{-1}$ pour les cas (a, d, g) CI, (b, e, h) IPD et (c, f, i) FULL. Tous les champs sont moyennés sur une période laser.

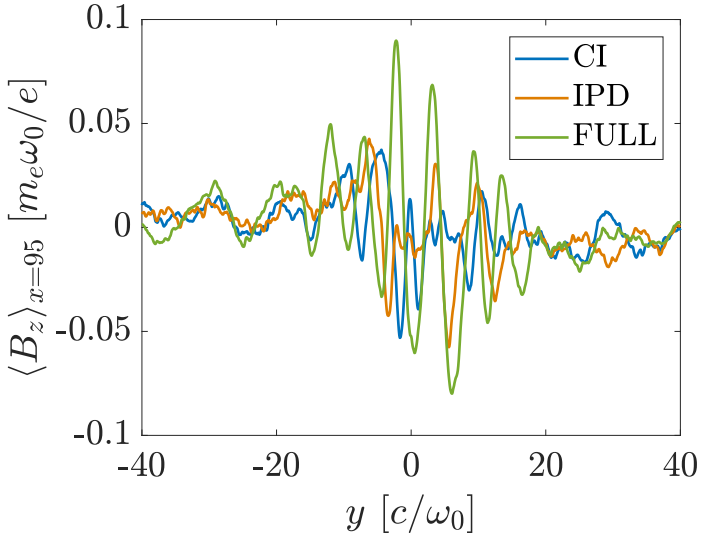


FIGURE 8.13 – Coupes longitudinales du champ magnétique moyen $\langle B_z \rangle$ (intégré sur une période laser) en $x = 95$ c/ω_0 à $t = 409.5$ ω_0^{-1} pour le cas CI (courbe bleue), le cas IPD (courbe orange) et le cas FULL (courbe verte).

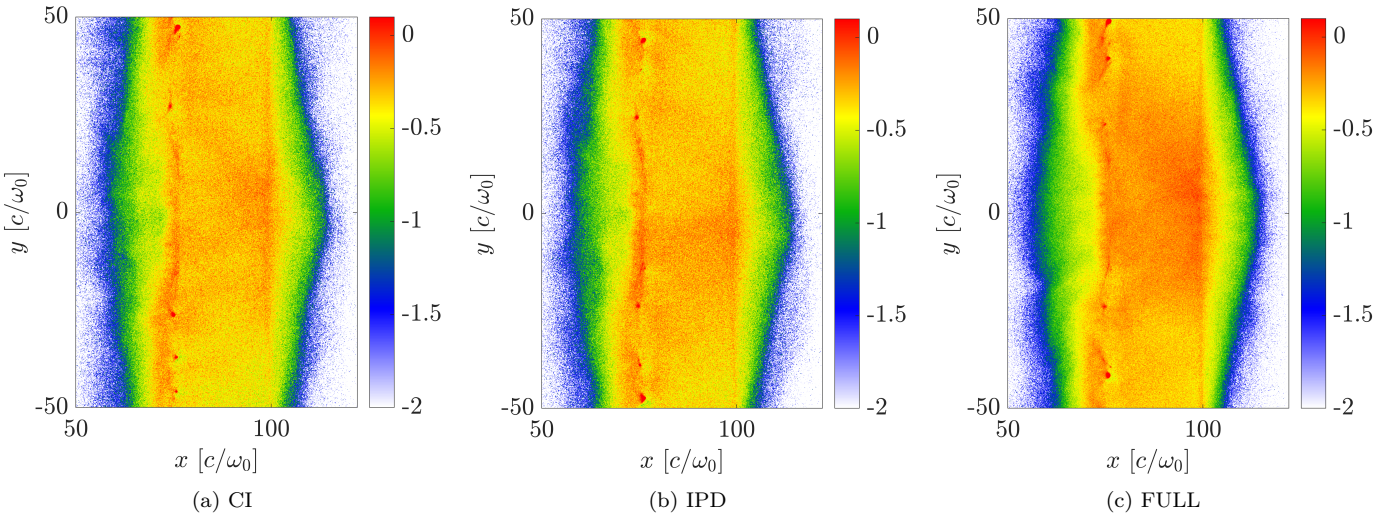


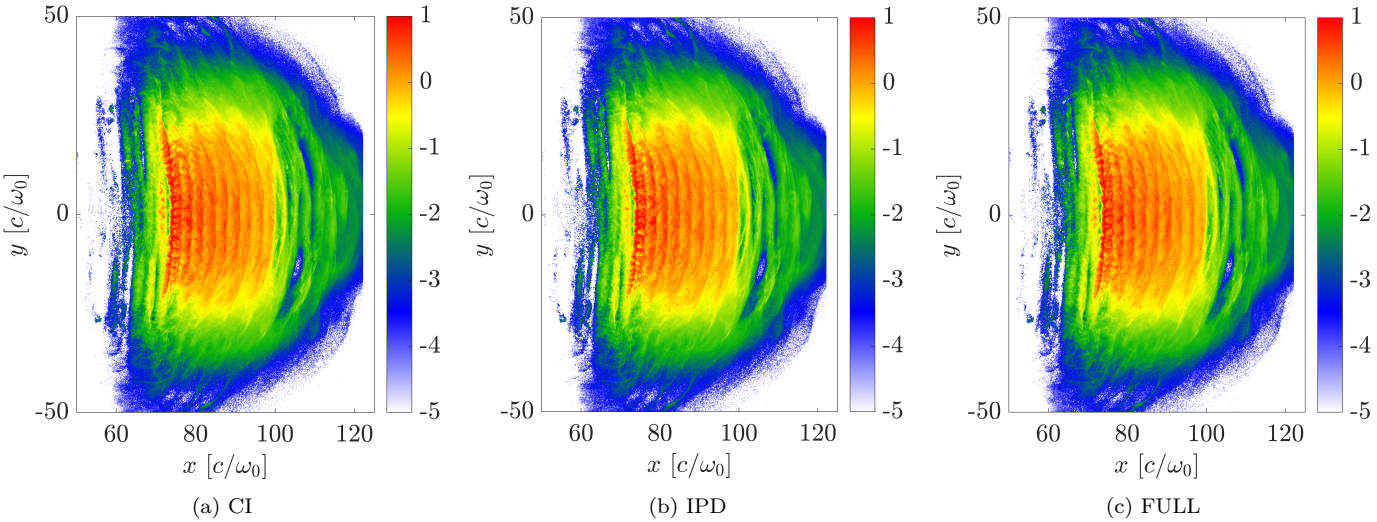
FIGURE 8.14 – Carte 2D de la densité électronique (en échelle $\log_{10}$ en unité de n_c) pour des particules dont l'énergie est supérieure à 100 keV, à $t = 409.5$ ω_0^{-1} pour les cas (a) CI, (b) IPD et (c) FULL.

par le laser n'est que très faiblement impacté par les nouveaux processus puisqu'il est le résultat de l'ionisation par champ de CALDER [Nuter *et al.*, 2011]. La première hypothèse concernant l'effet d'une plus forte résistivité sur l'instabilité de filamentation semble donc ici de rigueur.

L'intensification des filaments magnétiques se traduit également par une augmentation de la densité des électrons rapides dans la cible, qui se retrouve confinés plus efficacement. La Fig. 8.14 représente la densité des électrons d'énergie supérieure à 100 keV : cette densité atteint des valeurs plus élevées lorsque tous les processus atomiques sont décrits ($n_e \approx 0.5 - 1$ n_c alors).

8.1.4 Conclusion

Dans cette première application, nous avons simulé en 1D et 2D l'interaction entre un laser UHI d'impulsion ultra-courte (30 fs) avec des cibles d'Aluminium solide. Elles ont été



(a) CI (b) IPD (c) FULL

FIGURE 8.15 – Carte 2D du flux électronique ($n_e c$) pour des particules dont l'énergie est supérieure à 100 keV et de vitesse positive, à $t = 157.5\ \omega_0^{-1}$ en échelle $\log_{10}$ pour les cas (a) CI, (b) IPD et (c) FULL.

l'occasion d'apprécier la dynamique du chauffage de la cible par l'impulsion laser (progressant de la face irradiée de la cible jusqu'à la face arrière), avec la création d'un courant d'électrons rapides, neutralisé par un courant de retour porté par les électrons thermiques. Nous avons pu quantifier l'évolution du chauffage des électrons thermiques, ces derniers atteignant généralement une température comprise entre quelques dizaines d'eV et plusieurs centaines d'eV en fonction de l'intensité du laser, ainsi que l'évolution de la charge ionique moyenne, étroitement corrélée à la température régnant dans la cible. Nous avons également mesuré des valeurs typiques de champs quasi statiques apparaissant dans ces systèmes, avec des champs électrostatiques de l'ordre de 10^{9-10} V/m et des champs magnétostatiques de l'ordre de $100 - 1000$ T.

Si les nouveaux processus de physique atomique semblent montrer au premier abord un effet modéré sur les grandeurs macroscopiques tels que la charge ionique moyenne ou la température électronique, nous avons vu grâce aux simulations 2D que des différences parfois modestes pouvaient impacter significativement la structure des champs, ce qui a été particulièrement le cas dans notre exemple pour la composante B_z du champ magnétique, avec une intensification du phénomène de filamentation magnétique, résultant de l'interaction des différents courants électroniques dans la cible.

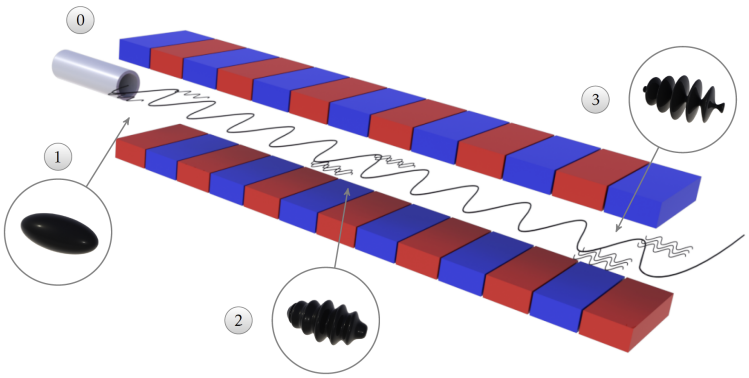


FIGURE 8.16 – Principe de fonctionnement d'un XFEL : (0) un faisceau électronique est accéléré à des énergies de l'ordre du GeV et comprimé jusqu'à une durée d'impulsion de quelques dizaines de fs. (1) Il est envoyé dans un onduleur qu'il va parcourir avec une trajectoire sinusoïdale. (2) A chaque ondulation, le faisceau électronique produit, par effet synchrotron, un faisceau photonique. (3) Ce faisceau photonique va, par interaction continue avec le faisceau électronique, devenir cohérent. Crédits : Luli-papd.

8.2 Interaction XFEL-solide

8.2.1 Introduction

Outre leur effet sur la dynamique du plasma, les processus atomiques et radiatifs considérés dans cette thèse permettent d'envisager de nouvelles sortes d'interactions photon-matière, telle celle entre un intense faisceau X, issu d'un laser à électrons libres (XFEL) et une cible solide.

Historiquement, l'émergence des XFELs est relativement récente puisque les premières installations sont apparues au début des années 2000 aux États-Unis, au laboratoire SLAC de Stanford avec le LCLS [Arthur *et al.*, 2007], suivie de près par l'accélérateur japonais SACLA [Yabashi *et al.*, 2013] dans la ville d'Harima, mis en service en 2011, puis du XFEL européen [Hüning *et al.*, 2013], à Hambourg en Allemagne en 2016. Le fonctionnement de ces lasers est, dans le principe, simple à décrire : un faisceau d'électrons libres est accéléré linéairement grâce à des cavités supra-conductrices sur une longue distance, généralement de l'ordre de plusieurs kilomètres, permettant aux électrons d'atteindre une énergie de l'ordre du GeV. Le faisceau de quelques dizaines de fs de durée est ensuite introduit dans un onduleur formé par une alternance d'aimants de sorte que le champ magnétique produit impose au faisceau une trajectoire sinusoïdale. À chaque ondulation, le faisceau émet, par effet synchrotron, une impulsion photonique avec une énergie de l'ordre du keV. A mesure que le faisceau progresse dans l'onduleur, l'impulsion photonique s'intensifie et, par interaction avec le faisceau électronique, devient cohérente (monochromatique). Les électrons sont par la suite déviés à la sortie de l'onduleur et le flash X est envoyé sur l'échantillon de matière à sonder, qui sera dans notre cas une cible solide. Ces étapes sont schématisées dans la Fig. 8.16.

Le faisceau photonique ainsi produit peut atteindre des intensités de l'ordre de 10^{17} à 10^{20} W/cm^2 avec des durées d'impulsion de quelques fs à la centaine de fs, soit des valeurs comparables à celles atteintes par les lasers optiques. Comme pour ces derniers, les XFELs se prêtent donc à la création et au diagnostic d'états exotiques de la matière, caractérisés par des densités d'énergie extrêmes (densité solide, température > 100 eV) et une dynamique ultra-rapide [Hau-Riege *et al.*, 2012]. Leur domaine d'application s'étend également à l'étude des réactions chimiques [Khakhulin *et al.*, 2020] ou à la caractérisation de structures biologiques [Liu & Spence, 2016], etc.

Dans une simulation PIC, le faisceau XFEL, caractérisé par sa durée, son profil spatio-temporel, son intensité et énergie photonique peut être modélisé par un faisceau de macro-photons interagissant avec la cible via le processus de photoionisation nouvellement implémenté (la diffusion Compton sur les électrons, dont les effets ne sont visibles que pour de très fortes densités photoniques, ne sera pas considérée ici). D'autres processus, tels que le Bremsstrahlung inverse, peuvent avoir un impact non négligeable dans ce genre d'interaction.

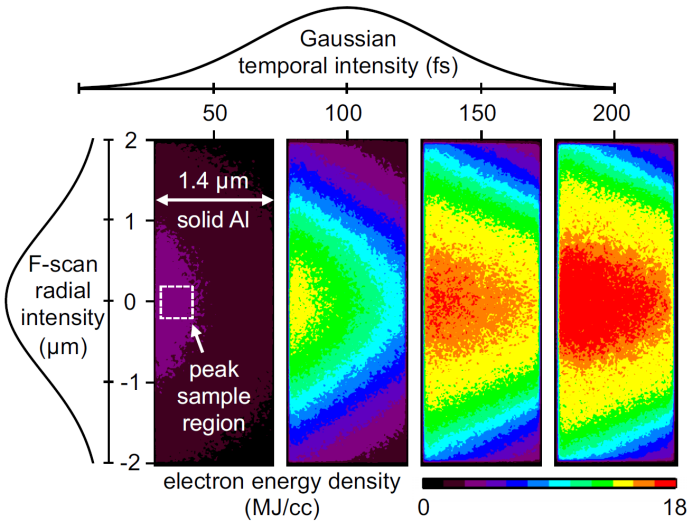


FIGURE 8.17 – Figure issue de [Royle *et al.*, 2017] présentant le profil spatio-temporel du faisceau X utilisé, ainsi que le chauffage de la cible qu'il entraîne. Le carré blanc en trait pointillé représente la zone de diagnostic, également utilisée dans les simulations CALDER.

Par manque de temps, ce processus n'a pas été implémenté dans le code PIC mais nous quantifierons néanmoins son effet sur le chauffage de la cible dans nos conditions d'interaction.

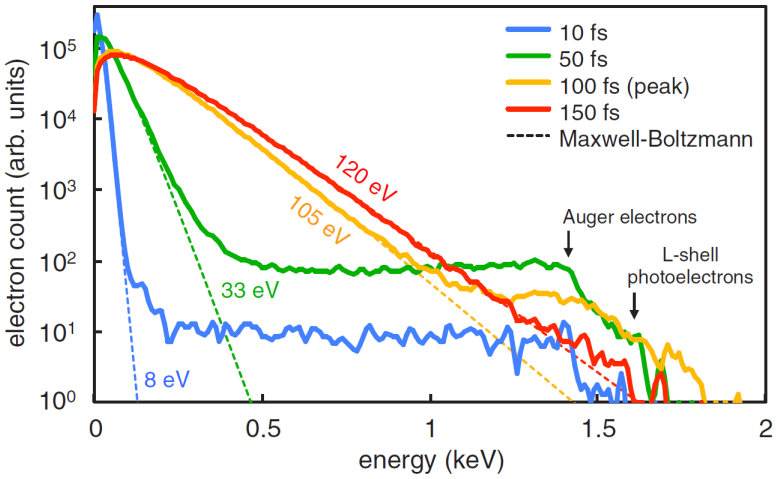
La photoionisation, permettant la production de lacunes électroniques sur les ions, principalement en couche interne, entraînera la génération de photo-électrons d'énergie $h\nu - B_k$ mais aussi d'électrons Auger, issus de la désexcitation atomique permise par la lacune, dont nous préciserons l'énergie. Ces deux processus constituent les deux sources de chauffage du plasma et un des objectifs de l'étude qui suit sera d'estimer, selon le régime d'intensité et d'énergie du faisceau, leur importance relative.

8.2.2 Irradiation X d'une cible d'Aluminium solide, comparaisons avec le code PICLS

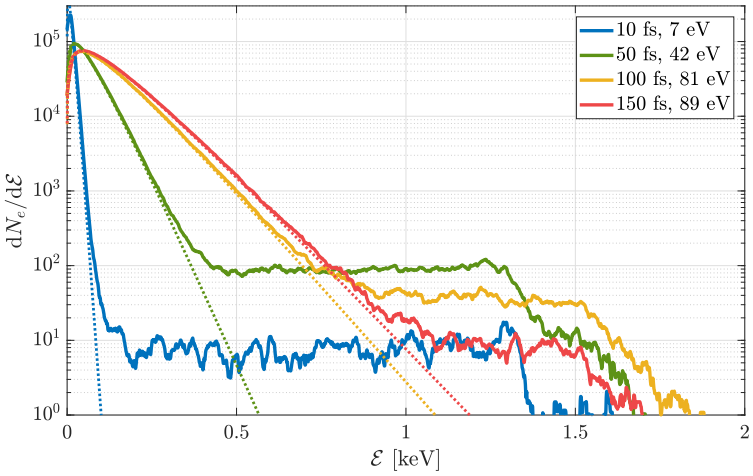
Le code PICLS semble aujourd'hui le seul code PIC connu en mesure de décrire l'interaction entre un faisceau de photons X avec une cible solide, car il inclut un nombre important de processus physiques, dont deux importants pour cette interaction à savoir la photoionisation et la désexcitation atomique (suite à la création de lacunes électroniques en couche K). Avec ce code, [Royle *et al.*, 2017] présentent des travaux pionniers en la matière, où est simulée la dynamique du chauffage d'une cible solide par interaction avec un intense faisceau X. Nous tentons dans cette section de reproduire leurs résultats avec le code CALDER.

Le faisceau X est initialisé avec une intensité $I = 1.36 \times 10^{17}$ W/cm^2, une énergie photonique $h\nu = 1700$ eV et la cible est constituée d'Aluminium solide ($\rho = 2.7$ g/cm^3). Ces conditions sont inspirées d'une expérience menée sur le LCLS (SLAC), décrite dans [Vinko *et al.*, 2012]. Le profil temporel (en x) du faisceau est gaussien, de largeur à mi-hauteur égale à 80 fs et son profil transverse est tiré de [Chalupskỳ *et al.*, 2010]. Pour simplifier, nous utilisons pour les simulations CALDER 2D un profil gaussien en y, de largeur à mi-hauteur égale à 2 µm. La cible est initialisée à $T_i = T_e = 5$ eV, et avec une charge $Z^* = 3$. Elle s'étend sur une longueur de 1.4 µm en x et de 4 µm en y. Ces paramètres sont résumés dans la Fig. 8.17 issue de [Royle *et al.*, 2017].

Les simulations CALDER emploient un domaine de simulation 2D avec des conditions aux bords absorbantes en $\pm x$ et réinjectantes en $\pm y$, de tailles $L_x = 2$ µm et $L_y = 4$ µm, constitué de 500 mailles en x de taille $\Delta x = 4$ nm et de 1000 mailles en y de taille $\Delta y = 4$ nm. La simulation est menée sur une durée totale de 250 fs avec un pas de temps $\Delta t = 5.31$ as.



(a) Picls



(b) Calder

Figure 8.18 – Comparaison entre les spectres en énergie électronique issus de (a) Picls [Royle *et al.*, 2017] et (b) Calder, pour différents instants : $t = 10$ fs (en bleu), $t = 50$ fs (en vert), $t = 100$ fs (en jaune) correspondant au pic laser, et $t = 150$ fs (en rouge).

Nous initialisons $N_i = N_e = 50$ macro-particules par maille avec un paramètre de coalescence $n = 4$, une période d'appel $\Delta t_{\mathrm{m}} = 10\ \Delta t$ et un nombre minimal $N_{\mathrm{min}} = 70$. La recombinaison à trois corps est, quant à elle, appelée tous les 5 pas de temps, 30 macro-électrons servant à échantillonner le fond électronique.

Comme pour [Royle *et al.*, 2017], tous nos diagnostics sont faits dans une zone réduite du domaine de simulation, soit une boite 0.4×0.4 µm^2 centrée en $y = 0$ et placée sur le bord gauche de la cible, près de la face irradiée par le faisceau X, telle qu'illustrée en Fig. 8.17.

Un premier diagnostic a consisté à tracer, pour différents instants, la fonction de distribution en énergie électronique. La Fig. 8.18 compare les distributions tirées de Picls (Fig. 8.18a) et de Calder (Fig. 8.18b) aux instants $t = 10$, 50, 100 et 150 fs ($t = 100$ fs correspond à l'arrivée du pic du faisceau sur la cible). Concentrons-nous d'abord sur les résultats obtenus dans [Royle *et al.*, 2017]. De façon générale, à chaque instant, la distribution présente deux parties distinctes : une partie thermique (approchée par une fonction maxwellienne, en pointillés) et une partie supra-thermique, que nous appellerons la queue de la distribution,

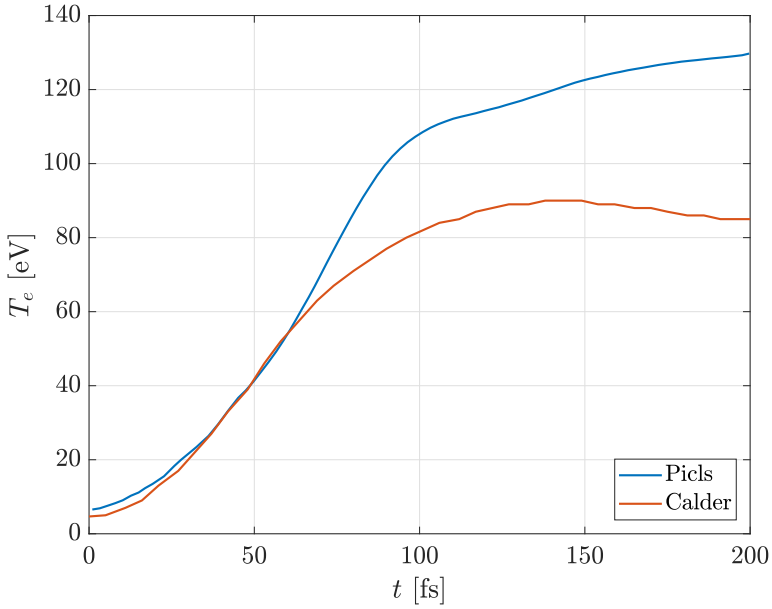
composée d'un nombre réduit d'électrons de "haute" énergie. À mesure que le temps s'écoule, la fraction thermique de la distribution s'élargit, conséquence de la thermalisation progressive de l'énergie cinétique électronique. La température caractérisant la maxwellienne correspondante passe de 8 eV à $t = 10$ fs à 120 eV à $t = 150$ fs. Ce chauffage est dû aux électrons issus soit de la photoionisation (en couche K et L), soit de la relaxation non radiative des lacunes en couche K. La contribution à la queue suprathermique des photo-électrons originaires de la couche L ($\sim 1.5 - 1.7$ keV) et des électrons Auger (~ 1.4 keV) est particulièrement visible à $t = 50$ fs. Nous remarquons en effet la présence d'une bosse aux alentours de 1.4 keV, soit l'énergie typique d'un électron Auger issu d'une transition KLL, dans ces conditions. Les couches électroniques L de l'Aluminium ayant une énergie de liaison de l'ordre de quelques dizaines d'eV, voir de la centaine d'eV, les photo-électrons issus de ces couches auront donc une énergie de liaison comprise entre 1.5 keV et 1.7 keV, ce que l'on voit distinctement ici, mais en proportion moindre, comparée à celle des électrons Auger KLL. En revanche, les photo-électrons issus de la couche K, dont l'énergie est proche de 1.7 keV, auront une énergie faible, de l'ordre de la centaine d'eV, et sont donc confondus avec la population thermique. À $t = 150$ fs, la thermalisation électronique semble achevée.

L'évolution des spectres électroniques prédite par Calder est en bon accord avec les résultats de Picls. Ceci présume un bon fonctionnement du module de photoionisation et de désexcitation atomique. Nous retrouvons les différentes bosses dans les distributions, notamment à $t = 50$ fs où elles sont plus marquées, témoignant de la création d'électrons Auger KLL et de photo-électrons issus de couches L. Quelques différences sont tout de même à noter : premièrement, si les températures (des populations thermalisées) obtenues pour $t = 10$ fs et $t = 50$ fs (respectivement 7 eV et 42 eV) sont proches de celles prédites par Picls, leurs valeurs pour $t = 100$ fs et $t = 150$ fs sont en revanche inférieures. Nous rappelons que le module de photoionisation inclus dans Calder est basé sur les approximations analytiques de [Verner *et al.*, 1993], associées à des atomes isolés, c'est-à-dire sans tenir compte de l'abaissement du potentiel d'ionisation par effet de densité. Une sous-estimation de la section efficace de PI est donc possible. Les sections efficaces de PI utilisées dans Picls sont, en revanche, calculées par le code de cinétique atomique de la suite de Los Alamos [Fontes *et al.*, 2015], intégrant un modèle d'IPD. La différence de production d'électrons Auger entre les deux codes peut également être due aux modèles de désexcitation utilisées, celui de Calder supposant une émission instantanée, ce qui n'est pas le cas de Picls où la transition KLL est résolue en temps avec la prise en compte de sa durée de vie moyenne[1]. Le chauffage plus important affiché par Picls pourrait également être dû à la prise en compte du Bremsstrahlung inverse. Nous montrerons toutefois dans la Sec. 8.2.4.1 que pour une intensité $I = 1.36 \times 10^{17}$ W/cm^2 et une énergie photonique de 1.7 keV, ce processus devrait jouer un rôle mineur. Deuxième différence, la dernière distribution prédite par Calder pour $t = 150$ fs présente encore une queue, montrant que le système n'est pas encore totalement relaxé. Cette différence de taux de relaxation pourrait s'expliquer par les modèles utilisés pour les collisions coulombiennes : les critères de saturation de la fréquence de collision à basse température son différents dans les deux codes[2] De plus Picls intègre, dans le calcul du taux de collision électron-électron, la contribution des collisions électrons libres-électrons liés [Mishra *et al.*, 2013], non considérée par le modèle de [Pérez *et al.*, 2012], implémenté dans Calder. Le taux de collisions binaires accru dans Picls pourrait expliquer sa plus grande rapidité à atteindre l'équilibre thermodynamique.

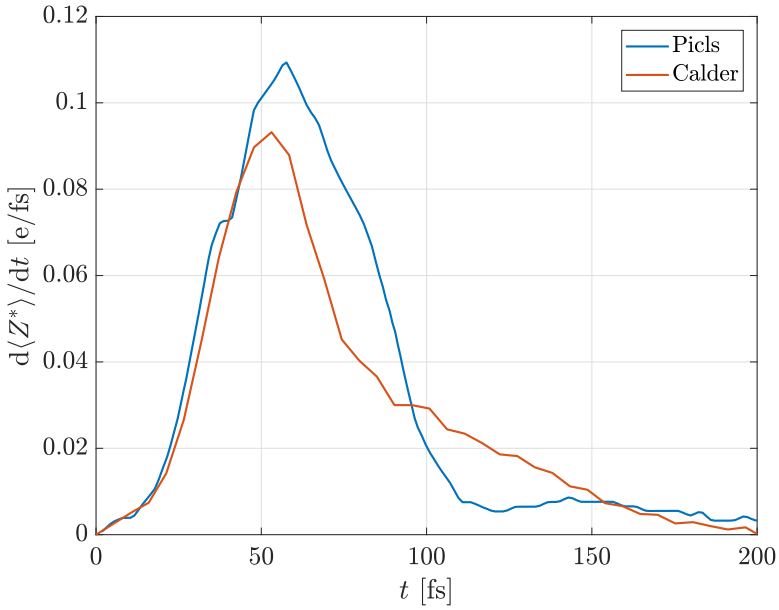
[1] Chap. 7, Sec. 7.2.

[2] Chap. 7, Sec. 7.2.

L'évolution temporelle de la température, calculée sur la base de la fraction thermique de la distribution, est tracée dans la Fig. 8.19a pour Picls (en bleu) et Calder (en orange). Cette comparaison confirme la tendance observée sur les spectres électroniques, à savoir un



(a)



(b)

FIGURE 8.19 – Évolutions temporelles de (a) la température électronique et (b) du taux d'ionisation, telles que prédites par les codes PICLS (bleu) et CALDER (orange). Le maximum de l'impulsion X est atteint à $t = 100$ fs. Les courbes de PICLS sont issues de [Royle *et al.*, 2017].

chauffage relativement proche pour les deux simulations dans les premiers instants ($t \leq 50$ fs). La différence apparaît ultérieurement avec une température électronique moindre dans la simulation CALDER.

[Royle *et al.*, 2017] s'intéressent également à l'évolution du taux de variation de la charge ionique moyenne, $\mathrm{d}\langle Z^* \rangle / \mathrm{d}t$, comparée dans la Fig. 8.19b à celle prédite par CALDER. Si les deux évolutions montrent un taux d'ionisation maximal pour $t \approx 60$ fs, la simulation PICLS prévoit une ionisation plus importante que CALDER entre $t = 50$ fs et $t = 90$ fs. Cette différence fait écho à la fois au problème de la prise en compte de l'abaissement des potentiels d'ionisation pour la photoionisation mais également aux différents modèles d'ionisation collisionnelle utilisés dans les deux codes, à savoir le modèle de [Lotz, 1970] dans PICLS et le modèle de [Kim *et al.*, 2000] dans CALDER ainsi qu'aux différentes méthodes de recombinaison à trois corps[1]. Elle peut être également attribuée au fait que la température électronique atteint des valeurs plus importantes dans la simulation PICLS, augmentant de ce fait la probabilité d'ionisation collisionnelle. Après $t = 90$ fs (soit proche du pic X) en revanche, la variation de la charge ionique moyenne de la simulation CALDER devient plus importante que celle de PICLS. La chute plus rapide de $\mathrm{d}\langle Z^* \rangle / \mathrm{d}t$ pour PICLS traduit une fois de plus la relaxation plus rapide prédite par ce code. Si l'ionisation est, à cet instant, principalement due à l'ionisation collisionnelle [Royle *et al.*, 2017], le coût énergétique de ce processus s'ajoutant à la thermalisation électron-ion peut expliquer la légère décroissance de la température électronique dans la simulation CALDER entre $t = 125$ fs et $t = 200$ fs.

[1] Chap. 7, Sec. 7.2.

Pour résumer, malgré des modélisations distinctes de la physique atomique et du transport radiatif dans PICLS et CALDER, les deux codes prédisent des tendances comparables lors de l'interaction entre un faisceau X d'intensité 1.36×10^{17} W/cm^2 et un échantillon d'Aluminium solide. Si les résultats présentent de fortes similitudes, quelques écarts notables sont à signaler, notamment au niveau de l'intensité du chauffage électronique qui est supérieure dans PICLS.

8.2.3 Variation de l'énergie photonique à intensité constante

8.2.3.1 Description des résultats

Au regard des différences observées entre les simulations PICLS et CALDER, s'est posée la question de la sensibilité du chauffage de la cible à l'énergie photonique du faisceau X. En effet, cette énergie va impacter aussi bien le taux de photoionisation que l'énergie des photoélectrons. Plus généralement, caractériser la dépendance du chauffage à l'énergie photonique constitue un problème intéressant dans le cadre des études sur la "matière dense et tiède" (*Warm Dense Matter*).

À cette fin, nous avons effectué une série de simulations avec des paramètres similaires à ceux utilisés dans la section précédente, en faisant varier l'énergie photonique et la densité photonique du faisceau X de sorte à ce que l'intensité reste constante, en l'occurrence égale à 1.36×10^{17} W/cm^2. Huit valeurs d'énergie photonique ont été testées : $h\nu = 1700$ eV, 1800 eV, 2000 eV, 2100 eV, 2400 eV, 2700 eV, 3000 eV et 3600 eV. Toutes ces valeurs sont supérieures au seuil d'ionisation de la couche K des ions Al^{3+} de la cible initiale.

La Fig. 8.20a représente l'évolution temporelle de la température électronique (à l'intérieur de la boite de diagnostic définie dans la section précédente). On distingue deux phases : une première, entre $t = 0$ fs et $t \approx 125$ fs, de chauffage rapide du plasma avec une croissance allant de quelques eV à plusieurs dizaines d'eV (voire la centaine d'eV pour certains cas), et une deuxième de refroidissement lent, due à la thermalisation entre les électrons et les ions. Une première différence remarquable entre ces courbes concerne le taux de chauffage initial du plasma, d'autant plus important que l'énergie photonique est faible. Une deuxième différence touche à la température électronique maximale. Le chauffage électronique s'avère

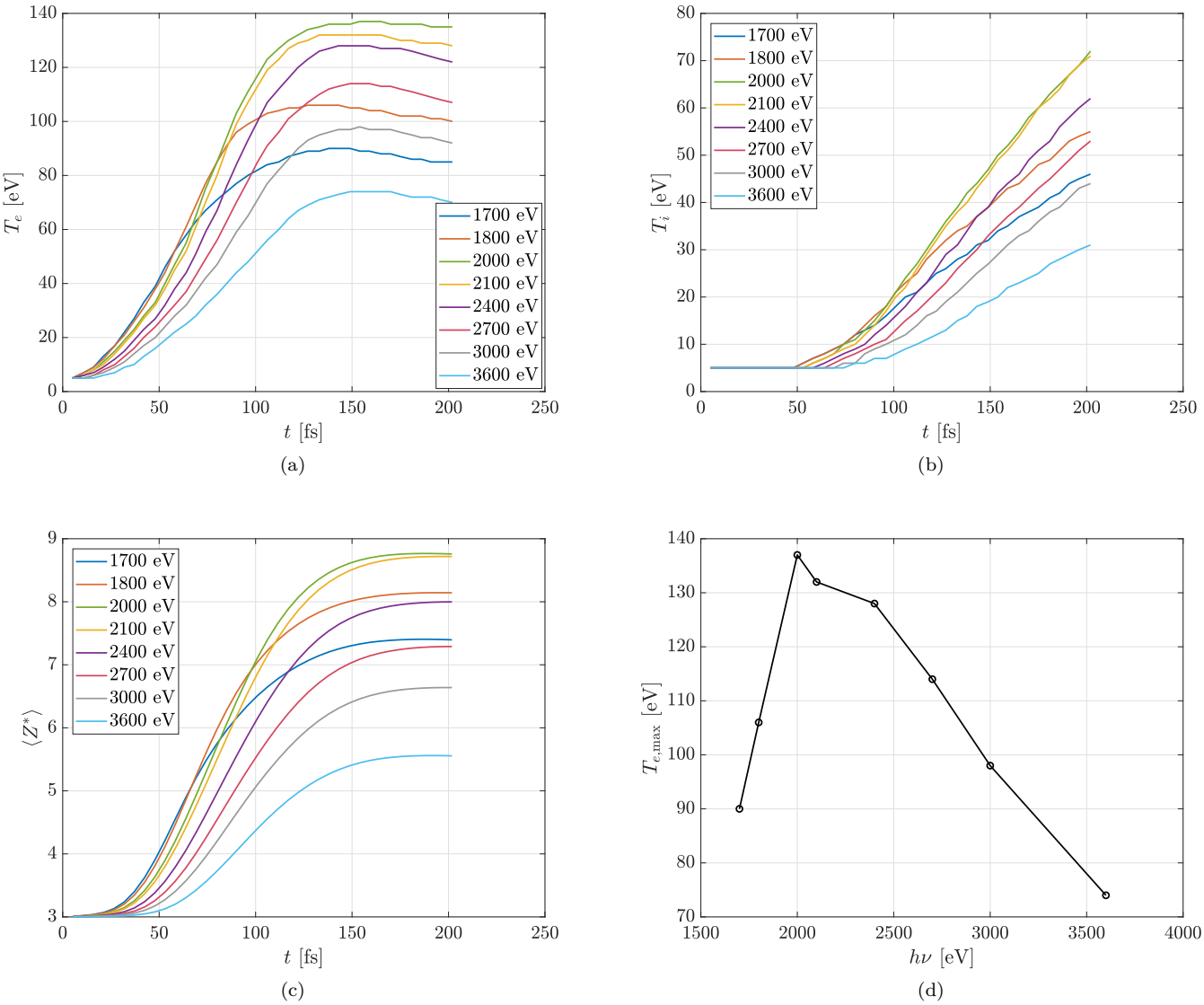


FIGURE 8.20 – Évolutions temporelles (a) des températures électroniques, (b) des températures ioniques et (c) de la charge ionique moyenne, pour différentes valeurs d'énergies photoniques pour le faisceau X : $h\nu = 1700$ eV (bleu), 1800 eV (orange), 2000 eV (vert), 2100 eV (jaune), 2400 eV (violet), 2700 eV (rouge), 3000 eV (gris) et 3600 eV (cyan), pour une intensité égale à 1.36×10^{17} W/cm^2. (d) Température électronique maximale en fonction de $h\nu$.

maximisé pour $h\nu = 2$ keV.

La température ionique, représentée en Fig. 8.20b montre, comme pour la température électronique, un taux de chauffage initial inversement proportionnel à l'énergie photonique. À la différence de T_e, T_i présente pour chaque cas une croissance monotone, résultat de la thermalisation (inachevée à l'instant final de la simulations, $t = 250$ fs) de la cible.

La Fig. 8.20d montre la variation de la température électronique maximale atteinte lors de la simulation avec l'énergie photonique $h\nu$, à intensité constante. Outre l'optimum de T_e à $h\nu = 2$ keV, elle révèle que des valeurs de $h\nu$ relativement éloignées (par exemple 1.7 keV et 3 keV) peuvent conduire à des températures maximales comparables (90 eV et 100 eV) et ce malgré des dynamiques distinctes de chauffage : T_e croît ainsi initialement beaucoup plus rapidement à $h\nu = 1.7$ keV qu'à 3 keV mais sature avant le maximum de l'impulsion X alors que pour $h\nu = 3$ keV le chauffage culmine après le pic X. Inversement, les simulations avec $h\nu = 1.7$ keV et 1800 eV ont le même taux de chauffage initial (de $t = 0$ fs à $t = 60$ fs) mais une température maximale différente avec respectivement $T_{e,\max} = 90$ eV et $T_{e,\max} = 106$ eV. Ainsi, une augmentation de seulement 6 % de l'énergie photonique peut engendrer une augmentation de 18 % de la température électronique maximale.

L'évolution de la charge ionique moyenne au cours du temps, représentée sur la Fig. 8.20c, présente dans tous les cas une première phase rapide de croissance, suivie d'une saturation. Comme pour les températures électroniques et ioniques, nous observons des taux de croissance initiaux inversement proportionnels à l'énergie photonique, ainsi que des maxima en charge ionique différentes. Notons cependant que la hiérarchie des courbes ne reproduira pas celle de la température électronique ou ionique : la charge ionique moyenne pour $h\nu = 2400$ eV reste toujours inférieure à celle du cas à 1800 eV alors que, d'après la Fig. 8.20a, la température électronique du premier cas surpasse celle du second vers $t = 100$ eV. Enfin, certains cas semblent tendre vers la même valeur finale de charge ionique, comme pour $h\nu = 2000$ eV et 2100 eV ou encore $h\nu = 1700$ eV et 2700 eV, alors qu'ils présentent des températures électroniques et ioniques différentes à $t = 200$ fs. Ce comportement est dû aux énergies d'ionisation qui agissent comme des seuils.

Pour apprécier la sensibilité à l'intensité X de l'énergie photonique maximisant le chauffage électronique, nous avons effectué une seconde série de simulations avec des paramètres similaires à la première, mais en prenant cette fois un faisceau X d'intensité cent fois plus forte, soit $I = 1.36 \times 10^{19}$ W/cm^2. La Fig. 8.21a représente l'évolution temporelle de la température électronique alors obtenue pour $h\nu = 1700$ eV, 1950 eV, 2700 eV, 3600 eV, 5800 eV, 8000 eV, 10 keV et 15 keV. Comme pour les simulations à 1.36×10^{17} W/cm^2, le taux initial de chauffage est d'autant plus grand que l'énergie photonique est faible. Ce chauffage est également plus intense, avec des températures électroniques atteignant plusieurs centaines d'eV (jusqu'à près de 600 eV pour $h\nu = 5800$ eV).

La Fig. 8.21b montre, comme la Fig. 8.20b, une croissance temporelle monotone de la température ionique. Aux tout premiers instants, le taux de chauffage ionique suit encore une fois celui du chauffage électronique. En revanche, on observe là encore une hiérarchie des températures ioniques qui n'est pas alignée avec celle des températures électroniques maximales, avec des différences parfois marquées comme pour $h\nu = 3600$ eV où la température est plus élevée que pour $h\nu = 5800$ eV et 8000 eV malgré un moindre chauffage électronique.

Les températures électroniques maximales sont regroupées dans la Fig. 8.21d, auxquelles nous avons ajouté, pour raffiner nos résultats et capturer plus précisément l'optimum d'énergie photonique, les cas où $h\nu = 2200$ eV, 2400 eV, 3100 eV, 4000 eV et 20 keV. Cet optimum se trouve autour de $h\nu = 5800$ eV, une valeur près de trois fois supérieure à celle obtenue à $I = 1.36 \times 10^{17}$ W/cm^2. Il y a donc eu un décalage de cet optimum vers les hautes énergies

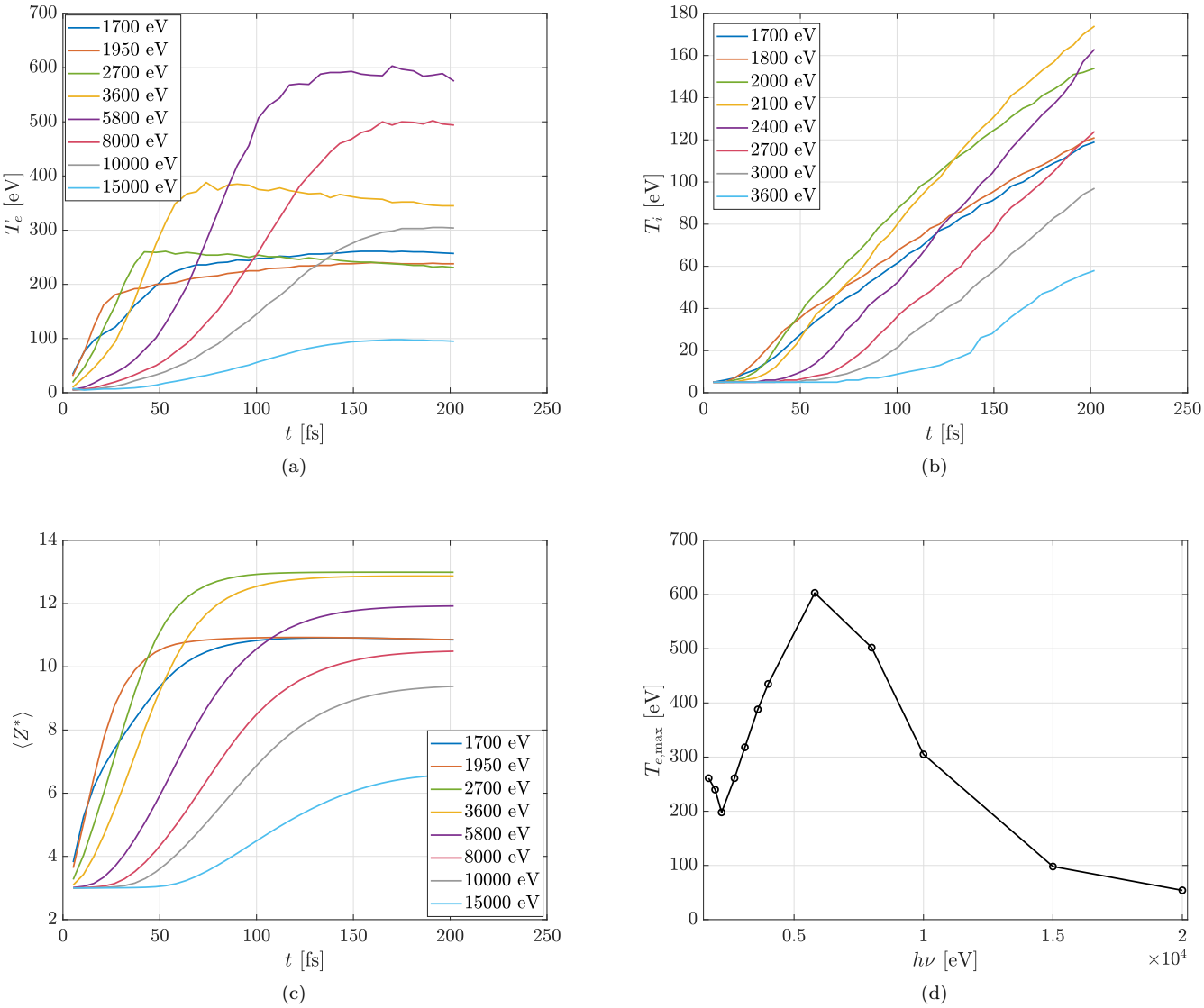


FIGURE 8.21 – Évolutions temporelles (a) des températures électroniques, (b) des températures ioniques et (c) de la charge ionique moyenne, pour différentes valeurs d'énergies photoniques pour le faisceau X : $h\nu$ = 1700 eV (bleu), 1950 eV (orange), 2700 eV (vert), 3600 eV (jaune), 5800 eV (violet), 8000 eV (rouge), 10000 eV (gris) et 15000 eV (cyan), pour une intensité égale à 1.36×10^{19} W/cm^2. (d) Température électronique maximale en fonction de $h\nu$.

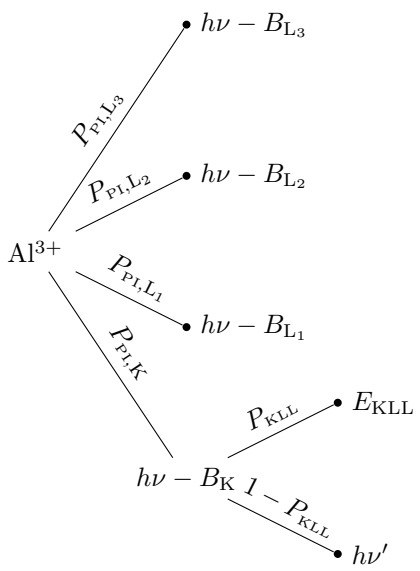


FIGURE 8.22 – Différents chemins possibles pour la production d'énergie lors de l'interaction du faisceau photonique X avec un ion Al^{3+}, incluant la production de photo-électrons et d'électrons Auger KLL.

puisque nous rappelons que la valeur optimale pour le cas à 1.36×10^{17} W/cm^2 se trouvait aux alentours de 2000 eV.

L'évolution temporelle de la charge ionique moyenne, représentée en Fig. 8.21c, est cohérente avec celle de la température électronique, avec le même effet de seuil que celui observé sur la Fig. 8.20c. La Fig. 8.21c révèle également les variations avec $h\nu$ du taux initial d'ionisation et du degré d'ionisation atteint. Une fois encore, la hiérarchie de ces dernières ne suit pas celle des températures électroniques maximales.

8.2.3.2 Discussion des résultats

Pour tenter d'expliquer les différents comportements décrits précédemment, qu'il s'agisse des différences de températures électronique, des charges ioniques moyennes maximales ou encore l'existence d'une valeur optimale d'énergie photonique pour le chauffage électronique, considérons les deux mécanismes de chauffage lors de l'interaction entre le faisceau X et la cible d'Aluminium :

- la production de photo-électrons, directement issus de la photoionisation des ions d'Aluminium, d'énergie $h\nu - B_k$ (où on rappelle que B_k est l'énergie de liaison de la couche électronique k pour un ion donné dans son état fondamental ;
- la production d'électrons Auger, issus de la désexcitation d'un ion présentant une lacune, elle-même résultant de la photoionisation ou de l'ionisation collisionnelle.

En réalité, le Bremsstrahlung inverse, qui n'est pas pris en compte dans CALDER, est également susceptible d'accroître l'énergie du système. Afin de simplifier davantage notre analyse, nous négligeons l'apport énergétique des électrons Auger issus d'une transition autre que la transition KLL, cette dernière étant de loin la plus énergétique.

Dans ces conditions, nous pouvons établir, pour un ion donné, l'espérance du gain en énergie cinétique électronique dans le plasma. Pour l'illustrer, considérons un ion Al^{3+}. Plusieurs évènements sont alors possibles : tout d'abord, la photoionisation de la couche K, produisant un photo-électron d'énergie $h\nu - B_K$ et d'une lacune électronique sur cette couche électronique, elle même pouvant donner lieu à la création d'un électron Auger KLL ou d'un photon.

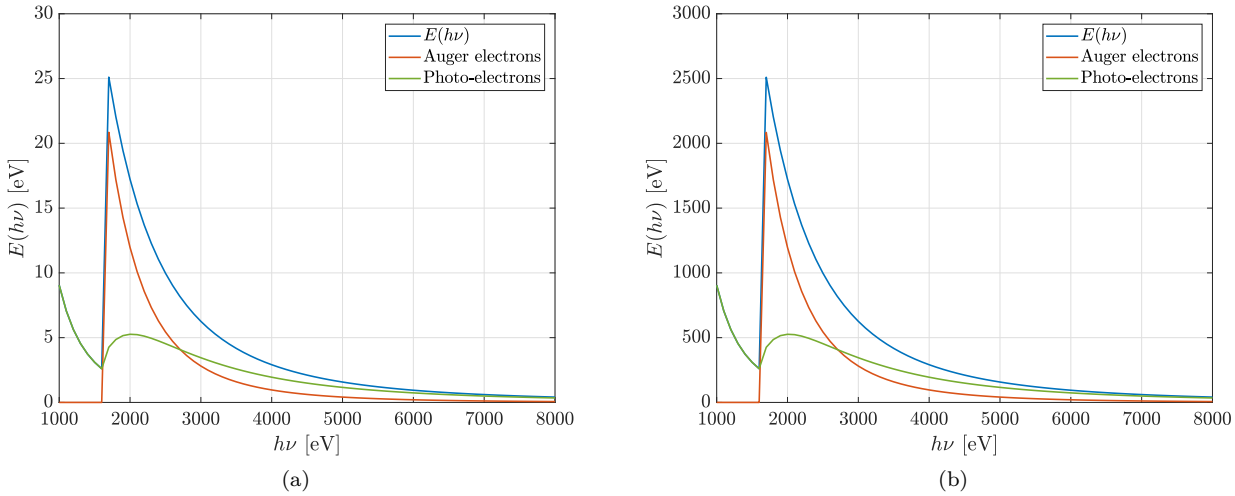


FIGURE 8.23 – Variation avec $h\nu$ de l'énergie cinétique électronique produite pendant 10 fs par un faisceau X gaussien de largeur à mi-hauteur égale à 80 fs (défini sur un total de 200 fs) et d'intensité maximale égale à (a) 1.36×10^{17} W/cm^2 et (b) 1.36×10^{19} W/cm^2. Sont également représentées les contributions des seuls électrons Auger (en orange) et des seuls photo-électrons (en vert).

La probabilité de désexcitation non radiative est, pour les éléments de numéro atomique modéré (< 20), très supérieure à la probabilité d'émission radiative (en moyenne respectivement de 96 % et 4 % pour l'Aluminium) donc la production de photons par le phénomène de désexcitation atomique est ici pratiquement négligeable. Il pourrait également y avoir photoionisation des couches L_1, L_2 ou L_3, produisant des photo-électrons d'énergie respectivement $h\nu - B_{L_1}$, $h\nu - B_{L_2}$ et $h\nu - B_{L_3}$. Ces chemins sont illustrés dans la Fig. 8.22. L'énergie cinétique électronique produite par intervalle de temps Δt lors de l'interaction entre un faisceau X et un ion s'écrit

$$\begin{aligned} E(h\nu) &= P_{\mathrm{PI,K}} P_{\mathrm{KLL}} \left(h\nu - B_{\mathrm{K}} + E_{\mathrm{KLL}}\right) + P_{\mathrm{PI,K}}(1 - P_{\mathrm{KLL}}) \left(h\nu - B_{\mathrm{K}}\right) \\ &\quad + P_{\mathrm{PI,L_1}}(h\nu - B_{\mathrm{L_1}}) + P_{\mathrm{PI,L_2}}(h\nu - B_{\mathrm{L_2}}) + P_{\mathrm{PI,L_3}}(h\nu - B_{\mathrm{L_3}}) \,, \end{aligned} \tag{8.2}$$

où $P_{\mathrm{PI,K}}$, $P_{\mathrm{PI,L_1}}$, $P_{\mathrm{PI,L_2}}$ et $P_{\mathrm{PI,L_3}}$ sont respectivement les probabilités de photoionisation en couche K, L_1, L_2 et L_3, définies par

$$P_{\mathrm{PI},k} = 1 - \exp\left(-c n_\gamma \sigma_k^{\mathrm{PI}} \Delta t\right) \,, \tag{8.3}$$

où c est la vitesse de la lumière, n_γ la densité photonique (un paramètre qui varie pour chaque valeur d'énergie photonique de sorte à maintenir l'intensité constante), σ_k^{PI} la section efficace de photoionisation pour la couche k et Δt une durée caractéristique qui correspondra dans notre cas au pas de temps de la simulation, soit 5.31 as. P_{KLL} est la probabilité d'émission Auger KLL lorsqu'une lacune est présente en couche K (et dont la valeur est tirée de Kaastra & Mewe [1993]) et enfin E_{KLL} l'énergie de l'électron Auger issu de la transition KLL. Si la correction due à l'IPD n'est pas prise en compte dans les probabilités de photoionisation et désexcitation, elle est en revanche prise en compte pour les valeurs d'énergie mises en jeu.

Deux valeurs d'intensité X ont été testées, correspondant à celles utilisées dans nos si-

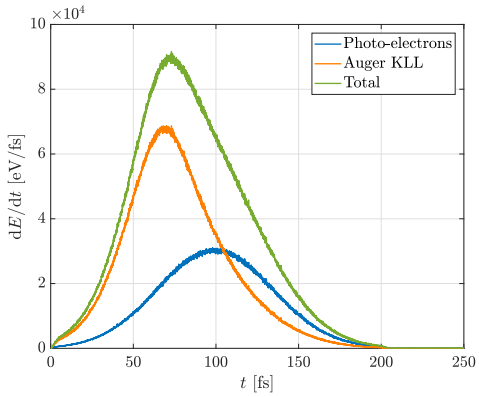
mulations, soient 1.36×10^{17} W/cm^2 et 1.36×10^{19} W/cm^2. Comme pour les simulations, nous utilisons un profil temporel gaussien pour le faisceau photonique, avec une largeur à mi-hauteur de 80 fs. Comme nous ne nous intéressons ici qu'au taux de chauffage initial, nous intégrons l'espérance sur les 10 premières fs (le faisceau X est défini, comme pour la simulation PIC, sur un total de 200 fs avec une largeur à mi-hauteur de 80 fs) en faisant l'approximation que la charge ionique reste égale à 3. Les résultats sont présentés en Fig. 8.23 sur laquelle nous avons tracé l'espérance calculée via l'Eq. (8.2) (en bleu) ainsi que la contribution des électrons Auger seuls (en orange) et celle des photo-électrons seuls (en vert).

Pour $I = 1.36 \times 10^{17}$ W/cm^2, nous distinguons deux régimes d'interaction en fonction de $h\nu$. Le premier entre $h\nu = 1000$ eV et $h\nu = 1500$ eV est entièrement dû à la production de photo-électrons en couche L. La baisse de la section efficace de photoionisation entraîne la décroissance avec $h\nu$ de l'énergie moyenne électronique. Lorsque l'énergie photonique devient suffisamment importante pour photoioniser la couche K, un saut a lieu (l'espérance passant de 3 eV à 25 eV). La création d'électrons Auger est désormais possible, comme le montre le saut de la courbe orange. L'espérance décroît alors de façon monotone et tend vers 0 pour de grandes énergies photoniques. Pour $I = 1.36 \times 10^{19}$ W/cm^2, l'évolution est similaire au cas précédent, avec la présence d'un saut entre 1500 eV et 1600 eV suivie d'une décroissance monotone de l'énergie électronique moyenne pour de plus hautes énergies photoniques mais avec ici une amplitude de chauffage nettement accrue. Ce comportement explique l'évolution des taux initiaux de chauffage électronique observés dans les simulations, fonction décroissante de $h\nu$.

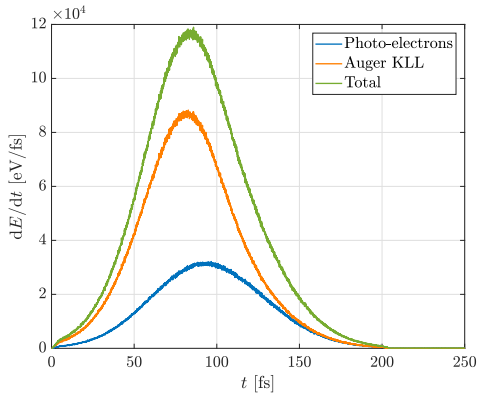
Ce comportement est ici en accord avec les simulations pour lesquelles nous avons vu que les taux de chauffage initiaux étaient inversement proportionnels à l'énergie photonique utilisée pour le faisceau X. En augmentant cette énergie, l'énergie des photo-électrons, $h\nu - B_k$, augmente mais le nombre de photo-électrons produits décroît rapidement, entraînant la chute de l'espérance $E(h\nu)$ observée sur ces figures.

Afin de tenter de comprendre l'existence d'un optimum d'énergie photonique pour le chauffage électronique, la Fig. 8.24 trace, à partir des simulations PIC, l'évolution temporelle des taux de production d'énergie $\mathrm{d}E/\mathrm{d}t$ sous forme de photo-électrons (en bleu) et d'électrons Auger (en orange) et leur somme (en vert), pour différentes valeurs d'énergie photonique. Cette figure montre qu'à une intensité de 1.36×10^{17} W/cm^2, l'essentiel de l'énergie cinétique électronique est apportée par les électrons Auger jusqu'à environ $h\nu = 2400$ eV où les deux courbes sont pratiquement superposées. Pour des énergies photoniques plus importantes, la contribution des photo-électrons supplante celle des électrons Auger. L'amplitude de ces taux augmentent de 1700 eV jusqu'à 2000 eV, qu'il s'agisse de la composante des électrons Auger ou des photo-électrons. Entre 2000 eV et 2400 eV, on observe une augmentation du taux pour les photo-électrons, mais une diminution plus prononcée encore de la contribution Auger, dont il résulte une baisse globale du taux $\mathrm{d}E/\mathrm{d}t$. L'optimum du chauffage électronique semble donc résulter d'une compétition des électrons Auger et des photo-électrons, équilibre qui dépend à la fois des énergies mises en jeu mais aussi des probabilités de photo-ionisation.

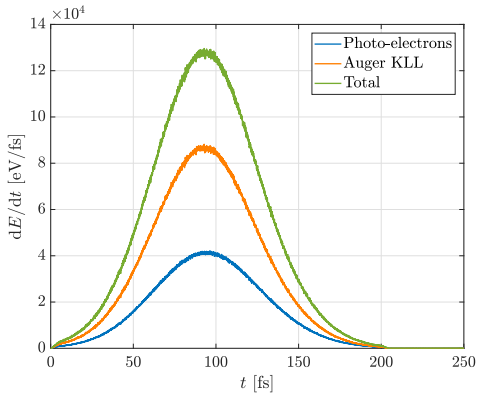
Nous avons réitéré l'expérience pour le cas à 1.36×10^{19} W/cm^2 dont les résultats sont regroupés dans la Fig. 8.25. Cette fois, et quelle que soit l'énergie photonique considérée, la contribution des électrons Auger est toujours inférieure à celle des photo-électrons et ce sont donc ces derniers qui vont piloter le chauffage de la cible. En effet, pour un ion donné, l'énergie des électrons Auger ne varie pas avec l'énergie photonique (rappelons cependant qu'elle diminue légèrement avec le degré de charge de l'ion), ce qui n'est bien sûr pas le cas des photo-électrons dont l'énergie est une fonction affine de l'énergie photonique. Or, du fait de l'hypothèse d'instantanéité de notre modèle de désexcitation, les probabilités de



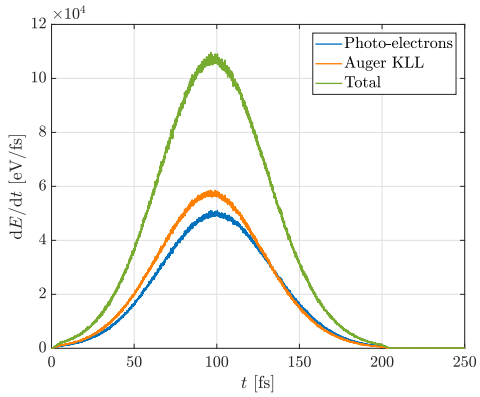
(a) $h\nu = 1700$ eV



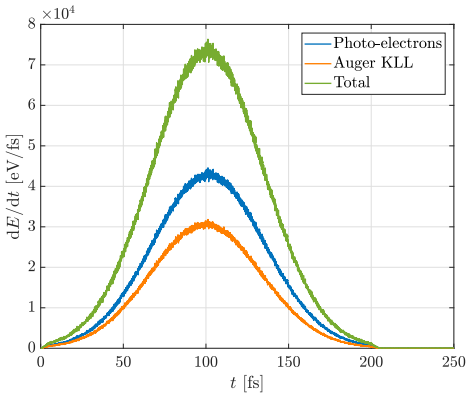
(b) $h\nu = 1800$ eV



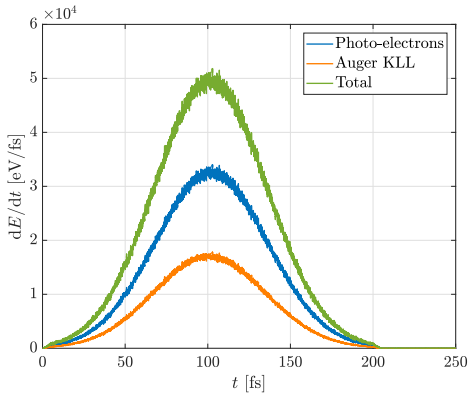
(c) $h\nu = 2000$ eV



(d) $h\nu = 2400$ eV

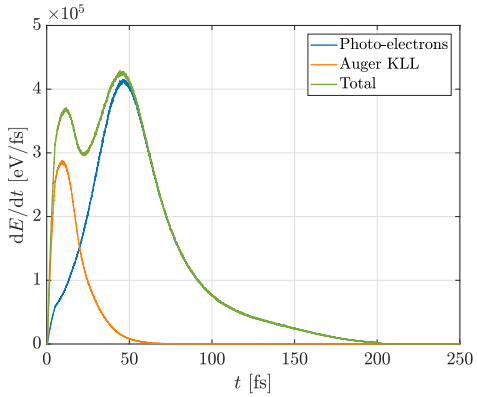


(e) $h\nu = 3000$ eV

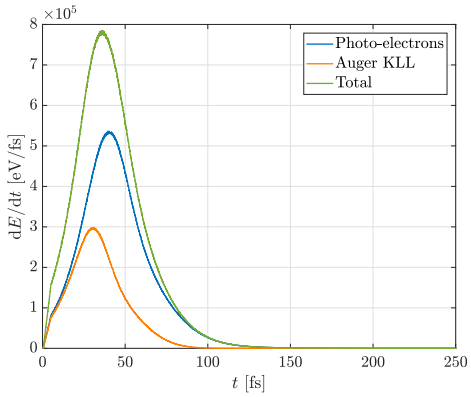


(f) $h\nu = 3600$ eV

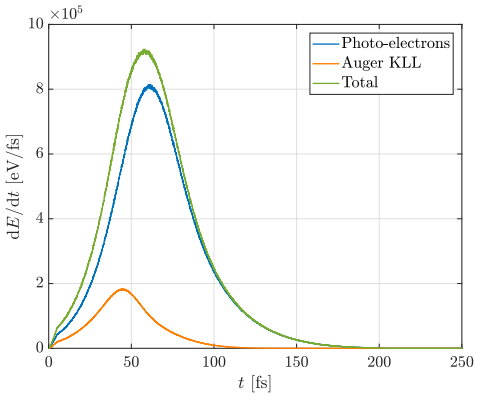
FIGURE 8.24 – Taux de production d'énergie cinétique électronique au cours du temps (en vert) pour différentes valeurs d'énergie photonique : $h\nu$ = (a) 1700 eV, (b) 1800 eV, (c) 2000 eV, (d) 2400 eV, (e) 3000 eV et (f) 3600 eV pour une intensité de faisceau égale à 1.36×10^{17} W/cm^2. Sont également représentées les contributions des électrons Auger (en orange) et des photo-électrons (en bleu).



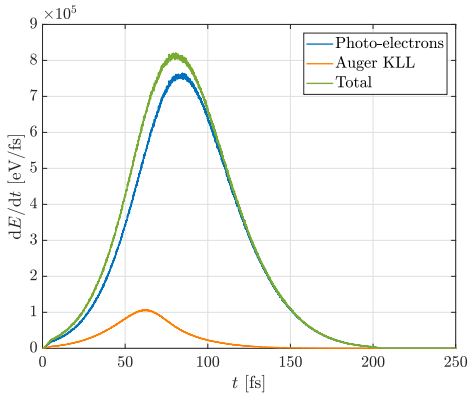
(a) $h\nu = 1700$ eV



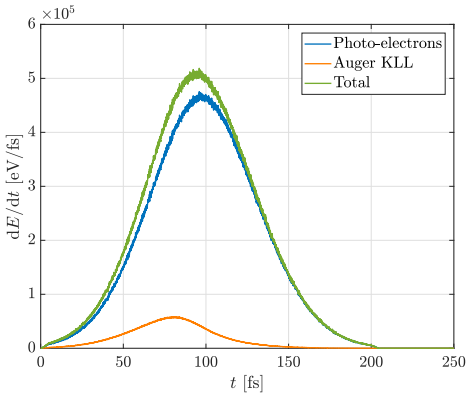
(b) $h\nu = 2700$ eV



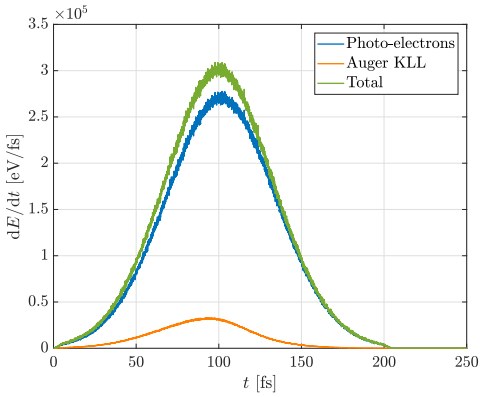
(c) $h\nu = 4000$ eV



(d) $h\nu = 5800$ eV



(e) $h\nu = 8000$ eV



(f) $h\nu = 10000$ eV

FIGURE 8.25 – Taux de production d'énergie cinétique électronique au cours du temps (en vert) pour différentes valeurs d'énergie photonique : $h\nu$ = (a) 1700 eV, (b) 2700 eV, (c) 4000 eV, (d) 5800 eV, (e) 8000 eV et (f) 10000 eV pour une intensité de faisceau égale à 1.36×10^{19} W/cm^2. Sont également représentées les contributions des électrons Auger (en orange) et des photo-électrons (en bleu).

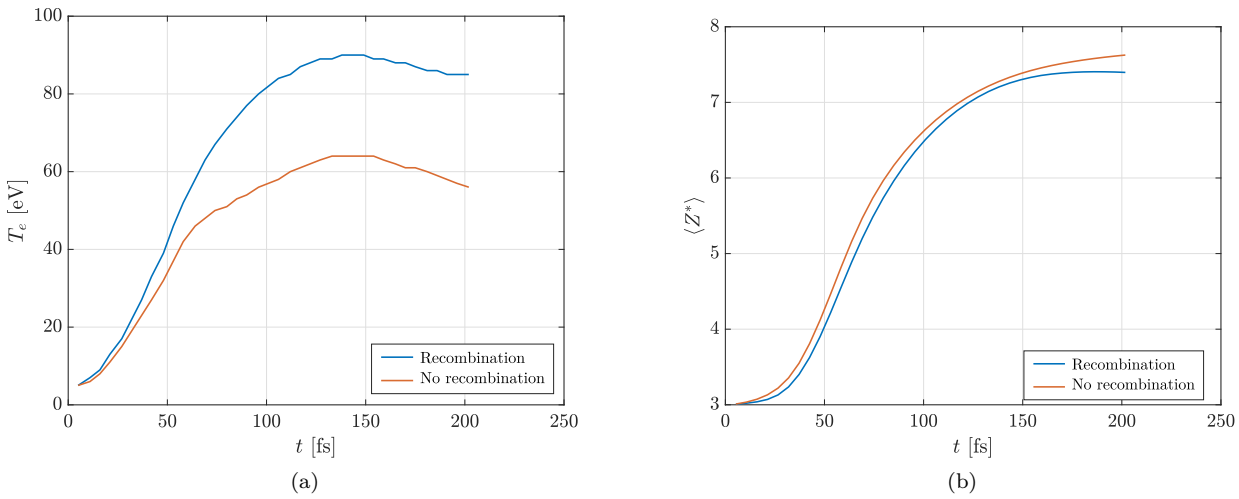


FIGURE 8.26 – Évolution temporelle (a) de la température électronique et (b) de la charge ionique moyenne lors de l'interaction d'une cible d'Aluminium avec un faisceau X d'énergie $h\nu = 1700$ eV et d'intensité $I = 1.36 \times 10^{17}$ W/cm^2. La recombinaison (à trois corps et radiative) est activée (en bleu) ou non (en orange).

production d'électrons Auger KLL et de photo-électrons de la couche K sont liées. Nous remarquons, comme à intensité moindre, que le pic du taux de production d'énergie cinétique électronique est atteint après une durée d'autant plus faible que l'énergie photonique est faible. Ce comportement est à mettre en parallèle avec l'évolution de la charge ionique, dont le maximum est atteint beaucoup plus rapidement avec les énergies photoniques les plus faibles.

En résumé, la présence d'un optimum en énergie photonique pour le chauffage électronique semble être le fruit d'une double compétition : une première, entre la contribution des électrons Auger et des photo-électrons, les premiers étant prépondérants à $I = 1.36\times10^{17}$ W/cm^2, puis les seconds prévalant à $I = 1.36\times10^{19}$ W/cm^2 ; une deuxième entre probabilité et efficacité énergétique de photoionisation. En effet, lorsque l'énergie photonique augmente, l'énergie du photo-électron, $h\nu - B_k$, augmente également mais la probabilité d'interaction entre le photon et l'ion diminue. L'espérance étant égal au produit de la probabilité et de l'énergie du photo-électron, elle présente un maximum qui résulte de la forme particulière de la section efficace de photoionisation.

8.2.3.3 Influence de la recombinaison à trois corps et radiative

Nous nous proposons ici de mesurer l'impact de la recombinaison (à trois corps et radiative) dans l'interaction faisceau X-solide. Nous considérons pour cela le cas d'un faisceau de photons d'énergie $h\nu = 1.7$ keV et d'intensité $I = 1.36 \times 10^{17}$ W/cm^2.

Nous avons représenté sur la Fig 8.26 l'évolution temporelle de la température électronique (Fig. 8.26a) avec recombinaison (en bleu) et sans recombinaison (en orange), ainsi que l'évolution de la charge ionique moyenne (Fig. 8.26b). Nous remarquons une diminution du chauffage lorsque la recombinaison est désactivée, avec une différence relative maximale de l'ordre de 30 % (vers $t = 150$ fs, soit à la fin de l'irradiation). Ce résultat est attendu car la recombinaison permet aux ions de repeupler leurs couches électroniques, et donc à la photoionisation de continuer de produire des photo-électrons et des électrons Auger qui chauffent le plasma. La Fig. 8.26b montre logiquement une charge ionique moyenne plus basse en présence de recombinaison, l'écart entre les deux simulations s'avère étonnamment faible : si la

recombinaison tend à abaisser la charge ionique moyenne, la température plus élevée qu'elle induit par ailleurs tend, quant à elle, à amplifier l'ionisation.

Cet exemple montre l'influence, à la fois appréciable et non triviale, dans ce type d'interaction photon-matière, où les températures électroniques, quoiqu'élevées (~ 100 eV), permettent néanmoins à la recombinaison d'opérer sur des échelles de temps de quelques dizaines de fs.

8.2.4 Domaine de validité des simulations

8.2.4.1 Quantification du chauffage par Bremsstrahlung inverse

Si le modèle présenté dans la section précédente permet d'expliquer les tendances observées pour les simulations à 1.36×10^{17} W/cm^2 et 1.36×10^{19} W/cm^2, la question de la validité de nos hypothèses sur les processus physiques pour ces deux régimes d'intensité se pose. La première interrogation concerne l'absence du Bremsstrahlung inverse. Ce processus permet en effet, de fournir de l'énergie à un électron libre, par absorption d'un photon au voisinage d'un ion. Nous nous proposons dans cette section d'estimer son importance dans nos conditions d'interaction.

Pour ce faire, nous pouvons estimer le gain en température électronique, que nous appellerons $\Delta T_{e,\mathrm{BI}}$, dû au Bremsstrahlung inverse (ou taux d'absorption radiative libre-libre), entre le début et la fin de la simulation. Cette quantité s'exprime en fonction du taux de Bremsstrahlung inverse (α_ν) et de l'intensité du faisceau photonique (I) en faisant l'hypothèse de l'équilibre thermodynamique tel que

$$\Delta T_{e,\mathrm{BI}}(t) = \frac{2}{3}\int_0^t \frac{\alpha_\nu(t')I(t')}{n_e(t')}\mathrm{d}t' \,, \tag{8.4}$$

où n_e est la densité électronique. Si les valeurs d'intensité et de densité électronique sont obtenues directement via les données de Calder, il est nécessaire pour le taux de Bremsstrahlung inverse de se référer aux formules théoriques proposées par la littérature.

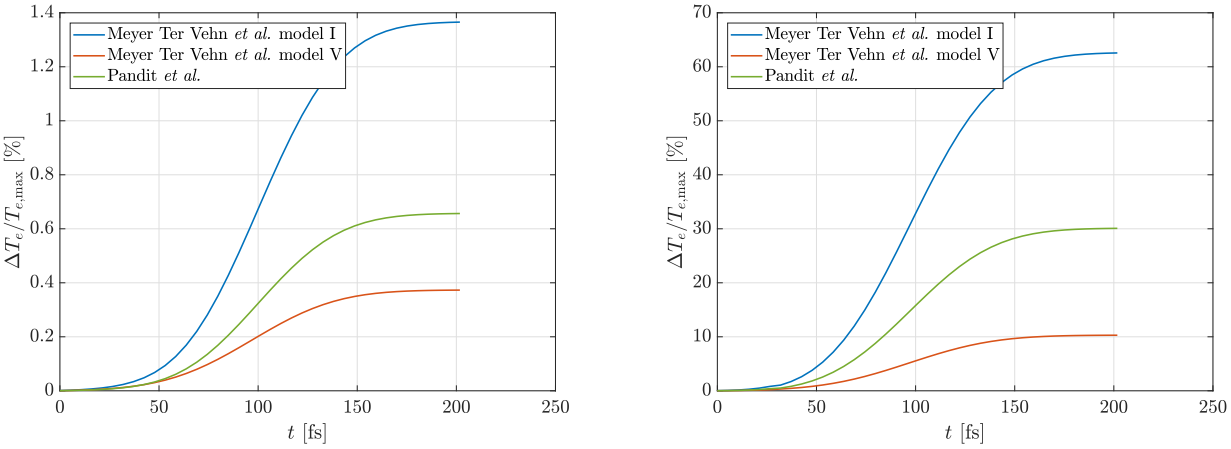
[Karzas & Latter, 1961] propose une formule de taux classique, utilisée dans Flychk [Chung *et al.*, 2005] et reformulée (dans le système CGS) dans [Pandit, 2015]

$$\alpha_\nu(t) = 2.42 \times 10^{-37} Z^*(t)^2 n_i(t) n_e(t) \frac{1}{(k_B T_e(t))^{1/2}} \frac{1}{(h\nu)^3} \quad \left[\mathrm{cm}^{-1}\right] \,, \tag{8.5}$$

avec Z^* la charge ionique, n_i et n_e respectivement la densité ionique et électronique, T_e la température électronique et $h\nu$ l'énergie photonique du faisceau. Ce modèle prévoit une décroissance rapide avec l'énergie photonique en $\propto 1/(h\nu)^3$.

Plus récemment, [Meyer-ter Vehn & Ramis, 2019] se sont basés sur la section efficace de Bremsstrahlung tirée de [Sommerfeld, 1939] et du principe de bilan détaillé pour calculer le taux d'absorption radiative libre-libre dans un plasma électronique dégénéré, avec l'hypothèse d'une fréquence photonique $\omega = 2\pi\nu$ supérieure à la fréquence plasma ω_p. Des formules asymptotiques sont déduites selon l'énergie photonique, la température électronique, la densité du plasma, etc. Parmi les régimes considérés, deux semblent à même de convenir aux conditions des simulations effectués dans cette section, à savoir les cas où

- $\hat{\varepsilon} \ll 1$ et $\hat{\omega} \gg 1$ (régime I),
- $\hat{\varepsilon}^{3/2} \ll \hat{\omega} \ll 1$ (régime V),



(a) $I = 1.36 \times 10^{17}$ W/cm^2 (b) $I = 1.36 \times 10^{19}$ W/cm^2

FIGURE 8.27 – Évolution temporelle de la contribution (en %) du Bremsstrahlung inverse au chauffage électronique selon la formule tirée de [Pandit, 2015] (en vert), et des modèles I (en bleu) et V (en rouge), tirés de [Meyer-ter Vehn & Ramis, 2019], pour des photons d'énergie 1.7 keV et d'intensité (a) 1.36×10^{17} W/cm^2 et (b) 1.36×10^{19} W/cm^2.

avec $\hat{\varepsilon} = \varepsilon/Z^{*2}E_a$ et $\hat{\omega} = \hbar\omega/Z^{*2}E_a$, ε étant l'énergie électronique, $\hbar\omega$ l'énergie photonique, Z^* la charge ionique et $E_a = m_e e^4/\hbar^2 = 27.2$ eV l'unité d'énergie atomique. Le régime I s'applique davantage à la première phase de nos simulations, où la température électronique reste modérée, tout comme la charge ionique, alors que le régime V décrit plutôt la phase ultérieure de la simulation, où la charge devient élevée.

[Meyer-ter Vehn & Ramis, 2019] expriment le taux de Bremsstrahlung inverse sous la forme

$$\alpha = \frac{\nu_{\mathrm{BI}}}{c}\left(\frac{\omega_p}{\omega}\right)^2 , \tag{8.6}$$

où ν_{BI} est une fréquence de collision effective. Il vient pour le régime I

$$\nu_{\mathrm{I}} = \frac{16}{3\sqrt{2}} Z^* \nu_0 \frac{\hat{T}}{\hat{\omega}^{3/2}} \left(\frac{4}{3\sqrt{\pi}}\left(\frac{T_F}{T_e}\right)^{3/2}\right) , \tag{8.7}$$

où $\hat{T} = k_B T_e/Z^{*2}E_a$, T_F la température de Fermi (égale à 11.72 eV pour l'Aluminium), et $\nu_0 = E_a/\hbar = 4.14 \times 10^{16}$ s^{-1}. Dans le régime V, on obtient

$$\nu_{\mathrm{V}} = \frac{4}{3\sqrt{3}} Z^* \nu_0 \frac{\hat{T}}{\hat{\omega}} \left(\frac{4}{3\sqrt{\pi}}\left(\frac{T_F}{T_e}\right)^{3/2}\right) . \tag{8.8}$$

Dans ces formules, la température électronique et la charge ionique seront remplacées par nos valeurs de T_e et $\langle Z^* \rangle$ tirées des simulations à $h\nu = 1700$ eV, nous permettant, grâce à l'Eq. (8.4) d'obtenir l'évolution temporelle du rapport $\Delta T_{e,\mathrm{BI}}/T_{e,\max}$, représentée en Fig. 8.27a pour $I = 1.36 \times 10^{17}$ W/c^2 et en Fig. 8.27b pour $I = 1.36 \times 10^{19}$ W/cm^2.

À $I = 1.36 \times 10^{19}$ W/cm^2 en revanche, le Bremsstrahlung inverse joue un rôle non négligeable. La formule classique prévoit une variation d'environ 30 % du chauffage électronique

tandis que la formule V de [Meyer-ter Vehn & Ramis, 2019], la plus adaptée à la forte ionisation ($Z^* > 10$) rapidement atteinte ($t \sim 60$ fs) lors de l'interaction, donne une valeur un peu plus faible (~ 10 %). La variation d'environ 60 % prédite par la formule I semble donc surestimée.

Nous pouvons en conclure que si la prise en compte du Bremsstrahlung inverse améliorerait la précision de nos simulation à une intensité X $\sim 10^{19}$ W/cm^2, elle ne devrait pas en bouleverser les grandes tendances, relatives au niveau de chauffage électronique et ionique ou à la compétition entre photo-électrons et électrons Auger. Un impact mesuré sur les énergies photoniques optimales n'est cependant pas exclu.

8.2.4.2 Discussion sur l'hypothèse d'instantanéité de la désexcitation atomique

Notre modèle de désexcitation atomique étant basé sur les tables de probabilités d'émission Auger et d'émission radiative fournies par [Kaastra & Mewe, 1993], il suppose que la désexcitation se fait immédiatement après l'ionisation en couche interne, qu'il s'agisse d'ionisation collisionnelle ou de photoionisation, et, en conséquence, qu'il ne peut exister à chaque instant qu'une lacune électronique en couche interne pour un ion donné.

Nous savons cependant qu'une lacune électronique peut subsister pendant une durée qui dépend principalement de la charge de l'ion sur lequel elle se trouve, comme le montre la Fig. 5.2, tirée de [Royle *et al.*, 2017]. Elle prévoit que le temps de vie moyen d'une lacune en couche K augmente fortement avec la charge ionique, en passant d'un peu moins de 1 fs pour un ion Al^{4+} jusqu'à 200 fs pour l'Al^{11+}. Cette dernière durée de vie coïncide avec la durée des simulations présentées précédemment, ce qui suggère que certains ions comportant une lacune en couche K pourraient ne pas se désexciter pendant toute la durée de la simulation. Malgré tout, nous avons pu constater que les comparaisons effectuées à 1.36×10^{17} W/cm^2 avec le code Picls étaient acceptables : les charges ioniques restant relativement modérées lors du chauffage de la cible, notre hypothèse d'instantanéité de la désexcitation joue probablement peu dans ce régime d'intensité. En revanche, et comme pour le Bremsstrahlung inverse, nous pouvons imaginer qu'elle peut potentiellement impacter grandement la cinétique atomique du système à 1.36×10^{19} W/cm^2.

Plus précisément, la non prise en compte de la durée de vie finie des lacunes en couche K nous empêche de traiter le phénomène de saturation de l'absorption des photons X, examiné notamment dans [Yoneda *et al.*, 2014] dans une cible de Fer irradiée par un faisceau X d'intensité 10^{20} W/cm^2. De même, elle ne permet pas non plus de décrire les systèmes avec plus d'une lacune en couche interne.

8.2.5 Conclusion

L'implémentation dans le code Calder de nouveaux processus de physique atomique et de transport radiatif nous a permis d'étendre son domaine d'utilisation. Il est dorénavant capable de modéliser l'interaction entre un faisceau photonique intense (représenté par des macro-photons) et un plasma dense partiellement ionisé.

Les premières simulations effectuées ont reproduit de façon satisfaisante les résultats obtenus avec le code PIC précurseur Picls pour une intensité de 1.36×10^{17} W/cm^2. Cette comparaison nous a également permis de souligner de potentielles lacunes dans notre modèle, pouvant influer sur les simulations à plus forte intensité X, laissant entrevoir des voies d'amélioration, sur lesquelles nous reviendrons lors de la conclusion de ce manuscrit.

Notre étude paramétrique sur l'énergie du faisceau X (d'énergie photonique allant de 1700 eV jusqu'à 20 keV) à intensité constante (1.36×10^{17} W/cm^2 et 1.36×10^{19} W/cm^2) a montré l'existence d'une énergie optimale (respectivement aux alentours de 2 keV et 5.8 keV)

pour le chauffage électronique (respectivement $T_e \approx 135$ eV et $T_e \approx 600$ eV) dans une cible d'Aluminium solide, dépendant, selon l'intensité considérée, de la compétition entre la production d'électrons Auger KLL (dont l'énergie est généralement située aux alentours de 1.4 keV) et celle de photo-électrons ($h\nu - B_k$), ou simplement de la nature intrinsèque de la photo-ionisation avec une section efficace décroissante avec l'énergie photonique mais une énergie de photo-électron croissante.

8.3 Interaction faisceau γ-plasma

8.3.1 Introduction

Certains contextes astrophysiques présentent des conditions physiques extrêmes, propices à l'apparition d'instabilités microscopiques, telles que l'instabilité faisceau-plasma par exemple [Medvedev & Loeb, 1999; Bret *et al.*, 2010]. C'est par exemple le cas lors de l'interaction entre des rayons γ (par exemple issus des sursauts gamma [Meszaros, 2006] suite à un cataclysme stellaire où des flux considérables de photons sont émis avec une énergie pouvant aller jusqu'à plusieurs GeV) avec le plasma environnant, pouvant induire des chocs non-collisionnels ou en modifier la dynamique.

Des installations multi-petawatt déjà opérationnelles (CoReLS [Yoon *et al.*, 2021]), ou qui le seront prochainement (ELI [Sistrunk *et al.*, 2017]), devraient permettre de créer, par rayonnement synchrotron des électrons accélérés dans le champ laser, des faisceaux γ ultra-intenses (emportant jusqu'à 10–50 % de l'énergie du laser [Ridgers *et al.*, 2012]). Une telle capacité laisse présager des expériences d'interaction γ-plasma se rapprochant des scénarios astrophysiques.

Cette dernière section vise à illustrer l'excitation d'instabilités plasmas relativistes par d'intenses faisceaux γ dans des conditions qui, quoiqu'extrêmes et inaccessibles aux capacités expérimentales actuelles, pourraient être envisageables dans les prochaines décennies [Cartlidge, 2018]. Nous pouvons imaginer alors disposer d'installations laser délivrant des impulsions d'intensité supérieure à 10^{24} W/cm^2 et d'énergie supérieure à 100 kJ [Mourou, 2019] capables de se convertir en faisceaux γ d'intensité comparable via le rayonnement synchrotron du plasma irradié.

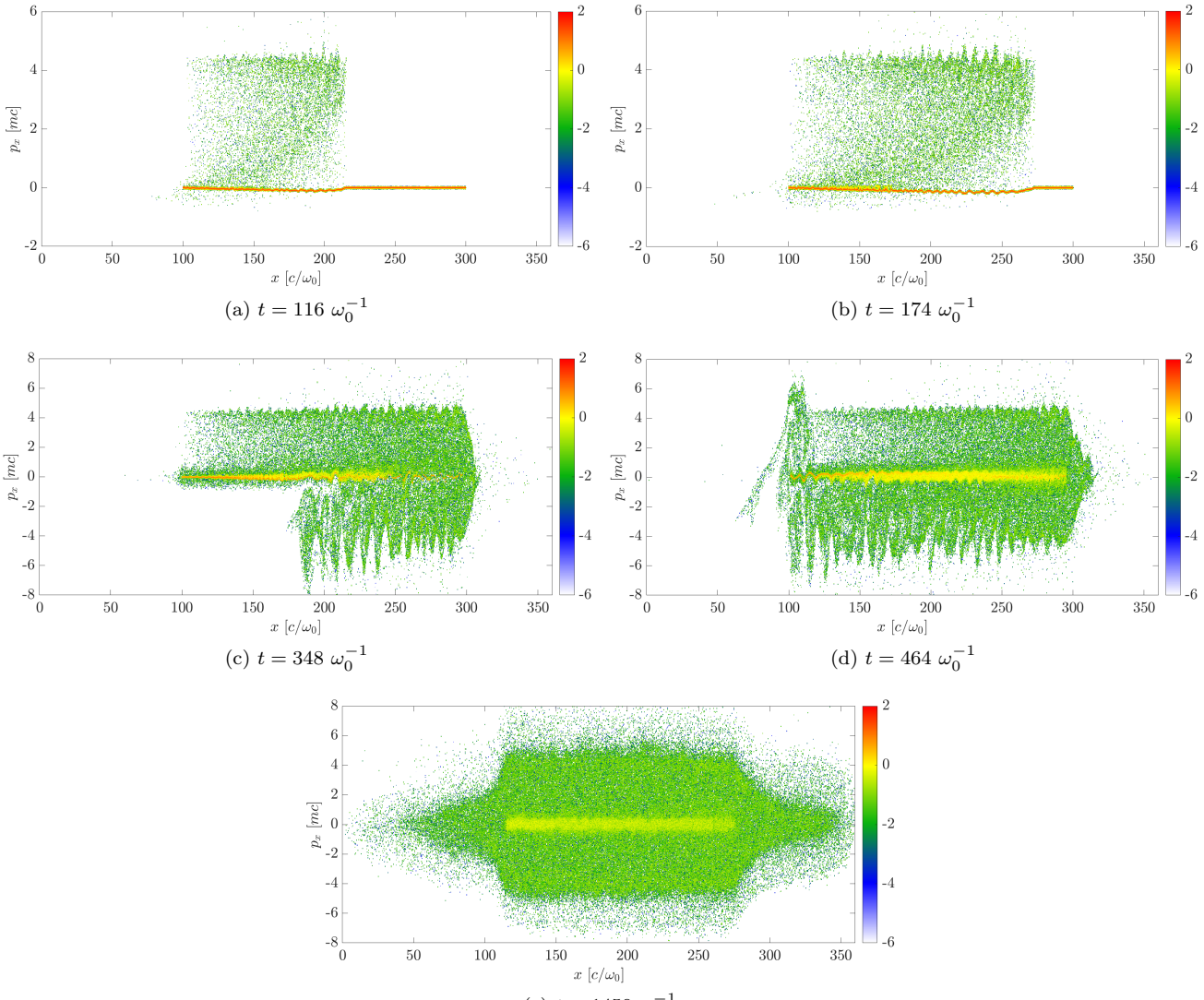
8.3.2 Paramètres de simulation

Le faisceau γ sera ici modélisé par un flot uniforme de macro-photons de même énergie et caractérisé par une densité photonique n_γ ainsi qu'une vitesse, naturellement égale à la vitesse de la lumière, c. Le but étant de créer dans le plasma un faisceau électronique d'énergie relativiste égale à $h\nu = 4\ m_e c^2$ (~ 2 MeV). Compte tenu de la petitesse de la probabilité d'interaction Compton entre les photons et les électrons, qui décroît, de surcroît, dans le régime de Klein-Nishina considéré ici, nous initialisons le faisceau avec une densité $n_\gamma = 5.55 \times 10^{26}$ cm^{-3}, soit une intensité de faisceau $I = 5.46 \times 10^{24}$ W/cm^2.

Ce faisceau irradie par la gauche une cible d'Hydrogène de densité $n_i = n_e = n_c = 1.11 \times 10^{21}$ cm^{-3} (de sorte que $\omega_{pe} = \omega_0$), initialisée hors-équilibre avec des températures $T_i = 10$ eV et $T_e = 100$ eV, ainsi qu'avec une charge ionique $Z^* = 1$. Cette interaction est simulée en 1D sur 12000 mailles de taille $\Delta x = 0.03\ c/\omega_0$ (≈ 4.8 nm). La cible a une épaisseur $L = 200\ c/\omega_0$ (≈ 32 µm), et est placée entre $x = 100\ c/\omega_0$ et $x = 300\ c/\omega_0$. Nous initialisons $N_i = N_e = 100$ macro-particules par maille, sans activer la coalescence (comme nous n'activons que la diffusion Compton et les collisions coulombiennes, il n'y a pas de génération de macro-particules). Le faisceau est également initialisé avec $N_\gamma = 100$ macro-photons par maille entre $x = -\infty$ et $x = 100\ c/\omega_0$. La simulation est faite sur un total de 50000 pas de temps avec $\Delta t = 15.4$ as ($= 0.029\ \omega_0^{-1}$).

8.3.3 Présentation des résultats

La Fig. 8.28 présente l'espace des phases $(x,\ p_x)$ des électrons du plasma à différents instants $t = 116$, 174, 348, 464 et 1450 ω_0^{-1} (l'origine des temps $t = 0$ correspondant à l'entrée des premiers photons dans le plasma). La carte de couleurs correspond à la fonction de distribution électronique en échelle logarithmique. On observe sur les Figs. 8.28a et 8.28b



(a) $t = 116\ \omega_0^{-1}$ (b) $t = 174\ \omega_0^{-1}$

(c) $t = 348\ \omega_0^{-1}$ (d) $t = 464\ \omega_0^{-1}$

(e) $t = 1450\ \omega_0^{-1}$

FIGURE 8.28 – Espace des phases (x, p_x) des électrons à différents instants (a) $t = 116\ \omega_0^{-1}$, (b) $t = 174\ \omega_0^{-1}$, (c) $t = 348\ \omega_0^{-1}$, (d) $t = 464\ \omega_0^{-1}$, (e) $t = 1450\ \omega_0^{-1}$. La carte de couleur représente la fonction de distribution $\log_{10}[f_e(x, p_x)]$.

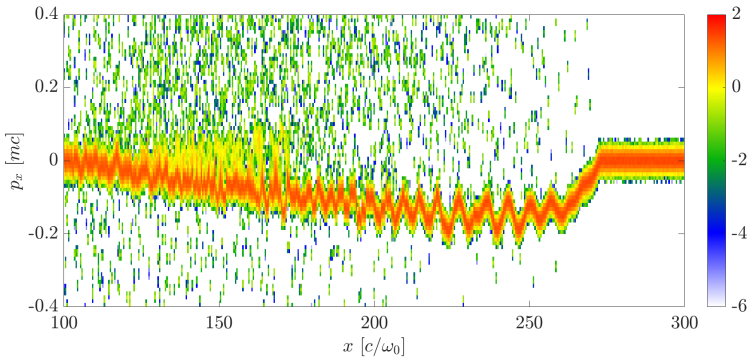


FIGURE 8.29 – Zoom sur le courant de retour observé dans l'espace des phases (x, p_x) des électrons à $t = 174\ \omega_0^{-1}$ (Fig. 8.28b). Les électrons thermiques, ici en rouge, présentent une vitesse de dérive négative ; la densité de courant correspondante neutralise celle de signée opposé, associée aux électrons rapides. Ce courant de retour présente des modulations de longueur d'onde croissant avec x.

deux populations : une population de forte densité (en rouge) centrée sur $f_e(x, p_x)$, associée aux électrons thermiques du plasma, de faible impulsion ($p_x \ll m_e c$), et une population de faible densité (en vert) visible jusqu'au front du faisceau ($x \leq ct$) et affichant des impulsions allant jusqu'à $p_x = 4\ m_e c$, associée aux électrons accélérés par diffusion Compton.

Dans la fraction de la cible ($x > ct$) qui n'a pas encore été affectée par le faisceau γ, visible sur ces deux figures, la distribution est centrée en $p_x = 0\ m_e c$ car les électrons sont initialisés avec une température finie mais sans dérive. Dans la partie irradiée de la cible, les électrons thermiques (en rouge) ont une faible impulsion négative, ce qui est particulièrement visible sur le zoom en Fig. 8.29, montrant l'espace des phases entre $x = 100\ c/\omega_0$ et $x = 300\ c/\omega_0$ à $t = 174\ \omega_0^{-1}$. Sur cette même figure, on remarque également l'existence de modulations de différentes fréquences : une modulation avec une longueur d'onde de l'ordre de $5\ c/\omega_0$, visible entre $x = 200\ c/\omega_0$ et $x = 250\ c/\omega_0$, et une autre de longueur d'onde beaucoup plus réduite ($< 1\ c/\omega_0$), visible aux alentours de $x = 150\ c/\omega_0$. Les modulations basse fréquence sont également visibles au niveau des électrons rapides, sur les Figs. 8.28a et 8.28b.

Sur la Fig. 8.28c, une partie des électrons rapides a une impulsion négative. Lorsque les électrons rapides atteignent le bord de la cible, leur éloignement aux ions, qui se meuvent beaucoup plus lentement du fait de leur masse, crée un champ électrostatique de forte amplitude qui a pour effet de les rappeler au sein de la cible, mais aussi d'accélérer les ions vers l'extérieur de la cible, engendrant, à terme, une détente du plasma, que l'on observe à un instant plus avancé de la simulation, sur la Fig. 8.28e. Ce phénomène n'est autre que le *target normal sheath acceleration* (TNSA), mécanisme connu pour accélérer les ions dans l'interaction laser-plasma relativiste [Maksimchuk *et al.*, 2000].

8.3.4 Interprétation des résultats

8.3.4.1 Comportement général

L'interaction entre le faisceau de macro-photons et la cible d'Hydrogène amène, par diffusion Compton, à une accélération d'une portion des électrons dans le sens du faisceau. Les électrons peuvent absorber une fraction importante de l'énergie photonique pouvant ici conduire à une impulsion maximale aux alentours de $4\ m_e c$. L'absence d'électrons d'impulsion supérieure à $4\ m_e c$ s'explique par le fait que la probabilité de diffusion Compton dépend de la densité photonique calculée dans le référentiel de l'électron. En appliquant la transformée de Lorentz, on obtient

$$n_\gamma^* = n_\gamma \gamma_e (1 - \boldsymbol{\beta}_e \cdot \boldsymbol{\Omega}) \,, \tag{8.9}$$

avec n_γ^* la densité photonique dans le référentiel de l'électron, γ_e et $\boldsymbol{\beta}_e$ respectivement le facteur de Lorentz et le vecteur vitesse de l'électron ainsi que $\boldsymbol{\Omega}$ le vecteur direction des photons. Il vient alors, par développement limité au premier ordre, $n_\gamma^* \approx n_\gamma/2\gamma_e = n_\gamma/8$. La probabilité d'interaction s'effondre donc dès la première collision pour ces électrons. De plus, l'énergie du photon baisse elle aussi (par effet Doppler[1]) dans le référentiel électronique.

[1] Chap. 5, Sec. 5.4.3.

La propagation du faisceau électronique dans le plasma induit un champ électrique qui accélère les électrons thermiques dans le sens opposé aux électrons rapides, ce que nous appellerons le courant de retour. Celui-ci neutralise le courant des électrons rapides, de sorte que

$$n_e V_e = -n_f V_f \,. \tag{8.10}$$

où n_e et V_e sont la densité et la vitesse de dérive des électrons thermiques et n_f et V_f leurs équivalents pour les électrons rapides.

8.3.4.2 Instabilité faisceau-plasma électronique

D'origine électrostatique, l'instabilité faisceau-plasma (aussi appelée *bump-on-tail instability* en anglais) naît de la superposition de deux courants électroniques opposés, avec un fond neutralisant d'ions immobiles. Les ions étant plus lourds que les électrons (dans notre cas d'un facteur 1836), les échelles de temps sub-femtoseconde sont trop courtes pour que le mouvement des ions, de faible température ($\sim$ dizaine d'eV), ait un impact visible sur la dynamique du plasma.

Considérons deux populations électroniques : l'une formant un faisceau dirigé vers les valeurs de x croissantes avec une vitesse moyenne V_f, une vitesse thermique $V_{f,\mathrm{th}} \propto \sqrt{T_f}$ ainsi qu'une densité n_f ; une seconde population avec une vitesse de dérive V_e, une vitesse thermique $V_{e,\mathrm{th}} \propto \sqrt{T_e}$ et de densité n_e. L'établissement d'un tel système "double-faisceau", constitué d'un faisceau d'électrons rapides neutralisé par un courant de retour thermique, est semblable à celui résultant de l'interaction laser-plasma en régime surcritique [Robinson *et al.*, 2014]. La présente configuration diffère toutefois de ce type d'interaction par la transparence du plasma aux photons γ, entrainant l'accélération volumique d'une fraction croissante des électrons du plasma. Dans le régime relativiste cinétique [Gremillet, 2014], la condition de l'instabilité faisceau-plasma est donnée par :

$$\frac{\partial f_f(x,\, p_x)}{\partial p_x} > 0 \,, \tag{8.11}$$

où $f_f(x,\, p_x)$ est la fonction de distribution du faisceau d'électrons rapides. Le taux de croissance d'un mode de fréquence réelle $\omega \sim \omega_{pe}$ et de vecteur d'onde k s'écrit

$$\frac{\Gamma_{\mathrm{TSI}}(k)}{\omega_{pe}} \approx \frac{1}{2}\left(\frac{m_e c}{kc/\omega_{pe}}\right)^2 \left(\frac{n_f}{n_e}\right)\gamma^3 \left(\frac{\partial f_f(x,\, p_x)}{\partial p_x}\right)_{v=\omega_{pe}/k} , \tag{8.12}$$

$$\approx \frac{1}{2(kc/\omega_{pe})}\left(\frac{n_f}{n_e}\right)\gamma^3 \frac{1}{(\Delta p_x/m_e c)^2} \,. \tag{8.13}$$

Nous avons représenté sur la Fig. 8.30a la fonction de distribution en énergie électronique moyennées entre $x = 200\ c/\omega_0$ et $x = 250\ c/\omega_0$ à $t = 174\ \omega_0^{-1}$. Cette distribution montre un pic étroit de forte amplitude et de faible impulsion négative correspondant au courant de

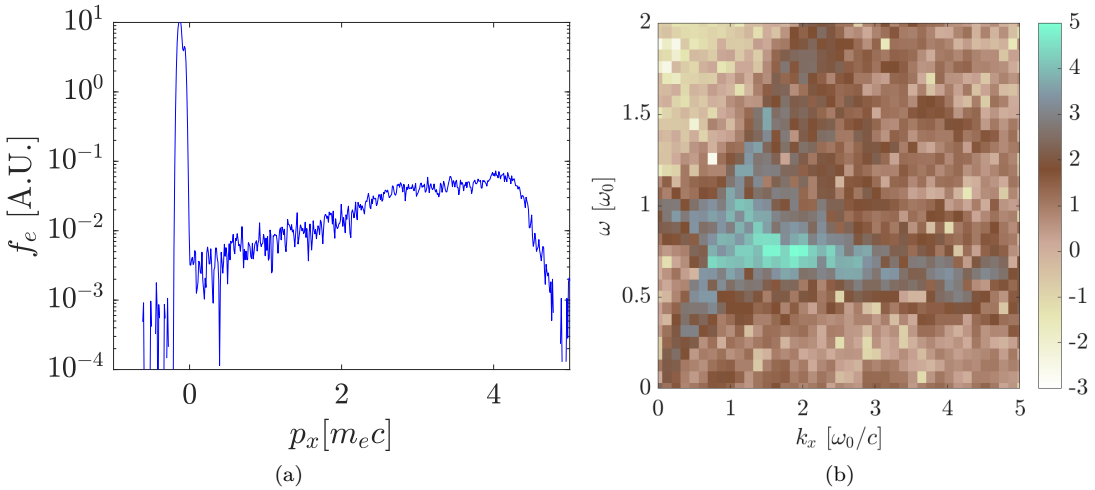


FIGURE 8.30 – (a) Distribution des énergies électroniques moyennées entre $x = 200\ c/\omega_0$ et $x = 250\ c/\omega_0$. Cette distribution montre le courant de retour porté par les électrons thermiques, nombreux et de faible impulsion, ainsi qu'une seconde population de moindre densité mais composée d'électrons relativistes. (b) Spectre $|E_x(\omega,\, k)|^2$ (en échelle $\log_{10}$) pour (a) l'instabilité de faisceau-plasma électronique mesurée dans l'intervalle $200 < x\omega_0/c < 250$ et $100 < t\omega_0 < 200$, montrant les modes excités par l'instabilité faisceau-plasma électronique ($\omega \sim \omega_{pe}$, $k \sim \omega_{pe}/c$).

retour thermique ainsi qu'une seconde population, associées aux électrons rapides, s'étendant sur une gamme beaucoup plus vaste de valeurs d'impulsion comprises entre 0 et $\sim 5\ m_e c$, et d'amplitude plus modeste (d'un facteur $\sim 10^3$. La pente positive ($f'_f(x,\, p_x) > 0$) que l'on observe pour la population suprathermique conditionne l'instabilité faisceau-plasma électronique.

Dans la partie de pente $\partial f/\partial p_x > 0$, la vitesse électronique vaut $\sim c$, d'où une longueur d'onde attendue $\lambda = 2\pi c/\omega_{pe}$. Or, cette longueur d'onde peut également être estimée graphiquement grâce à la Fig. 8.29, en particulier entre $200\ c/\omega_0$ et $250\ c/\omega_0$ où nous comptons huit périodes, soit une longueur d'onde moyenne $\lambda \approx 6.25\ c/\omega_0$, résultat proche de celui estimée précédemment.

Ces valeurs sont en accord avec le spectre du champ $|E_x(\omega,\, k)|^2$, calculé sur l'intervalle $[200,\, 250]\ c/\omega_0$ représenté en Fig. 8.30b. Ce spectre révèle une zone de forte amplitude (en bleu), centrée en $k \approx 1\ \omega_0/c$ et $\omega \approx 0.75\ \omega_0$. Si la valeur du nombre d'onde est très proche de celle obtenue théoriquement, la fréquence est en revanche légèrement plus faible que la valeur que nous pouvons estimer par $\omega = kc \approx 1.1\ \omega_0$. Nous pouvons attribuer cet écart au fait que l'instabilité faisceau-plasma est probablement dans un régime transitoire entre le régime cinétique, où la fréquence réelle de l'instabilité est $\omega \approx \omega_{pe}$, et le régime fluide (ou *réactif*), pour lequel la fréquence est cette fois $\omega \approx \omega_{pe}\left(1 - 0.4(n_f/n_e)^{1/3}\right)$ et où le rapport n_f/n_e n'est pas négligeable. Au regard de la Fig. 8.30a, nous pouvons également donner un ordre de grandeur du taux de croissance de l'instabilité, donnée en Eq. 8.13, en prenant $n_f/n_e \approx 10^{-2}$, $\gamma \sim 4$ et $\Delta p_x \sim 4$. Il vient alors $\Gamma_{\text{TSI}} \approx 2 \times 10^{-2}\ \omega_{pe}$, ce qui semble en bon accord avec ce qui est observé sur la Fig. 8.28 où on voit que l'instabilité faisceau-plasma ne met que quelques dizaines de ω_0^{-1} à se développer.

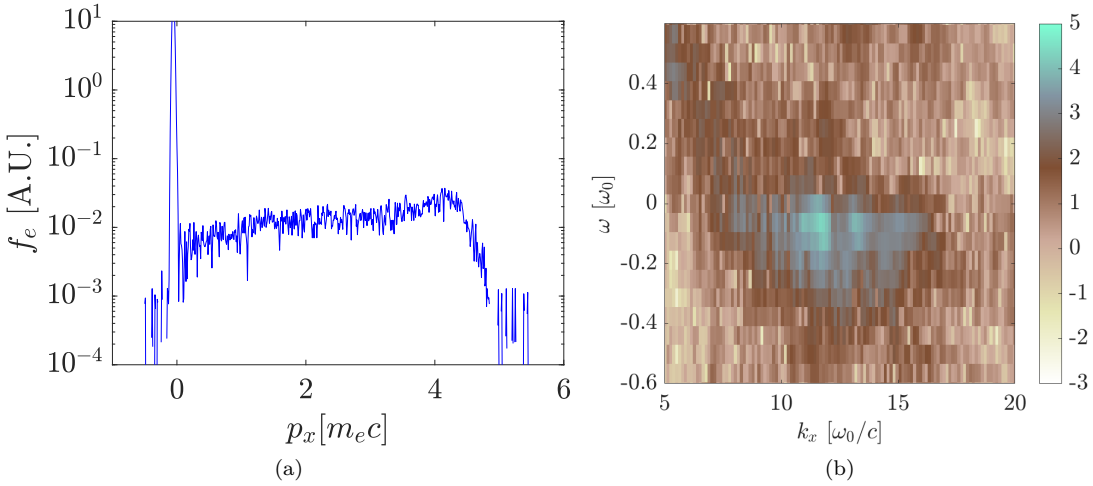


FIGURE 8.31 – (a) Distribution des énergies électroniques moyennées entre $x = 160\ c/\omega_0$ et $x = 170\ c/\omega_0$, à $t = 174\ \omega_0^{-1}$. Cette distribution montre le courant de retour porté par les électrons thermiques, nombreux et de faible impulsion, ainsi qu'une seconde population de moindre densité mais composée d'électrons relativistes. (b) Spectre $|E_x(\omega,\, k)|^2$ (en échelle $\log_{10}$) sur l'intervalle $160 < x\omega_0/c < 170$ et $100 < t\omega_0 < 200$, pour mettre en évidence les modes dus à l'instabilité électron-ion de Buneman ($\omega \sim 0.045\ \omega_{pe}$, $k \sim 10\ \omega_{pe}/c$).

8.3.5 Instabilité électron-ion de Buneman

Un autre type d'instabilité, de plus courte longueur d'onde, peut avoir lieu lorsque la vitesse relative entre le courant de retour, porté par les électrons, et les ions, avec lesquels il interagit (phénomène traité par [Thode & Sudan, 1975]), dépasse la vitesse thermique électronique : il s'agit de l'instabilité de Buneman [Buneman, 1959], que nous apercevons sur la Fig. 8.29 aux alentours de $x = 150\ c/\omega_0$ à $t = 174\ \omega_0^{-1}$. Considérons ici un faisceau électronique de vitesse de dérive V_e et de vitesse thermique $V_{e,\mathrm{th}}$ telles que

$$V_e > V_{e,\mathrm{th}}\,. \tag{8.14}$$

D'après la Fig. 8.31a, le courant de retour a une vitesse moyenne $V_e \approx -0.05\ c$. La largeur du pic nous renseigne également sur la vitesse thermique, que l'on peut estimer ici à $V_{e,\mathrm{th}} \approx 0.016\ c$ et la condition pour l'instabilité de Buneman entre les électrons du courant de retour et les ions, définie en Eq. (8.14), est donc bien vérifiée. La distribution moyennée entre $160\ c/\omega_0$ et $170\ c/\omega_0$ montre un plateau pour les électrons supra-thermiques, contrairement à la distribution de la Fig. 8.30a.

Il est possible de caractériser l'instabilité de Buneman en résolvant la relation de dispersion dans le plasma électron-proton [Gary, 1993]

$$1 + \sum_j K_j(\mathbf{k},\, \omega) = 0 \qquad \omega \in \mathbb{C}\,, \tag{8.15}$$

avec

$$K_j(\mathbf{k},\, \omega) = -\frac{\omega_j^2}{n_j}\frac{\partial}{\partial\omega}\int \frac{\mathrm{d}^3V\, f_j(\mathbf{V})}{\mathbf{k}\cdot\mathbf{V} - \omega}\,, \tag{8.16}$$

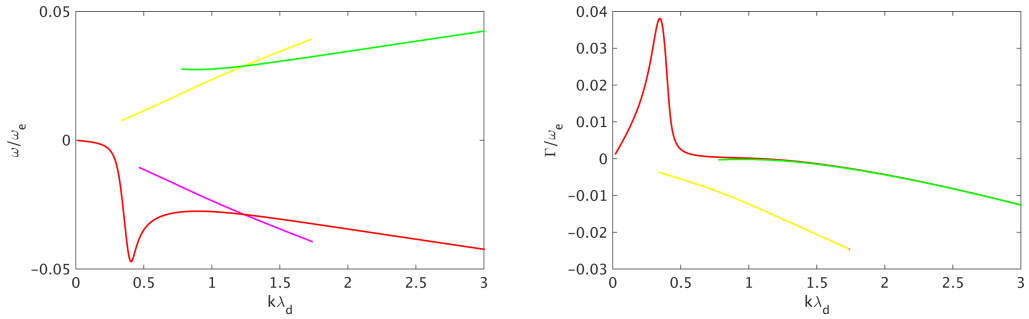


FIGURE 8.32 – Représentation des différentes solutions de la relation de dispersion de l'Eq. (8.15) pour (a) la composante réelle ω_r et (b) la composante imaginaire Γ, correspondant au taux d'accroissement de l'instabilité. La solution en rouge, la seule de partie imaginaire > 0, correspond à l'instabilité de Buneman.

où ω_j est la fréquence pour la composante j, n_j la densité, $\mathbf{k}$ le vecteur d'onde, $\mathbf{V}$ le vecteur vitesse et f_j la fonction de distribution maxwellienne telle que

$$f_j(\mathbf{V}) = \frac{n_j}{(2\pi V_{e,th,j}^2)^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\mathbf{V}-\mathbf{V}_{e,j})}{2V_{e,th,j}^2}\right) , \tag{8.17}$$

où $V_{e,j}$ et $V_{e,th,j}$ sont la vitesse moyenne de dérive et la vitesse thermique respectivement. La méthode proposée par [Fried & Gould, 1961] permet de résoudre numériquement l'Eq. (8.15) afin de déterminer la solution complexe $\omega = \omega_r + i\Gamma$.

La Fig. 8.32 montre différentes branches pour la solution avec $\omega(k)$ (figure de gauche) et $\Gamma(k)$ (figure de droite). Le mode de Buneman, en rouge, montre un pic en pulsation pour $k \approx 0.4\ \lambda_D^{-1} \approx 25\ \omega_0/c$ (λ_D étant la longueur de Debye électronique), une valeur de même ordre de grandeur que celle que l'on peut déterminer graphiquement sur le spectre de la Fig. 8.31b, montrant un maximum en amplitude compris entre $k = 10\ \omega_0/c$ et $k = 15\ \omega_0/c$. De même, la pulsation estimée numériquement, $\omega_{\max} \approx 0.045\ \omega_{pe}$ (Fig. 8.32 à gauche), est proche de celle déduite de la Fig. 8.31b, à savoir $\omega \approx 0.050\ \omega_{pe}$.

Remarque 8.3.1 Nous pouvons tenter de retrouver ces valeurs en utilisant les formules approchées, proposées dans la littérature [Huba, 2016]. Le nombre d'onde de l'instabilité de Buneman est prédit tel que

$$k = \omega_{pe}/V_d \,, \tag{8.18}$$

soit, dans notre cas, une valeur $k = 1/0.05 \approx 20\ \omega_0/c$, proche de l'intervalle déterminé spectralement. Le taux de croissance maximal associé est alors donné par la formule

$$\Gamma_{\text{BI}} = \frac{3^{1/2}}{2^{4/3}} \left(\frac{m_e}{m_i}\right)^{1/3} \omega_{pe} \,, \tag{8.19}$$

avec laquelle on obtient alors $\Gamma_{\text{BI}} = 0.057\ \omega_{pe}$, du même ordre que le taux de croissance déterminé grâce au solveur ($\Gamma_{\max} = 0.038\ \omega_{pe}$ sur la Fig. 8.32). La fréquence théorique est

quant à elle prédite par

$$\omega = 0.4 \left(\frac{m_e}{m_i}\right)^{1/3} \omega_{pe} \,, \tag{8.20}$$

affichant ici une valeur approchée $\omega \approx 0.033\ \omega_{pe}$.

8.3.6 Conclusion

Nous avons examiné un scénario d'interaction entre un faisceau γ ultra-intense et un plasma électron-proton. La diffusion Compton des photons sur les électrons du plasma crée un courant d'électrons relativistes, qui induit à son tour un courant de retour alimenté par les électrons froids. L'interpénétration de ces deux courants de signe opposé déclenche une instabilité faisceau-plasma électronique, tandis que le courant de retour, en interagissant avec les ions, excite une instabilité de type Buneman.

Cette étude préliminaire mériterait d'être complétée par une analyse des transferts d'énergie entre les différentes populations particulaires du systèmes. Elle invite aussi à être étendue en géométrie 2D ou 3D pour décrire l'instabilité de filamentation pouvant se développer dans la direction transverse [Martinez *et al.*, 2021] et son impact possible sur les ions aux temps longs.

Rappelons, pour conclure cette partie, que si sa pertinence astrophysique semble admise [Levinson, 2020; Vanthieghem *et al.*, 2022], sur un plan expérimental, ce type de scénario apparaît très prospectif : (i) les paramètres (intensité, énergie photonique, durée, taille transverse) du faisceau γ considérés resteront probablement longtemps hors de portée des installations laser ; (ii) le jour où cette capacité existera, il sera difficile d'isoler les photons γ des autres particules énergétiques (électrons, ions) créés lors de l'interaction laser-plasma, source de ces photons.

Bibliographie

Arthur, J., Boutet, S., Castagna, J., Chapman, H., Feng, Y., Foyt, W., Fritz, D., Gaffney, K., Gruebel, G., Hajdu, J. *et al.* (2007). *LCLS Ultrafast Science Instruments : Conceptual Design Report.* SLAC National Accelerator Lab., Menlo Park, CA (United States) .

Bret, A., Dieckmann, M. E. & Gremillet, L. (2010). *Recent progresses in relativistic beam-plasma instability theory.* Annales Geophysicae **28**, no. 11, p. 2127–2132.

Buneman, O. (1959). *Dissipation of currents in ionized media.* Physical Review **115**, no. 3, p. 503.

Cartlidge, E. (2018). *Physicists are planning to build lasers so powerful they could rip apart empty space.* Science .

Chalupskỳ, J., Krzywinski, J., Juha, L., Hájková, V., Cihelka, J., Burian, T., Vyšín, L., Gaudin, J., Gleeson, A., Jurek, M. *et al.* (2010). *Spot size characterization of focused non-Gaussian X-ray laser beams.* Optics Express **18**, no. 26, p. 27836–27845.

Chung, H.-K., Chen, M., Morgan, W., Ralchenko, Y. & Lee, R. (2005). *FLYCHK : Generalized population kinetics and spectral model for rapid spectroscopic analysis for all elements.* High Energy Density Physics **1**, no. 1, p. 3–12.

Cowan, T., Hunt, A., Phillips, T., Wilks, S., Perry, M., Brown, C., Fountain, W., Hatchett, S., Johnson, J., Key, M. *et al.* (2000). *Photonuclear fission from high energy electrons from ultraintense laser-solid interactions.* Physical Review Letters **84**, no. 5, p. 903.

Davis, J. & Petrov, G. (2014). *Modelling of non-LTE atomic physics processes in hot dense plasmas during the interaction with an intense short pulse laser.* Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics **47**, no. 9, p. 095402.

Déchard, J., Davoine, X., Gremillet, L. & Bergé, L. (2020). *Terahertz emission from submicron solid targets irradiated by ultraintense femtosecond laser pulses.* Physics of Plasmas **27**, no. 9, p. 093105.

Dervieux, V., Loupias, B., Baton, S., Lecherbourg, L., Glize, K., Rousseaux, C., Reverdin, C., Gremillet, L., Blancard, C., Silvert, V. *et al.* (2015). *Characterization of near-LTE, high-temperature and high-density aluminum plasmas produced by ultra-high intensity lasers.* High Energy Density Physics **16**, p. 12–17.

Fontes, C., Zhang, H., Abdallah Jr, J., Clark, R., Kilcrease, D., Colgan, J., Cunningham, R., Hakel, P., Magee, N. & Sherrill, M. (2015). *The Los Alamos suite of relativistic atomic physics codes.* Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics **48**, no. 14, p. 144014.

Fried, B. D. & Gould, R. W. (1961). *Longitudinal ion oscillations in a hot plasma.* The Physics of Fluids **4**, no. 1, p. 139–147.

Gary, S. P. (1993). *Theory of Space Plasma Microinstabilities.* Cambridge University Press.

Gremillet, L. (2014). *Introduction au transport électronique non-collisionnel : Instabilités faisceau-plasma et transport résistif.* École d'Aquitaine « ondes et matière ».

Gremillet, L., Bonnaud, G. & Amiranoff, F. (2002). *Filamented transport of laser-generated relativistic electrons penetrating a solid target.* Physics of Plasmas **9**, no. 3, p. 941–948.

Hau-Riege, S. P., Graf, A., Döppner, T., London, R. A., Krzywinski, J., Fortmann, C., Glenzer, S., Frank, M., Sokolowski-Tinten, K., Messerschmidt, M. *et al.* (2012). *Ultrafast transitions from solid to liquid and plasma states of graphite induced by x-ray free-electron laser pulses.* Physical review letters **108**, no. 21, p. 217402.

Hoarty, D., Allan, P., James, S., Brown, C., Hobbs, L., Hill, M., Harris, J., Morton, J., Brookes, M., Shepherd, R. *et al.* (2013). *Observations of the effect of ionization-potential depression in hot dense plasma.* Physical Review Letters **110**, no. 26, p. 265003.

Huba, J. (2016). *Naval Research Laboratory Formulary.* Rapport technique, NRL/PU/6790-16-614.

Hüning, M. *et al.* (2013). *Status of the European XFEL.* WEZB101, these proceedings .

Kaastra, J. S. & Mewe, R. (1993). *X-ray emission from thin plasmas. I - Multiple Auger ionisation and fluorescence processes for Be to Zn.* Astronomy and Astrophysics Supplement Series **97**, p. 443–482.

Karzas, W. & Latter, R. (1961). *Electron Radiative Transitions in a Coulomb Field.* The Astrophysical Journal Supplement Series **6**, p. 167.

Khakhulin, D., Otte, F., Biednov, M., Boemer, C., Choi, T.-K., Diez, M., Galler, A., Jiang, Y., Kubicek, K., Lima, F. A. *et al.* (2020). *Ultrafast X-ray photochemistry at European XFEL : capabilities of the femtosecond X-ray experiments (FXE) instrument.* Applied Sciences **10**, no. 3, p. 995.

Kim, Y.-K., Santos, J. P. & Parente, F. (2000). *Extension of the binary-encounter-dipole model to relativistic incident electrons.* Physical Review A **62**, no. 5, p. 052710.

Levinson, A. (2020). *Plasma kinetic effects in relativistic radiation-mediated shocks.* Physical Review E **102**, no. 6, p. 063210.

Liu, H. & Spence, J. C. (2016). *XFEL data analysis for structural biology.* Quantitative Biology **4**, no. 3, p. 159–176.

Lobet, M., d'Humières, E., Grech, M., Ruyer, C., Davoine, X. & Gremillet, L. (2016). *Modeling of radiative and quantum electrodynamics effects in pic simulations of ultra-relativistic laser-plasma interaction.* Journal of Physics : Conference Series **688**, no. 1, p. 012058.

Lotz, W. (1970). *Electron-impact ionization cross-sections for atoms up to Z= 108.* Zeitschrift für Physik A Hadrons and nuclei **232**, no. 2, p. 101–107.

Maksimchuk, A., Gu, S., Flippo, K., Umstadter, D. & Bychenkov, V. Y. (2000). *Forward ion acceleration in thin films driven by a high-intensity laser.* Physical Review Letters **84**, no. 18, p. 4108.

Martinez, B., d'Humières, E. & Gremillet, L. (2018). *Synchrotron emission from nanowire array targets irradiated by ultraintense laser pulses.* Plasma Physics and Controlled Fusion **60**, no. 7, p. 074009.

Martinez, B., Grismayer, T. & Silva, L. O. (2021). *Compton-driven beam formation and magnetization via plasma microinstabilities.* Journal of Plasma Physics **87**, no. 3.

Medvedev, M. V. & Loeb, A. (1999). *Generation of magnetic fields in the relativistic shock of gamma-ray burst sources.* The Astrophysical Journal **526**, no. 2, p. 697.

Meszaros, P. (2006). *Gamma-ray bursts.* Reports on Progress in Physics **69**, no. 8, p. 2259.

Mishra, R., Leblanc, P., Sentoku, Y., Wei, M. & Beg, F. (2013). *Collisional particle-in-cell modeling for energy transport accompanied by atomic processes in dense plasmas.* Physics of Plasmas **20**, no. 7, p. 072704.

Mourou, G. (2019). *Nobel Lecture : Extreme light physics and application.* Reviews of Modern Physics **91**, no. 3, p. 030501.

Nuter, R., Gremillet, L., Lefebvre, E., Lévy, A., Ceccotti, T. & Martin, P. (2011). *Field ionization model implemented in particle in cell code and applied to laser-accelerated carbon ions.* Physics of Plasmas **18**, no. 3, p. 033107.

Pandit, R. R. (2015). *Numerical study of γ-ray production in ultra-intense laser-plasma interaction* .

Pérez, F., Gremillet, L., Decoster, A., Drouin, M. & Lefebvre, E. (2012). *Improved modeling of relativistic collisions and collisional ionization in particle-in-cell codes.* Physics of Plasmas **19**, no. 8, p. 083104.

Raffestin, D., Lecherbourg, L., Lantuéjoul, I., Vauzour, B., Masson-Laborde, P., Davoine, X., Blanchot, N., Dubois, J., Vaisseau, X., d'Humières, E. *et al.* (2021). *Enhanced ion acceleration using the high-energy petawatt PETAL laser.* Matter and Radiation at Extremes **6**, no. 5, p. 056901.

Raj, G., Kononenko, O., Gilljohann, M., Doche, A., Davoine, X., Caizergues, C., Chang, Y.-Y., Cabadağ, J. C., Debus, A., Ding, H. *et al.* (2020). *Probing ultrafast magnetic-field generation by current filamentation instability in femtosecond relativistic laser-matter interactions.* Physical Review Research **2**, no. 2, p. 023123.

Ridgers, C., Brady, C. S., Duclous, R., Kirk, J., Bennett, K., Arber, T., Robinson, A. & Bell, A. (2012). *Dense electron-positron plasmas and ultraintense γ rays from laser-irradiated solids.* Physical Review Letters **108**, no. 16, p. 165006.

Robinson, A., Strozzi, D., Davies, J., Gremillet, L., Honrubia, J., Johzaki, T., Kingham, R., Sherlock, M. & Solodov, A. (2014). *Theory of fast electron transport for fast ignition.* Nuclear Fusion **54**, no. 5, p. 054003.

Royle, R., Sentoku, Y., Mancini, R. C., Paraschiv, I. & Johzaki, T. (2017). *Kinetic modeling of x-ray laser-driven solid Al plasmas via particle-in-cell simulation.* Physical Review E **95**, no. 6, p. 063203.

Sentoku, Y., d'Humières, E., Romagnani, L., Audebert, P. & Fuchs, J. (2011). *Dynamic control over mega-ampere electron currents in metals using ionization-driven resistive magnetic fields.* Physical Review Letters **107**, no. 13, p. 135005.

Sistrunk, E., Spinka, T., Bayramian, A., Betts, S., Bopp, R., Buck, S., Charron, K., Cupal, J., Deri, R., Drouin, M. *et al.* (2017). *All diode-pumped, high-repetition-rate advanced petawatt laser system (HAPLS).* CLEO : Science and Innovations p. STh1L–2.

Sommerfeld, A. (1939). *Atombau und Spektrallinien, vol. II.* F. Vieweg und Sohn, Braunschweig p. 457.

Stewart, J. C. & Pyatt Jr, K. D. (1966). *Lowering of ionization potentials in plasmas.* The Astrophysical Journal **144**, p. 1203.

Thode, L. E. & Sudan, R. (1975). *Plasma heating by relativistic electron beams. II. Return current interaction.* The Physics of Fluids **18**, no. 11, p. 1564–1573.

Vanthieghem, A., Mahlmann, J. F., Levinson, A., Philippov, A. A., Nakar, E. & Fiuza, F. (2022). *The role of plasma instabilities in relativistic radiation mediated shocks : stability analysis and particle-in-cell simulations.* arXiv preprint arXiv :2201.05494 .

Meyer-ter Vehn, J. & Ramis, R. (2019). *On collisional free-free photon absorption in warm dense matter.* Physics of Plasmas **26**, no. 11, p. 113301.

Verner, D., Yakovlev, D., Band, I. & Trzhaskovskaya, M. (1993). *Subshell photoionization cross sections and ionization energies of atoms and ions from He to Zn.* Atomic Data and Nuclear Data Tables **55**, no. 2, p. 233–280.

Vinko, S., Ciricosta, O., Cho, B., Engelhorn, K., Chung, H.-K., Brown, C., Burian, T., Chalupskỳ, J., Falcone, R., Graves, C. *et al.* (2012). *Creation and diagnosis of a solid-density plasma with an X-ray free-electron laser.* Nature **482**, no. 7383, p. 59–62.

Wu, D., He, X., Yu, W. & Fritzsche, S. (2018). *Particle-in-cell simulations of laser–plasma interactions at solid densities and relativistic intensities : the role of atomic processes.* High Power Laser Science and Engineering **6**.

Yabashi, M., Tanaka, H., Tanaka, T., Tomizawa, H., Togashi, T., Nagasono, M., Ishikawa, T., Harries, J., Hikosaka, Y., Hishikawa, A. *et al.* (2013). *Compact xfel and amo sciences : Sacla and scss.* Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics **46**, no. 16, p. 164001.

Yoneda, H., Inubushi, Y., Yabashi, M., Katayama, T., Ishikawa, T., Ohashi, H., Yumoto, H., Yamauchi, K., Mimura, H. & Kitamura, H. (2014). *Saturable absorption of intense hard X-rays in iron.* Nature Communications **5**, no. 1, p. 1–5.

Yoon, J. W., Kim, Y. G., Choi, I. W., Sung, J. H., Lee, H. W., Lee, S. K. & Nam, C. H. (2021). *Realization of laser intensity over* 10^{23} W/cm^2. Optica **8**, no. 5, p. 630–635.

9 Conclusion

9.1 Résumé

Ces travaux de thèse avaient pour objectif premier d'améliorer la description de la physique atomique et radiative du code CALDER, pour des plasmas à densité solide. Nous avons pour cela inclus un module d'abaissement des potentiels d'ionisation permettant de prendre en compte l'effet de l'environnement plasma sur les niveaux d'énergie ainsi que l'ionisation par pression. Ce module comprend les deux modèles historiques pour la description de ce phénomène, à savoir le modèle d'Ecker-Kröll [Ecker & Kröll, 1963] et le modèle de Stewart-Pyatt [Stewart & Pyatt Jr, 1966]. Si l'effet de l'IPD est négligeable pour les plasmas peu denses, nous avons montré que son effet pouvait être important à densité solide.

L'ionisation collisionnelle, déjà incluse dans CALDER [Pérez *et al.*, 2012], a été remaniée de sorte à résoudre l'ionisation sur la structure $n\ell j$ des espèces et permettre ainsi l'ionisation collisionnelle en couche interne, accompagnée de la production de lacunes électroniques. Afin d'améliorer la description de la cinétique atomique, un modèle de recombinaison à trois corps a été implémenté. Pour des raisons de temps de calcul, nous avons réduit ce processus à trois corps, faisant intervenir deux électrons libres et un ion, à un processus binaire électron-ion plongé dans un bain électronique. Malgré cette simplification, ce modèle nous a permis de montrer, via des comparaisons avec le modèle de Saha, que la description de la cinétique atomique de CALDER s'en trouvait améliorée pour des plasmas à densité solide ($n_i \sim 10^{22-23}$ cm^{-3}) à températures modérées ($T_e < 1$ keV).

La nouvelle capacité de CALDER à produire des ions avec une lacune en couches internes nous a amené à considérer le processus de désexcitation atomique. Nous nous sommes pour cela basé sur les travaux de [Kaastra & Mewe, 1993], proposant, pour une lacune électronique unique, l'ensemble des combinaisons d'émission radiative et non radiative (émission d'électrons Auger) permettant à l'ion de recouvrer son état fondamental. Une modification de l'algorithme initial nous a permis de distinguer le cas d'électrons Auger issus d'une transition de type KLL, qui peuvent avoir un impact non négligeable sur la dynamique d'ionisation et de relaxation, du reste des électrons Auger [Galtier *et al.*, 2011]. Les photons émis lors de

ce processus de désexcitation par cascade permettent d'obtenir des spectres d'émission qui peuvent être utiles pour l'analyse de diagnostics spectroscopiques.

La production de photons particulaires dans CALDER, via la désexcitation atomique ou le Bremsstrahlung [Martinez *et al.*, 2019] par exemple, a conduit à intégrer dans le code un modèle de transport radiatif. Ce dernier inclut le processus de photoionisation et son processus inverse, la recombinaison radiative. Des tests ont montré que l'algorithme de transport radiatif implémenté dans CALDER permettait de retrouver les coefficients d'atténuation proposés dans la base de données du NIST. Enfin, nous avons introduit un modèle de diffusion Compton, basé sur l'algorithme utilisé dans le code GEANT4 [Truscott *et al.*, 2000] dont la validité a été largement éprouvée via des comparaisons avec des modèles théoriques issus de la littérature.

Pour éviter que l'ajout de ces processus n'engendre une croissance démesurée du temps de calcul, du fait de la grande quantité de macro-particules qu'ils produisent, nous avons implémenté dans le code un algorithme de coalescence des macro-particules tiré de [Vranic *et al.*, 2015] que nous avons ajusté à nos besoin avec l'introduction de trois paramètres numériques permettant de faire varier l'ampleur et la fréquence de la coalescence de chaque espèce.

L'effet de l'ensemble de ces nouveaux processus a été illustré dans le contexte de plasmas en cours de thermalisation en activant ou désactivant les nouveaux modules. Nous avons montré que les cas intégrant les processus implémentés permettaient de retrouver des distributions ioniques très proches de celles prédites par le modèle de Saha, au quasi-équilibre thermodynamique. Nous avons également pu observer une amélioration de la description temporelle de la dynamique atomique en comparant nos résultats de simulation avec le code de cinétique atomique FLYCHK.

Enfin, trois applications numériques sont venues conclure ces travaux. La première a porté sur l'effet de la diffusion Compton lors de l'interaction entre un faisceau photonique (particulaire) de très forte intensité (10^{24} W/cm^2) et un plasma proton-électron. Nous avons vu à cette occasion que le transfert d'énergie entre le faisceau photonique et les électrons libres entraînait la génération d'un courant d'électrons rapides, neutralisé par un courant de retour porté par les électrons thermiques. L'interaction de ces deux courants superposés a donné naissance à une instabilité de type faisceau-plasma et à une instabilité de Buneman, que nous avons toutes deux caractérisées graphiquement et analytiquement. Une deuxième application a porté sur l'apport des nouveaux processus atomiques dans le contexte de l'interaction entre un laser UHI et une cible d'Aluminium solide. Si les simulations 1D ont montré que ces processus avaient tendance à compenser leurs effets sur la cinétique du plasma (l'IPD tendant à favoriser l'ionisation tandis que la recombinaison tend au contraire à réduire le degré de charge ionique), les simulations 2D ont montré pour leur part des différences locales en ce qui concerne la température électronique et la charge ionique moyenne. Même si ces effets sont fins, nous avons vu qu'ils impactaient d'autres grandeurs comme la conductivité électrique et donc également les courants et les champs électromagnétiques. Nous avons ainsi montré que le phénomène de filamentation magnétique était plus intense pour la simulation prenant en compte tous les processus. Finalement, une dernière étude a eu pour objet de faire interagir un faisceau X de haute intensité avec une cible d'Aluminium solide. Nous avons confirmé que pour une intensité de 1.36×10^{17} W/cm^2, le chauffage de la cible était principalement dû à la production d'électrons Auger KLL et de photo-électrons résultant de la photoionisation [Galtier *et al.*, 2011; Deschaud *et al.*, 2020]. Nos modèles nous ont permis d'obtenir des résultats proches de ceux obtenus par le code PICLS [Royle *et al.*, 2017]. Une étude paramétrique a été menée afin de mesurer l'effet de l'énergie photonique du faisceau

sur le chauffage de la cible, à intensité constante. Ceci nous a permis de mettre en évidence l'existence d'une valeur optimale d'énergie photonique pour le chauffage, qui semble varier en fonction de l'intensité du faisceau. Différents diagnostics ont montré que cet optimum résultait d'une double compétition : une première entre la contribution des électrons Auger et celle des photo-électrons pour le chauffage et une deuxième, découlant directement de la section efficace de photoionisation, entre l'augmentation de l'énergie des photo-électrons et la diminution du nombre de photo-électrons créés.

9.2 Perspectives

Si ces différentes études ont montré une capacité accrue du code Calder à décrire la cinétique des plasma dans des régimes de haute densité d'énergie, elles ont parfois été l'occasion de souligner les limites de nos modèles. Nous pouvons toutefois imaginer un certain nombre d'améliorations qui pourraient permettre de les contourner.

Ainsi, bien que les modèles de [Ecker & Kröll, 1963] et de [Stewart & Pyatt Jr, 1966] représentent en première approximation une nette amélioration pour la description des plasmas à haute densité, nous avons vu à la fin du Chap. 3 que ni l'un ni l'autre ne permettait de décrire convenablement l'ensemble des résultats observés expérimentalement. Le recours à des modèles plus élaborés [Son *et al.*, 2014; Li & Rosmej, 2020; Zhou *et al.*, 2021] pourraient permettre de raffiner la description de ce phénomène dans Calder.

De même, il pourrait être envisagé d'améliorer la prise en compte des effets d'environnement plasma sur l'évaluation de la section efficace de photoionisation.

L'implémentation du processus de Bremsstrahlung inverse pourrait constituer une amélioration conséquente de notre modèle de transport radiatif. Nous avons évalué son effet un exemple d'interaction entre un faisceau photonique de forte intensité (10^{19} W/cm^2) et une cible d'Aluminium solide, en montrant que le chauffage était dû en partie à ce processus. Étant un processus à trois corps (photon-électron-ion), nous pourrions nous inspirer de la recombinaison à trois corps pour son implémentation en considérant un fond photonique, par exemple.

Une autre piste d'amélioration pour les processus atomiques concerne la désexcitation atomique par cascade, dont l'hypothèse d'instantanéité est une approximation forte. Celle-ci pourrait être levée en tenant compte de la durée de vie finie des lacunes en couches internes. Cette amélioration permettrait ainsi de produire des ions avec plus d'une lacune en couches internes tels qu'observés expérimentalement [Yoneda *et al.*, 2014].

Bibliographie

Deschaud, B., Peyrusse, O. & Rosmej, F. (2020). *Simulation of XFEL induced fluorescence spectra of hollow ions and studies of dense plasma effects.* Physics of Plasmas **27**, no. 6, p. 063303.

Ecker, G. & Kröll, W. (1963). *Lowering of the ionization energy for a plasma in thermodynamic equilibrium.* The Physics of Fluids **6**, no. 1, p. 62–69.

Galtier, E., Rosmej, F., Dzelzainis, T., Riley, D., Khattak, F., Heimann, P., Lee, R., Nelson, A., Vinko, S., Whitcher, T. *et al.* (2011). *Decay of cystalline order and equilibration during the solid-to-plasma transition induced by 20-fs microfocused 92-eV free-electron-laser pulses.* Physical Review Letters **106**, no. 16, p. 164801.

Kaastra, J. S. & Mewe, R. (1993). *X-ray emission from thin plasmas. I - Multiple Auger ionisation and fluorescence processes for Be to Zn.* Astronomy and Astrophysics Supplement Series **97**, p. 443–482.

Li, X. & Rosmej, F. (2020). *Analytical approach to level delocalization and line shifts in finite temperature dense plasmas.* Physics Letters A **384**, no. 25, p. 126478.

Martinez, B., Lobet, M., Duclous, R., d'Humières, E. & Gremillet, L. (2019). *High-Energy Radiation and Pair Production by Coulomb Processes in Particle-in-Cell Simulations.* Physics of Plasmas **26**, no. 10, p. 103109.

Pérez, F., Gremillet, L., Decoster, A., Drouin, M. & Lefebvre, E. (2012). *Improved modeling of relativistic collisions and collisional ionization in particle-in-cell codes.* Physics of Plasmas **19**, no. 8, p. 083104.

Royle, R., Sentoku, Y., Mancini, R. C., Paraschiv, I. & Johzaki, T. (2017). *Kinetic modeling of x-ray laser-driven solid Al plasmas via particle-in-cell simulation.* Physical Review E **95**, no. 6, p. 063203.

Son, S.-K., Thiele, R., Jurek, Z., Ziaja, B., Santra, R. *et al.* (2014). *Quantum-mechanical calculation of ionization-potential lowering in dense plasmas.* Physical Review X **4**, no. 3, p. 031004.

Stewart, J. C. & Pyatt Jr, K. D. (1966). *Lowering of ionization potentials in plasmas.* The Astrophysical Journal **144**, p. 1203.

Truscott, P., Lei, F., Dyer, C., Ferguson, C., Gurriaran, R., Nieminen, P., Daly, E., Apostolakis, J., Giani, S., Pia, M. *et al.* (2000). *Geant4-a new Monte Carlo toolkit for simulating space radiation shielding and effects.* Institute of Electrical and Electronics Engineers p. 147–152.

Vranic, M., Grismayer, T., Martins, J. L., Fonseca, R. A. & Silva, L. O. (2015). *Particle merging algorithm for PIC codes.* Computer Physics Communications **191**, p. 65–73.

Yoneda, H., Inubushi, Y., Yabashi, M., Katayama, T., Ishikawa, T., Ohashi, H., Yumoto, H., Yamauchi, K., Mimura, H. & Kitamura, H. (2014). *Saturable absorption of intense hard X-rays in iron.* Nature Communications **5**, no. 1, p. 1–5.

Zhou, M., Li, L., Fang, X. & Wu, R. (2021). *IPD capacitor with pseudo-symmetry for isolated differential signal transfer applications.* Microelectronics Journal **108**, p. 104966.

Annexe

	Variable	Valeur ($\gamma_0 = 1$ µm)
Densité	n_c	1.11×10^{27} m^{-3}
Vitesse	c	3.00×10^{8} m/s
Distance	c/ω_0	1.59×10^{-7} m
Temps	ω_0^{-1}	5.31×10^{-16} s
Masse	m_e	9.11×10^{-31} kg
Impulsion	$m_e c$	2.73×10^{-22} kg.m/s
Energie	$m_e c^2$	8.20×10^{-14} J
Densité de courant	$n_c e c$	5.34×10^{-16} A/m^2
Champ magnétique	$m_e \omega_0 / e$	1.07×10^{4} T
Champ électrique	$m_e \omega_0 c / e$	3.21×10^{12} V/m

Table 9.1 – Normalisations laser.

ÉCOLE DOCTORALE
Ondes et matière
(EDOM)

Titre : Modélisation de la physique atomique et du transport radiatif dans un code particle-in-cell

Mots clés : codes particle-in-cell, simulation numérique, physique atomique, transport radiatif, laser

Résumé : La matière à haute densité d'énergie est au cœur de nombreux systèmes physiques tels que les plasmas stellaires ou les plasmas de fusion, par exemple. Le meilleur moyen de recréer ces conditions extrêmes en laboratoire est l'utilisation de lasers d'ultra-haute intensité (10^{17-23} $\mathrm{W/cm^2}$) présentant des impulsions ultracourtes ($\sim$ dizaine de femtosecondes). L'étude de la physique riche et complexe qui découle de ces systèmes d'interaction nécessite de faire appel à la simulation numérique. Les codes de type *particle-in-cell* (PIC) sont des outils particulièrement adaptés à ces échelles spatiale ($\sim \mu\mathrm{m}$) et temporelle ($\sim$ fs). Cependant, ils ne permettent pas, dans leur formulation originelle, de prendre en compte les interactions inter-particules, les amenant donc à négliger les processus de physique atomique ou le transport radiatif. Ce constat a mené à leur couplage avec des algorithmes de type Monte Carlo (MC), souvent basés sur l'estimation de la section efficace du processus considéré. Bien que cet apport ait permis d'intégrer un certain nombre de processus dans les principaux codes PIC, ces derniers présentent une description souvent partielle de la physique atomique, en particulier pour les plasmas à forte densité ($n_i > 10^{22}$ $\mathrm{cm^{-3}}$) et de température modérée ($T_e < 1$ keV). Pour pallier ce défaut, nous proposons un modèle PIC-MC de physique atomique et radiative comprenant : (i) l'abaissement des potentiels d'ionisation dû aux effets de densité ; (ii) l'ionisation collisionnelle résolue sur la structure atomique fine ; (iii) la recombinaison à trois corps ; (iv) la désexcitation atomique par cascade basée sur des tables d'émission (radiative et Auger) instantanée ; (v) la photoionisation ; (vi) la recombinaison radiative ; (vii) la diffusion Compton. L'effet de ces processus sera illustré dans le code CALDER, développé au CEA/DAM, dans des contextes de plasmas hors-équilibre en cours de thermalisation ou encore dans l'interaction de cibles solides d'Aluminium avec des lasers d'ultra-haute intensité ou des faisceaux photoniques X tels que ceux issus des lasers à électrons libres.

Title : Modeling of atomic physics and radiation transport in a particle-in-cell code

Keywords : particle-in-cell codes, numerical simulation, atomic physics, radiation transport, laser

Abstract : High energy density matter is at the heart of many physical systems such as stellar plasmas or fusion plasmas, for example. The best way to recreate these extreme conditions in the laboratory is to use ultra-high intensity lasers (10^{17-23} $\mathrm{W/cm^2}$) with ultrashort pulses ($\sim$ ten of femtoseconds). The study of the rich and complex physics resulting from these interaction systems requires the use of numerical simulation. The *particle-in-cell* (PIC) codes are particularly suitable tools for these spatial ($\sim \mu\mathrm{m}$) and temporal ($\sim$ fs) scales. However, in their original formulation, they do not allow inter-particle interactions to be taken into account, thus leading to neglect atomic physics processes and radiative transport. This observation led to their coupling with Monte Carlo (MC) algorithms, often based on the estimation of the cross section of the considered process. Although this contribution allowed to integrate a certain number of processes into the main PIC codes, the latter often present partial description of atomic physics, in particular for high density plasmas ($n_i > 10^{22}$ $\mathrm{cm^{-3}}$) and moderate temperature ($T_e < 1$ keV). To overcome this defect, we propose a PIC-MC model of atomic and radiative physics including : (i) the lowering of ionization potentials due to density effects ; (ii) the collisional ionization resolved on the atomic fine structure ; (iii) the three-body recombination ; (iv) the atomic de-excitation by cascade based on instantaneous (radiative and Auger) emission tables ; (v) the photoionization ; (vi) the radiative recombination ; (vii) the Compton scattering. The effect of these processes will be illustrated in the CALDER code, developed at CEA/DAM, in the context of out-of-equilibrium plasmas undergoing thermalization or in the interaction of solid aluminum targets with ultra-high intensity lasers or X photonic beams such as those emitted by free-electron lasers.