

N° d'ordre: 00000

# THÈSE

présentée

(devant l'Université Paris-Sud 11

pour obtenir

*en Sciences Physiques*

le grade de : DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE PARIS-SUD  
Mention ONDES ET MATIÈRE

par

Thomas VALLOTTON

Titre de la thèse :

*Ionisation par la pression et effets  
de densité dans les plasmas  
hors équilibre thermodynamique local*

*Soutenu le 21 décembre 2009*

À soutenir le plus tôt possible devant la commission d'examen

Mme	MM. :	A. CALISTI	Rapporteurs
M		M. POIRIER	<i>Rapporteur</i>
	MM. :	G. MAYNARD	Examineurs
		D. BENREDJEM	<i>Directeur de Thèse</i>
		O. PEYRUSSE	<i>Examinateur</i>
		J. BAUCHE	<i>Invité</i>



# Table des matières

<b>1</b>	<b>Effets de l'environnement plasma sur la statistique des ions (revue)</b>	<b>9</b>
1.1	Généralités sur les effets de densité dans les plasmas . . . . .	10
1.1.1	Abaissement du seuil d'ionisation et écrantage des niveaux	10
1.1.2	Résonances dans le continuum . . . . .	12
1.2	Modèles d'équilibres d'ionisation et d'excitation des ions dans les plasmas . . . . .	13
1.2.1	Rappels : cadre général de l'équilibre collisionnel-radiatif .	13
1.2.2	Un cas particulier : le modèle coronal . . . . .	14
1.2.3	Equilibre thermodynamique local . . . . .	15
1.3	Phénomène d'ionisation par la pression dans un plasma HETL . .	20
1.3.1	États collectivisés . . . . .	21
1.3.2	Un nouveau processus dans le modèle collisionnel radiatif : l'ionisation par effet tunnel . . . . .	21
<b>2</b>	<b>Ionisation par la pression et modèle collisionnel-radiatif</b>	<b>25</b>
2.1	Calcul des fonctions d'onde électroniques . . . . .	26
2.1.1	Méthodes autocohérentes . . . . .	26
2.1.1.1	Modèle du champ central . . . . .	26
2.1.1.2	Les différents potentiels utilisés . . . . .	28
2.1.2	Calcul des fonctions d'onde électroniques par une méthode spectrale . . . . .	31
2.1.2.1	Grille de calcul . . . . .	31
2.1.2.2	Utilisation d'une base de B-splines . . . . .	32
2.1.2.3	Agencement du calcul . . . . .	33
2.2	Les fonctions d'onde libres résonnantes . . . . .	36
2.2.1	Passage dans le continuum . . . . .	36
2.2.2	Fonctions d'onde libres et densité d'états . . . . .	37
2.3	Modèle collisionnel-radiatif et ionisation par la pression . . . . .	40
2.3.1	Les différents processus à prendre en compte . . . . .	40
2.3.1.1	Emission spontanée . . . . .	41

	2.3.1.2	Déexcitation et excitation collisionelles . . . . .	41
	2.3.1.3	Ionisation collisionnelle et recombinaison à trois corps . . . . .	42
	2.3.1.4	La recombinaison radiative . . . . .	43
	2.3.2	Ionisation par la pression . . . . .	43
<b>3</b>		<b>Influence du plasma sur les fonctions d'onde électroniques et les énergies de configuration<sup>d</sup></b>	<b>47</b>
x v	3.1	Fonctions d'onde liées et libres résonnantes . . . . .	48
x	3.1.1	Calculs en l'absence de plasma . . . . .	48
	3.1.1.1	Résultats obtenus pour les ions hydrogénoïdes . .	48
	3.1.1.2	Ions multi-électroniques . . . . .	51
	3.1.2	Calculs en présence d'un plasma dense . . . . .	52
	3.1.3	Orbitales du continuum . . . . .	56
	3.1.3.1	Densités d'états partielle et totale . . . . .	57
	3.1.3.2	Calcul des orbitales . . . . .	58
	3.1.4	Fonctions d'onde libres localisées . . . . .	59
	3.2	Résonances dans le continuum . . . . .	60
	3.2.1	Caractéristiques des résonances . . . . .	60
	3.2.2	Le problème de la résolution d'une résonance . . . . .	62
x + x	3.3	Energie <sup>d</sup> de configuration <sup>d</sup> . . . . .	64
	3.3.1	Energie moyenne de configuration dans un ion isolé . . . .	64
	3.3.1.1	Rappels : . . . . .	64
	3.3.1.2	Résultats numériques . . . . .	65
	3.3.2	Energie obtenue en présence du plasma . . . . .	66
<b>4</b>		<b>Inclusion des niveaux partiellement liés dans un modèle collisionnel- radiatif</b>	<b>71</b>
	4.1	Calculs sans effets de densité . . . . .	72
	4.1.1	Etude d'un plasma de carbone . . . . .	72
	4.2	Effets de densité dans le modèle collisionnel-radiatif . . . . .	74
	4.2.1	Traitement partiel par modification des énergies . . . . .	74
	4.2.1.1	Suppression des configurations ionisées . . . . .	75
	4.2.1.2	Inclusion des configurations ionisées . . . . .	77
	4.2.2	Définition d'un taux d'ionisation par effet tunnel . . . . .	78
	4.2.3	Calcul du degré d'ionisation et états de charge . . . . .	80
	4.2.3.1	Discussion : retour sur l'influence de la densité électronique . . . . .	84

# Introduction

L'étude des propriétés physiques des plasmas denses et chauds est d'un grand intérêt pour la réalisation et la compréhension d'un grand nombre d'applications physiques (fusion par confinement inertiel, production de sources X, observation et caractérisation des milieux stellaires partiellement ionisés). Les grandeurs que l'on cherche à déterminer sont, entre autres, l'opacité, l'émissivité et le degré d'ionisation du plasma obtenu dans des expériences (plasma de laboratoire) ou observé dans la nature (plasma stellaire). Lorsque le plasma est dense, il est nécessaire de prendre en compte son effet sur la structure des ions. En effet, les particules du plasma affectent le potentiel vu par les électrons des ions, et ainsi l'équilibre du système. Pour étudier cet équilibre, on peut adopter une démarche variationnelle statistique dans le cadre des plasmas à l'équilibre thermodynamique local (ETL). Si le plasma est fortement hors équilibre thermodynamique local (HETL), il est nécessaire de prendre en compte les différents processus reliant les différents états atomiques des ions pour déterminer l'état du plasma.

X A chaque processus physique correspond un taux reliant les différents niveaux atomiques peuplés, présents dans le plasma. A l'approximation où l'on regroupe les niveaux en configuration<sup>4</sup>, la résolution du système d'équations reliant toutes les configurations permet d'obtenir les différentes quantités recherchées. Pour obtenir ces équations, il est nécessaire de déterminer les énergies de ces configurations. On dispose pour cela de différentes bases de données fournissant ces énergies pour des ions isolés (telle celle du NIST). Une première façon de prendre en compte les effets de densité consiste à introduire l'influence du plasma sur les énergies des niveaux des ions. Les électrons libres du plasma qui pénètrent dans la sphère ionique écrantent la charge du noyau vue par les électrons liés. Cela a pour conséquence de diminuer l'énergie de liaison des électrons, et donc de rapprocher l'énergie<sup>44</sup> des configurations électroniques du seuil d'ionisation. On comprend alors que lorsque la densité du plasma est suffisamment importante, les sous-couches les plus externes peuvent passer dans le continuum. Ces énergies sont calculées quantiquement, en résolvant, pour chaque configuration à  $N$  électrons, l'équation aux valeurs propres faisant intervenir un Hamiltonien à  $N$  électrons. Il est donc nécessaire de prendre en compte l'effet du plasma dans celui-ci. Les modèles utilisés actuellement représentent la correction due au plasma par une

Laquelle de ces façons est-elle considérée pour effectuer les calculs qui vont suivre ?  
et renvoyer au paragraphe correspondant dans chapitre 2

modification du potentiel de l'ion isolé, vu par les électrons. Cette modification prend généralement la forme d'un terme supplémentaire calculé à l'aide d'un modèle simple (modèle de Debye-Hückel ou de cellule ionique, par exemple).

L'abaissement du potentiel d'ionisation, dû à l'interaction avec le plasma, peut être interprété de différentes façons :

- On peut considérer qu'il se produit quand les électrons libres du plasma pénétrant dans la sphère ionique écrantent suffisamment la charge du noyau pour contrebalancer l'attraction entre les électrons des sous-couches externes et le noyau.
- Cette ionisation peut aussi se produire quand l'énergie de liaison de l'électron est inférieure au potentiel électrostatique de l'ion voisin vu par cet électron à mi-distance des deux ions (si les ions sont identiques)
- Enfin, il se produit quand les orbitales électroniques d'ions adjacents se recouvrent, c'est-à-dire quand le rayon de la sphère ionique et le rayon moyen des orbitales sont égaux.

Actuellement, dans le cadre de l'ETL, on prend en compte ce phénomène à partir d'approches statistiques par la minimisation d'une énergie libre ou, de façon plus arbitraire, par la réduction des poids statistiques des sous-couches passant dans le continuum par abaissement du potentiel d'ionisation. Cependant, ces méthodes ne sont pas adaptées aux calculs hors équilibre thermodynamique local.

Dans un cadre HETL, on peut supprimer les configurations électroniques passées dans le continuum du système d'équations-bilan. Cependant, cette approche suppose que le passage des électrons des sous-couches externes dans le continuum se fait de façon abrupte. Une fois la configuration disparue, elle est totalement exclue du modèle collisionnel-radiatif. Cela a pour conséquence de faire apparaître des sauts abrupts non physiques dans le calcul des grandeurs physiques du plasma. En effet, le passage de ces sous-couches dans le continuum ne se fait pas de manière brutale quand la densité augmente. Les électrons des sous-couches externes sont de plus en plus perturbés et finissent par aller dans le continuum. Il existe donc des conditions de densité où le caractère lié ou libre des électrons reste ambigu. Le calcul de la densité d'états dans le continuum montre en effet l'apparition de résonances représentant les sous-couches anciennement liées venant de passer dans le continuum : elles ne disparaissent donc pas immédiatement. Le calcul de la fonction d'onde de ces orbitales résonnantes montre que les électrons ont un double comportement, un comportement d'orbitale liée près du noyau et un comportement d'orbitale libre à l'extérieur de la cellule ionique. Notre approche consiste à tenir compte de ces résonances dans les modèles collisionnels-radiatifs pour reproduire correctement le passage graduel des configurations dans le continuum.

Parallèlement, il faut rajouter dans les équations-bilan un processus décrivant

?

3 façons

⊗

x

⊗

x

ou rejoindre l'ion voisin?

## Introduction

7

x le phénomène d'ionisation par la pression, suivant l'existence ou non de résonances (rappelant l'existence des sous-couches anciennement liées). Le calcul du potentiel vu par les électrons montre l'apparition d'une barrière de potentiel lorsque la densité du plasma est suffisamment importante. On peut donc décrire le phénomène d'ionisation par la pression comme un phénomène d'ionisation par effet tunnel : les électrons possédant une énergie supérieure au potentiel d'ionisation mais inférieure à la barrière de potentiel sont encore liés à l'ion mais peuvent disparaître dans le continuum en traversant la barrière de potentiel par effet tunnel. Pour quantifier ce processus, un des moyens que l'on peut utiliser est d'associer un taux d'ionisation par effet tunnel à chaque sous-couche. La valeur de ce taux étant associée à la largeur de la résonance correspondante. En effet, plus la résonance est large, plus la densité d'états tend vers la densité d'états d'un gaz d'électrons libres. Le taux d'ionisation sera donc d'autant plus grand que la résonance aura une largeur à mi-hauteur importante.

4<sup>e</sup> façon

et

choix } x  
} Notre travail a donc consisté, dans un premier temps, à construire un modèle et un programme qui permette de calculer correctement les fonctions d'onde électroniques juste au-dessus du seuil d'ionisation. Nous avons choisi une méthode de calcul autocohérente et nous nous sommes restreint à une description non relativiste. L'action du plasma sur le potentiel est traitée à l'aide d'un modèle de sphère ionique : les électrons de l'ion voient une distribution d'électrons libres à l'intérieur de cette sphère, les ions voisins en étant expulsés par la forte charge du noyau. Dans une deuxième partie, on associera aux configurations partant dans le continuum un taux d'ionisation. Ces données seront ensuite intégrées dans un modèle collisionnel-radiatif pour pouvoir déterminer les états d'excitation et d'ionisation des ions dans un plasma dense.

et on nous } Dans un premier chapitre, on présentera les modèles utilisés pour prendre en compte le phénomène d'ionisation par la pression dans les plasmas denses à l'ETL ou HETL. On mettra particulièrement en avant le phénomène d'ionisation par la pression utilisé dans le cadre HETL. Dans le deuxième chapitre, nous présenterons le programme développé pour le calcul des fonctions d'onde et leur introduction dans le modèle collisionnel-radiatif. Le troisième chapitre est consacré aux résultats que nous avons obtenus pour les fonctions d'onde des électrons résonnants et les énergies des configurations. Enfin, le quatrième chapitre présente les résultats des calculs collisionnel-radiatifs où l'ionisation par effet tunnel est prise en compte.



# Chapitre 1

## Effets de l'environnement plasma sur la statistique des ions (revue)

### Sommaire

---

<b>1.1</b>	<b>Généralités sur les effets de densité dans les plasmas</b>	<b>10</b>
1.1.1	Abaissement du seuil d'ionisation et écrantage des niveaux . . . . .	10
1.1.2	Résonances dans le continuum . . . . .	12
<b>1.2</b>	<b>Modèles d'équilibres d'ionisation et d'excitation des ions dans les plasmas</b> . . . . .	<b>13</b>
1.2.1	Rappels : cadre général de l'équilibre collisionnel-radiatif	13
1.2.2	Un cas particulier : le modèle coronal . . . . .	14
1.2.3	Equilibre thermodynamique local . . . . .	15
<b>1.3</b>	<b>Phénomène d'ionisation par la pression dans un plasma HETL</b> . . . . .	<b>20</b>
1.3.1	États collectivisés . . . . .	21
1.3.2	Un nouveau processus dans le modèle collisionnel radiatif : l'ionisation par effet tunnel . . . . .	21

---

Le phénomène d'ionisation par la pression est étudié depuis le début des années soixante dans les plasmas stellaires (Cox 1965 [1]) et depuis les années soixante-dix dans les plasmas de laboratoire. Ce phénomène est donc bien connu et un grand nombre de modèles le décrivant ont été proposés. Hors équilibre thermodynamique local, on peut, par exemple, modéliser ce phénomène en introduisant un nouvel état collectivisé des électrons. Cependant, ces modèles ne prennent pas toujours en compte de manière satisfaisante l'existence de pics de résonances dans la densité d'états du continuum des ions affectés par le phénomène d'ionisation. On présentera donc, dans une première partie de ce chapitre, le phénomène d'ionisation par la pression et les effets de densité dans les plasmas en général, ainsi que leurs conséquences dans les modèles de description des plasmas. On décrira ensuite les méthodes standard utilisées pour décrire l'équilibre d'ionisation et d'excitation des ions dans un plasma. On verra ensuite les différentes approches pour tenir compte des effets de densité dans ces modèles. C'est dans une troisième partie que l'on décrira l'ionisation par effet tunnel qui permet d'inclure l'ionisation par la pression dans les modèles collisionnels-radiatifs.

## 1.1 Généralités sur les effets de densité dans les plasmas

Dans les plasmas denses, les particules interagissent de façon plus importante entre elles que dans les plasmas peu denses. A partir d'une certaine densité, ces interactions sont suffisamment fortes pour perturber les états électroniques des ions, ce qui a pour conséquence d'affecter les caractéristiques des plasmas (en modifiant leur état de charge). Pour pouvoir décrire les plasmas denses et déterminer par exemple leurs spectres d'absorption ou d'émission, il est nécessaire de tenir compte des effets de densité. La modification des états électroniques d'un ion particulier peut être interprétée à partir des perturbations induites par les ions plus proches voisins et par les électrons libres du plasma. Le potentiel vu par un électron lié dépend de la position des ions proches et de la densité d'électrons libres. Pour simplifier, on peut voir ces perturbations comme un effet moyen du plasma qui modifie le potentiel vu par les électrons liés.

### 1.1.1 Abaissement du seuil d'ionisation et écrantage des niveaux

Les états les plus sensibles à ces perturbations sont les états les moins liés de l'ion, qui peuvent, lorsque la densité du plasma est suffisamment importante, disparaître dans le continuum. La partie gauche de la figure 1.1 représente les principales configurations des ions C II et C III. Certaines configurations sont

(voir le Charbonne I)

excitées, d'autres doublement excitées (ex :  $1s^2 2s 2p 3d$  qui est naturellement auto-ionisante). La partie droite présente ces mêmes configurations mais en présence d'un plasma dense. On voit que les configurations les plus excitées (ex :  $1s^2 2s^2 3p$ ) passent dans le continuum. On peut décrire cette disparition comme un abaissement du seuil d'ionisation.

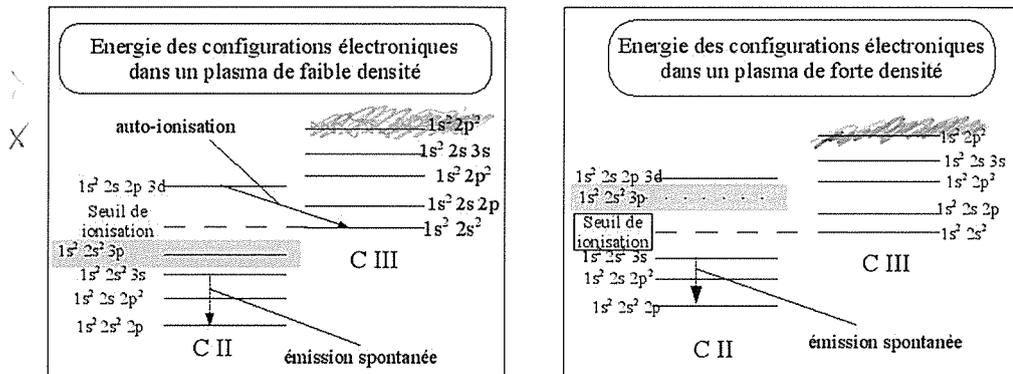


FIG. 1.1 – Diagramme des principales configurations des ions C II et C III. Figure de gauche : faible densité, figure de droite : densité élevée. On note un abaissement du seuil d'ionisation de C II.

Le phénomène d'ionisation par la pression est un phénomène physique spécifique aux milieux denses. Il est lié au volume dont dispose un ion. Si les ions du plasma sont trop proches les uns des autres, les orbitales des électrons liés externes ne disposent plus de l'espace nécessaire pour être localisées sur un seul noyau. Pour un plasma de densité ionique  $n_i$ , on définit un rayon  $\mathcal{R}_0 = (3/4\pi n_i)^{1/3}$  tel que les centres de deux ions plus proches voisins, supposés de forme sphérique, sont espacés de  $2\mathcal{R}_0$ . D'après R. M. More ([2]), une condition pour que le phénomène d'ionisation par la pression se produise pour un électron placé sur une couche  $n$  s'écrit :

$$\mathcal{R}_0 = r_n, \tag{1.1}$$

*n-ième* /

où  $r_n = n^2 a_0 / Q_{\text{eff}}$  est le rayon de la  $n^{\text{ième}}$  orbite de Bohr avec la charge effective  $Q_{\text{eff}}$ . Cette condition implique que l'énergie de liaison des électrons des sous-couches supérieures est du même ordre de grandeur que le potentiel électrostatique dû à l'ion plus proche voisin.

L'ionisation peut aussi se produire lorsque les électrons libres du plasma sont suffisamment nombreux pour écranter totalement la charge du noyau vue par les

?

électrons liés externes.

Le phénomène d'ionisation par la pression peut enfin être vu comme la conséquence de l'abaissement du seuil d'ionisation. On peut calculer la modification du potentiel par l'écrantage de la charge du noyau causé par les électrons libres du plasma présents dans la cellule ionique. Cet écrantage a comme conséquence la réduction de l'énergie de liaison des électrons. Dans un plasma suffisamment peu dense pour que la théorie de Debye-Hückel soit valable ( $R_0 \ll \lambda_d$ ), chaque niveau d'énergie subit le décalage suivant :

$$\Delta E = \frac{Z^* e^2}{\lambda_d}, \quad (1.2)$$

où  $\lambda_d = \sqrt{\frac{kT}{4\pi e^2 N_e}}$  est la longueur de Debye du plasma considéré et  $Z^*$  la charge ionique moyenne. Tous les niveaux sont affectés. Lorsque  $\Delta E$  est supérieur à la valeur absolue de l'énergie de liaison d'un état électronique particulier, ce dernier passe dans le continuum.

Toutes ces images du phénomène d'ionisation par la pression restent relativement phénoménologiques. Pour aller plus loin, il est nécessaire d'examiner de plus près les états proches du continuum.

### 1.1.2 Résonances dans le continuum

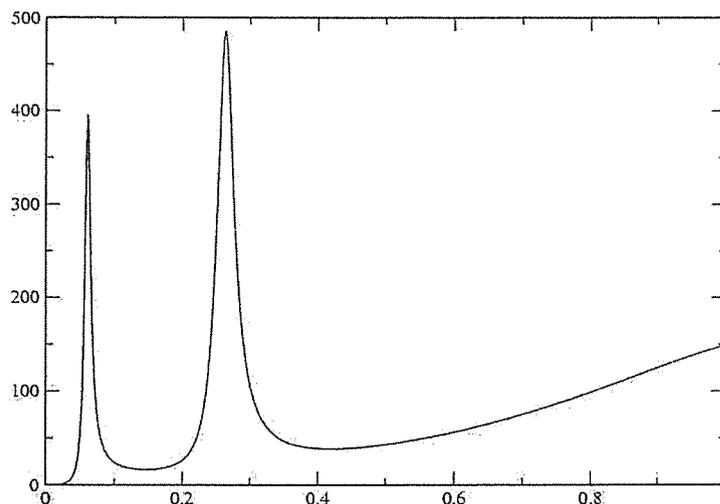
Le phénomène d'abaissement du seuil d'ionisation a pour conséquence de faire disparaître un certain nombre d'orbitales électroniques liées. Une compréhension plus fine du phénomène est nécessaire. Il faut étudier le comportement des fonctions d'onde des électrons concernés par le passage dans le continuum. Une méthode consiste à représenter les densités d'états dans le continuum des différents ions du plasma pour déterminer le comportement des électrons passés dans le continuum (le calcul des densités d'états sera abordé plus loin). Un exemple de densité d'état obtenu à partir d'un modèle de champ central (qui représente l'influence moyenne du plasma) est montré dans la figure 1.2. Le phénomène le plus notable est l'apparition de pics de résonances dans la densité d'états, se situant approximativement aux énergies où devraient se trouver les sous-couches passées dans le continuum, si on ne tenait pas compte du phénomène d'abaissement du seuil d'ionisation. Ces résonances représentent donc les sous-couches anciennement liées passées dans le continuum. Elles mettent en évidence un état hybride des électrons qui, une fois passés dans le continuum, ne sont pas encore totalement libres et conservent une interaction avec l'ion. Ces résonances jouent un rôle dans la statistique des ions du plasma et ses propriétés thermodynamiques ([3], 1982). Il est donc intéressant de chercher à les prendre en compte dans l'étude des propriétés des plasmas dans un contexte hors-ETL.

peut  
qu'on base  
de 2.11

Y

X

ordonnée ?



abscisse ?

FIG. 1.2 – Densité d'états dans le continuum de l'ion Al VI. La densité électronique est fixée à  $N_e = 2 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ .

*l'électron libre*

## 1.2 Modèles d'équilibres d'ionisation et d'excitation des ions dans les plasmas

L'introduction des effets de densité se fait dans un cadre standard concernant le calcul de l'ionisation et de l'excitation des ions dans les plasmas. Les principaux concepts sont rappelés ici.

### 1.2.1 Rappels : cadre général de l'équilibre collisionnel-radiatif

Pour décrire l'équilibre d'ionisation (à densité et température données) des plasmas, c'est-à-dire la distribution de population des niveaux électroniques et leur degré moyen d'ionisation, il est nécessaire de prendre en compte un certain nombre de processus microscopiques reliant ces différents niveaux. On doit de plus, dans l'absolu, tenir compte du rayonnement local et de l'absorption des photons, ce qui complique davantage les calculs. Le plus ou moins grand nombre de niveaux à prendre en compte demande donc une somme importante de calculs pour déterminer l'équilibre d'un plasma, et une résolution exacte est dans la pratique impossible à atteindre. Pour simplifier, on fait en règle générale un certain nombre d'approximations suivant la nature du plasma que l'on considère, dans le but de négliger un certain nombre de processus et de niveaux pour rendre le calcul de l'équilibre et de l'état microscopique du plasma possible. De plus, dans

le cadre de notre étude, nous supposons qu'un équilibre thermodynamique partiel restreint est atteint. Plus précisément, nous supposons que tous les niveaux atomiques de structure fine sont thermalisés à l'intérieur d'une même configuration. Ceci permet de regrouper les niveaux en configurations électroniques, ce qui réduit le nombre effectif de niveaux à prendre en compte.

Ce système collisionnel-radiatif décrivant l'équilibre d'un plasma se compose d'un système d'équations-bilan, chaque équation-bilan représentant l'évolution de la population d'une configuration électronique, reliée aux autres configurations présentes dans le plasma. Pour une configuration  $C$  dont la population est  $N_C$ , on a :

$$\frac{dN_C}{dt} = -N_C \sum_{C' \neq C} T_{C \rightarrow C'} + \sum_{C' \neq C} N_{C'} T_{C' \rightarrow C}, \quad (1.3)$$

où la somme sur  $C'$  porte sur toutes les configurations électroniques de population  $N_{C'}$  présentes dans le plasma. Les coefficients  $T_{C \rightarrow C'}$  et  $T_{C' \rightarrow C}$  représentent respectivement, le taux de dépeuplement de la configuration  $C$  vers la configuration  $C'$ , et de peuplement de la configuration  $C$  à partir de la configuration  $C'$ . Ces taux étant obtenus à partir du calcul des taux des différents processus atomiques ayant cours dans le plasma. Les principaux processus collisionnels-radiatifs sont :

- La désexcitation radiative (émission spontanée)
- L'excitation et la désexcitation collisionnelle
- L'ionisation collisionnelle et la recombinaison à trois corps
- La recombinaison radiative
- L'autoionisation et la capture diélectronique
- La photoexcitation (absorption) et l'émission stimulée
- La photoionisation et la recombinaison stimulée

Les quatre derniers processus (photoexcitation, émission stimulée, photoionisation et recombinaison stimulée) sont des processus qui dépendent de l'intensité  $I_\nu$  du champ de rayonnement dans le plasma. Il est nécessaire de connaître l'équilibre du plasma pour la déterminer. La valeur de  $I_\nu$  doit être obtenue de manière autocohérente, ce qui augmente la difficulté de la résolution du problème. Si l'on se restreint à l'étude de plasmas optiquement minces, on peut négliger ces quatre processus, mais la résolution du problème nécessitera encore la prise en compte d'un système d'équations-bilan. Il est important de mentionner l'existence de modèles limites comme le modèle coronal ou le modèle de l'équilibre thermodynamique local qui permettent, dans certaines situations, de simplifier les calculs.

### 1.2.2 Un cas particulier : le modèle coronal

Ce modèle décrit les conditions d'équilibre des plasmas optiquement minces, de faible densité. Il permet de décrire certains plasmas que l'on rencontre dans

la nature comme les couronnes stellaires, ainsi que certains plasmas de laboratoires (tokamaks, ...). Dans ces plasmas, l'émission spontanée est prédominante par rapport à la désexcitation collisionnelle des niveaux électroniques. Par ailleurs, la faible densité électronique implique un faible peuplement des niveaux excités par excitation collisionnelle. Les ions présents dans le plasma sont principalement dans leur état fondamental. Pour obtenir les taux de peuplement des états fondamentaux, les processus à prendre en compte sont l'ionisation collisionnelle et la recombinaison radiative. Il faut impérativement ajouter l'autoionisation et la capture diélectronique pour les atomes de  $Z$  suffisamment élevé. On néglige la recombinaison à trois corps qui, étant proportionnelle au carré de la densité électronique du plasma, devient négligeable devant les autres processus. La population  $N_i$  du fondamental d'un ion  $i$  fois ionisé, obéit à l'équation :

$$\frac{dN_i}{dt} = N_e [N_{i+1}R_{i+1,i} + N_{i-1}S_{i-1,i}] - N_e N_i S_{i,i+1} \quad (1.4)$$

où  $N_e$  est la densité électronique du plasma,  $N_e R_{i+1,i}$  le taux de recombinaison radiative de l'ion  $Z^{(i+1)+}$  vers l'ion  $Z^{i+}$  et  $N_e S_{i,i+1}$  le taux d'ionisation collisionnelle de l'ion  $Z^{i+}$  vers  $Z^{(i+1)+}$ . Pour que ce modèle soit valable, il faut que le processus d'émission spontanée domine largement le processus de désexcitation collisionnelle. Pour un ion donné, on doit donc avoir pour tout niveau  $n$  :

$$\sum_{m < n} A_{nm} \geq N_e \sum_{m < n} C_{nm} \quad (1.5)$$

Par exemple, un plasma d'aluminium peut être décrit à l'aide du modèle coronal pour des densités électroniques de l'ordre de  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .

### 1.2.3 Equilibre thermodynamique local

Cet équilibre s'applique aux plasmas dont les ions et les électrons sont supposés à l'équilibre thermodynamique. Dans ce cas, la fréquence d'un processus est égale à la fréquence du processus inverse. C'est ce que l'on appelle aussi la microréversibilité des processus. L'adjectif "local" sert à faire la distinction avec l'équilibre total dans lequel les photons sont eux aussi à l'équilibre avec le milieu. Dans le cas de l'équilibre thermodynamique local, les photons émis en un point donné peuvent être absorbés en un autre point du plasma, où la température et/ou la densité sont différentes. A l'ETL, la thermalisation est assurée en tout point par des processus collisionnels qui dominent les processus radiatifs. Ces conditions correspondent à des plasmas de densité électronique assez importante pour que les processus collisionnels soient prépondérants devant les processus radiatifs. La caractéristique de cet équilibre est que l'on peut utiliser le cadre de la physique statistique pour calculer les propriétés des plasmas. Les

et l'émission spontanée ?

✓

x

TA

x

qu'est C?

redite

principales équations de l'ETL (équations de Saha et Boltzmann) peuvent être obtenues par une minimisation de l'énergie libre. Si l'on néglige toute interaction entre les corpuscules (électrons et ions) du milieu, et si on suppose les particules indépendantes, l'énergie libre d'un plasma monoatomique, de numéro atomique  $Z$ , est calculée en l'assimilant à un gaz parfait composé d'électrons libres et d'ions dans différents états de charge (chaque ion ayant sa propre structure interne). On a alors la fonction de partition canonique  $Z_c$  qui s'écrit :

$$Z_c = \frac{1}{N_e!} Z_e^{N_e} \prod_{i=0}^Z \frac{1}{N_i!} Z_i^{N_i}, \quad (1.6)$$

où  $Z_e$  est la fonction de partition d'un électron et  $Z_i$  la fonction de partition d'un ion  $i$  fois ionisé. On a

$$Z_e = \frac{2V}{h^3} (2\pi m_e kT)^{3/2} \quad (1.7)$$

$$Z_i = \frac{V}{h^3} (2\pi m_i kT)^{3/2} \sum_l e^{-E_l/kT} \quad (1.8)$$

où la somme sur  $l$  porte sur les états pris en compte dans l'ion  $i$ .  $V$  est le volume du milieu.

L'énergie libre étant définie par  $F = -kT \ln(Z_c)$ . On trouve :

$$F = -N_e kT \left[ 1 + \ln \left( \frac{Z_e}{N_e} \right) \right] - kT \sum_{i=0}^Z N_i \left[ 1 + \ln \left[ \frac{V}{N_i h^3} (2\pi m_i kT)^{3/2} \right] - \ln \left( \sum_l e^{-E_l/kT} \right) \right] \quad (1.9)$$

L'équilibre thermodynamique est obtenu lorsque l'énergie libre du système est minimale. On doit donc minimiser la quantité

$$Q(N_e, N_0, \dots, N_Z) = F(N_e, N_0, \dots, N_Z) + a \left( N_{\text{ion}} - \sum_{i=0}^Z N_i \right) + b \left( N_e - \sum_{i=0}^Z i N_i \right) \quad (1.10)$$

où  $a$  et  $b$  sont des multiplicateurs de Lagrange. On a :

$$b = kT \ln \left[ \frac{2V}{N_e h^3} (2\pi m_e kT)^{3/2} \right] \quad (1.11)$$

$$\ln \left[ \frac{V \sum_l e^{-E_l/kT}}{N_i h^3} (2\pi m_i kT)^{3/2} \right] = -\frac{a}{kT} - \frac{b}{kT} i \quad (1.12)$$

Ces deux équations donnent  $N_i$  en fonction de  $a$ ,  $T$ ,  $N_e$  et  $V$  :

$$N_i = \frac{V}{h^3} (2m_i \pi kT)^{3/2} e^{a/kT} \sum_l e^{-E_l/kT} \left[ \frac{2V}{N_e h^3} (2\pi m_e kT)^{3/2} \right]^i \quad (1.13)$$

En considérant deux ions de charges  $i$  et  $i + 1$  dans leur état fondamental, et en sommant sur les niveaux, cette équation donne la loi de Saha :

$$\frac{N_{i+1} N_e}{N_i} = \frac{2(2\pi m_e kT)^{3/2}}{h^3} \frac{g_{i+1}}{g_i} e^{-(E_{i+1} - E_i)/kT}, \quad (1.14)$$

où  $g_{i+1}$  est le poids statistique du fondamental de l'ion  $Z^{(i+1)+}$  et  $m_e$  la masse de l'électron. En considérant deux ions de même charge mais dans deux états d'excitation  $n$  et  $m$  différents on trouve la loi de Boltzmann :

$$\frac{N_n}{N_m} = \frac{g_n}{g_m} e^{-(E_n - E_m)/kT} \quad (1.15)$$

Si on écrit l'équation de Saha pour tous les états de charge, on obtient un jeu d'équations qui relie tous les états de charge présents dans le plasma, ainsi que la densité électronique. Pour pouvoir résoudre le problème et obtenir les valeurs des populations ioniques, on doit rajouter deux conditions que le plasma doit vérifier. La première relie la somme des populations de chaque état de charge à la population ionique totale :

$$\sum_{i=0}^Z N_i = N_{\text{ion}}, \quad (1.16)$$

où  $N_{\text{ion}}$  est la population ionique totale du plasma. La seconde illustre la neutralité électrique du plasma. Elle s'écrit simplement

$$N_e = \sum_{i=0}^Z i N_i. \quad (1.17)$$

Les populations des niveaux fondamentaux étant connues, on peut déterminer le peuplement des niveaux excités à partir de la loi de Boltzmann (1.15).

Le calcul des états de charge néglige l'interaction mutuelle des particules. Cette approximation ne peut pas s'appliquer aux plasmas denses. En effet, plus la densité augmente plus les particules du plasma interagissent entre elles et plus leurs niveaux sont perturbés. D'un point de vue mathématique, l'équation de Saha montre qu'à température donnée, le plasma se recombinera toujours pour une densité suffisamment élevée, ce qui impliquerait comme résultat non physique

la prédominance de gaz neutre pour les plasmas de densité élevée, quelles que soient leurs températures.

Du fait de la densité, les états les moins liés sont fortement perturbés et peuvent même disparaître dans le continuum. Cette disparition tronque de façon naturelle la fonction de partition (équation 1.8). On peut voir cette troncature comme la conséquence d'un abaissement du potentiel. Les effets de densité et l'abaissement du potentiel d'ionisation qui en découle nous conduisent à réécrire l'équation de Saha sous la forme :

$$\frac{N_{i+1}N_e}{N_i} = \frac{2(2\pi m_e kT)^{3/2}}{h^3} \frac{g_{i+1}}{g_i} e^{-(E_{i+1}-E_i-\Delta E_i)/kT}, \quad (1.18)$$

où  $\Delta E_i$  est l'abaissement du potentiel pour un ion  $i$ . Cette prise en compte de l'abaissement du potentiel n'est malheureusement pas thermodynamiquement consistante [4]. Une manière plus satisfaisante de tenir compte de ce phénomène est de prendre en compte l'interaction entre les particules dans le calcul de l'énergie libre que l'on cherche à minimiser, ce qui permettrait d'obtenir une formulation thermodynamiquement consistante. Il faut déterminer une énergie libre plus réaliste qui tienne compte des phénomènes de densité. Un grand nombre de modèles ont été proposés.

Zimmerman et More [5] ont proposé de réduire le poids statistique d'un niveau par un facteur dépendant de la densité. Le cadre général de leur approche est un modèle d'atome moyen hydrogénoïde écranté basé sur le modèle de Strömgren-Mayer [6],[7]. Pour une couche  $n$ , ils posent comme nouvelle dégénérescence  $g_n$  :

$$g_n = 2n^2 f_n(\rho), \quad (1.19)$$

avec

$$f_n(\rho) = \left[ 1 + \left( a \frac{r_n}{\mathcal{R}_0} \right)^b \right]^{-1}, \quad (1.20)$$

où  $\rho$  désigne la densité du plasma.  $a$  et  $b$  sont deux paramètres ajustables. Le facteur  $f_n$  est compris entre zéro et un et tend vers zéro quand la densité croît. Cette méthode donne un résultat thermodynamiquement consistant. Cependant, le facteur de diminution du poids statistique ne correspond pas à un phénomène physique mais est choisi de façon à obtenir les résultats attendus.

La méthode proposée par Hummer et Mihalas [8],[9] consiste, comme dans le modèle de Zimmerman et More, à introduire un poids statistique effectif pour le niveau  $i$ , qui représenterait la probabilité de trouver un ion dans cet état. Ce modèle présente un avantage sur le précédent : le poids statistique prend en compte des processus physiques. On écrit pour le niveau réel  $i$  (et non plus la couche d'un atome moyen fictif) :

$$g_i^d = \omega_i g_i^0 \quad (1.21)$$

où  $g_i^d$  est la dégénérescence du niveau  $i$  dans un plasma et  $g_i^0$  la dégénérescence de ce niveau pour un atome isolé. Le calcul de  $\omega_i$  nécessite de prendre en compte différents effets tels la modification du potentiel due aux particules chargées ou les collisions entre l'ion considéré et les électrons libres. Le premier est équivalent à l'action d'un microchamp sur les niveaux de l'ion considéré.

L'introduction de poids statistiques effectifs dans l'énergie libre permet d'avoir un traitement consistant du phénomène d'abaissement du continuum. De plus, la valeur de  $\omega_i$  décroît de façon continue lorsque la densité augmente. On évite ainsi les problèmes de discontinuité rencontrés dans les modèles plus simples. Cette approche de réduction du poids statistique est thermodynamiquement consistante, mais n'est pas complètement satisfaisante car elles ignorent la modification des fonctions d'onde.

Une méthode plus satisfaisante doit prendre en compte explicitement les interactions dans le plasma pour le calcul de l'énergie des niveaux, ce qui permet d'obtenir un nombre fini de niveaux liés. On obtient ainsi une fonction de partition tronquée de façon naturelle. Le potentiel agissant sur les électrons liés peut être exprimé à l'aide de différents modèles. On distingue le modèle de l'atome confiné, proposé la première fois par Harris, Roberts et Trulio [10], et le modèle SSCP (static screened Coulomb potential) proposé par Rogers, Graboske et Harwood [11],[12]. Dans le modèle de l'atome confiné, on impose une barrière de potentiel infinie au niveau de la sphère ionique de rayon  $R_0$ . Les états d'énergie positive ne sont pas pris en compte dans la fonction de partition. Dans le modèle SSCP, le potentiel tient compte de l'effet d'écran exercé par les électrons libres. Pour un ion hydrogénoïde, le potentiel s'écrit

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}e^{-r/\lambda_D} \quad (1.22)$$

où  $\lambda_D$  est la longueur de Debye. La portée du potentiel est de l'ordre de la longueur de Debye. Au premier ordre, les énergies des niveaux électroniques augmentent de  $4Z^2e^2/\lambda_D$ , ce qui montre bien le passage dans le continuum des niveaux les plus excités, et la troncature de la fonction de partition. Ces deux modèles permettent de tenir compte des phénomènes de densité observés dans les plasmas. Malheureusement, les potentiels ont un domaine de validité limité, et les résultats obtenus montrent des désaccords avec les valeurs expérimentales. Le modèle de l'atome confiné donne des résultats qualitatifs alors que le modèle SSCP peut donner des énergies satisfaisantes lorsque le plasma est fortement ionisé et pas trop dense. Cependant, à basse température, lorsque le plasma est proche du gaz neutre (la densité d'électrons libres est faible), la longueur de Debye devient grande, et on ne peut plus décrire correctement le phénomène d'abaissement du potentiel. Dans ce cas, les valeurs obtenues sont fausses. De plus, dans ces modèles, les niveaux qui passent dans le continuum disparaissent brutalement du calcul, ce qui entraîne

des discontinuités non physiques dans le calcul des quantités macroscopiques en fonction de la densité et de la température.

Enfin, un autre modèle a été proposé par D.A. Liberman [13],[14] pour la prise en compte des effets de densité dans le calcul des équations d'états à l'ETL. Ce modèle a été utilisé par B.Wilson et P.A Sterne [15],[16] pour écrire le code PURGATORIO. C'est un modèle de cellule ionique dans laquelle on considère un noyau et une densité électronique à symétrie sphérique. En dehors de la cellule, la charge totale est nulle. Ce modèle permet de calculer directement la densité des électrons ioniques et, à partir de là, les quantités thermodynamiques telles la pression ou l'entropie. Cette densité est séparée en deux composantes, une composante représentant les électrons liés et l'autre la densité électronique dans le continuum. Une des particularités de ce modèle est la prise en compte de résonances dans la densité d'états électroniques qui apparaissent dans le continuum ; résonances qui sont alors prises en compte dans le calcul des quantités thermodynamiques, contrairement aux autres modèles.

### 1.3 Phénomène d'ionisation par la pression dans un plasma HETL

Les méthodes utilisées précédemment permettent de décrire les effets de densité du plasma sur les niveaux électroniques dans le cadre de l'équilibre thermodynamique local. Cet équilibre est caractérisé par la prédominance des processus collisionnels sur les processus radiatifs. Le principe de minimisation de l'énergie libre permet d'éviter de prendre en compte explicitement les processus microscopiques.

Lorsque le plasma est trop peu dense pour que les processus radiatifs soient négligeables devant les processus collisionnels ou lorsque le plasma n'a pas eu le temps de se thermaliser (situations hors ETL), il est nécessaire de tenir compte des processus radiatifs (en plus des processus collisionnels) et d'étudier l'équilibre du plasma grâce à un modèle de type collisionnel-radiatif. Il faut donc, dans les modèles collisionnels-radiatifs, prendre en compte les effets de densité dans le système d'équations-bilan. L'effet principal est l'abaissement du seuil d'ionisation qui a pour conséquence de supprimer plus ou moins brutalement les niveaux les plus excités des ions. La méthode des poids statistiques effectifs utilisée pour les plasmas à l'ETL reste utilisable mais son caractère heuristique n'est pas satisfaisant. Dans la suite, nous présentons deux méthodes plus satisfaisantes. La première passe par l'introduction d'états collectivisés dans le système d'équation-bilan. La deuxième méthode passe par l'introduction d'un nouveau processus "d'ionisation" par la pression dans les équations-bilan. Cette deuxième approche fait l'objet de cette thèse.

? m<sub>ion</sub>

B

### 1.3.1 États collectivisés

Une méthode proposée pour la première fois par Gündel [17],[18],[19],[20] consiste, pour prendre en compte les effets de densité, à introduire un nouvel état électronique dans les modèles d'équilibre des plasmas. Jusqu'à présent, les électrons étaient soit dans un état lié, avec une énergie propre négative, soit libres, avec une énergie propre positive. Le nouvel état introduit est un état collectivisé : l'électron a une énergie propre négative mais peut se déplacer librement entre les puits de potentiel des ions voisins : il n'est plus lié à un seul ion mais à plusieurs. Le déplacement d'un électron d'un puits de potentiel à l'autre se fait sans changement d'énergie entre l'état initial et l'état final. Il a lieu quand la barrière séparant deux puits de potentiel est plus basse que l'énergie de liaison de l'électron. Pour un ion donné, tous les électrons ayant une énergie supérieure à cette barrière sont donc collectivisés. La difficulté du calcul réside dans la localisation de cette barrière qui dépend de la position des ions plus proches voisins, et qui, par conséquent, n'est pas située à la même énergie pour tous les ions du plasma.

La collectivisation des états liés est donc décrite de façon statistique : un ion dans un état électronique  $q$ , dont l'électron externe possède une énergie négative, peut être soit lié soit collectivisé suivant l'environnement. Pour un même état, on aura donc une partie des états électroniques qui sera liée et l'autre collectivisée. On appelle  $\omega_q$  la fraction liée, la fraction collectivisée sera donc  $1 - \omega_q$ . Le poids statistique effectif  $g_q^{\text{effectif}}$  s'écrit alors :

$$g_q^{\text{effectif}} = \omega_q g_q^0, \quad (1.23)$$

où  $g_q^0$  est le poids statistique pour l'ion isolé. Cette prise en compte des effets de densité par l'ajout d'un état collectivisé pour les électrons d'énergie propre négative mène à la nécessité de redéfinir le système d'équations-bilan dans le but de prendre en compte ces états qui ne sont plus liés. On doit, en effet, calculer de nouveaux taux pour les processus faisant intervenir des états collectivisés. De plus, ces états ne rentrent plus en compte dans l'équation 1.17 de neutralité électronique. Cette redéfinition demande un temps de calcul prohibitif car le calcul des taux de transition des états collectivisés est très difficile. Il faut donc chercher une autre approche pour obtenir les populations du plasma.

### 1.3.2 Un nouveau processus dans le modèle collisionnel radiatif : l'ionisation par effet tunnel

Pour ne pas avoir à prendre en compte des états collectivisés et à développer des calculs mettant en jeu les ions plus proches voisins, l'approche que nous avons

électrons  
d'énergie  
des solides  
ou des molécules ?

B

suivie consiste à rester dans un modèle de champ central, et à introduire un nouveau processus dans le modèle collisionnel-radiatif. Ce processus, qui représente directement l'ionisation par la pression, prend en compte l'effet des particules du plasma sur l'ion, et est le même pour tous les ions d'une configuration donnée. Il rend compte du fait que l'écrantage de la charge du noyau par les particules du plasma fait passer un certain nombre de sous-couches électroniques au-dessus du seuil d'ionisation, sans les faire disparaître complètement, leur disparition partielle étant pilotée par un taux d'ionisation spécifique. En effet, on constate que les orbitales passées dans le continuum persistent encore dans le calcul de la densité d'états libres sous la forme de résonances. La position et la largeur de ces résonances nous permettent de continuer à tenir compte des configurations associées dans le système d'équations-bilan. On peut donc considérer l'ionisation de ces configurations en fonction de la forme des résonances obtenues : une configuration excitée est considérée comme totalement ionisée lorsque la résonance associée à l'orbitale excitée disparaît totalement dans la densité d'états.

Pour associer ce phénomène à un processus physique, il faut comprendre comment se forment ces résonances et quels états électroniques elles représentent. Ces points seront développés dans les chapitres suivants. Pour le moment, il suffit de savoir que l'introduction d'une contribution due au plasma dans le potentiel vu par les électrons d'un ion plongé dans un plasma dense fait apparaître une barrière de potentiel (voir figure 1.3).

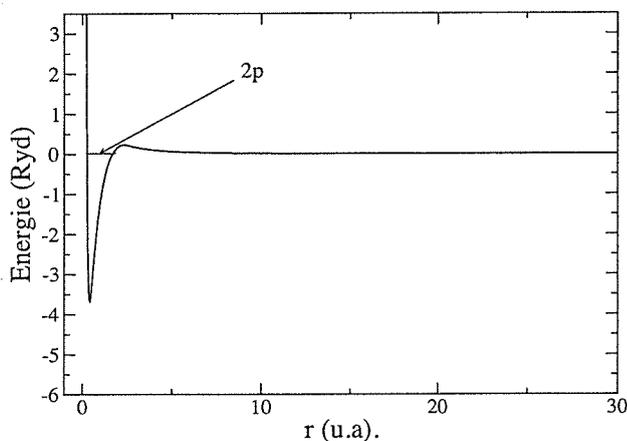


FIG. 1.3 – Potentiel vu par un électron  $p$  du C II dans un plasma de densité  $N_e = 2 \times 10^{23} \text{cm}^{-3}$ .

L'apparition des résonances s'explique alors par le fait que les électrons d'éner-

gie propre positive, mais inférieure au maximum de la barrière de potentiel, se trouvent toujours dans le puits de potentiel, mais peuvent en sortir par effet tunnel. Ce phénomène d'ionisation par effet tunnel peut décrire de façon graduelle la disparition des configurations excitées par la disparition des orbitales externes.

Dans la suite, le calcul de ce taux d'ionisation sera effectué à partir de la largeur des résonances. En effet, une orbitale encore fortement liée donnera une résonance (dans la densité d'états) dont la forme est proche de celle d'une lorentzienne très fine. A l'inverse, la densité d'états (partielle) associée à une orbitale complètement libre ne montrera pas de prééminence particulière. Le critère que nous utiliserons pour déterminer le taux d'ionisation par effet tunnel sera donc la largeur de la résonance dans la densité d'états de l'orbitale partiellement liée.

En conclusion, l'introduction d'un taux d'ionisation par la pression permet d'éviter la disparition brutale des configurations excitées, et donc les discontinuités dans les calculs collisionnels-radiatifs pour les hautes densités. Nous allons maintenant présenter un modèle permettant d'introduire ce processus dans un modèle collisionnel-radiatif. Ceci nécessite un calcul des orbitales électroniques et des énergies de configuration des ions dans un plasma dense. C'est l'objet du chapitre suivant.

pas  
de  
hauteurs ?



# Chapitre 2

## Ionisation par la pression et modèle collisionnel-radiatif

### Sommaire

---

<b>2.1</b>	<b>Calcul des fonctions d'onde électroniques . . . . .</b>	<b>26</b>
2.1.1	Méthodes autocohérentes . . . . .	26
2.1.1.1	Modèle du champ central . . . . .	26
2.1.1.2	Les différents potentiels utilisés . . . . .	28
2.1.2	Calcul des fonctions d'onde électroniques par une méthode spectrale . . . . .	31
2.1.2.1	Grille de calcul . . . . .	31
2.1.2.2	Utilisation d'une base de B-splines . . . . .	32
2.1.2.3	Agencement du calcul . . . . .	33
<b>2.2</b>	<b>Les fonctions d'onde libres résonnantes . . . . .</b>	<b>36</b>
2.2.1	Passage dans le continuum . . . . .	36
2.2.2	Fonctions d'onde libres et densité d'états . . . . .	37
<b>2.3</b>	<b>Modèle collisionnel-radiatif et ionisation par la pression . . . . .</b>	<b>40</b>
2.3.1	Les différents processus à prendre en compte . . . . .	40
2.3.1.1	Emission spontanée . . . . .	41
2.3.1.2	Déexcitation et excitation collisionnelles . . . . .	41
2.3.1.3	Ionisation collisionnelle et recombinaison à trois corps . . . . .	42
2.3.1.4	La recombinaison radiative . . . . .	43
2.3.2	Ionisation par la pression . . . . .	43

---

On cherche à construire un modèle collisionnel-radiatif prenant en compte les effets de densité dans les plasmas HETL. On a vu précédemment que l'étude de ces effets doit se faire à l'aide d'un modèle qui inclut les processus microscopiques intervenant dans la cinétique de population. L'objet de ce chapitre est de présenter les outils théoriques qui seront utilisés ou mis en oeuvre afin de bâtir un tel modèle. Les applications ainsi que certains détails seront discutés dans les chapitres 3 et 4.

La première étape consiste à calculer les fonctions d'onde électroniques des ions du plasma. On se concentrera très précisément sur le calcul des fonctions d'onde des électrons des sous-couches externes qui peuvent passer dans le continuum sous l'effet de la densité. Dans une deuxième partie, nous aborderons le modèle collisionnel-radiatif qui nous permettra plus loin (chapitre 4) de déterminer la cinétique des populations du plasma. Pour cela, nous utiliserons les fonctions d'onde et les résonances calculées préalablement, et nous prendrons en compte explicitement le phénomène d'ionisation par la pression.

## 2.1 Calcul des fonctions d'onde électroniques

### 2.1.1 Méthodes autocohérentes

On désire calculer les fonctions d'onde électroniques des différents états des différents ions dans un plasma. Pour chaque ion particulier à  $N$  électrons, il est nécessaire de chercher les fonctions propres de l'Hamiltonien suivant (écrit à l'approximation non relativiste et en Hartree) :

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{m=1}^N \vec{\nabla}_m^2 - \sum_{m=1}^N \frac{Z}{r_m} + \sum_{\substack{m,n \\ m>n}}^N \frac{1}{r_{mn}} + V_{\text{plasma}}, \quad (2.1)$$

où  $m$  et  $n$  repèrent les électrons de l'ion. Dans cette expression, le premier terme correspond à l'énergie cinétique, le deuxième et troisième aux interactions internes propres aux électrons de l'ion. L'influence du plasma est pris en compte par l'ajout d'un terme spécifique  $V_{\text{plasma}}$ . Plusieurs choix sont possibles pour  $V_{\text{plasma}}$ . Celui de cette étude est discuté plus loin. La résolution de l'équation aux valeurs propres  $H\Psi = E\Psi$  nécessite une simplification de ce problème à  $N$  corps. En physique atomique traditionnelle (où  $V_{\text{plasma}} = 0$ ), la méthode utilisée est la méthode du champ central.

#### 2.1.1.1 Modèle du champ central

Le point de départ de la plupart des descriptions utilisées pour la détermination des fonctions d'onde multiélectroniques est de réécrire l'Hamiltonien sous la

forme suivante :

$$H = \sum_{m=1}^N \left( -\frac{1}{2} \vec{\nabla}_m^2 + V(r_m) \right) + V_{\text{plasma}} + \left[ \sum_{m=1}^N \left( -V(r_m) - \frac{Z}{r_m} \right) + \sum_{\substack{m,n \\ m>n}}^N \frac{1}{r_{mn}} \right], \quad (2.2)$$

où  $V(r_m)$  est purement radial et choisi de telle sorte que le terme entre crochets soit petit. En physique atomique traditionnelle, ce terme est responsable de la structure en termes Russell-Saunders. Nous le négligerons dans cette étude car les niveaux pris en compte dans notre modèle collisionnel-radiatif correspondent à des moyennes configurationnelles (cf chapitre 1). L'autre partie de l'Hamiltonien se décompose en une somme d'Hamiltoniens monoélectroniques  $H = \sum_{m=1}^N h(\vec{r}_m)$  où  $h(\vec{r}) = -\frac{1}{2} \vec{\nabla}^2 + V(r) + V_{\text{plasma}}$ . En choisissant également  $V_{\text{plasma}}$  purement radial, on peut alors chercher à déterminer la fonction d'onde de chaque électron lié en l'écrivant sous la forme :

$$\varphi_i(\vec{r}) = \frac{1}{r} P_{n_i l_i}(r) Y_{l_i m_{l_i}}(\theta, \phi) \sigma_{m_{s_i}} \quad (2.3)$$

où  $P_{n_i l_i}(r)$  est la partie radiale,  $Y_{l_i m_{l_i}}$  une harmonique sphérique et où  $\sigma_{m_{s_i}}$  donne l'état de spin de l'électron. Les quatre nombres quantiques ( $n_i$ ,  $l_i$ ,  $m_{l_i}$ , et  $m_{s_i}$ ) caractérisent l'orbitale en question. La fonction radiale vérifie la condition dite de normalisation :  $\int_0^\infty P_{n_i l_i} P_{n_j l_j} = \delta_{ij}$ . Le calcul de la fonction se réduit à celui de la fonction radiale  $P_{nl}(r)$ .

La fonction d'onde totale doit être antisymétrique par rapport à l'échange de deux électrons. Elle s'écrit alors sous la forme d'un déterminant de Slater :

$$\Psi = (N!)^{-1/2} \begin{vmatrix} \varphi_1(\vec{r}_1) & \varphi_1(r_2) & \dots & \varphi_1(r_n) \\ \varphi_2(\vec{r}_1) & & & \\ \dots & & & \\ \varphi_n(r_1) & & & \end{vmatrix} \quad (2.4)$$

Dans le cadre non relativiste, la forme précédente conduit à une répartition des électrons dans différentes sous-couches ( $n_i l_i$ ) où les électrons ont tous des jeux ( $n$ ,  $l$ ,  $m_l$ , et  $m_s$ ) différents. Une répartition particulière dans les sous-couches correspond à une *configuration* électronique. Dans une sous-couche ( $n_i l_i$ ), les électrons ont la même énergie et la même fonction radiale. Si on appelle  $w_i$  le nombre d'électrons dans la sous-couche ( $n_i l_i$ ), une configuration électronique à  $q$  sous-couches se définit par :

$$(n_1 l_1)^{w_1} (n_2 l_2)^{w_2} \dots (n_q l_q)^{w_q}. \quad (2.5)$$

On a :

$$\sum_{i=1}^q w_i = N,$$

où  $w_i$  est compris entre zéro et  $2(2l_i + 1)$ . Le facteur deux provient des deux valeurs possible de l'état de spin ( $m_{s_i} = \pm 1/2$ ) et le facteur  $(2l_i + 1)$  provient des valeurs possibles pour  $m_{l_i}$  :  $-l_i \leq m_{l_i} \leq l_i$ .

$P_{n_i l_i}(r)$  s'obtient en résolvant l'équation radiale suivante :

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} P_{n_i l_i}(r) + \left[ \frac{l_i(l_i + 1)}{2r^2} + V_i(r) + V_{\text{plasma}}(r) \right] P_{n_i l_i}(r) = E_i P_{n_i l_i}(r), \quad (2.6)$$

avec comme conditions aux limites  $P_{n_i l_i}(r = 0) = 0$  et  $P_{n_i l_i}(r = \infty) = 0$  pour les états liés. C'est cette équation aux valeurs propres que l'on cherche à résoudre pour déterminer les fonctions radiales des électrons. Le potentiel moyen vu par un électron  $i$  est la somme de plusieurs contributions. Les quelques formes possibles de  $V_i(r)$  que nous avons utilisées sont maintenant présentées.

### 2.1.1.2 Les différents potentiels utilisés

#### 1. Potentiel de Hartree

Hartree ne tient compte dans  $V_i(r)$  que de l'interaction entre l'électron et le noyau et, de l'énergie potentielle de cet électron dans le champ moyen créé par les autres électrons. Ce champ est obtenu en considérant  $P_{n_i l_i}^2$  comme une densité électronique. Ce terme d'énergie potentielle correspond à la partie directe de l'énergie potentielle quantique d'interaction entre électrons. Pour un électron d'une sous-couche  $i$ , le potentiel de Hartree s'écrit :

$$V_{i, \text{Hartree}}(r) = -\frac{Z}{r} + \sum_{j=i}^q (w_j - \delta_{ij}) \int_0^\infty \frac{1}{r_{>}} P_j^2(r_1) dr_1, \quad (2.7)$$

où  $r_{>} = \max(r, r_1)$ , et la somme sur  $j$  porte sur les sous-couches électroniques. On ne tient pas compte du terme d'échange dans l'énergie potentielle d'interaction entre les électrons (que ce soit des électrons équivalents ou non).  $V_{i, \text{Hartree}}(r)$  est donc sous-évalué, ce qui implique que les fonctions d'onde seront trop étendues et l'énergie totale trop forte. Cependant, ce n'est pas le principal défaut de cette méthode qui est que les fonctions radiales ne sont plus nécessairement orthogonales les unes aux autres car tous les électrons ne voient pas le même potentiel.

#### 2. Potentiel de Hartree-Fock-Slater (HFS)

Le potentiel comprend cette fois le terme d'échange de l'énergie d'interaction électron-électron. Le potentiel direct et le potentiel d'échange s'écrivent respectivement :

$$V_D(r) = \sum_{j=1}^q w_j \int_0^\infty \frac{P_j(r_1)^2}{r_{>}} dr_1 \quad (2.8)$$

$$V_E(r) = -\frac{3}{4} \left( \frac{24\rho(r)}{\pi} \right)^{1/3}, \quad (2.9)$$

où  $\rho(r)$  est la densité électronique à une distance  $r$  de l'origine. Elle est normalisée au nombre d'électrons liés présents dans l'ion :  $\int \rho(r) d\vec{r} = N$ . Elle s'écrit donc :

$$\rho(r) = \frac{1}{4\pi r^2} \sum_{j=1}^q w_j P_j^2(r). \quad (2.10)$$

Le potentiel total auquel est soumis un électron est :

$$V_{\text{HFS}}(r) = -\frac{Z}{r} + V_D(r) + V_E(r). \quad (2.11)$$

On peut remarquer que l'on utilise le même potentiel direct pour toutes les orbitales, contrairement à l'expression utilisée dans la méthode de Hartree. Par ailleurs,  $V_E(r)$  ne dépend que de  $\rho(r)$ . On a un potentiel total qui ne dépend plus de l'orbitale considérée mais seulement de  $r$ . L'avantage sur la méthode précédente est que les  $P_{n,l_i}(r)$  obtenues seront toutes orthogonales entre elles. De plus, le terme d'échange permet d'obtenir des énergies propres et des fonctions d'onde plus précises.

X L'inconvénient de cette méthode est que  $V_D(r)$  prend en compte l'interaction de l'électron  $i$  avec lui même, ce qui introduit une contribution non physique dans l'énergie potentielle. Comme  $\rho(r)$  prend en compte tous les électrons,  $V_E(r)$  atténue quelque peu cette contribution. Toutefois, cette compensation n'est qu'approximative, surtout pour les grandes valeurs de  $r$  pour lesquelles  $\rho(r)$  tend<sup>s</sup> vers 0. On a alors l'expression asymptotique du potentiel :

$$V_{\text{HFS}}(r) \rightarrow -\frac{1}{r}(Z - N), \quad (2.12)$$

alors que le potentiel vu par un électron devrait être, à grande distance, celui d'une charge  $Z - N + 1$ , c'est-à-dire  $-\frac{1}{r}(Z - N + 1)$ .

### X 3. Potentiel Hx (référence)

X Le principal inconvénient avec la méthode HFS est l'existence d'une contribution d'autointeraction directe. Pour y pallier, d'autres potentiels, dont le potentiel Hx, ont été proposés.

Dans le potentiel Hx, le terme direct est identique à celui de la méthode de Hartree (voir équation 2.7). Il n'y a donc pas d'autointeraction. La difficulté réside dans le choix de l'interaction d'échange. Elle doit être telle que le potentiel total ne dépende pas de l'orbitale  $i$ . Cette condition assure l'orthogonalité des fonctions d'onde.

mais alors tous les électrons se voient par le même potentiel?

On introduit une nouvelle densité  $\rho'(r)$ , dépendant de l'orbitale  $i$ , dans le terme d'échange, pour prendre en compte le fait qu'un électron n'interagit pas avec lui-même. Pour tous les électrons d'une même sous-couche  $i$ , l'énergie d'échange ne fait intervenir que les électrons de même spin. On modifie donc  $\rho(r)/2$  de façon à retrancher ce qui pourrait contribuer à l'interaction de l'électron  $i$  avec lui-même. On a donc :

$$\frac{\rho'(r)}{2} = \frac{\rho(r)}{2} - \rho_i(r),$$

avec  $\rho_i(r) = w_i P_i^2(r)/(4\pi r^2)$ . Comme  $\rho'(r)$  doit être nulle pour une sous-couche à un seul électron, on doit la prendre sous la forme :

$$\rho'(r) = \rho(r) - \min(2, w_i)\rho_i(r)$$

Enfin, pour avoir un meilleur accord avec les résultats expérimentaux, on modifie légèrement l'allure du potentiel. On obtient finalement le potentiel d'échange :

$$V_E = -k_x f(r) \left( \frac{\rho'(r)}{\rho'(r) + 0.5/(n_i - l_i)} \right) \left( \frac{\rho'(r)}{\rho(r)} \right) \left( \frac{24\rho(r)}{\pi} \right)^{1/3}, \quad (2.13)$$

(où  $k_x$  est un facteur que l'on peut ajuster pour avoir un bon accord entre la théorie et l'expérience,  $f(r)$  sert à réduire la non-orthogonalité de toutes les fonctions d'onde. Cette méthode donne des résultats plus précis que la méthode HFS mais conduit à des fonctions d'onde pas tout à fait orthogonales entre elles. En effet,  $\rho'(r)$  dépend de  $i$ .

#### 4. Potentiel dû au plasma

Par commodité, et pour rester dans le cadre du modèle du champ central, on choisira ce terme purement radial. De plus, pour ne pas introduire de nouveaux problèmes d'orthogonalité des orbitales, ce terme doit être le même pour toutes les sous-couches électroniques.

On utilise donc la même approche que G. Massacrier [21], qui est basée sur le modèle de la cellule ionique. Dans ce modèle, on suppose que jusqu'à une certaine distance  $r_0$  du noyau, seuls les électrons libres sont présents, les ions étant exclus de la sphère de rayon  $r_0$ , en raison de la charge positive du noyau. Les charges électriques des électrons et des ions se compensent au delà de  $r_0$ . Le potentiel est donc celui d'une distribution d'électrons libres dans une sphère de rayon  $r_0$ . On suppose que la densité de charge est uniforme.  $r_0$  est choisi de telle sorte que l'électron lié le plus externe ne voit plus la charge du noyau. Cette charge est complètement écrantée par les électrons des sous-couches inférieures et par les électrons libres. On a donc

$$V_{\text{plasma}} = \begin{cases} \frac{Z-N+1}{2r_0} \left(3 - \frac{r^2}{r_0^2}\right) & \text{si } r < r_0 \\ \frac{Z-N+1}{r} & \text{si } r > r_0 \end{cases} \quad (2.14)$$

et

$$r_0 = \left[ \frac{3(Z - N + 1)}{4\pi N_e} \right]^{\frac{1}{3}}, \quad (2.15)$$

où  $N_e$  est la densité électronique du plasma.

Ce potentiel conduit à des fonctions d'onde et des valeurs propres plus ou moins différentes (suivant la densité) de celles de l'ion isolé. En règle générale, les valeurs propres de tous les niveaux augmentent, provoquant ainsi une disparition des états monoélectroniques (orbitales) externes.

## 2.1.2 Calcul des fonctions d'onde électroniques par une méthode spectrale

La résolution des équations radiales (équation 2.6) se fait numériquement. On a choisi une méthode de type "spectrale" dans laquelle on développe les orbitales sur une base de fonctions B-splines prédéfinies sur une grille adaptée au calcul de fonctions d'onde radiales. On cherche alors à calculer les coefficients du développement des orbitales radiales sur cette base de calcul.

### 2.1.2.1 Grille de calcul

Le calcul des fonctions radiales nécessite l'utilisation d'un maillage unidimensionnel. Le maillage doit être adapté au comportement attendu des orbitales que nous allons calculer, qu'elles correspondent à des états liés ou à des états du continuum. Les fonctions correspondant à des états liés imposent un maillage fin pour les petites valeurs de  $r$  et permettent un maillage beaucoup moins dense pour les grandes valeurs de  $r$ . Par contre, les fonctions radiales associées aux états libres nécessitent que le maillage soit suffisamment serré pour les grandes valeurs de  $r$  afin de reproduire correctement le caractère oscillant des fonctions radiales libres.

- Les deux types de fonctions radiales imposent donc deux types de maillage :
- Le maillage logarithmique qui est bien adapté à l'étude des fonctions liées mais pas à celles des fonctions libres à grande distance.
  - Le maillage linéaire qui convient à l'étude des fonctions d'onde libres mais qui ne permet pas de rendre compte des fortes variations des fonctions liées pour les petites valeurs de  $r$ .

Le maillage approprié pour l'étude des états liés et des états libres doit être très serré pour les petites valeurs de  $r$  et présenter un intervalle à peu près constant pour les grandes valeurs de  $r$ . La première idée serait donc de séparer la grille en

une zone logarithmique pour les petites valeurs de  $r$  et une zone linéaire pour les grandes valeurs de  $r$ . L'inconvénient de cette grille est qu'à la frontière des deux zones il faut assurer la continuité des deux types de calcul. Comme Chernysheva, Cherpkov et Radojevic [22],[23] on utilise une grille hybride qui fait intervenir la transformation de coordonnées suivante :

$$\rho = \alpha r + \beta \ln Zr, \quad (2.16)$$

où  $\rho$  varie par pas constant,  $Z$  est le numéro atomique de l'élément considéré.  $\alpha$  et  $\beta$  sont choisis de telle sorte que la grille présente un comportement essentiellement logarithmique pour les petites valeurs de  $r$ , et un comportement linéaire pour les grandes valeurs de  $r$ .

### 2.1.2.2 Utilisation d'une base de B-splines

On cherche à résoudre une équation aux valeurs propres du type :

$$\mathbf{H}\Psi = E\Psi, \quad (2.17)$$

où les  $\Psi$  sont des fonctions qui satisfont des conditions aux limites. Pour cela, il est nécessaire de disposer d'une base de fonctions, sur laquelle on développe les fonctions  $\Psi$ , qui soit adaptée aux fonctions que l'on cherche à calculer. Les orbitales atomiques sont caractérisées par un comportement "assez doux" que l'on peut facilement représenter par des morceaux de polynômes. Les fonctions B-splines correspondent bien à ces critères. Elles sont construites par récurrence comme des morceaux de polynômes d'ordre plus ou moins élevé suivant le nombre d'itérations de la relation de récurrence. Elles ont un comportement assez doux. De plus, elles sont de carré sommable, ce qui facilite les calculs de densité ou d'énergie.

Les B-splines sont donc calculées par récurrence à partir d'un certain nombre de points  $t_i$  appelés noeuds. On a (voir [24], [25], [26]) :

$$B_i^{(k)}(r) = \frac{r - t_i}{t_{i+k} - t_i} B_i^{(k-1)}(r) + \frac{t_{i+k} - r}{t_{i+k} - t_{i+1}} B_{i+1}^{(k-1)}(r), \quad (2.18)$$

*i*-ème où  $i$  est le numéro de la  $i$ ème B-spline de la base et  $k$  l'ordre de la B-spline. Le nombre de noeuds est égal à  $l + 2k - 1$ , où  $l$  est le nombre de segments de la grille. Ce résultat tient au fait que les  $k$  premiers noeuds ainsi que les  $k$  derniers sont confondus aux deux extrémités de la grille. Le nombre de B-splines de la base est  $l + k - 1$ . Pour initier la récurrence, on pose

$$B_i^{(1)}(r) = \begin{cases} 1 & \text{si } t_i \leq r < t_{i+1} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

X
X
 Nous devons donc placer un certain nombre de noeuds  $t_i$  sur notre grille. On construit la grille à partir de la transformation de coordonnées (2.16). Cela nous permet d'obtenir un type de grille dont un exemple est donné dans la figure 2.1

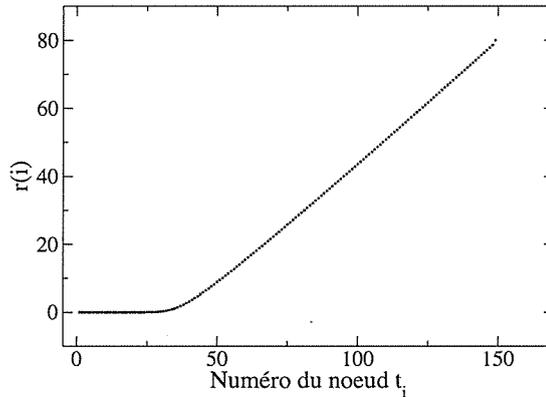


FIG. 2.1 - Grille obtenue pour  $Z = 26$ . En abscisse : indice du noeud  $t_i$ , en ordonnée : valeur  $r(i)$  en u.a qui lui est associée.

Nous
X
 Avec cette grille, nous disposons des noeuds nécessaires pour calculer les B-splines. On utilise ensuite la méthode de quadrature de Gauss-Legendre pour calculer les différentes intégrales radiales. Cette méthode nécessite de connaître la valeur de la fonction dont on cherche à calculer l'intégrale entre deux noeuds, en un certains nombres de points intermédiaires (le nombre dépendant de la précision souhaitée) définis de façon précise. L'ensemble de ces points intermédiaires nous permet de tracer les fonctions d'onde.

Un exemple de base utilisée pour le carbone est donné dans la figure 2.2. On voit les 148 B-splines d'ordre neuf tracées sur une grille d'une longueur de quatre-vingts unités atomiques. La première B-spline est la seule à ne pas être nulle en zéro tandis que la 148<sup>ième</sup> est la seule à ne pas être nulle à l'autre extrémité. La 75<sup>ième</sup> B-spline apparaît en trait foncé. On voit bien le support fini de chacune de ces fonctions de base.

### 2.1.2.3 Agencement du calcul

sous-programme
X
X
 Un certain nombre de sous-programmes FORTRAN ont été utilisés dans nos calculs. Mentionnons une routine qui résout un système aux valeurs propres généralisé du type  $ax = \lambda bx$ , où  $a$  et  $b$  sont des matrices,  $x$  un vecteur propre et  $\lambda$  sa valeur propre. Cette routine fait partie de la librairie eispack d'Argonne National Laboratory et sert à résoudre l'équation  $H\Psi = E\Psi$ .

## Base de B-splines

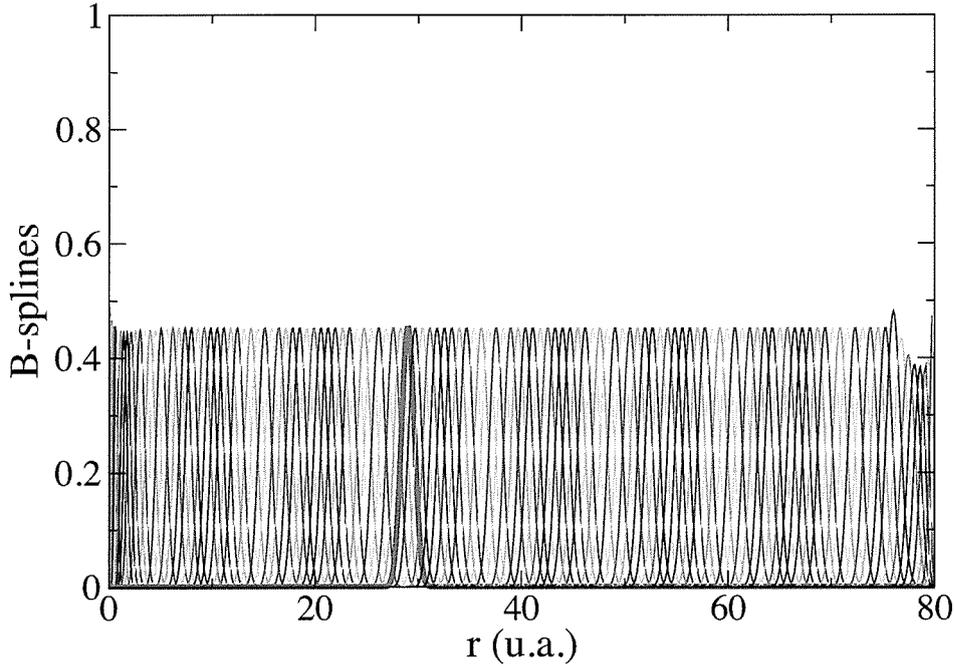


FIG. 2.2 – Base de B-splines d'ordre 9 obtenue pour  $Z = 26$  sur une grille de 80 u.a.

Pour obtenir les fonctions radiales par une résolution auto-cohérente, il est nécessaire de connaître des fonctions initiales permettant de démarrer le processus d'itération. La première partie du calcul consiste, après avoir déterminé la grille de calcul et la base de B-splines adaptées aux ions étudiés, à calculer ces fonctions initiales.

Comme fonctions initiales on utilise des fonctions de type hydrogénoïdes écran-tées calculées à partir du potentiel radial suivant :

$$V(r) = -\frac{Z_{\text{eff}}}{r}, \quad (2.19)$$

où  $Z_{\text{eff}}$  est la charge du noyau, écran-tée par les électrons des sous-couches internes et les autres électrons de la sous-couche  $i$ , vue par un des électrons de cette sous-couche. On résout donc le système aux valeurs propres pour chaque sous-couche ; ce qui nous permet de déterminer la fonction radiale correspondant à cette sous-couche. Pour construire le système aux valeurs propres, il nous faut développer

les fonctions radiales à calculer ainsi que l'Hamiltonien sur la base de B-splines. De plus, il faut tenir compte des conditions aux limites pour la fonction d'onde liée : elle doit être nulle à l'origine et tendre vers 0 à l'infini. Les seules B-splines non nulles en 0 et à l'extrémité de la grille étant respectivement la première et la dernière. On les supprime donc du développement de la fonction radiale  $P_{nl}$  :

$$P_{nl}(r) = \sum_{i=2}^{N-1} c_i B_i^k(r) \quad (2.20)$$

où  $N$  est le nombre total de B-splines d'ordre  $k$ .

Pour déterminer une fonction radiale on doit donc déterminer tous les coefficients  $c_i$ . L'équation aux valeurs propres devient alors

$$\mathbf{Hc} = \epsilon \mathbf{S}c, \quad (2.21)$$

où  $c$  est le vecteur représentant les coordonnées  $c_i$  de la fonction radiale dans la base des B-splines,  $\mathbf{H}$  la matrice représentant l'Hamiltonien dans cette même base et  $\mathbf{S}$  la matrice de recouvrement des B-splines qui ne sont pas orthogonales les unes aux autres. Les éléments de matrice de  $\mathbf{H}$  et  $\mathbf{S}$  entre les deux B-splines  $i$  et  $j$  sont donnés par :

$$H_{ij} = -\frac{1}{2} \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} B_i^k(r) \frac{d^2}{dr^2} B_j^k(r) dr + l(l+1) \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} B_i^k(r) \frac{1}{r^2} B_j^k(r) dr + \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} B_i^k(r) V(r) B_j^k(r) dr \quad (2.22)$$

$$S_{ij} = \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} B_i^k(r) B_j^k(r) dr. \quad (2.23)$$

La résolution du système à  $l$  fixé nous donne  $N - 2$  valeurs propres, chacune étant associée à un vecteur propre. Il faut alors choisir la valeur propre qui correspond aux différentes couches  $n$  (à  $l$  fixé). Pour les états liés on élimine d'emblée les valeurs propres positives : elles correspondent à des états libres qui satisfont de manière fortuite les conditions aux limites. Il faut donc classer les valeurs propres négatives, par valeurs croissantes : la première correspondra à la première couche existante pour la valeur de  $l$  choisie ( $2p$  pour  $l = 1$ , par exemple) et de remplir les autres dans l'ordre.

Après avoir résolu un système aux valeurs propres pour chaque  $l$  présent dans la configuration calculée, on réitère ce processus pour calculer un nouveau potentiel (soit de type HX, soit de type HFS) obtenu explicitement à partir des orbitales. Après avoir obtenu le nouveau potentiel, on vérifie la condition de

convergence puis on calcule les nouvelles orbitales des sous-couches occupées à partir des nouveaux systèmes aux valeurs propres obtenus. Cette boucle est effectuée tant que la condition de convergence (pour l'itération  $m$ ) :

$$|(V_m(r) - V_{m-1}(r))r| < 10^{-5} \quad \forall r \quad (2.24)$$

n'est pas vérifiée. Lorsque cette condition est vérifiée, on obtient des états propres et des valeurs propres qui correspondent aux orbitales et énergies de chaque sous-couche électronique de l'ion.

## 2.2 Les fonctions d'onde libres résonnantes

La résolution de l'équation aux valeurs propres donne pour chaque sous-couche électronique une valeur propre négative. Cependant, lorsqu'on inclut dans l'Hamiltonien du système le potentiel répulsif dû au plasma, on observe une augmentation de l'énergie propre des orbitales électroniques, avec la densité du plasma. Cette énergie peut s'annuler et devenir positive, ce qui correspond au passage dans le continuum de l'électron associé. Or, le spectre des valeurs propres positives obtenues par notre méthode spectrale ne correspond qu'à des états du continuum qui, fortuitement, s'annulent au bord de la boîte de calcul. Par définition, les états libres n'ont pas d'énergie discrète. Il nous faut donc trouver une méthode pour calculer les fonctions d'onde des électrons passant dans le continuum, sachant que l'on ne peut plus déterminer simplement quelles fonctions sélectionner dans la boucle autocohérente. Pour cela, une étude plus précise du comportement des électrons passant dans le continuum est nécessaire. En effet, lors du passage des électrons dans le continuum, les orbitales électroniques ne disparaissent pas de façon abrupte : on observe des résonances dans la densité d'états électroniques. Le calcul de la densité d'états fait l'objet du paragraphe qui suit.

### 2.2.1 Passage dans le continuum

Lorsqu'on étudie la densité d'états électronique dans le continuum, on observe des résonances, plus ou moins marquées (voir figure 2.3), à des énergies proches du seuil d'ionisation. L'apparition de ces résonances, à partir d'une certaine densité, correspond à la persistance dans le continuum des sous-couches anciennement liées pour des densités plus basses. Notre objectif sera d'utiliser ces résonances pour calculer les fonctions d'onde électroniques associées aux sous-couches externes passées dans le continuum. Cela nous permettra de définir des configurations partiellement liées et de les inclure dans un modèle collisionnel-radiatif.

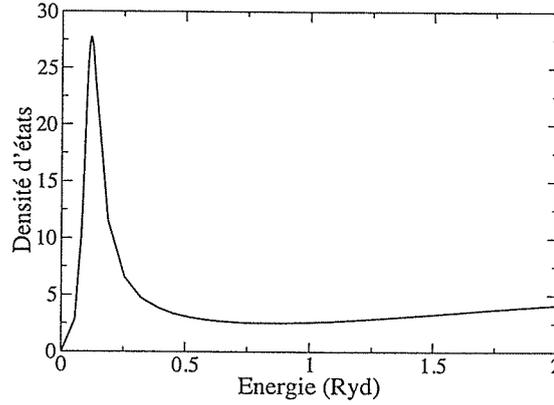


FIG. 2.3 – Calcul de la densité d'états dans le continuum proche du seuil d'ionisation pour un ion C II dans son état fondamental.  $N_e = 2,02 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ .

### 2.2.2 Fonctions d'onde libres et densité d'états

Le point central du calcul consiste à déterminer l'orbitale libre que l'on doit utiliser pour représenter l'orbitale passant dans le continuum. Pour cela, on doit être capable de calculer préalablement les fonctions radiales des électrons libres, pour diverses énergies  $E$  ( $E > 0$ ) qui échantillonnent la densité d'états. Le système que l'on doit résoudre n'est plus un système aux valeurs propres car  $E$  est fixé. On a à résoudre l'équation  $HP_{E,l} = EP_{E,l}$ , où  $P_{E,l}$  est déterminé par les coefficients  $c_i$  (équation 2.20) sur la base des B-splines. Seul le coefficient de la première B-spline est nul, afin de vérifier la condition de nullité à l'origine. En projetant le système sur chaque B-spline  $i$  on obtient un système homogène de  $N - 1$  équations à  $N - 1$  inconnues. Afin de résoudre le problème, on fixe un des coefficients (ici le dernier) de sorte que la fonction d'onde s'écrive sous la forme suivante :

$$P_{E,l}(r) = c_N \left[ \sum_{j=2}^{N-1} \tilde{c}_j B_j^k(r) + B_N^k(r) \right], \quad (2.25)$$

où  $\tilde{c}_j = c_j/c_N$ . Le coefficient  $c_N$  est déterminé par la normalisation de la fonction d'onde. Les coefficients  $\tilde{c}_j$  sont alors déterminés par le système d'équations linéaires suivant :

$$\sum_{j=2}^{N-1} (H_{ij} - ES_{ij}) \tilde{c}_j = ES_{iN} - H_{iN}, \quad (2.26)$$

Les éléments de matrice  $H_{ij}$  sont obtenus en utilisant le potentiel (tenant compte du terme centrifuge) calculé à l'itération précédente de la boucle autocohérente.

On sait que les fonctions, solutions d'une équation de Schrödinger où le potentiel est nul ou constant, sont des combinaisons linéaires de fonctions de Riccati-Bessel et Riccati-Neuman sphériques. L'idée utilisée pour normaliser nos fonctions d'onde libres est donc de supposer qu'en dehors de la sphère ionique, la fonction doit se comporter comme la solution connue. La normalisation se fera donc en raccordant, en  $r = r_0$ , la fonction d'onde que l'on a calculée à la solution théorique en dehors de la sphère.

On doit donc d'abord normaliser (en énergie) les fonctions de Riccati-Bessel qui ne sont pas nulles à l'infini et qui ne sont pas de carré sommable. Une telle normalisation, qui s'écrit  $\int_0^\infty P_{E,l}(r)P_{E',l}(r)dr = \delta(E - E')$ , est obtenue avec le facteur multiplicatif  $C$  (voir Cowan [27]) suivant :

$$C = \frac{1}{\sqrt{\pi E^{1/2}}} \quad (2.27)$$

On a maintenant une normalisation en énergie. Il nous faut faire le raccord entre la zone intérieure à la sphère ionique où le potentiel n'est pas nul et la zone extérieure où le potentiel est constant, et où on considère que la fonction est une combinaison linéaire des fonctions de Riccati-Neumann et Riccati-Bessel. On écrit donc :

$$\Psi(r) = A\psi_a(r) + B\psi_b(r), \quad (2.28)$$

où  $\psi_a$  est une fonction de Riccati-Bessel et  $\psi_b$  une fonction de Riccati-Neumann. On suppose donc connue la valeur de la fonction en  $r_0$ . Par continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée en  $r_0$ , on détermine  $A$  et  $B$  à partir du système de deux équations à deux inconnues :

$$\begin{aligned} P(r_0) &= A\psi_a(r_0) + B\psi_b(r_0) \\ P'(r_0) &= A\psi'_a(r_0) + B\psi'_b(r_0) \end{aligned} \quad (2.29)$$

On obtient alors un facteur de normalisation ( $1/\sqrt{A^2 + B^2}$ ) de la fonction numérique calculée à l'intérieur de la sphère ionique.

On a effectué le calcul des fonctions  $P_{E,l}(r)$  pour des valeurs de  $E$  comprises entre le seuil d'ionisation et une certaine limite à laquelle nous contrainst la base de B-splines. Les fonctions que l'on doit calculer étant sinusoidales aux bords de la boîte, le nombre de B-splines doit être suffisamment grand pour reproduire correctement les oscillations pour les grandes valeurs de  $r$ . Pratiquement, on impose que l'intervalle entre deux noeuds du réseau sur lequel sont construites les B-splines reste toujours inférieur au tiers de la longueur d'onde associée à la fonction d'onde libre.

Après avoir obtenu les fonctions d'onde libres, il s'agit de sélectionner la fonction  $P_{E,l}(r)$  qui doit correspondre à la fonction  $P_{nl}(r)$  passée dans le continuum.

Pour cela on peut utiliser la densité partielle d'états électroniques dans le continuum, obtenue pour les électrons de même moment cinétique que ceux de la sous-couche disparue. Cette densité s'écrit :

$$\rho_l(E) = 2(2l + 1) \int_0^{r_0} |P_{E,l}(r)|^2 dr. \quad (2.30)$$

Cette densité d'états en énergie est calculée à l'intérieur de la cellule ionique. Dans le cas où une sous-couche électronique passe dans le continuum, les calculs montrent la présence de résonances (signe d'un écart à la densité d'états d'un gaz d'électrons libres qui varie en  $\sqrt{E}$ ) qui sont liées à la persistance d'une interaction de l'électron avec le noyau. Cet électron se trouve dans un état partiellement lié. On fait alors l'hypothèse que, pour un moment cinétique  $l$ , les résonances (dans la

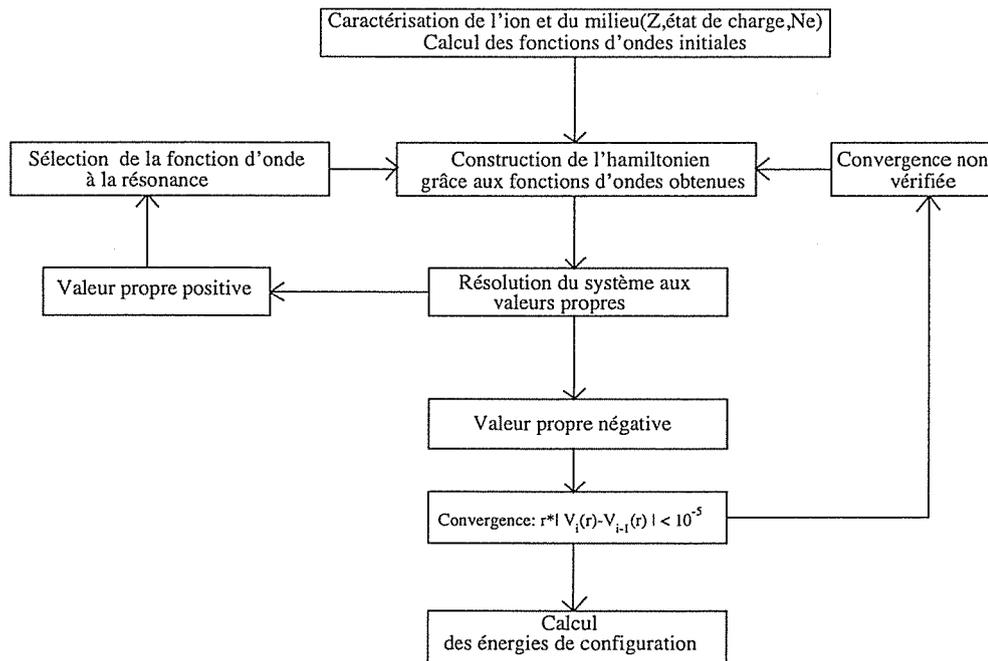


FIG. 2.4 – Organigramme du calcul des orbitales

densité partielle d'états), représentent la trace des sous-couches  $nl$  qui ont disparu dans le continuum. Dans le calcul autocohérent, on sélectionne la fonction  $P_{E,l}$ , pour laquelle la résonance prend sa valeur maximum, pour remplacer l'orbitale partie dans le continuum. Dans la suite du calcul, on néglige la légère variation de la position du maximum de la résonance au cours du processus itératif. On

peut alors traiter, dans la boucle autocohérente, la sous-couche ionisée de la même façon que les autres sous-couches. La seule différence étant que la fonction que l'on doit calculer est une fonction d'onde libre, que l'on doit modifier pour représenter la composante "liée" (cf chapitre 3). Une configuration électronique particulière pourra donc toujours exister malgré le passage dans le continuum d'une de ses orbitales. L'organigramme (figure 2.4) schématise l'enchaînement du calcul pour une configuration donnée.

## 2.3 Modèle collisionnel-radiatif et ionisation par la pression

Notre but étant de calculer l'état d'ionisation et l'état d'excitation des ions dans un plasma hors équilibre thermodynamique local, il est nécessaire de construire un modèle collisionnel-radiatif prenant en compte les processus prédominants. L'objet de notre étude étant l'ionisation par la pression, nous nous placerons dans l'approximation des plasmas optiquement minces. Ceci nous permet de négliger les processus liés à un éventuel champ radiatif ambiant. Dans notre étude, la nouveauté consiste à introduire le processus d'ionisation par la pression dans le système d'équations-bilan.

### 2.3.1 Les différents processus à prendre en compte

On rappelle ici brièvement les principaux processus collisionnels et radiatifs à prendre en compte dans un plasma dense et optiquement mince. Notons  $X$  un ion de l'élément atomique étudié et  $C$  et  $C'$  deux configurations particulières de  $X$ . On admettra que l'énergie de  $C$  est supérieure à celle de  $C'$ . On distingue huit processus qui jouent un rôle dans les équation-bilan. Ces processus sont :

- X - l'autoionisation et la capture électronique,
- X - la désexcitation et l'excitation collisionnelle,
- l'ionisation collisionnelle et la recombinaison à trois corps,
- l'émission spontanée,
- X - la recombinaison radiative.

ah! ( On négligera l'autoionisation et la capture électronique, car leur effet sur l'ionisation des plasmas d'éléments de  $Z$  faibles est marginal. Lorsqu'un taux est connu, le taux de son processus inverse est obtenu simplement en utilisant le principe de microréversibilité. Ceci réduit à quatre le nombre de taux à calculer.

### 2.3.1.1 Emission spontanée

Elle est représentée par :

$$X_C \rightarrow X_{C'} + h\nu, \quad (2.31)$$

Le taux radiatif dipolaire-électrique moyen entre deux configurations  $C$  :  $(n_1 l_1)^{w_1} (n_2 l_2)^{w_2} \dots$  et  $C'$  :  $(n_1 l_1)^{w_1+1} (n_2 l_2)^{w_2-1} \dots$  s'écrit :

$$A_{CC'} = \sum_{\alpha \in C, \beta \in C'} A_{\alpha\beta} / g_C, \quad (2.32)$$

où  $g_C$  est la dégénérescence de la configuration  $C$  et  $\alpha$  et  $\beta$  deux états de  $C$  et  $C'$ . On peut montrer [30] que la moyenne précédente conduit à la formule compacte suivante :

$$A_{CC'} = k (E_C - E_{C'})^3 \frac{w_1 (g_2 - w_2)}{g_1 g_2} 2[l_1, l_2] \begin{pmatrix} l_1 & 1 & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 P_{12}^2, \quad (2.33)$$

où  $[l_1, l_2] = \sqrt{(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)}$ ,  $P_{1,2} = \int_0^\infty P_{n_1 l_1}(r) r P_{n_2 l_2}(r) dr$ ,  $g_i = 2(2l_i + 1)$ .  $k = 2.677 \times 10^9$ , si les énergies sont en Rydberg et le taux  $A_{CC'}$  en  $s^{-1}$ .

### 2.3.1.2 Désexcitation et excitation collisionnelles

Le processus d'excitation électronique a lieu lors de la collision d'un ion dans un certain niveau  $a$ , avec un électron libre du plasma. L'électron incident cède de l'énergie à l'ion, ce qui a pour effet d'exciter l'ion dans un niveau  $b$  d'énergie plus élevée. Il s'agit ici d'une transition non radiative. La désexcitation collisionnelle est le processus inverse, l'électron incident fait passer l'ion excité du niveau  $b$  vers le niveau  $a$ . La conservation de l'énergie fait que l'énergie cinétique de l'électron libre augmente. Les deux processus sont représentés par :



Dans l'approche configurationnelle, utilisée jusqu'à présent, il convient d'examiner des taux collisionnels moyens connectant des configurations à l'intérieur d'un même ion. Le calcul du taux passe par la moyenne d'une section efficace pondérée par une fonction de distribution (supposée maxwellienne) des électrons libres. Pour une excitation de  $C'$  vers  $C$ , cette section efficace s'écrit sous la forme  $\sigma(x) = \pi a_0^2 \frac{1}{g_C} Ryd \frac{\Omega_{C'C}}{x}$ , où  $x$  est l'énergie de l'électron incident en Rydberg et

$\Omega_{C'C}$  est une quantité sans dimension appelée force de collision. La force de collision moyenne entre  $C'$  et  $C$  s'écrit :

$$\Omega_{C'C} = \sum_{a \in C', b \in C} \frac{g_a \Omega_{ab}}{g_{C'}}, \quad (2.35)$$

où la somme porte sur les niveaux  $a$  et  $b$  (et non plus sur les états). Dans le cadre de l'approximation Distorted-Wave et du champ central, la force de l'excitation collisionnelle entre deux niveaux  $a$  et  $b$  est donnée par (voir [31] et [32]) :

$$\Omega_{ab} = 2 \sum_{j_0, j_1} (2J+1) \left| \langle \zeta_b(j_1) | \sum_{\substack{k,l \\ l < k}}^{N+1} \frac{1}{r_{kl}} | \zeta_a(j_0) \rangle \right|^2. \quad (2.36)$$

$\zeta_b(j_1)$  et  $\zeta_a(j_0)$  sont des fonctions d'ondes couplées (toutes les deux de moment cinétique total  $J$ ) à  $N+1$  électrons ( $N$  électrons liés + un électron libre). La somme sur  $j_0$  et  $j_1$  porte sur les moments cinétiques des électrons libres initiaux et finaux, respectivement.

Le calcul de  $\Omega_{C'C}$  est donc très difficile. Pour notre étude centrée sur l'ionisation par la pression nous avons préféré utiliser une formule semi-empirique comme celle de Van-Regemorter [33]. Le taux de transition collisionnelle  $C'$  vers  $C$  s'écrit (en  $s^{-1}$ ) :

$$K_{C'C} = N_e \times 3.2 \times 10^{-7} \left( \frac{E_H}{T_e} \right)^{3/2} f_{C \rightarrow C'} \frac{e^{-y}}{y} G(y), \quad (2.37)$$

où  $y = \frac{E_C - E_{C'}}{kT_e}$ ,  $E_H = 13.6$  eV.  $T_e$  désigne la température électronique et  $G(y)$  un éventuel facteur de Gaunt correctif.  $f_{C \rightarrow C'}$  est la force d'oscillateur, qui s'exprime simplement en fonction du taux d'émission spontanée calculé précédemment.

### 2.3.1.3 Ionisation collisionnelle et recombinaison à trois corps

L'ionisation collisionnelle est l'un des processus les plus importants dans les plasmas chauds. Elle a lieu quand un électron libre entre en collision avec un ion et fait alors passer un de ses électrons dans le continuum. Le processus inverse se produit lorsque deux électrons pénètrent en même temps dans la cellule ionique, un électron est alors capturé tandis que le second récupère l'énergie restante. Ce dernier processus (la recombinaison à trois corps) n'est important que dans les plasmas denses.

Pour le calcul des taux de transition, l'interaction est la même que pour l'excitation et la désexcitation collisionnelles. La différence se situe aux niveaux des états atomiques qui entrent en jeu dans le calcul : un électron lié passe dans le

continuum, son orbitale de type lié est remplacée par une orbitale du continuum. L'énergie de l'électron éjecté peut prendre plusieurs valeurs suivant l'énergie récupérée par l'électron diffusé. Le calcul de la force d'ionisation collisionnelle fait intervenir une somme sur toutes ces énergies possibles. Le calcul final du taux d'ionisation collisionnelle est donc plus complexe que celui demandé pour le taux d'excitation collisionnelle. On préfère utiliser ici une formulation semi-empirique. Parmi les nombreuses formulations existantes, on a choisi d'utiliser celle proposé par Lotz [34], qui, bien que simple, est relativement précise pour les éléments de  $Z$  peu élevé. Le taux d'ionisation d'un électron de la sous-couche  $nl$ , d'énergie d'ionisation  $E_{nl}$ , dans la configuration  $C$ , est alors (en  $s^{-1}$ ) :

$$S_{CC'} = 3 \times 10^6 N_e w_{nl} T_e^{-3/2} \frac{E_1(y)}{y}. \quad (2.38)$$

$C'$  se déduit de  $C$  par suppression d'un électron  $nl$ .  $w_{nl}$  est le nombre d'électrons peuplant  $nl$ .  $E_1(y)$  est l'exponentielle intégrale et  $y = E_{nl}/(kT_e)$ .

#### 2.3.1.4 La recombinaison radiative

Ce processus a lieu quand un électron libre est capturé par un ion dans un état lié. Un photon est émis pour assurer la conservation de l'énergie. On représente ce processus par la réaction :



Il s'agit d'un processus à deux corps. Il est donc plus important pour les plasmas de faible densité. A forte densité, le processus de recombinaison à trois corps prédomine. Pour calculer le taux de recombinaison radiative, nous utilisons la formulation de Seaton [35]. Partant d'une configuration  $C$ , d'énergie  $E_C$ , l'ion se recombine par capture radiative vers la configuration  $C'$  d'énergie  $E_{C'}$ . Le taux de recombinaison s'écrit :

$$R_{CC'} = 5.2 \times 10^{-14} N_e y^{1.5} e^y E_1(y) Z \text{Vac}(nl) (s^{-1}) \quad (2.40)$$

où  $y = (E_C - E_{C'})/(kT_e)$ .  $C'$  se déduit de  $C$  par l'ajout d'un électron sur une sous-couche  $nl$ .  $Z$  est le degré d'ionisation de l'ion de configuration  $C$  et  $\text{Vac}(nl)$  est la vacance dans la sous-couche d'accueil avant ionisation.

### 2.3.2 Ionisation par la pression

On a revu un certain nombre de taux entrant en jeu dans les équations-bilan faisant partie des modèles collisionnels-radiatifs. Les effets de densité ne sont pris en compte que par la modification des énergies de configuration et des orbitales

rentrant dans le calcul des taux. Le phénomène de disparition des configurations dont les orbitales passent dans le continuum n'est pas pris en compte.

Comme on l'a vu précédemment, les niveaux ne disparaissent pas de façon brutale dans le continuum, ils persistent sous forme de résonances dans la densité d'états du continuum. Si l'on fait disparaître brutalement les niveaux, les discontinuités qui peuvent apparaître n'ont pas de sens physique. Pour remédier à cela, il faut représenter le phénomène d'ionisation par un processus physique quantifiable, ce qui permet ensuite de calculer un taux et d'inclure les configurations concernées par l'ionisation par la pression.

Pour mieux décrire ce qui se passe au seuil d'ionisation, on peut utiliser le potentiel vu par un électron passé dans le continuum et le comparer au potentiel des électrons liés. Le potentiel dû au plasma est un potentiel répulsif. Il a donc pour effet de diminuer le puits de potentiel dans lequel se trouvent les états des électrons liés. Lorsque la densité du plasma est suffisamment élevée, on peut alors voir l'apparition d'une barrière de potentiel positive comme le montre la figure 2.5.

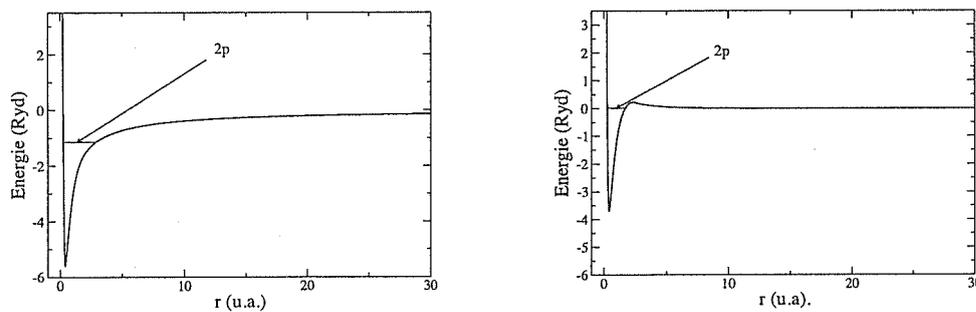


FIG. 2.5 – Potentiel vu par un électron  $p$  d'un ion C II dans son état fondamental, en absence (figure de gauche), ou en présence (figure de droite) d'un plasma de densité électronique  $2 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ .

La figure de gauche représente le potentiel vu par un électron  $p$  (incluant le terme centrifuge) de la configuration fondamentale de C II. Les énergies des orbitales excitées ( $np$ ) ( $n > 2$ ) se situent toutes dans ce puits de potentiel. La figure de droite montre le potentiel vu par le même électron lorsque l'ion C II est dans un plasma de densité électronique égale à  $2 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ . On peut voir que le potentiel dû au plasma diminue la profondeur du puits de potentiel, ce qui conduit à une augmentation de l'énergie de tous les états liés. Mais le plus intéressant est la présence d'une barrière de potentiel au-dessus du seuil d'ionisation, quand

on augmente suffisamment la densité. Les électrons dont l'énergie est comprise entre le seuil d'ionisation et le maximum de cette barrière de potentiel se trouvent dans des états partiellement liés responsables des résonances. On notera aussi que les résonances associées à des électrons d'énergie bien supérieure à cette barrière, seront tellement larges qu'elles seront fondues dans le continuum des états libres. Les électrons d'énergie proche du maximum de la barrière, et se trouvant spatialement dans la zone comprise entre le noyau et la barrière de potentiel, restent liés au noyau, mais peuvent passer dans le continuum à travers cette barrière. Au delà de cette barrière, les électrons ne voient plus de puits de potentiel et sont donc libres. L'ionisation par effet tunnel est donc une façon de prendre en compte les orbitales résonnantes dans un modèle collisionnel-radiatif : les configurations ayant des orbitales passées dans le continuum conservent en effet une existence dans le système collisionnel-radiatif, et on leur associera un taux d'ionisation par effet tunnel qui permettra de prendre en compte leur disparition dans le continuum. Le calcul du taux sera explicité au chapitre 4, il fait intervenir la densité d'états électroniques partielle  $\rho_l(E)$  dans le continuum (équation 2.30).

C'est à l'aide de cette densité d'états que l'on mettra en évidence l'existence de résonances qui nous permettront, grâce à leur largeur à mi-hauteur, d'associer un taux d'ionisation par effet tunnel aux configurations dont l'orbitale externe est passée dans le continuum.

En conclusion, le taux que l'on cherche doit quantifier la propension des sous-couches résonnantes à disparaître dans le continuum. Nous allons donc dans le chapitre suivant montrer quelle est l'influence du plasma sur les orbitales électroniques des ions du plasma. Cela nous permettra de mettre en évidence le passage dans le continuum des orbitales externes des ions pour des densités suffisamment élevées, puis de montrer l'apparition de résonances dans la densité d'états électroniques du continuum correspondant à ces orbitales. Ces calculs permettront de prendre en compte de façon plus satisfaisante les effets de densité, dans le modèle collisionnel-radiatif.



*(résultats numériques)*

## Chapitre 3

# Influence du plasma sur les fonctions d'onde électroniques et les énergies de configuration

### Sommaire

---

<b>3.1</b>	<b>Fonctions d'onde liées et libres résonnantes . . . . .</b>	<b>48</b>
3.1.1	Calculs en absence de plasma . . . . .	48
3.1.1.1	Résultats obtenus pour les ions hydrogénoïdes	48
3.1.1.2	Ions multi-électroniques . . . . .	51
3.1.2	Calculs en présence d'un plasma dense . . . . .	52
3.1.3	Orbitales du continuum . . . . .	56
3.1.3.1	Densités d'états partielle et totale . . . . .	57
3.1.3.2	Calcul des orbitales . . . . .	58
3.1.4	Fonctions d'onde libres localisées . . . . .	59
<b>3.2</b>	<b>Résonances dans le continuum . . . . .</b>	<b>60</b>
3.2.1	Caractéristiques des résonances . . . . .	60
3.2.2	Le problème de la résolution d'une résonance . . . . .	62
<b>3.3</b>	<b>Energie de configuration . . . . .</b>	<b>64</b>
3.3.1	Energie moyenne de configuration dans un ion isolé . .	64
3.3.1.1	Rappels : . . . . .	64
3.3.1.2	Résultats numériques . . . . .	65
3.3.2	Energie obtenue en présence du plasma . . . . .	66

---

La première partie du modèle développé dans le chapitre précédent est consacrée au calcul des fonctions d'onde, et la seconde à l'introduction des configurations résonnantes obtenues dans un modèle collisionnel-radiatif. L'objectif de ce chapitre est de présenter les fonctions d'onde et énergies propres obtenues grâce à notre modèle. On s'intéressera plus particulièrement aux fonctions et énergies obtenues pour les configurations dont une sous-couche externe est passée dans le continuum. Ce sont en effet ces configurations, habituellement considérées comme ionisées, que l'on cherche à introduire dans un modèle collisionnel-radiatif. Il est important de corrélérer l'apparition de résonances dans la densité d'états électroniques du continuum avec la disparition des sous-couches externes sous l'effet du plasma.

### 3.1 Fonctions d'onde liées et libres résonnantes

La première étape consiste à déterminer les fonctions d'onde des orbitales des différents ions du plasma, ainsi que leurs énergies (négative ou positive). Celles-ci permettront de déterminer les sous-couches qui ont transité dans le continuum. Ces quantités sont ensuite utilisées dans le calcul des énergies des configurations électroniques ainsi que dans un certain nombre de taux du système collisionnel-radiatif.

#### 3.1.1 Calculs en absence de plasma

On commence tout d'abord par examiner les fonctions d'onde et les énergies obtenues pour un ion non perturbé par le plasma. Cela nous permettra de vérifier si notre modèle fonctionne correctement pour un cas simple, et de comparer nos résultats avec les résultats connus.

##### 3.1.1.1 Résultats obtenus pour les ions hydrogénoïdes

n	valeur calculée	valeur théorique	n	valeur calculée	valeur théorique
1	-0.9998	-1	5	-0.0399	-0.04
2	-0.2499	-0.25	6	-0.0268	-0.0277
3	-0.1111	-0.1111	7	-0.0136	-0.0204
4	-0.0625	-0.0625			

TAB. 3.1 – Énergies (en Rydberg) des premières couches de l'atome d'hydrogène.

Dans un premier temps, on peut se restreindre aux ions hydrogénoïdes. Les fonctions d'onde et énergies ne nécessitent pas de prendre en compte l'interaction

entre les électrons. De plus, en partant d'une certaine charge écrantée du noyau, ces fonctions constituent les fonctions de départ utilisées dans la boucle de calcul multi-électronique. Il est donc nécessaire que les fonctions obtenues soient les mieux adaptées pour la suite des calculs. Les valeurs propres obtenues analytiquement sont bien connues. Pour un atome d'hydrogène, on a en effet  $E_n = -1/n^2$  Ryd. La résolution numérique (par la méthode des B-splines) de l'équation de Schrödinger donne les valeurs reportées dans la table 3.1. A partir de  $n = 7$  la différence entre la valeur exacte et la valeur numérique devient importante. De plus, pour  $n$  supérieur ou égal à 8, les valeurs calculées ne sont plus négatives. Ceci s'explique par la petitesse de la valeur propre théorique pour les grandes valeurs de  $n$ . Le programme n'est plus capable de trouver la valeur propre cherchée. Ce manque de précision est dû à la taille finie de la grille de calcul et au fait que la base de B-splines possède un nombre limité de fonctions : le nombre de valeurs propres trouvées par la résolution du système aux valeurs propres est donc limité, en particulier le nombre de valeurs propres négatives. Ainsi, les paramètres du programme limitent les calculs lorsqu'on approche du seuil d'ionisation. On ne peut pas obtenir les valeurs propres des sous-couches très faiblement liées. En augmentant la taille de la base de B-splines ainsi que la taille de la grille, on peut accéder à des valeurs propres de  $n$  élevé avec une bonne précision. Par exemple, pour l'orbitale  $7s$  de l'atome d'hydrogène dont le rayon moyen  $\langle r_{7s} \rangle$  est de 73.5 u.a, une grille de 80 u.a est trop petite pour assurer une bonne convergence au bord de la grille. La contrepartie de ces deux améliorations est une augmentation substantielle du temps de calcul.

n	num.	théo.	n	num.	théo.	n	num.	théo.
1	-673.9	-676	14	-3.448	-3.448	27	-0.9271	-0.9272
2	-168.7	-169	15	-3.003	-3.004	28	-0.8621	-0.8622
3	-75.03	-75.11	16	-2.640	-2.640	29	-0.8037	-0.8038
4	-42.21	-42.25	17	-2.338	-2.339	30	-0.7509	-0.7511
5	-27.02	-27.04	18	-2.086	-2.086	31	-0.7023	-0.7034
6	-18.76	-18.77	19	-1.872	-1.872	32	-0.6540	-0.6601
7	-13.78	-13.79	20	-1.689	-1.69	33	-0.6011	-0.6207
8	-10.55	-10.56	21	-1.532	-1.532	34	-0.5420	-0.5847
9	-8.342	-8.345	22	-1.396	-1.396	35	-0.4768	-0.5518
10	-6.757	-6.76	23	-1.277	-1.277	36	-0.4062	-0.5216
11	-5.585	-5.586	24	-1.173	-1.173	37	-0.3305	-0.4937
12	-4.693	-4.694	25	-1.081	-1.081	38	-0.2500	-0.4681
13	-3.999	-4	26	-0.9998	-1	39	-0.1650	-0.4444

TAB. 3.2 – Energies (en Ryd) des premières couches du fer hydrogénoïde. num. : valeurs calculées, théo. : valeurs exactes.

Cependant, cette limitation des valeurs propres négatives n'est réellement contraignante que pour les ions hydrogénoïdes de  $Z$  faible et pour les ions de  $Z$  important mais faiblement ionisés. Au contraire, dans les ions de  $Z$  important, fortement ionisés, les électrons sont fortement liés au noyau, et les valeurs propres des états les moins excités ont une grande valeur absolue. Il y aura donc un bien plus grand nombre de valeurs propres négatives accessibles. On peut prendre comme exemple le fer hydrogénoïde Fe XXVI. On donne les valeurs propres dans la table 3.2. Les résultats sont très proches des valeurs théoriques ( $E_n = -Z^2/n^2$ ) pour  $n \leq 30$ . De plus, on obtient des valeurs propres négatives pour  $n$  supérieur à 40. On voit ici que le nombre de valeurs propres négatives est limité par la taille de la matrice que l'on doit diagonaliser. La vraie limitation sur la précision des résultats concerne les valeurs propres proches du seuil d'ionisation de l'ion isolé (états de Rydberg). Pour traiter correctement ces états de Rydberg, il serait judicieux d'augmenter le nombre de B-splines de la base et la dimension de la grille, ce qui entraînerait obligatoirement une nette augmentation du temps de calcul.

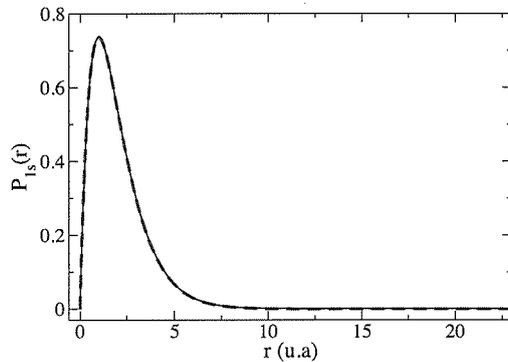


FIG. 3.1 – Fonction radiale de l'orbitale  $1s$  de l'atome d'hydrogène en u.a. Trait rouge discontinu : calcul numérique, trait noir : fonction radiale théorique.

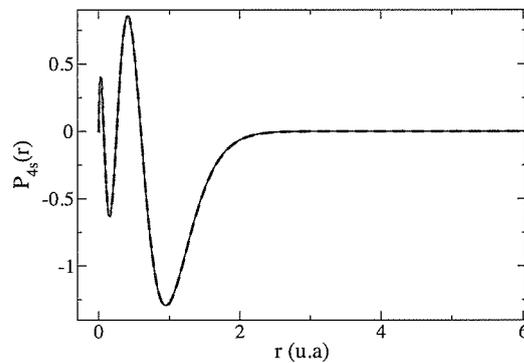


FIG. 3.2 – Fonction radiale de l'orbitale  $4s$  du fer hydrogénoïde en u.a. Trait rouge discontinu : calcul numérique, trait noir : fonction radiale théorique.

On peut également vérifier la précision des fonctions radiales obtenues avec notre base de B-splines. Les figures 3.1 et 3.2, où l'on représente les fonctions  $P_{nl}$  numériques (écrites sous la forme d'un développement sur la base de B-splines) et les fonctions théoriques. Pour les configurations  $1s$  de l'hydrogène et  $4s$  du fer hydrogénoïde, l'accord est parfait. La résolution de l'équation aux valeurs propres est bien adaptée aux ions hydrogénoïdes.

## 3.1.1.2 Ions multi-électroniques

ion	Fe VII		Sn XI	
	HFS	HX	HFS	HX
1s	-522.9	-528.8	-2070.	-2081.
2s	-70.03	-70.47	-321.5	-322.2
2p	-62.33	-63.33	-304.0	-306.1
3s	-15.44	-15.23	-74.47	-73.92
3p	-13.02	-12.78	-66.80	-66.29
3d	-8.932	-8.795	-51.93	-51.87
4s			-21.93	-22.66
4p			-19.13	-19.85
4d			-14.29	-14.91

TAB. 3.3 – Energie en Rydberg des sous-couches non relativistes 1s a 4d. Méthodes utilisées : HFS, HX.

Le calcul des fonctions radiales des ions multi-électroniques nécessite d'introduire les interactions inter-électroniques (interaction coulombienne et interaction d'échange) dans l'équation aux valeurs propres. On peut utiliser la méthode HFS ou la méthode Hx, décrites précédemment. On peut noter que la première itération d'un tel calcul correspond au cas précédent (ion hydrogénoïde). Les valeurs propres obtenues à l'aide des méthodes HFS et HX, pour les orbitales des ions Fe VII et Sn XI sont reportées dans la table 3.3. Quel que soit le mode de calcul ou

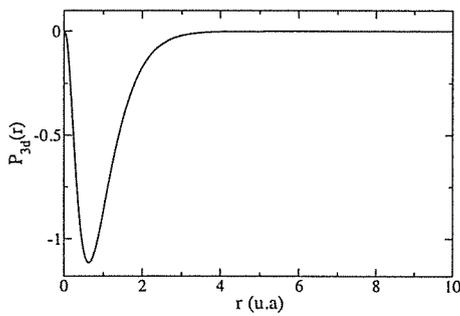


FIG. 3.3 – Fonction radiale (u.a.) de l'orbitale 3d de l'ion Fe VII isolé.

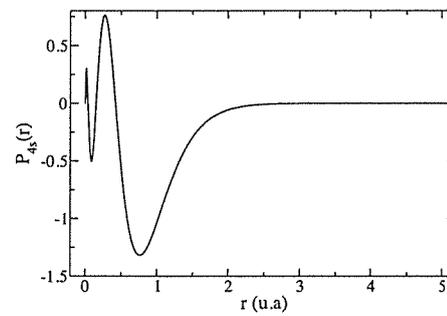


FIG. 3.4 – Fonction radiale (u.a.) de l'orbitale 4s de l'ion Sn XI isolé.

le programme utilisé, on obtient sensiblement les mêmes résultats avec un écart

d'au plus 10% pour les sous-couches externes. La méthode HX permet de traiter l'interaction d'échange mieux que la méthode HFS. Or cette interaction est importante pour les sous-couches externes qui sont susceptibles de passer dans le continuum par effet de densité, et qui entrent en jeu dans les différents processus atomiques reliant les configurations. Il est recommandé de choisir la méthode qui donnera les résultats les plus précis pour les sous-couches externes. Dans la suite des calculs, nous utiliserons donc la méthode HX.

On s'intéresse maintenant aux orbitales des ions Fe VII et Sn XI dans leur état fondamental, par exemple les orbitales  $3d$  de Fe VII et  $4s$  de Sn XI. Pour le fer,  $3d$  correspond à la fonction propre associée à la plus basse valeur propre trouvée pour  $l = 2$ . Et, pour l'étain,  $4s$  correspond à la fonction associée à la quatrième plus basse valeur propre trouvée pour  $l = 0$ . Dans les figures 3.3 et 3.4 on représente les orbitales de Fe VII et Sn XI en fonction de  $r$ . On observe que les deux courbes possèdent chacune  $n - l - 1$  noeuds, ce qui correspond au nombre de noeuds théorique des orbitales mono-électroniques.

### 3.1.2 Calculs en présence d'un plasma dense

Après avoir vérifié la validité de notre calcul des états propres et valeurs

Energies des orbitales électroniques du Fe VII (Ryd)							
Configuration $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^2$							
$N_e$	0.	6.75E20	6.75E21	6.75E22	2.02E23	4.05E23	6.75E23
1s	-528.8	-527.9	-527.0	-525.0	-523.4	-522.1	-521.0
2s	-70.47	-69.65	-68.71	-66.70	-65.10	-63.81	-62.72
2p	-63.33	-62.51	-61.56	-59.56	-57.96	-56.67	-55.58
3s	-15.23	-14.41	-13.46	-11.46	-9.875	-8.595	-7.520
3p	-12.78	-11.96	-11.02	-9.021	-7.433	-6.155	-5.084
3d	-8.795	-7.974	-7.030	-5.031	-3.443	-2.167	-1.098
Configuration $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d 4f$							
$N_e$	0.	6.75E20	6.75E21	6.75E22	2.02E23	4.05E23	6.75E23
1s	-530.2	-529.3	-528.4	-527.1	-525.6	-524.3	-523.18
2s	-71.95	-71.13	-70.20	-68.90	-67.39	-66.06	-64.91
2p	-64.81	-63.99	-63.05	-61.75	-60.24	-58.91	-57.77
3s	-16.30	-15.48	-14.54	-13.27	-11.79	-10.48	-9.371
3p	-13.85	-13.03	-12.09	-10.81	-9.339	-8.039	-6.928
3d	-10.02	-9.202	-8.266	-6.989	-5.509	-4.206	-3.093
4f	-3.133	-2.314	-1.392	continuum	continuum	continuum	continuum

TAB. 3.4 – Energies des orbitales électroniques de Fe VII dans son état fondamental et pour une configuration excitée.  $N_e$  est donnée en  $\text{cm}^{-3}$ .

propres des ions isolés, on peut passer à l'étude des ions perturbés par un plasma dense. L'effet du plasma sur les énergies des niveaux et les fonctions propres est

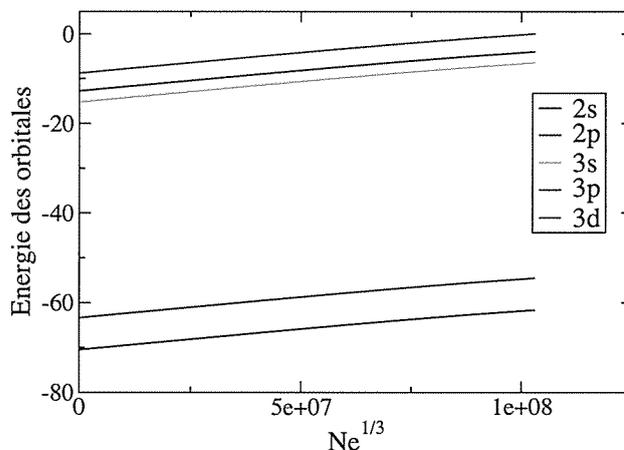


FIG. 3.5 – Énergies des orbitales de Fe VII dans la configuration fondamentale en fonction de  $N_e^{1/3}$ . L'énergie est donnée en Rydberg et  $N_e^{1/3}$  en  $\text{cm}^{-1}$ .

pris en compte en ajoutant, dans le potentiel utilisé pour le calcul autocohérent, le potentiel dû au plasma (voir chapitre 2). Le modèle choisi ici est celui de la cellule ionique. Les énergies et les fonctions propres dépendent alors de la densité électronique  $N_e$ . Dans la table 3.4 nous donnons en exemple les énergies des sous-couches de l'ion Fe VII dans son état fondamental et dans la configuration excitée  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d 4f$ , pour plusieurs densités électroniques du plasma. On note alors, pour les deux configurations, une augmentation de l'énergie propre des sous-couches électroniques avec la densité électronique. De plus, pour la configuration excitée, on ne trouve plus de valeur propre négative pour l'orbitale de la sous-couche externe  $4f$ , à partir d'une densité de  $6.75 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ . Cette absence de valeurs propres négatives pour une sous-couche externe excitée n'est pas surprenante. En effet, les énergies de configuration augmentent avec la densité comme  $N_e^{1/3}$  [21].

Nous avons pu le vérifier en représentant les énergies des orbitales en fonction de  $N_e$  (voir figure 3.5). Avec un décalage en énergie proportionnel à  $N_e^{1/3}$ , on voit bien qu'il existe une densité seuil, pour laquelle ce décalage devient plus important que l'énergie de liaison de la dernière sous-couche. C'est ce phénomène que l'on vient d'observer pour la sous-couche externe  $4f$  de la configuration excitée de Fe VII. On considère alors que celle-ci a disparu dans le continuum. Il est intéressant de constater que ce phénomène de disparition des sous-couches externes dans le

continuum est aussi très sensible à leur degré d'excitation. On voit en effet que la sous-couche  $4f$  passe dans le continuum dès que l'on atteint une densité de  $6.75 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ , alors que pour une densité 10 fois supérieure la sous-couche externe  $3d$  de la configuration fondamentale est toujours liée.

Les orbitales ne sont pas toutes affectées de la même façon par le plasma. Représentons les fonctions radiales  $3s$  (figure 3.6) et  $3d$  (figure 3.7) de la configuration fondamentale du Fe VII, isolé, ou perturbé par un plasma de densité électronique égale à  $6.75 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ . On constate que le plasma n'affecte pas les orbitales de la même façon.

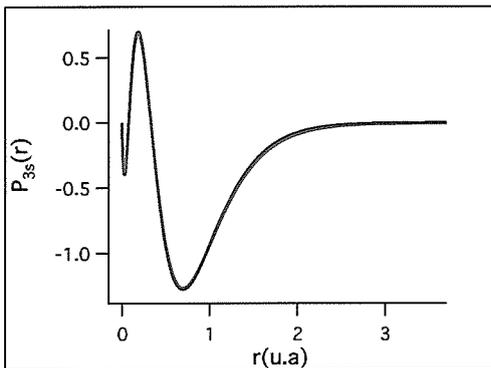


FIG. 3.6 – Fonction radiale de l'orbitale  $3s$  de la configuration fondamentale de Fe VII isolé (trait noir) et en présence d'un plasma (trait rouge).  $N_e = 6.75 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ .

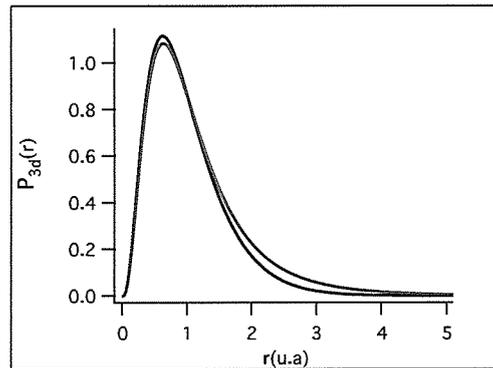


FIG. 3.7 – Fonction radiale de l'orbitale  $3d$  de la configuration fondamentale de Fe VII isolé (trait noir) et en présence d'un plasma (trait rouge).  $N_e = 6.75 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ .

La fonction  $3s$  n'est pas modifiée par le plasma. Ceci s'explique par le fait qu'elle est relativement profonde. Son énergie est de  $-15.23 \text{ Ryd}$  en l'absence de plasma. La diminution de l'énergie de liaison due au plasma fait alors passer la valeur propre de l'orbitale à  $-7.52 \text{ Ryd}$ , pour une densité électronique de  $6.75 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ , ce qui est insuffisant pour perturber le comportement de la fonction d'onde. La fonction radiale de la sous-couche  $3d$  est plus affectée par le plasma (figure 3.7). Dans ce cas, il s'agit de la sous-couche la plus externe. Son énergie de liaison, même en absence de plasma, est beaucoup plus faible. La perturbation par le plasma aura donc une influence plus importante que pour  $3s$ . En effet, on passe d'une énergie de liaison de  $-8.795 \text{ Rydberg}$  en l'absence de plasma à une énergie de liaison de  $-1.098 \text{ Rydberg}$  en présence de plasma.

On observe également un effet du plasma sur le rayon moyen des orbitales .

Le rayon moyen est défini par :

$$\langle r_i \rangle = \int_0^\infty P_i r P_i dr.$$

Les rayons moyens des orbitales de la configuration fondamentale du Fe VII isolé ( $\langle r^{(0)} \rangle$ ) et du Fe VII perturbé par un plasma ( $\langle r \rangle$ ) de densité  $N_e = 6.75 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$  sont :

$$\begin{aligned} \langle r_{3s}^{(0)} \rangle &= 0.7818 \text{ ua} \\ \langle r_{3d}^{(0)} \rangle &= 0.8100 \text{ ua} \\ \langle r_{3s} \rangle &= 0.7892 \text{ ua} \\ \langle r_{3d} \rangle &= 0.8574 \text{ ua} \end{aligned} \quad (3.1)$$

Les rayons moyens  $\langle r_{3s}^{(0)} \rangle$  et  $\langle r_{3d}^{(0)} \rangle$  sont très proches l'un de l'autre, les deux orbitales appartiennent en effet à la même couche électronique. De plus, le rayon moyen de 3s varie peu lorsque l'ion est dans un plasma, contrairement au rayon moyen de 3d : l'effet du plasma est plus important sur l'orbitale la plus externe. Cependant, ses valeurs sont inférieures au rayon de la sphère ionique, qui pour une densité  $N_e = 6.75 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$  est de 2.556 u.a. Les deux orbitales conservent

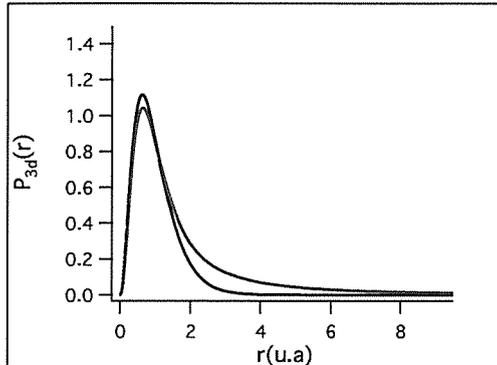


FIG. 3.8 – Fonction radiale de l'orbitale 3d de la configuration fondamentale de l'ion Fe VII isolé (trait noir) et en présence d'un plasma (trait rouge),  $N_e = 1.113 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$ .

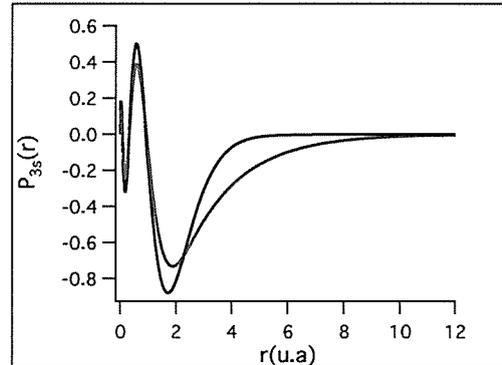


FIG. 3.9 – Fonction radiale de l'orbitale 4s de première configuration excitée  $1s^2 2s^2 3s^2 3p^6 3d 4s$  de Fe VII isolé (trait noir) et en présence d'un plasma (trait rouge),  $N_e = 3.375 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ .

leur caractère lié. Plus la densité augmente, plus l'effet prend de l'importance.

Pour une densité électronique  $N_e = 1.113 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$  l'orbitale  $3d$  est fortement perturbée (voir la figure 3.8) et  $\langle r_{3d} \rangle = 0.9623 \text{ ua}$ . Pour des configurations excitées, l'effet du plasma se ressent plus fortement sur les orbitales électroniques, comme on peut le voir sur l'orbitale  $4s$  de la configuration  $1s^2 2s^2 3s^2 3p^6 3d 4s$  à la densité  $3.375 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$  (voir figure 3.9). On a de même pour les rayons moyens associés :

$$\begin{aligned} \langle r_{4s}^{(0)} \rangle &= 1.8266 \text{ ua} \\ \langle r_{4s} \rangle &= 2.3903 \text{ ua} \end{aligned} \quad (3.2)$$

L'expansion radiale des orbitales augmente fortement avec la densité. Si les orbitales deviennent trop étendues, leur rayon moyen finit par se rapprocher sensiblement de la taille de la cellule ionique. L'orbitale empiète sur les cellules ioniques voisines : elle passe dans le continuum.

### 3.1.3 Orbitales du continuum

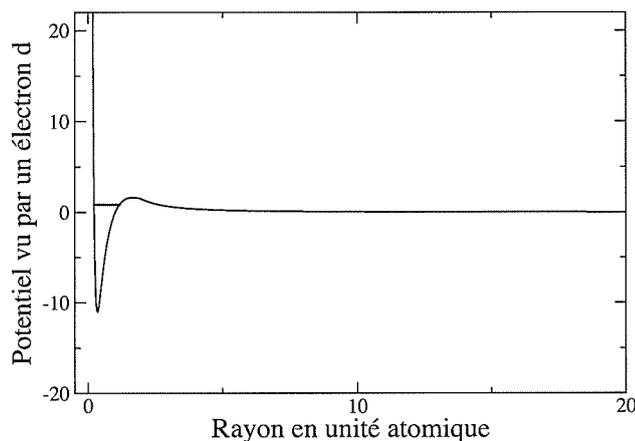


FIG. 3.10 – Potentiel vu par un électron  $d$  d'un ion Fe VII dans un plasma de densité électronique  $N_e = 1.688 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$ . Le trait rouge se situe à l'énergie où on trouve le maximum de la résonance. Il représente donc l'état (partiellement) lié correspondant à  $3d$ .

Comme on a pu le voir, lorsque la densité est suffisamment importante la dernière sous-couche électronique passe effectivement dans le continuum. Pour le

cas de l'ion Fe VII dans sa configuration fondamentale ( $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^2$ ), la densité seuil est de  $1.288 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$ . Si on trace la courbe du potentiel vu par un électron  $d$  pour une densité supérieure à cette densité seuil (voir 3.10), on voit bien apparaître une barrière de potentiel. Cela laisse supposer l'existence d'états partiellement liés dans la densité d'états électroniques dans le continuum.

### 3.1.3.1 Densités d'états partielles et totale

On calcule donc la densité d'états totale dans le continuum de l'ion Fe VII, pour une densité électronique de  $1.688 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$ . La densité d'états est obtenue en faisant la somme des différentes densités partielles en  $l$  (équation 2.30). Pour les calculer, il est nécessaire de connaître les différentes  $P_{E,l}(r)$  qui sont obtenues en résolvant l'équation 2.26. On adapte seulement le potentiel utilisé en modifiant le terme centrifuge pour qu'il corresponde au moment cinétique de l'orbitale à calculer. Dans la figure 3.11 on représente la densité obtenue et la densité électronique d'un gaz d'électrons libres. On voit bien apparaître un pic de forte amplitude dont le maximum est localisé à 0.9 Rydberg. Or la barrière de potentiel remonte jusqu'à 2 Rydbergs (voir figure 3.10). Cette résonance se trouve donc au-dessous de la barrière de potentiel. Pour cette énergie propre, un électron libre peut donc toujours se trouver dans le puits de potentiel pour les petites valeurs de  $r$ . Pour les plus hautes énergies, la densité d'états obtenue tend

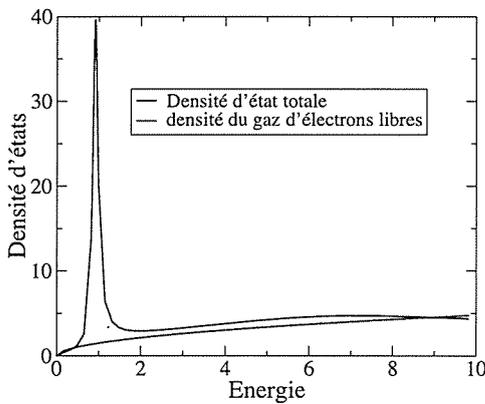


FIG. 3.11 – Densité d'états pour la configuration fondamentale de Fe VII.  $N_e = 1.688 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$ .

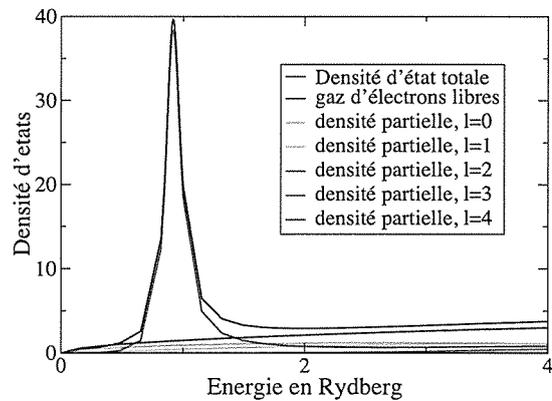


FIG. 3.12 – Densités d'états partielles pour la configuration fondamentale de Fe VII.  $N_e = 1.688 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$ .

vers celle du gaz d'électrons libres. Il existe cependant un léger décalage vers le bas, qui s'explique par le fait que la somme sur les moments cinétiques dans la

densité d'états calculée est limitée à  $l = 5$  : la somme n'est pas complète et le résultat obtenu est trop faible pour les grandes énergies (énergies pour lesquelles les contributions des densités partielles de  $l$  plus grand sont plus importantes). C'est cette résonance qui fait la différence entre le résultat obtenu en tenant compte de l'effet du plasma de celui obtenu pour le gaz d'électrons libres. On considère alors qu'elle représente l'existence de l'électron passé dans le continuum, qui est le principal effet du plasma sur la configuration électronique. Cependant, on a à présent une densité d'états totale, et l'orbitale passée dans le continuum est une orbitale  $3d$ . Il nous faut vérifier si la résonance obtenue correspond bien à un électron  $d$ .

Dans la figure 3.12 on compare les densités partielles obtenues pour différentes valeurs de  $l$  à la densité totale. On voit bien que les densités partielles associées à  $l \neq 2$  ne montrent aucune trace de la résonance, pour une énergie égale à 0.9 Rydberg, alors que la densité partielle associée à  $l = 2$  montre cette résonance. L'existence de cette résonance correspond clairement à une orbitale  $d$ . La sous-couche  $3d$  étant la première sous-couche  $d$  passée dans le continuum, elle est représentée par la résonance. En règle générale, on peut dire que la résonance partielle, pour un  $l$  donné, représente bien le caractère partiellement lié de l'électron de même  $l$ , de la sous-couche passée dans le continuum.

### 3.1.3.2 Calcul des orbitales

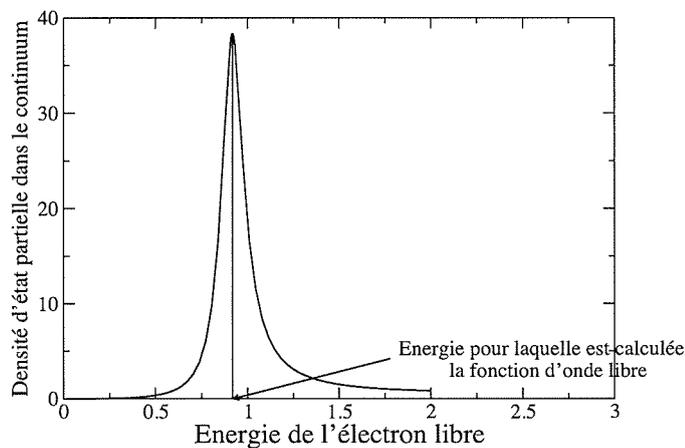


FIG. 3.13 – Densité d'états partielle dans le continuum d'un ion de Fe VII pour  $l = 2$ . La fonction d'onde correspondant à l'énergie indiquée par la flèche (maximum de la densité d'états) est tracée sur la figure 3.14.

Dans notre exemple de l'ion Fe VII dans sa configuration fondamentale on se concentre donc sur la densité d'états partielle pour  $l$  égal à deux, dans le but d'obtenir une orbitale représentant la sous-couche  $3d$  passée dans le continuum. On peut intégrer dans le calcul autocohérent une fonction propre et une valeur propre associées à cette sous-couche, grâce à la fonction calculée au maximum de la résonance. En effet, considérons la fonction radiale  $3d$  obtenue pour l'énergie au maximum de la résonance (figure 3.14). Elle comporte deux parties distinctes.

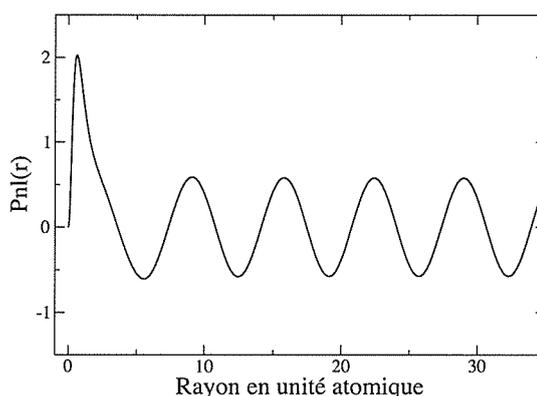


FIG. 3.14 – Fonction radiale  $d$  au maximum de la résonance (voir figure 3.13).

Pour les petits  $r$  elle a un comportement de fonction liée avec l'existence d'un ventre, tel qu'attendu pour une fonction  $3d$ , et pour les  $r$  plus grands elle a un comportement d'onde plane, tel qu'attendu pour une fonction d'onde libre. Ceci illustre bien le caractère semi-lié de la configuration à laquelle elle est associée.

### 3.1.4 Fonctions d'onde libres localisées

On souhaite utiliser ces fonctions partiellement liées dans le calcul autocohérent des orbitales radiales et des énergies de configuration des électrons liés. Ce qui nous importe alors est la partie liée de ces fonctions. Celle-ci nous permettra d'obtenir l'énergie de configuration. Pour isoler la partie liée, on raccorde la fonction d'onde numérique à une fonction hydrogénoïde (exponentielle décroissante). On raccorde ces deux fonctions à l'extérieur de la cellule ionique, au premier point de la courbe où les fonctions numérique et hydrogénoïde ainsi que leurs dérivées sont égales.

Dans la figure 3.15 on a représenté la fonction semi-liée de la figure 3.14, la fonction localisée qui lui correspond, et la fonction de l'ion isolé. Les deux fonc-

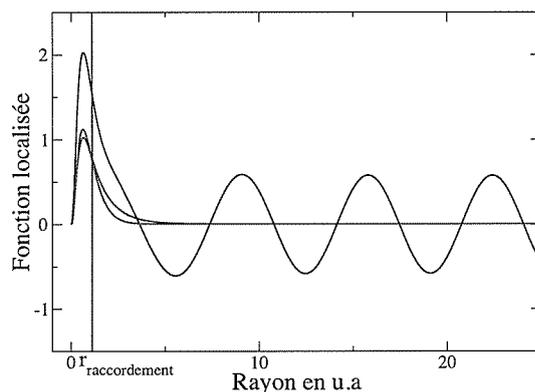


FIG. 3.15 – Fonctions radiales de la sous-couche de Fe VII dans l'état fondamental. Courbe rouge : fonction libre localisée; courbe noire : fonction non localisée; courbe bleue : fonction de l'ion isolé.  $N_e = 1.688 \times 10^{24} \text{cm}^{-3}$ .

tions calculées en présence du plasma ont bien le même comportement pour les valeurs de  $r$  inférieures à la distance  $r_{\text{racc}}$  où les deux courbes sont raccordées. Ces valeurs de  $r$  correspondent à la partie liée de la fonction semi-liée. Pour les  $r$  supérieures à  $r_{\text{racc}}$ , on voit bien que la fonction localisée décroît lentement vers 0, comme une fonction liée. La différence entre les deux fonctions, pour la partie liée, s'explique simplement par le fait que l'on doit renormaliser la fonction d'onde localisée pour assurer la présence complète de l'électron dans la boîte. Quand on compare la fonction localisée à la fonction de l'ion isolé, on constate comme précédemment une augmentation de l'extension radiale de l'orbitale électronique. La procédure précédente permet d'obtenir des fonctions ayant un comportement de fonctions d'onde liées monoélectroniques que l'on va pouvoir utiliser dans le calcul autocohérent des fonctions d'onde et des énergies moyennes de configuration.

## 3.2 Résonances dans le continuum

### 3.2.1 Caractéristiques des résonances

Les résonances dans le continuum ne permettent pas seulement de calculer les fonctions d'onde des sous-couches électroniques passées dans le continuum. Elles permettent aussi, suivant leur nature, de déterminer qualitativement à quel point un électron  $nl$  reste lié à son atome. En premier lieu, pour une même densité les résonances que l'on obtient n'auront pas la même amplitude ni ne se trouveront

à la même énergie suivant la configuration électronique dans laquelle se trouve l'ion. Dans la figure 3.16 on représente un certain nombre de densités d'états dans le continuum pour une densité électronique identique et pour des électrons appartenant au même ion (C IV). Seule la configuration à laquelle appartient l'ion est modifiée (on modifie l'orbitale de l'électron externe pour obtenir des résonances suivant des valeurs différentes de  $l$ ).

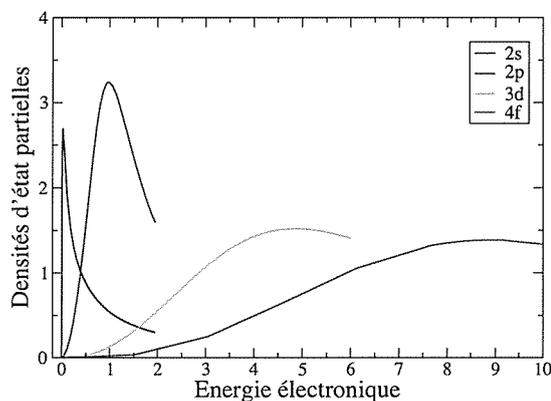


FIG. 3.16 – Résonances dans le continuum en fonction de la configuration électronique pour C IV. Les configurations sont de forme  $1s^2nl$ , avec l'électron  $nl$  passé dans le continuum indiqué dans la légende.  $N_e = 1.01 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ .

Les résultats obtenus montrent les résonances associées à toutes les configurations  $1s^2nl$  étudiées. On obtient des résonances pour toutes les valeurs de  $l$ . Le principal effet observé est que la largeur de la résonance, ainsi que sa localisation, croissent avec la valeur du moment cinétique qui lui est associé. En effet, les résonances dans le continuum ont un comportement largement influencé par le moment cinétique de l'électron passé dans le continuum : les résonances de même moment cinétique ont des formes et des amplitudes à peu près similaires. Ceci s'explique par le fait que le potentiel vu par les électrons est fortement dépendant du moment cinétique. Les électrons  $s$  ne voient pas de terme centrifuge, la barrière de potentiel qu'ils voient est donc moins haute, mais de la même façon ils auront une énergie inférieure à celle des autres électrons. Pour un potentiel donné, il leur est donc plus difficile de passer dans le continuum que les électrons de moment cinétique plus élevé, ce qui se traduit par une résonance dans le continuum de moins grande largeur, leur plus faible énergie expliquant le fait que la résonance est plus proche du seuil d'ionisation. Ce phénomène s'accroît avec l'augmentation de  $l$ , ce qui explique le comportement des résonances. Enfin, un autre aspect important

qui joue sur les résonances est naturellement la densité électronique du plasma dans lequel se trouve l'ion. Il est donc intéressant d'étudier le comportement des résonances vis-à-vis à la densité électronique.

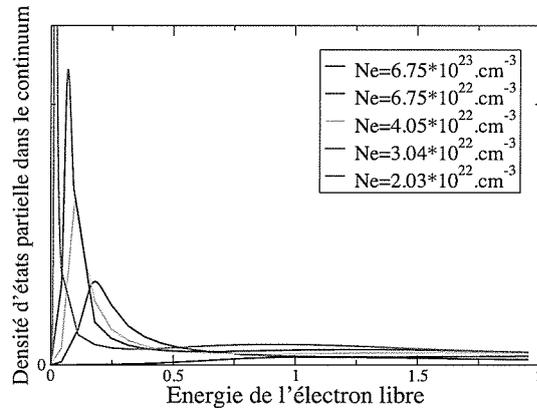


FIG. 3.17 – Résonances  $2p$  obtenues pour la configuration fondamentale de l'atome de carbone à différentes densités.

La figure 3.17 montre les résonances  $2p$  obtenues pour la configuration fondamentale de l'atome de carbone ( $1s^2 2s^2 2p^2$ ) pour plusieurs valeurs de la densité électronique. On observe que la forme générale de la résonance reste la même quelque soit la densité électronique, l'influence de la densité jouant en effet sur la largeur de la résonance et sa localisation. Cette influence se manifeste par un élargissement progressif de la résonance et un décalage de son maximum vers les hautes énergies quand la densité augmente. En effet, une densité proche de la densité minimale d'ionisation implique que la barrière de potentiel due au plasma sera peu importante. Par conséquent, les états semi-liés possibles auront une énergie propre faible pour ne pas passer au-dessus de cette barrière. Quand la densité augmente, la barrière de potentiel augmente et les états semi-liés peuvent donc prendre une plus grande énergie, ce qui explique le décalage de la résonance. Le phénomène le plus intéressant est l'élargissement de la résonance avec la densité électronique. C'est ce phénomène qui nous permettra d'associer un taux d'ionisation par effet tunnel aux configurations semi-liées, dans le chapitre suivant.

### 3.2.2 Le problème de la résolution d'une résonance

Pour un ion et une configuration donnés, on trouve toujours une densité à partir de laquelle la sous-couche la plus externe passe dans le continuum. Pour

des densités très légèrement supérieures, on rencontre un problème de résolution numérique lié à la largeur de la résonance. La largeur des résonances obtenues est en effet si faible qu'il devient très difficile de les résoudre en énergie pour le calcul de la densité d'états. Ce problème est illustré sur l'exemple suivant. Dans la configuration fondamentale de l'ion Fe VII, on obtient une densité minimum de  $1.1270 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$  pour laquelle la sous-couche  $3d$  passe dans le continuum. La densité d'états obtenue pour une densité de  $1.1271 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$  qui lui est légèrement supérieure est présentée dans les figures 3.18 et 3.19.

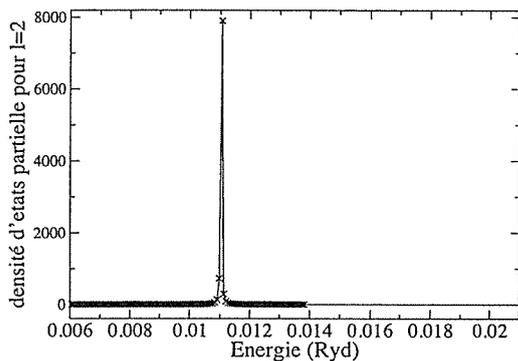


FIG. 3.18 – Densité d'états du Fe VII pour une énergie comprise entre 0.006 et 0.021 Ryd.  $N_e = 1.1271 \times 10^{24}$ .

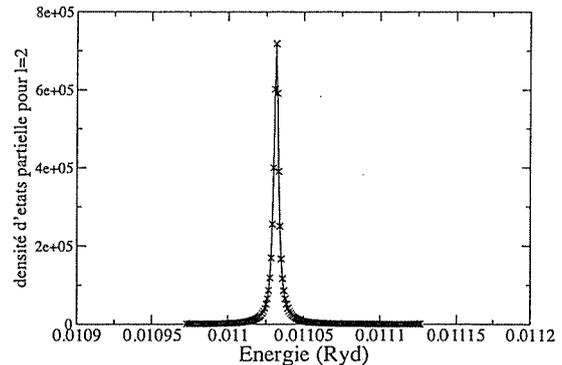


FIG. 3.19 – Densité d'états du Fe VII pour une énergie comprise entre 0.0109 et 0.0112 Ryd. Même densité que dans la figure 3.18.

Un premier calcul sur une grille en énergie grossière donne une résonance de largeur voisine de 0.00015 Rydberg et une amplitude proche de  $8000 \text{ u.a.}^{-1}$  (voir figure 3.18). Mais un deuxième calcul mettant en jeu une grille d'énergie plus fine montre que la résonance a une largeur égale à 0.000005 Rydberg et une amplitude supérieure à  $7 \times 10^5 \text{ u.a.}^{-1}$  (voir figure 3.19). Ce deuxième calcul nécessite un temps machine deux fois plus important. De plus, même ce calcul ne nous donne pas forcément la valeur du maximum de la résonance, dans la mesure où on trouve un faible nombre d'énergies pour lesquelles la valeur de la densité d'états est proche du maximum. Mais ce qui est important est le gain de précision sur la largeur à mi-hauteur et la position de la résonance. La valeur du maximum de la résonance présente peu d'intérêt. Ici, le gain de précision sur la valeur de la largeur n'est pas suffisant pour justifier une nouvelle augmentation du temps de calcul. Il est donc difficile d'obtenir avec une grande précision la largeur des résonances lorsqu'on est légèrement au-dessus du seuil d'ionisation.

### 3.3 Energie de configuration

Le calcul des orbitales électroniques n'est que la première étape dans la connaissance des effets de densité sur la structure des ions. Ils sont nécessaires dans la détermination des énergies des configurations électroniques présentes dans le plasma considéré. Ces énergies entrent dans le calcul des taux de transition couplant les différentes configurations. Il faut donc les calculer précisément en tenant compte de la perturbation apportée par le plasma.

#### 3.3.1 Energie moyenne de configuration dans un ion isolé

##### 3.3.1.1 Rappels :

L'énergie moyenne d'une configuration électronique  $C$  donnée s'écrit :

$$E_{\text{moy}}(C) = \frac{\sum_m \langle m | H | m \rangle}{N_C}, \quad (3.3)$$

où  $m$  représente un état de la configuration  $C$  (sous la forme d'un produit antisymétrisé de fonctions monoélectroniques) et  $N_C$  le nombre de ces états. L'Hamiltonien  $H$  est obtenu en additionnant les termes monoélectroniques contribuant à l'Hamiltonien de chaque électron de la configuration, auxquels on ajoute un terme d'interaction inter-électroniques. On a donc  $H$  :

$$H = - \sum_i \nabla_i^2 - \sum_i \frac{2Z}{r_i} + \sum_{\substack{i,j \\ i>j}} \frac{2}{r_{ij}}, \quad (3.4)$$

où  $i$  et  $j$  se rapportent aux électrons liés de l'ion considéré.

Une manière courante de calculer l'énergie consiste à utiliser directement les règles de Slater sur la fonction d'onde totale du système, pour exprimer l'énergie comme une simple somme d'éléments de matrice mettant en jeu des éléments de matrice à un ou deux électrons (voir par exemple [27]). On a alors :

$$\begin{aligned} E_{\text{moy}}(C) = & - \sum_i \langle i | \nabla_i^2 | i \rangle_{\text{moyen}} - \sum_i \langle i | \frac{2Z}{r_i} | i \rangle_{\text{moyen}} \\ & + \sum_{\substack{i,j \\ i>j}} \left[ \langle ij | \frac{2}{r_{12}} | ij \rangle_{\text{moyen}} - \langle ij | \frac{2}{r_{12}} | ji \rangle_{\text{moyen}} \right], \end{aligned} \quad (3.5)$$

où la moyenne est effectuée sur les états possibles de  $i$  et  $j$ . Les deux premiers termes sont des opérateurs à un électron et sont obtenus par des intégrales simples sur  $r$ . Le troisième terme qui représente l'énergie d'interaction inter-électronique met en jeu des intégrales à deux électrons, appelées intégrales de Slater.

## 3.3.1.2 Résultats numériques

Pour illustrer ces calculs d'énergies moyennes on considère l'azote dans différents états de charge. Dans la table 3.5 on donne les différentes contributions

Ion considéré	N I	N I	N II	N II	N VII
configuration de l'ion	$1s^2 2s^2 2p^3$	$1s^2 2s^2 2p^2 3s$	$1s^2 2s^2 2p^2$	$1s^2 2s^2 2p 3s$	$1s$
$E_{\text{cin}}^{1s}$	44.11	44.12	44.13	44.17	-48.91
$E_{\text{cin}}^{2s}$	4.829	5.290	5.313	5.924	
$E_{\text{cin}}^{2p}$	3.579	4.399	4.434	5.405	
$E_{\text{cin}}^{3s}$		0.409		1.017	
$E_{\text{noy}}^{1s}$	-92.92	-92.94	-92.94	-92.99	-97.87
$E_{\text{noy}}^{2s}$	-15.49	-16.20	-16.23	-17.12	
$E_{\text{noy}}^{2p}$	-12.96	-14.54	-14.60	-16.21	
$E_{\text{noy}}^{3s}$		-3.242		-4.845	
$E_{\text{int}}^{1s,1s}$	8.205	8.207	8.207	8.212	
$E_{\text{int}}^{1s,2s}$	1.869	1.942	1.945	2.033	
$E_{\text{int}}^{1s,2p}$	1.778	1.989	1.997	2.209	
$E_{\text{int}}^{1s,3s}$		0.420		0.623	
$E_{\text{int}}^{2s,2s}$	1.349	1.414	1.417	1.493	
$E_{\text{int}}^{2s,2p}$	1.144	1.260	1.265	1.380	
$E_{\text{int}}^{2s,3s}$		0.384		0.546	
$E_{\text{int}}^{2p,2p}$	1.176	1.363	1.370	1.553	
$E_{\text{int}}^{2p,3s}$		0.392		0.565	
$E_{\text{int}}^{3s,3s}$		0.291		0.426	
$E_{\text{moy}}(\text{conf})$	-109.01	-108.42	-107.99	-106.73	-48.95

TAB. 3.5 – Energie cinétique, énergie d'interaction avec le noyau, énergie d'interaction interélectronique et énergie moyenne de configuration pour différents ions N. Les valeurs sont données en Ryd.

à l'énergie moyenne de configuration pour les configurations fondamentales de N I, N II et N VII, ainsi que les contributions de la première configuration excitée de N I et N II. Les résultats obtenus pour les deux configurations fondamentales de N I et NII sont en bon accord avec celles obtenues par Cowan (voir [27]). On peut également s'intéresser aux énergies moyenne d'ionisation des ions. L'énergie moyenne d'ionisation d'un ion  $A^{n+}$  dans une configuration  $C$  vers un ion  $A^{(n+1)+}$  dans la configuration fondamentale  $C_f$  est donnée par :

$$E_{\text{ionisation}}(C) = E_{\text{moy}}(C_f) - E_{\text{moy}}(C), \quad (3.6)$$

La valeur expérimentale obtenue pour l'énergie d'ionisation de N I vers N II est de 1.068 Rydberg ([36]). la valeur trouvée ici est de 1.020 Rydberg. L'énergie d'ionisation de N VII mesurée est de 49.027 Rydberg, alors que notre valeur théorique est de 48.95 Rydberg. Pour les états fortement ionisés les valeurs numériques sont en meilleur accord avec les valeurs expérimentales que ne le sont les résultats obtenus pour les états peu ionisés. Ceci s'explique par la difficulté à calculer correctement les orbitales et les énergies des sous-couches proches du seuil d'ionisation dans une base finie de B-splines.

### 3.3.2 Energie obtenue en présence du plasma

Lorsqu'on cherche à calculer les énergies de configuration des ions dans un plasma, on doit ajouter à l'Hamiltonien un terme qui est dû à l'interaction du plasma avec les électrons. On doit également pouvoir déterminer une énergie moyenne pour les électrons d'une sous-couche passée dans le continuum. L'interaction  $V_{\text{plasma}}$  est un opérateur monoélectronique. On a :

$$E_{\text{plasma}} = \sum_i w_i E_{\text{plasma}}^i, \quad (3.7)$$

où  $w_i$  est le peuplement de la sous-couche  $i$  et où, pour un électron  $i$ , l'énergie

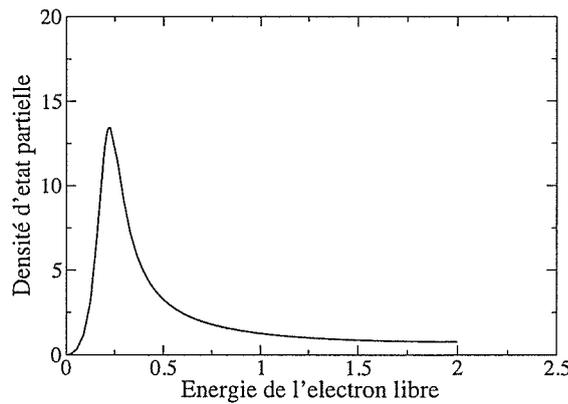


FIG. 3.20 – Résonance associée à la sous-couche  $2p$  de N II.

due à l'interaction avec le plasma s'écrit

$$\begin{aligned} E_{\text{plasma}}^i &= \langle i | V_{\text{plasma}} | i \rangle \\ &= \int_0^{\infty} P_i(r) V_{\text{plasma}}(r) P_i(r) dr \end{aligned} \quad (3.8)$$

où  $V_{\text{plasma}}$  est donné en 2.1.2.2. Pour les sous-couches passées dans le continuum, on calcule les différentes contributions à l'énergie, au maxima de la résonance. Pour cela, on se sert des mêmes formules que pour les sous-couches liées. Comme précédemment, la fonction radiale de cette sous-couche est calculée à partir du maximum de la résonance apparaissant dans le calcul de la densité d'états électroniques du continuum (voir figure 3.20). Dans la table 3.6 on donne les énergies moyennes de configuration obtenues pour la configuration fondamentale de N II

$N_e$ (cm <sup>-3</sup> )	0	$6.755 \times 10^{18}$	$6.755 \times 10^{20}$	$6.755 \times 10^{21}$	$3.377 \times 10^{23}$
$E_{\text{cin}}^{1s}$	44.13	44.13	44.13	44.13	44.28
$E_{\text{cin}}^{2s}$	5.313	5.313	5.311	5.299	5.652
$E_{\text{cin}}^{2p}$	4.434	4.434	4.432	4.410	3.420*
$E_{\text{noy}}^{1s}$	-92.94	-92.94	-92.94	-92.94	-93.11
$E_{\text{noy}}^{2s}$	-16.23	-16.23	-16.23	-16.21	-16.70
$E_{\text{noy}}^{2p}$	-14.60	-14.60	-14.60	-14.56	-13.40*
$E_{\text{plasma}}^{1s}$	0	$7.676 \times 10^{-2}$	0.356	0.767	2.813
$E_{\text{plasma}}^{2s}$	0	$7.675 \times 10^{-2}$	0.355	0.759	2.454
$E_{\text{plasma}}^{2p}$	0	$7.675 \times 10^{-2}$	0.355	0.758	2.234*
$E_{\text{int}}^{1s,1s}$	8.207	8.207	8.207	8.207	8.226
$E_{\text{int}}^{1s,2s}$	1.945	1.945	1.945	1.943	1.990
$E_{\text{int}}^{1s,2p}$	1.997	1.997	1.997	1.991	1.828*
$E_{\text{int}}^{2s,2s}$	1.417	1.417	1.417	1.415	1.448
$E_{\text{int}}^{2s,2p}$	1.265	1.265	1.264	1.261	1.178*
$E_{\text{int}}^{2p,2p}$	1.370	1.370	1.370	1.364	1.157*
$E_{\text{moy}}(\text{conf})$	-109.01	-107.53	-105.85	-103.41	-93.90

TAB. 3.6 – Energie de la configuration fondamentale de l'ion N II dans un plasma. La densité électronique est en cm<sup>-3</sup>. L'astérisque désigne les sous-couches passant dans le continuum.

en fonction de la densité électronique. Les trois premières densités non nulles sont inférieures au seuil d'ionisation. Toutes les sous-couches électroniques sont donc liées. Tant qu'une sous-couche électronique est liée, les différentes énergies (énergie cinétique, d'interaction entre les électrons et avec le noyau) varient peu avec la densité du plasma. Cela est dû au fait qu'en l'absence de sous-couches passant dans le continuum, les fonctions radiales ne sont pas significativement modifiées, comme on peut le voir dans la figure 3.6. L'augmentation de l'énergie de la configuration est donc, pour ces configurations, essentiellement due à la contribution de l'énergie d'interaction électron-plasma. La densité  $3.377 \times 10^{23}$  cm<sup>-3</sup> est supérieur à la densité seuil qui fait passer l'orbitale 2p dans le continuum. La fonction

radiale de  $2p$  est donc sensiblement modifiée pour cette densité. On constate alors une modification plus importante de toutes les énergies pour la dernière orbitale de la configuration. Cependant, c'est toujours  $E_{\text{plasma}}^i$  qui joue le plus grand rôle dans l'évolution de l'énergie moyenne de configuration quand on fait varier la densité.

Il est maintenant intéressant de voir si la variation de l'énergie moyenne de configuration avec la densité électronique est la même pour toutes les configurations, que celles-ci comprennent des orbitales liées ou pas. Dans la figure 3.22 nous avons donc tracé les courbes donnant l'énergie moyenne de la configuration fondamentale du fer en fonction de la densité et de la racine cubique de la densité.

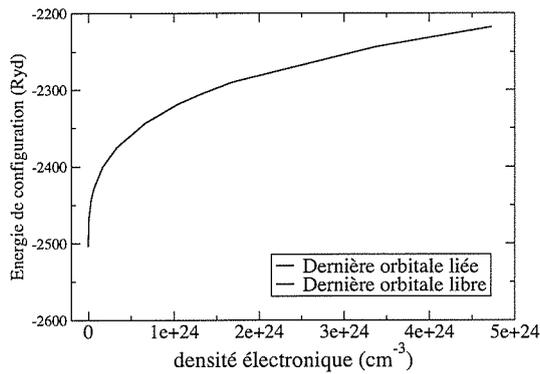


FIG. 3.21 - Énergie moyenne de la configuration fondamentale d'un ion Fe VII en présence du plasma en fonction de sa température électronique.

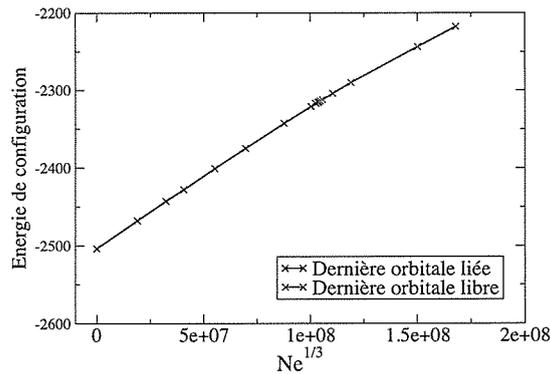


FIG. 3.22 - Énergie moyenne par rapport à  $N_e^{1/3}$ .

On remarque que l'énergie de la configuration fondamentale est proportionnelle à  $N_e^{1/3}$  comme l'énergie de liaison des orbitales atomiques. Quand on augmente la densité on obtient des énergies moyennes de configuration qui suivent le même comportement, que la dernière orbitale soit liée ou pas. De plus, il n'y a pas de discontinuité au niveau de la jonction entre les énergies de configurations, que la dernière orbitale soit liée ou pas. La prise en compte des configurations dont la sous-couche externe est passée dans le continuum se fait de façon continue.

En conclusion, il s'agit maintenant d'associer à ces configurations possédant des orbitales passées dans le continuum, un taux d'ionisation par effet tunnel. Ce taux sera obtenu à partir de la largeur des résonances. Plus une résonance est étroite, plus l'orbitale est liée et le taux d'ionisation faible. Ces taux seront utilisées dans un modèle collisionnel-radiatif dans le but de prendre en compte ces configurations dans l'équilibre des plasmas. Le modèle collisionnel-radiatif utilisé

devra également tenir compte de l'effet du plasma sur les énergies de configuration et sur les orbitales électroniques. Les effets de densité seront donc pris en compte à deux niveaux. Le premier niveau est un calcul des taux des différents processus, par utilisation de fonctions radiales et d'énergies de configurations tenant compte de l'effet du plasma. Le deuxième niveau consiste à ajouter un nouveau processus d'ionisation par effet tunnel dans les équations-bilan.

70 *Influence du plasma sur les fonctions d'onde électroniques et les énergies de configuration*

(Résultats numériques)

## Chapitre 4

# Inclusion des niveaux partiellement liés dans un modèle collisionnel-radiatif

### Sommaire

---

4.1	Calculs sans effets de densité . . . . .	72
4.1.1	Etude d'un plasma de carbone . . . . .	72
4.2	Effets de densité dans le modèle collisionnel-radiatif	74
4.2.1	Traitement partiel par modification des énergies . . .	74
4.2.1.1	Suppression des configurations ionisées . . .	75
4.2.1.2	Inclusion des configurations ionisées . . . . .	77
4.2.2	Définition d'un taux d'ionisation par effet tunnel . . .	78
4.2.3	Calcul du degré d'ionisation et états de charge . . . .	80
4.2.3.1	Discussion : retour sur l'influence de la densité électronique . . . . .	84

---

Dans le chapitre précédent nous avons associé à chaque configuration passée dans le continuum une énergie de configuration et une fonction liée pour la sous-couche ionisée grâce aux résonances. On peut à présent introduire ces configurations dans un modèle collisionnel-radiatif via un processus d'ionisation supplémentaire qui tiendra compte de leur caractère partiellement lié. L'objectif étant de mieux prendre en compte le passage de ces configurations dans le continuum et d'améliorer le calcul de l'équilibre des plasmas.

## 4.1 Calculs sans effets de densité

Le modèle collisionnel-radiatif doit traiter correctement les processus standard. On va donc négliger, dans un premier temps, la contribution des configurations passées dans le continuum, et l'effet du plasma sur les niveaux d'énergie. On a donc à calculer les énergies de configurations des ions étudiés (en l'absence de plasma) pour toutes les configurations entrant en jeu dans le système d'équations-bilan. Dans un deuxième temps, on calculera les taux des différents processus reliant ces configurations.

### 4.1.1 Etude d'un plasma de carbone

On choisit en premier lieu d'étudier un plasma d'élément léger comme le carbone. L'avantage des éléments légers est de nous permettre de négliger certains phénomènes et processus qui rendent les calculs plus difficiles et plus longs. Par exemple, les processus d'autoionisation et de capture diélectronique qui mettent en jeu des configurations doublement excitées, peuvent être négligés. On se limite donc, dans un premier temps, aux configurations simplement excitées. De plus, le fait de choisir un élément léger nous permet de négliger l'effet de mélange de configurations qui n'est pas assez important pour influencer les calculs. De même, le nombre de configurations à prendre en compte étant raisonnable, le formalisme des superconfigurations n'est pas nécessaire. Enfin, d'un point de vue pratique, cela nous permet de déterminer l'ordre en énergie des configurations des différents états de charge en suivant un ordre hydrogénoïde. Dans les ions lourds, ceci n'est possible qu'en cas de forte ionisation. Les configurations de l'atome de carbone sont  $1s^2 2s^2 2p^2$  (configuration fondamentale),  $1s^2 2s^2 2p 3s$ ,  $1s^2 2s^2 2p 3p$ ,  $1s^2 2s^2 2p 3d$ , etc.

A titre d'exemple, la figure 4.1 représente la charge ionique moyenne  $\bar{Z}$  en fonction de la température électronique ( $T_e$ ) et pour différentes densités électroniques ( $N_e$ ) dans un plasma de carbone. On a pris en compte une dizaine de configurations par état de charge. Les fonctions d'onde et énergies de configuration ont été calculées sans tenir compte de l'effet du plasma. On remarque une

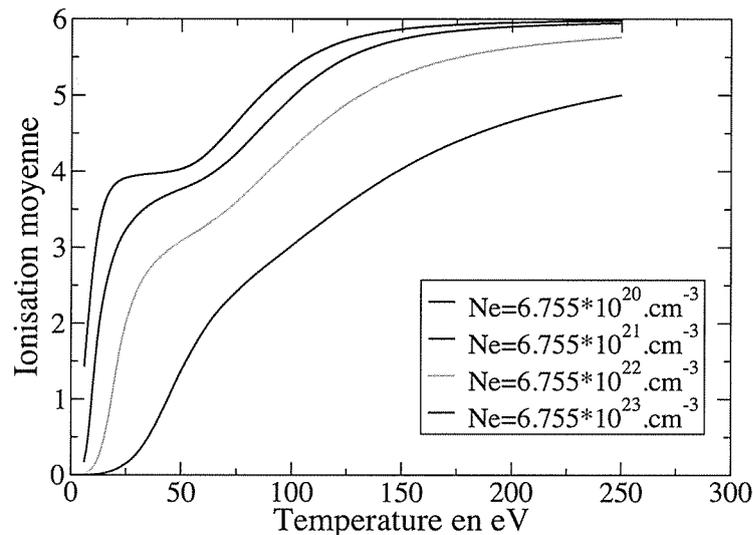


FIG. 4.1 – Charge ionique moyenne obtenue avec un système à 10 configurations par état de charge. Les énergies des niveaux sont calculés pour des ions isolés.

diminution de  $\bar{Z}$  à une température donnée au fur et à mesure que la densité électronique augmente, mais aucun effet dû au plasma n'est pris en compte dans le modèle collisionnel-radiatif.

De plus, il est intéressant d'examiner la dépendance de  $\bar{Z}$  par rapport au nombre de configurations prises en compte, afin de s'assurer de la convergence des résultats pour un nombre de configurations non prohibitif. Dans les figures ci-dessous on a représenté l'ionisation moyenne pour deux densités :  $6.755 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$  (figure 4.2), et  $6.755 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$  (figure 4.3). Dans chaque cas, on a fait varier le nombre de configurations et calculé  $\bar{Z}$  en fonction de  $T_e$ . On voit que les résultats diffèrent suivant le nombre de configurations prises en compte, mais conservent le même ordre de grandeur. Cependant, dans le deuxième exemple, pour la densité la plus élevée, on voit que le résultat le plus excentré est celui obtenu avec cinq configurations par état de charge, et que plus on augmente le nombre de configurations, plus les courbes obtenues sont proches. Cela s'explique par le fait qu'un modèle contenant un petit nombre de configurations (ici 5 configurations) ne permet pas de prendre en compte les configurations fortement excitées, qui aux densités élevées sont plus fortement peuplées. Parallèlement, avec plus d'une dizaine de configurations, les résultats ne varient presque plus. Il nous faut donc faire un compromis entre la rapidité de calcul, qui nécessite de

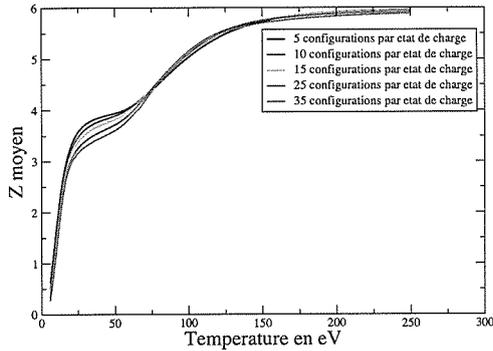


FIG. 4.2 – Ionisation moyenne en fonction de la température dans un plasma de carbone de densité électronique de  $6.755 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ .

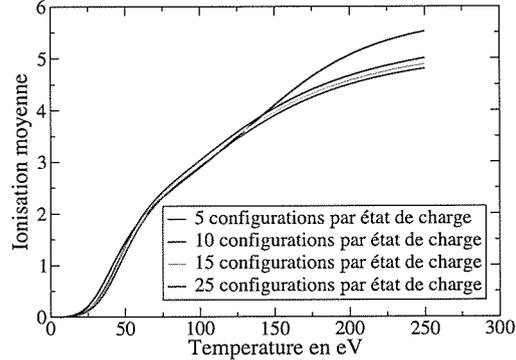


FIG. 4.3 – Ionisation moyenne en fonction de la température dans un plasma de carbone de densité électronique de  $6.755 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ .

choisir un petit nombre de configurations par état de charge, et la précision des calculs, qui nécessite de prendre le plus grand nombre possible de configurations. Pour le carbone, nous avons choisi de prendre en compte 15 configurations par état de charge lorsque les effets de densité jouent un rôle. En revanche, 10 configurations par état de charge semblent suffisantes pour les calculs sans effet de densité.

## 4.2 Effets de densité dans le modèle collisionnel-radiatif

### 4.2.1 Traitement partiel par modification des énergies

Précédemment, la densité électronique n'intervenait que comme coefficient multiplicatif dans les taux collisionnels. On obtient alors une diminution de  $\bar{Z}$  quand la densité électronique augmente (voir 4.1). Pour des densités suffisamment élevées, on obtient un plasma totalement recombinaison pour de faibles températures, ce qui n'est pas physique. A forte densité, les résultats obtenus hors équilibre thermodynamique local tendent vers les résultats obtenus à l'ETL : le plasma devient suffisamment dense pour que les processus collisionnels dominent les processus radiatifs, ce qui produit les mêmes aberrations que dans les calculs à l'ETL où, en l'absence d'abaissement du continuum, le plasma se recombine totalement aux très fortes densités. Il est donc nécessaire de tenir compte des

effets d'ionisation par la pression dans les modèles collisionnels-radiatifs pour obtenir des résultats qui aient un réel sens physique lorsque le plasma est très dense. On peut commencer par introduire les effets de densité dans le calcul des énergies et des fonctions radiales des configurations. Celles-ci interviennent dans les taux des différents processus. On aura donc une première modification de l'équilibre du plasma due aux effets de densité. Cependant, si on tient compte de la modification des énergies de configuration, se pose le problème de l'ionisation des configurations les plus excitées. Un certain nombre de configurations voient en effet partir leurs sous-couches externes dans le continuum. On ne peut plus alors considérer ces configurations de la même manière dans le système d'équations-bilan. En l'absence d'un processus spécifique d'ionisation dû aux effets de densité, on distingue deux façons de considérer ces configurations.

#### 4.2.1.1 Suppression des configurations ionisées

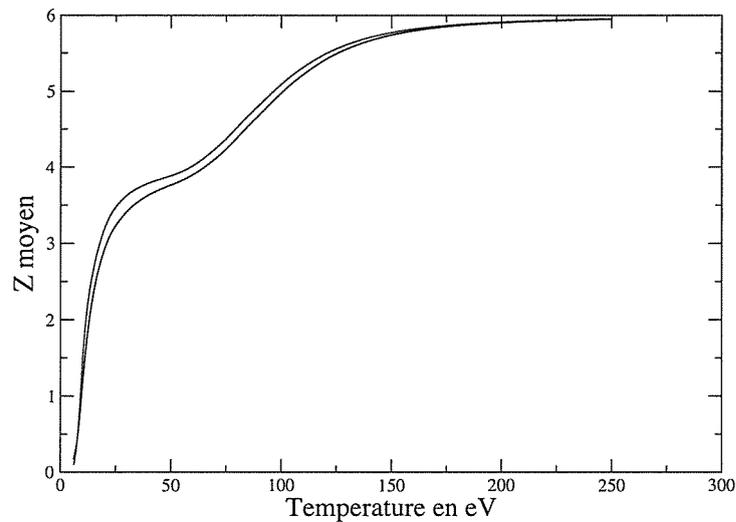


FIG. 4.4 – Ionisation moyenne pour un plasma de carbone,  $N_e = 6.755 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ . En rouge : effets du plasma pris en compte par suppression des sous-couches passées dans le continuum. En noir : sans effet plasma.

La première suppose les configurations comme définitivement disparues, ce qui revient à ne pas donner un poids statistique à chaque configuration, en raison de

son caractère plus ou moins lié. On supprime alors les configurations du système d'équations-bilan. Le défaut de cette méthode est de risquer de faire apparaître des discontinuités dans le calcul de  $\bar{Z}$ . La figure 4.4 montre l'ionisation moyenne  $\bar{Z}$  pour un plasma de carbone de densité électronique de  $6.755 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ . On a calculé 10 énergies de configurations par état de charge, mais on a supprimé toutes les configurations qui voient une de leurs sous-couches passer dans le continuum. On obtient finalement le jeu de configurations donné dans la table 4.1. Avec 10 configurations calculées pour chaque état de charge, plus la configuration de l'ion totalement ionisé, il y'a normalement 61 configurations possibles dans notre modèle collisionnel-radiatif. En fait, il n'y plus que 35 configurations existantes dans le système pour une densité de  $6.755 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$  (voir table 4.1).

conf.	Ion	$E_{\text{moy}}$	conf.	Ion	$E_{\text{moy}}$	conf.	Ion	$E_{\text{moy}}$
$1s^2 2s^2 2p^2$	C I	-72.793	$1s^2 3d$	C IV	-62.910	$1s$	C VI	-34.378
$1s^2 2s^2 2p$	C II	-70.992	$1s^2 4s$	C IV	-62.353	$2s$	C VI	-7.404
$1s^2 2s^2 3s$	C II	-70.040	$1s^2$	C V	-61.876	$2p$	C VI	-7.406
$1s^2 2s^2$	C III	-68.929	$1s 2s$	C V	-39.909	$3s$	C VI	-2.426
$1s^2 2s 2p$	C III	-68.437	$1s 2p$	C V	-39.540	$3p$	C VI	-2.424
$1s^2 2s 3s$	C III	-66.913	$1s 3s$	C V	-36.115	$3d$	C VI	-2.417
$1s^2 2s 3p$	C III	-66.745	$1s 3p$	C V	-36.012	$4s$	C VI	-0.730
$1s^2 2s 3d$	C III	-66.633	$1s 3d$	C V	-35.971	$4p$	C VI	-0.725
$1s^2 2s$	C IV	-65.842	$1s 4s$	C V	-34.897	$4d$	C VI	-0.713
$1s^2 2p$	C IV	-65.243	$1s 4p$	C V	-34.853	$4f$	C VI	-0.696
$1s^2 3s$	C IV	-63.122	$1s 4d$	C V	-34.824		C VII	0.
$1s^2 3p$	C IV	-62.963	$1s 4f$	C V	-34.798			

TAB. 4.1 – Configurations entrant en jeu dans le système d'équations-bilan après abaissement du continuum.

Près de la moitié des configurations sont passées dans le continuum et ont été supprimées du système. Le plus important est que les configurations supprimées sont avant tout celles des ions peu ionisés, dont les sous-couches externes sont faiblement liées. On remarque (voir table 4.1) que seule la configuration fondamentale de l'atome de carbone (C I) est présente, et que pour le carbone simplement ionisé ne subsistent que deux configurations. En ce qui concerne les ions C V et C VI, toutes les configurations sont présentes. Il en résulte une sous-évaluation des états de charge dont peu de configurations sont présentes, une sur-évaluation relative des autres, une perte de précision due au petit nombre de configurations prises en compte, et en conséquence de tout cela une sur-évaluation du  $\bar{Z}$  obtenu.

#### 4.2.1.2 Inclusion des configurations ionisées

La deuxième méthode consiste à prendre en compte les configurations ionisées par effet de densité grâce aux résonances, comme on l'a vu dans le chapitre précédent. Les résonances permettent en effet de traiter ces configurations comme des configurations liées, en leur associant une énergie moyenne et des taux de transition vers les autres configurations du système. Les taux de transition des configurations ionisées sont calculées en utilisant les fonctions radiales au maximum de la résonance. Le défaut de cette méthode est, bien que les configurations soient affectées par la densité, que le phénomène d'ionisation par la pression est alors complètement ignoré. Aucune configuration n'étant ionisée par ce processus, on obtiendra un  $\bar{Z}$  sous-évalué. Si on applique cette méthode au même système que précédemment, on obtient les résultats montrés dans la figure 4.5.

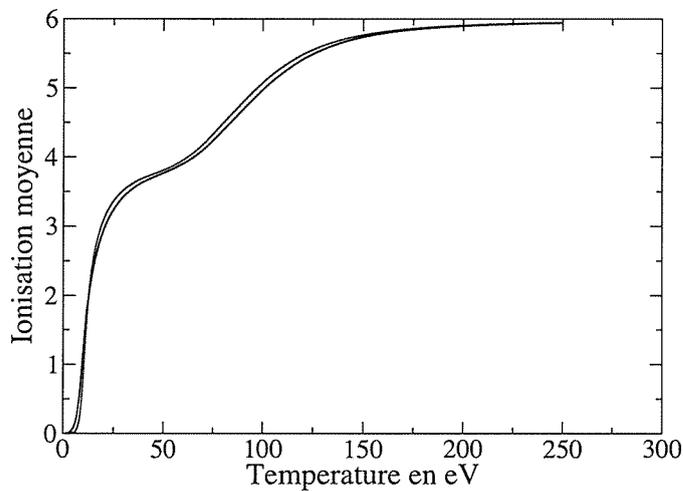


FIG. 4.5 –  $\bar{Z}$  pour un plasma de carbone, effets du plasma pris en compte en incluant les configurations ionisées.

Les résultats obtenus sont très proches de ceux obtenus lorsque les effets de densité sont ignorés dans le calcul des énergies de configuration et des fonction d'onde radiales. Les énergies déterminées grâce aux résonances sont, ici, en effet très proches des énergies calculées pour les ions isolées. Finalement, on peut voir dans la figure 4.6 la comparaison entre les différentes manières de prendre en compte les effets de densité dans un plasma de carbone. On voit bien que la suppression des configurations électroniques passées dans le continuum donne un  $\bar{Z}$  plus élevé que si on prend en compte toutes ces configurations. Par ailleurs, le

fait de garder ces configurations donne un résultat très proche du résultat obtenu sans effet de densité. Il convient donc de tenir compte du phénomène d'ionisation par la pression.

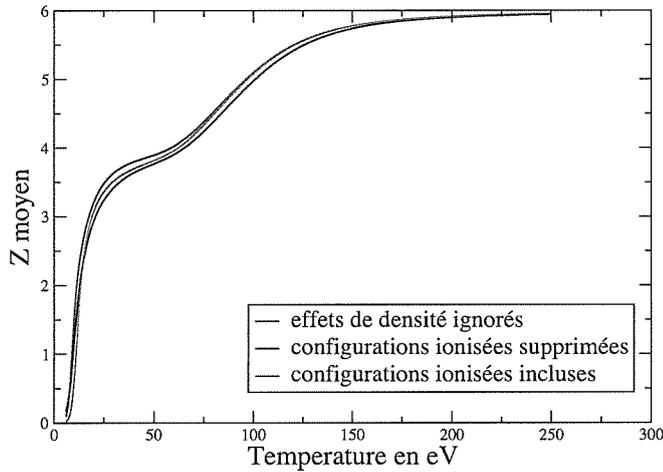


FIG. 4.6 –  $\bar{Z}$  en fonction de la température électronique pour un plasma de carbone,  $N_e = 6.755 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ .

#### 4.2.2 Définition d'un taux d'ionisation par effet tunnel

Pour prendre en compte de façon plus satisfaisante les effets de densité, il est donc nécessaire de définir une méthode qui réunirait les qualités des deux méthodes présentées précédemment. Il nous faut une solution qui rendrait compte du phénomène d'ionisation par la pression, mais sans faire intervenir la disparition d'un certain nombre de configurations, comme dans la seconde méthode. La continuité dans le calcul de  $\bar{Z}$  impose alors de tenir compte de toutes les configurations, qu'elles soient passées dans le continuum ou pas. La prise en compte du phénomène d'ionisation par la pression impose de rajouter un processus dans le système d'équations-bilan.

Le nouveau système d'équations-bilan prendra en compte les configurations dont les sous-couches externes sont passées dans le continuum à l'aide de leurs résonances, et il représentera le fait que ces configurations ne sont pas totalement liées par un processus d'ionisation qui affectera uniquement ces configurations. Le processus à inclure dans nos calcul est l'ionisation par effet tunnel, à travers

la barrière de potentiel vue par l'électron partiellement lié. Pour calculer le taux d'ionisation par effet tunnel, on utilise la méthode proposée par Fano [37]. Il s'agit de calculer le taux d'autoionisation d'un état discret interagissant avec les états du continuum d'énergies proches. On appelle  $\varphi$  un état appartenant à une configuration discrète de l'ion, d'énergie propre  $E_\varphi$ , et  $\psi_{E'}$  un état appartenant au continuum (ou, plus exactement, l'état d'une configuration dont l'un des électrons est passé dans le continuum), d'énergie propre  $E'$ . Dans ce problème, on suppose que  $E_\varphi$  est une valeur comprise dans l'intervalle de valeurs de  $E'$ . Les éléments de matrice donnent

$$\begin{aligned}\langle \varphi | H | \varphi \rangle &= E_\varphi \\ \langle \psi_{E'} | H | \varphi \rangle &= V_{E'} \\ \langle \psi_{E''} | H | \psi_{E'} \rangle &= E' \delta(E'' - E')\end{aligned}$$

Un vecteur propre de cette nouvelle matrice s'écrit alors :

$$\Psi_E = a\varphi + \int b_{E'} \psi_{E'} dE', \quad (4.1)$$

où  $a$  et  $b_{E'}$  sont des coefficients dépendant de  $E$  que l'on cherche à déterminer explicitement. Fano montre que le coefficient  $a$  vérifie l'équation :

$$|a(E)|^2 = \frac{|V_E|^2}{[E - E_\varphi - F(E)]^2 + \pi^2 + |V_E|^4}, \quad (4.2)$$

où  $F(E) = PP \int \frac{|V_{E'}|^2}{E - E'} dE'$  ( $PP$  signifie la partie principale). L'interaction avec les configurations du continuum a donc pour conséquence de diluer l'état discret dans une bande d'états stationnaires. Le profil (Lorentzien) de cette bande a l'aspect d'une résonance de largeur à mi-hauteur :

$$\Gamma = \pi V_E^2 \text{ (en Ryd)}. \quad (4.3)$$

On considère alors que la fonction calculée pour l'état passé dans le continuum correspond à cet état discret élargi passant dans le continuum par interaction de configuration. La largeur des résonances dans la densité d'états que l'on peut obtenir par la méthode décrite au chapitre précédent donne donc directement un taux de transition que l'on peut ajouter dans le modèle collisionnel-radiatif. Physiquement, le processus correspondant est un passage à travers la barrière de potentiel par effet tunnel. On a donc un taux d'ionisation par effet tunnel qui s'écrit :

$$\tau_{\text{ionisation}} = 2\Gamma/\hbar. \quad (4.4)$$

Après avoir intégré ce processus au système d'équations-bilans, il convient de prendre en compte le processus inverse de capture d'un électron à l'intérieur de cette barrière, de sorte que les équilibres obtenus se rapprochent de l'ETL quand les conditions en densité et températures sont celles de l'ETL. En effet, le principe de microréversibilité à l'ETL implique qu'un processus donné a la même fréquence que le processus inverse. Pour déterminer le taux de ce processus de capture, on applique donc ce principe au taux d'ionisation par effet tunnel. Si on considère qu'une configuration  $C$  s'ionise par effet tunnel (taux  $\tau_{\text{ionisation}}$ ) vers une configuration  $C'$ , et qu'à l'inverse un électron libre est capturé par l'ion dans la configuration  $C'$ , à travers la barrière de potentiel (taux  $\tau_{\text{capture}}$ ), le principe de microréversibilité permet d'écrire :

$$P_C \tau_{\text{ionisation}} = P_{C'} \tau_{\text{capture}}, \quad (4.5)$$

où  $P_C$  et  $P_{C'}$  sont les probabilités d'existence des deux configurations dans le plasma. Ces configurations peuvent échanger des électrons avec le réservoir d'électrons libres du plasma. Pour calculer leurs probabilités de présence à l'ETL, il est nécessaire de se placer dans le cadre de la distribution grand-canonique. La probabilité d'une configuration  $C$  à  $Q_C$  électrons s'écrit alors :

$$P_C = \frac{g_C e^{-(E_C - \mu Q_C)/kT_e}}{\sum_C g_C e^{-(E_C - \mu Q_C)/kT_e}}, \quad (4.6)$$

où  $E_C$  est l'énergie de la configuration  $C$ ,  $g_C$  sa dégénérescence et  $\mu$  le potentiel chimique du réservoir d'électrons libres. Le taux de capture électronique à travers la barrière de potentiel s'écrit alors :

$$\tau_{\text{capture}} = \frac{g_C}{g_{C'}} e^{-(E_C - E_{C'} - \mu)/kT_e} \tau_{\text{ionisation}}, \quad (4.7)$$

Diverses formulations, plus ou moins précises, donnent le potentiel chimique d'un gaz d'électrons libres en fonction de sa densité et de sa température. On peut alors déterminer les deux taux à inclure dans le système d'équations-bilan.

### 4.2.3 Calcul du degré d'ionisation et états de charge

Le processus d'ionisation par effet tunnel et son inverse sont inclus dans le système d'équations-bilan. Les premiers résultats obtenus pour le carbone sont donnés dans la figure 4.7. Ils montrent une diminution de  $\bar{Z}$  par rapport au calcul effectué sans prise en compte du phénomène d'autoionisation, pour les températures inférieures à 16 eV, et une augmentation pour les températures supérieures à

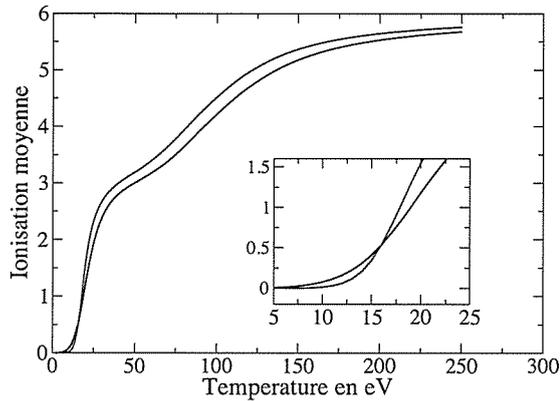


FIG. 4.7 –  $\bar{Z}$  pour un plasma de carbone en fonction de la température, pour une densité électronique égale à  $6.75 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ . Courbe noire : sans prise en compte des effets plasma. Courbe rouge : avec prise en compte complète des effets plasma.

16 eV. Les deux courbes convergent pour les hautes températures (à partir de 200 eV). Pour les faibles températures, un grand nombre d'états et de configurations partiellement liés sont permis lorsqu'on calcule les énergies de configurations des différents ions du plasma, L'ajout d'un processus d'autoionisation et de son inverse implique donc un nombre important de configurations, qui sont alors peuplées et dépeuplées par deux processus supplémentaires, ce qui fait varier grandement  $\bar{Z}$ . Pour les températures plus élevées, les ions sont déjà en majorité fortement ou totalement ionisés, l'autoionisation influe alors très peu dans le calcul de  $\bar{Z}$ , car il implique un nombre de configurations de plus en plus petit. La diminution du  $\bar{Z}$  observée pour les faibles températures n'était pas attendue. La disparition des configurations électroniques due aux effets de densité touche en effet de façon majoritaire les configurations des états de charge les moins ionisés (ayant donc les énergies de liaison les plus faibles). Cette diminution peut s'expliquer par la prise en compte du processus inverse de capture électronique à travers la barrière, dans notre système d'équations-bilan. Lorsque cet effet domine l'autoionisation par la pression on aura un peuplement plus important des états faiblement chargés, et donc une diminution du  $\bar{Z}$ . La figure 4.8 montre bien ce phénomène. Lorsqu'on prend en compte seulement le processus d'autoionisation, le  $\bar{Z}$  obtenu est plus élevé que celui obtenu sans prise en compte des effets de densité, quelle que soit la température. De plus, pour expliquer qu'à partir d'une certaine température, le  $\bar{Z}$  augmente quand on prend en compte les effets de densité mais diminue

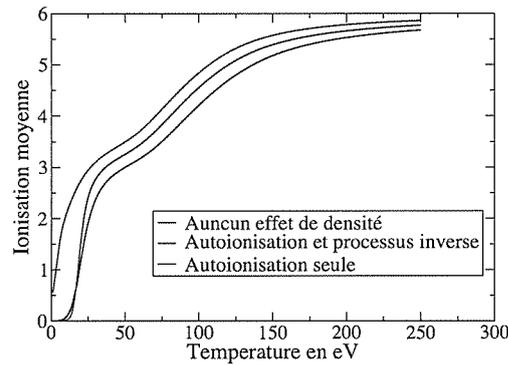


FIG. 4.8 – Comparaison des  $\bar{Z}$  obtenus avec ou sans prise en compte du processus de capture électronique.

au-dessous de cette température, on peut comparer l'importance du processus d'autoionisation par rapport à son processus inverse de capture électronique. En effet, ces deux processus inverses sont ceux qui déterminent principalement la modification de l'équilibre du plasma. La figure 4.9 donne le rapport  $\tau_{\text{capture}}/\tau_{\text{ionisation}}$

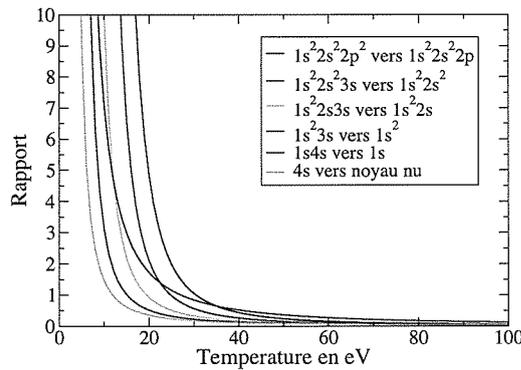


FIG. 4.9 – Rapport du taux de capture à travers une barrière de potentiel sur le taux d'autoionisation par la pression reliant différentes configurations électroniques en fonction de la température.

reliant différentes configurations en fonction de la température électronique. Pour les basses températures, ce rapport est supérieur à 1 quelles que soient les configurations considérées. Le processus de capture électronique à travers une barrière de potentiel domine donc le processus d'ionisation. Cependant, pour toutes les

configurations, il décroît avec la température pour descendre au-dessous de 1 pour des températures supérieures à 50 eV. Aux températures élevées, le phénomène d'ionisation par effet tunnel prédomine.

Les figures 4.10 et 4.11 montrent les populations ioniques des différents états

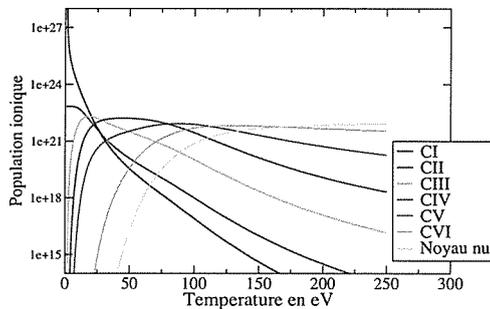


FIG. 4.10 – Populations des différents états de charge de l'ion carbone en fonction de la température (en eV), dans un plasma de densité  $6.755 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ . Effet du plasma non pris en compte.

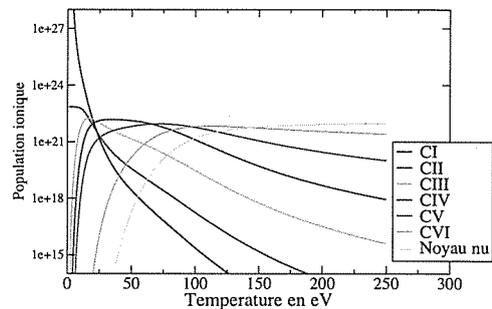


FIG. 4.11 – Populations des différents états de charge de l'ion carbone par rapport à la température (en eV), dans un plasma de densité  $6.755 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ . Effet du plasma pris en compte.

de charge obtenues avec ou sans prise en compte des effets de densité. Les deux calculs montrent un comportement similaire pour le peuplement des configurations. A basse température, seuls les deux premiers états de charge sont peuplés. Plus la température électronique augmente, plus ces états de charge se dépeuplent en faveur des états de charge plus ionisés. A haute température, les noyaux isolés et C VI prédominent tandis que les deux premiers états de charge ont des populations négligeables.

On superpose ces deux figures pour mieux se rendre compte de l'effet de la densité électronique sur les populations ioniques (voir figure 4.12).

On constate que la prise en compte de la densité affecte principalement les deux états de charge les moins ionisés, les autres états de charge étant moins affectés. Les ions les moins chargés (C I et C II) sont donc les plus affectés par le phénomène d'ionisation par la pression. Pour une température inférieure à 20 eV, la population d'atomes de carbone est plus importante si on ne tient pas compte des effets de densité. Cela correspond au domaine de température où la capture électronique par effet tunnel domine l'ionisation par effet tunnel. Au-dessus de 20 eV, la population d'atomes de carbone diminue, ce qui correspond au domaine où l'ionisation par effet tunnel prédomine. Pour C II, le domaine

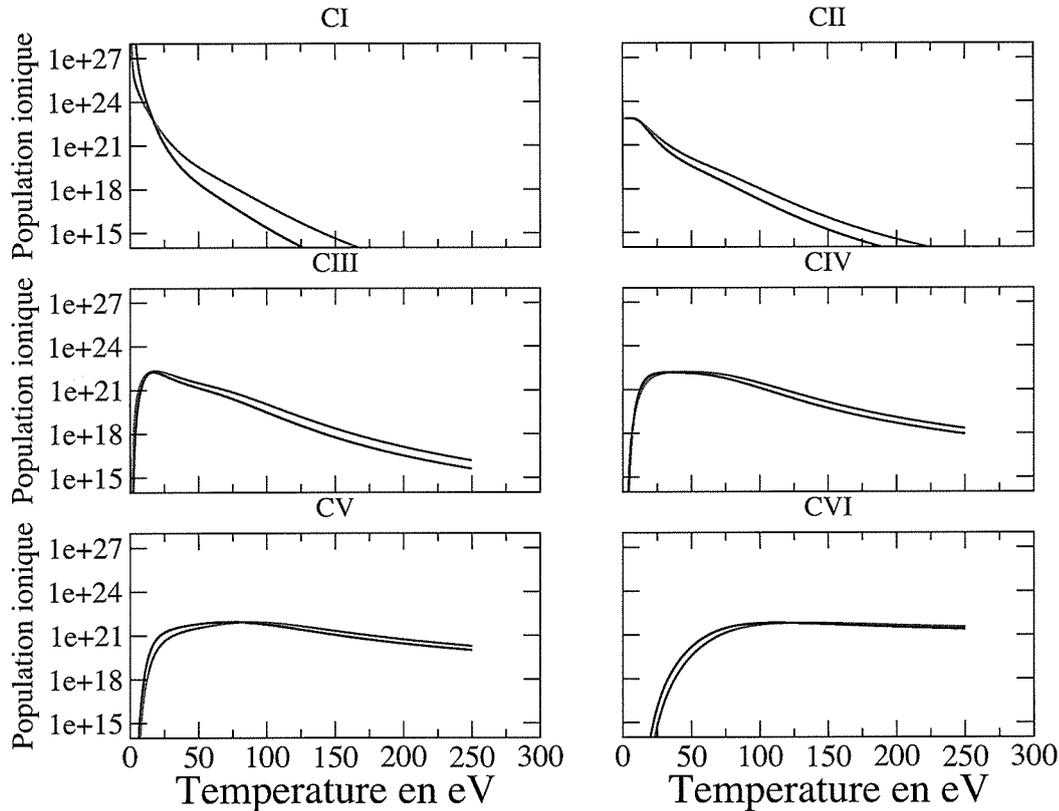


FIG. 4.12 – Populations des différents états de charge du carbone en fonction de la température (en eV), dans un plasma de densité  $6.755 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ . Courbes noires : pas d'effet de densité; courbes rouges : effets de densité pris en compte.

de température où la population augmente est bien plus petit. La population de C II augmente (très faiblement) seulement pour  $T_e < 6 \text{ eV}$ . Cela s'explique par le fait qu'à basse température si C II est peuplé par un processus de capture électronique venant des configurations de C III, le processus de dépeuplement par capture électronique de C II vers C I équilibre ce phénomène. On n'a donc pas de peuplement plus important de C II à basse température. Pour les autres états de charge, la variation des populations ioniques est plus faible. Il y'a en effet moins de configurations passant dans le continuum et le processus d'ionisation par la pression joue donc un moins grand rôle.

#### 4.2.3.1 Discussion : retour sur l'influence de la densité électronique

Le premier effet de la densité électronique consiste en une modification des énergies moyennes des configurations faisant partie du modèle collisionnel-radiatif.

La figure 4.13 montre les énergies de configuration des différents états de charge

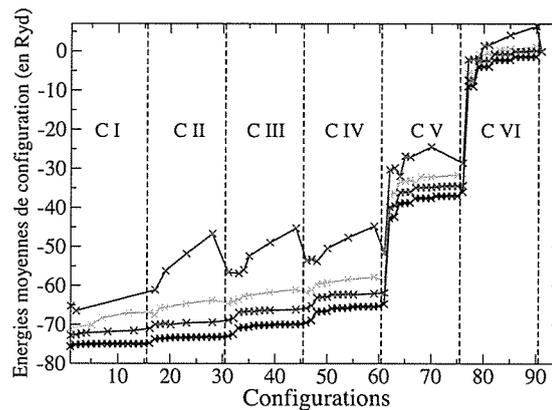


FIG. 4.13 – Énergies moyennes de configuration des ions carbone. Courbe rouge :  $N_e = 6.755 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ ; courbe verte :  $N_e = 6.755 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ ; courbe bleue :  $N_e = 6.755 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ ; courbe noire : ions isolés. Chaque croix représente une énergie de configuration calculée.

d'un ion de carbone isolé (densité nulle : courbe noire) ou en présence d'un plasma. L'énergie augmente avec la densité électronique. Chaque courbe implique 91 énergies de configurations calculées (15 configurations pour chaque état de charge). Chacune de ces configurations est symbolisée par une croix. Les énergies de configurations calculées pour l'ion isolé ont un comportement "doux". Pour un état de charge donné, l'énergie augmente avec le degré d'excitation de la configuration. La variation en énergie, quasi-hydrogénoïde, est donc bien respecté pour les configurations des ions en l'absence de plasma. De plus, plus un ion sera ionisé, plus l'énergie de ces configurations correspondra à la structure en couches de l'ion hydrogénoïde. Cette structure est bien présente pour les configurations de l'ion C VI, dont les niveaux en énergie sont égaux pour les électrons de même couche électronique. La présence d'un plasma fait apparaître une augmentation de l'énergie moyenne de toutes les configurations prises en compte. Il en résulte une diminution de l'énergie de liaison des électrons. L'augmentation des énergies de configuration croît avec la densité du plasma. Un autre phénomène lié aux effets de densité est la modification de l'ordre en énergie des différentes configurations d'un état de charge donné, au fur et à mesure que la densité augmente. L'énergie de configuration croît toujours avec  $l$  dans une couche électronique donnée, mais les configurations de petit  $l$  de la couche électronique supérieure peuvent avoir une énergie inférieure aux configurations de grand  $l$  des couches électroniques infé-

rieures. Enfin, pour les densités importantes, la dernière sous-couche électronique passe dans le continuum, ainsi que la sous-couche suivante. De plus, il arrive que la résonance associée à la sous-couche passée dans le continuum disparaisse totalement dans les calculs de densité d'états. Cela a pour conséquence, dans ces deux cas, de faire disparaître la configuration associée du modèle collisionnel-radiatif. On considère alors que la configuration est ionisée directement. Après avoir obtenu toutes les énergies de configuration et les fonctions d'onde électroniques utilisées dans le modèle collisionnel-radiatif, on peut les utiliser pour calculer  $\bar{Z}$ . Dans la

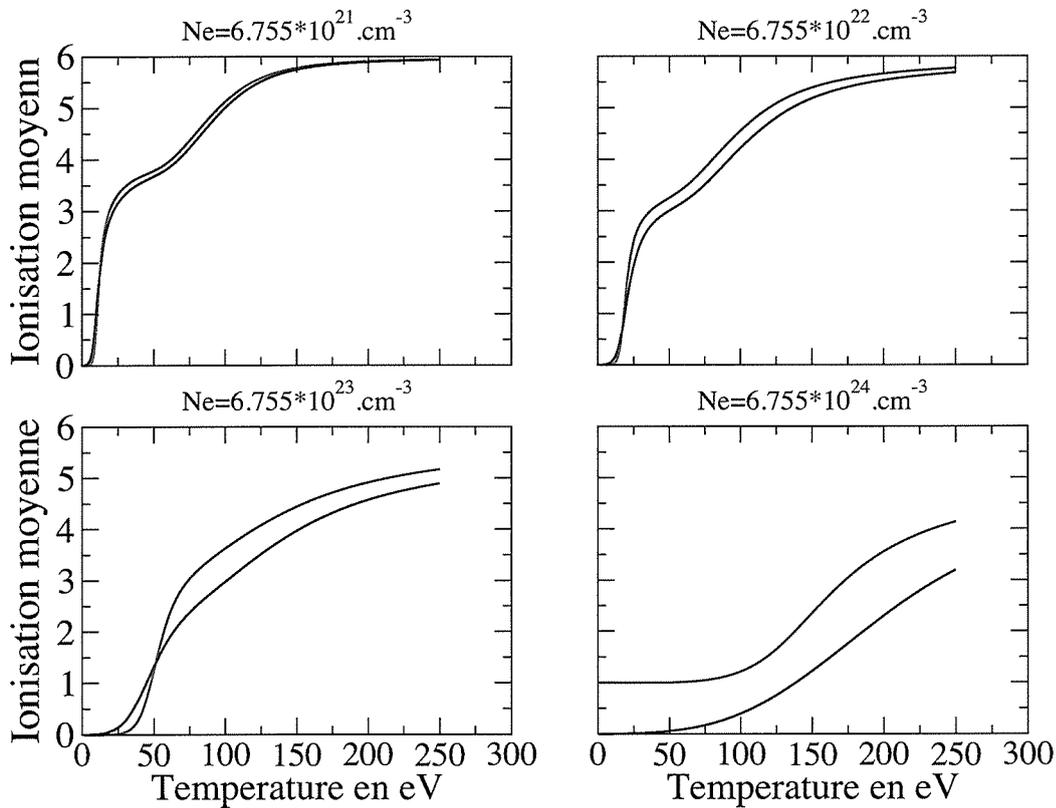


FIG. 4.14 –  $\bar{Z}$  en fonction de la température et pour différentes densités dans un plasma de carbone. Courbes noires : pas d'ionisation par la pression. Courbes rouges : ionisation prise en compte.

figure 4.14 on représente  $\bar{Z}$  en fonction de la température et pour différentes densités. Comme pour les énergies de configuration, on observe un effet de la densité sur  $\bar{Z}$  important. Lorsque le plasma est suffisamment dense pour faire disparaître définitivement toutes les configurations d'un état de charge dans le continuum, le  $\bar{Z}$  obtenu montre une disparition de cet état de charge. Dans notre exemple,

on peut voir que pour une densité électronique de  $6.755 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$  on ne peut atteindre un  $\bar{Z}$  inférieur à 1, et que pour une température inférieure à 50 eV il reste constant et égal à 1 : les configurations de l'atome de carbone ont en effet toutes disparues dans le continuum.

A ces températures et cette densité électroniques, tous les ions peuplant, dans le cadre d'un calcul sans effet de densité, les configurations de C I (qui sont les configurations les plus peuplées) peuplent alors les différentes configurations de C II. Pour des densités plus faibles, où toutes les configurations peuvent être prises en compte, l'augmentation de la densité a pour effet d'accroître la variation de  $\bar{Z}$ . Le comportement reste le même : aux faibles températures, si on tient compte des effets de densité,  $\bar{Z}$  diminue, jusqu'à une température où le processus d'ionisation par effet tunnel devient plus important que le processus inverse. Dans ce cas,  $\bar{Z}$  augmente. Pour les très hautes températures, les deux résultats ont tendance à converger quelle que soit la densité électronique.

En conclusion, nous avons construit un modèle collisionnel-radiatif qui prend en compte de façon continue le phénomène d'ionisation par la pression. Son domaine d'application est celui des éléments légers et moyen ( $Z$  inférieur ou égal à 26). Il permet de prendre en compte l'effet du plasma sur les niveaux d'énergie des configurations électroniques présentes dans le plasma, ainsi que les modifications des taux de transition des différents processus. De plus, l'ajout d'un nouveau processus d'ionisation par effet tunnel, grâce à l'utilisation des résonances passées dans le continuum, permet d'associer un processus particulier au phénomène de disparition des sous-couches électroniques externes des ions, sans avoir besoin d'utiliser un modèle statistique.



*C'est mieux que  
l'autoconsistance*

## Conclusion et perspectives

Afin d'améliorer le traitement de l'ionisation par la pression, nous avons cherché à inclure directement les "résonances du continuum" dans un modèle collisionnel-radiatif. Ces résonances sont connues pour apparaître naturellement dans tous les modèles microscopiques où l'environnement plasma est supposé avoir une symétrie sphérique. Contrairement aux calculs ETL de type "atome moyen" où il est possible d'avoir une autocoherence complète sur la densité électronique (libre et liée), ceci reste hors d'atteinte dans les modèles hors équilibre. Nous avons choisi, pour modéliser l'effet du plasma, d'utiliser un potentiel de type cellule ionique où la densité électronique libre reste homogène et est une donnée du calcul. On inclut ensuite ce potentiel dans le calcul autocohérent des orbitales électroniques des ions. A ce niveau, l'équation de Schrödinger est résolue en utilisant une méthode spectrale (intrinsèquement robuste), la base de fonctions utilisée étant une base de B-splines. Ces fonctions ont été choisies car elles sont bien adaptées au calcul d'orbitales électroniques : elles ont un comportement assez doux et sont de carré sommable.

Nous avons alors obtenu, en résolvant l'équation aux valeurs propres, les orbitales des électrons liés prenant en compte l'effet dû au plasma. En règle générale, les effets observés sont un élargissement de ces orbitales, ainsi qu'une augmentation de leurs énergies propres. Cette augmentation conduit, pour les électrons des sous-couches externes, à leur passage dans le continuum quand la densité électronique est suffisamment élevée, et donc à la disparition de la configuration qui leur est associée. Pour représenter ces orbitales libres, il est nécessaire d'utiliser une autre méthode de calcul : l'énergie étant fixée, on n'a plus qu'à résoudre un simple système d'équations linéaires. Grâce à ces orbitales libres, et en faisant un balayage en énergie, nous avons pu calculer des densité d'états électronique dans le continuum. Ces densités d'états montrent l'apparition de résonances. On considère ces résonances comme des témoins de la persistance des orbitales passées dans le continuum.

X Dans le but de conserver une existence aux configurations dont les orbitales externes sont ainsi passées dans le continuum, nous nous sommes alors intéressés aux orbitales au maximum des résonances. Leur étude, au niveau de ces maximums, nous a en effet montré qu'elles conservent un caractère partiellement lié

quand elles sont proches du noyau. On en extrait donc la partie liée en restreignant la fonction numérique obtenue à la cellule ionique, et en la raccordant à une solution en exponentielle décroissante à l'extérieur de cette sphère. Cette localisation permet de conserver le caractère lié des orbitales passées dans le continuum. On peut ainsi inclure dans le calcul des énergies de configuration les sous-couches qui leur sont associées. Obtenir cette énergie moyenne permet de continuer à prendre en compte la configuration associée, bien que certains de ses électrons soient passés dans le continuum par effet de densité.

L'étape suivante consiste alors à introduire un nouveau processus d'ionisation (due à la pression), qui concerne ces configurations, pour rendre compte de leur caractère partiellement lié. Les résonances dans le continuum étant l'élément distinguant ce nouveau type de configuration, nous avons décidé de nous servir d'elles pour déterminer le taux à introduire dans le système d'équations-bilan. Le nouveau processus est un processus d'ionisation par effet tunnel, l'électron externe passé au-dessus du seuil d'ionisation reste piégé par la barrière de potentiel due à l'effet du plasma, mais passe à travers cette barrière pour être ionisé. La valeur de son taux étant proportionnelle à la largeur à mi-hauteur de la résonance de l'orbitale passée dans le continuum, il est très facile à obtenir.

Nous avons finalement construit un modèle collisionnel-radiatif adapté à l'étude de plasmas d'éléments légers, optiquement minces. Nous n'avons pas tenu compte de certains processus comme l'autoionisation et la capture électronique, ni des configurations plusieurs fois excitées. Les taux utilisés pour tous les processus prennent en compte le décalage en énergie dû au plasma ainsi que les modifications des orbitales électroniques. Le processus d'ionisation par la pression, ainsi que son processus inverse, sont ensuite simplement ajoutés dans les équations-bilan pour toutes les configurations concernées. Les résultats obtenus montrent qu'aux basses températures, les ions d'états de charge les plus petits sont plus peuplés, et que l'ionisation moyenne diminue. Ce résultat *à priori* surprenant semble indiquer que pour ces températures, le processus inverse de l'ionisation par effet tunnel domine. Cependant, pour des températures plus élevées (supérieures à 20 eV environ pour le carbone) le phénomène inverse se produit, et l'ionisation moyenne augmente. Enfin, à haute densité, l'effet du plasma est suffisamment important pour faire disparaître les résonances dans la densité d'états, voire plusieurs orbitales électroniques différentes pour chaque configuration. La configuration associée est alors éliminée du système d'équations-bilan. Ce phénomène permet donc à très forte densité un dépeuplement des ions les moins ionisés. Pour les densités importantes, on ne peut plus obtenir de plasma totalement recombinaison, car toutes les configurations des ions d'états de charge les plus faibles ont disparues du système.

Un développement naturel de cette étude consisterait à utiliser d'autres types

X

à voir

non

de potentiel (centraux) pour modéliser l'environnement plasma. En particulier, l'utilisation d'un potentiel de type Yukawa avec une longueur d'écrantage de type Thomas-Fermi linéarisé (interpolation entre Debye-Hückel et Thomas-Fermi) serait intéressante.

x

Pour étendre le domaine de validité de notre modèle à des plasmas d'éléments plus lourds, il serait nécessaire d'inclure un plus grand nombre de configurations dans notre modèle. L'introduction de configurations plusieurs fois excitées permettrait de tenir compte de processus tels que l'autoionisation et la recombinaison diélectronique. De plus, il conviendrait de tenir compte des configurations possédant des sous-couches fortement peuplées pouvant passer dans le continuum.

Pour finir, les résultats de cette étude pourront servir à recalibrer plus précisément les modèles de traitement heuristique du phénomène d'ionisation par la pression dans les modèles collisionnels-radiatifs.



# Bibliographie

- [1] Cox A. N., in Stars and Stellar Systems, **8**, Stellar Structure, ed L. H. Aller and D.B. McLaughlin (Chicago : University of Chicago Press) 195 (1965)
- [2] Richard M. More, J. Quant. Spectrosc. Rad. Transf., **27**, 345 (1982)
- [3] I.J. Feng, W. Zakowicz, R.H. Pratt, Phys. Rev. A, **23**, 883 (1981)
- [4] M.A. Sweeney, Ap. J., **220**, 335 (1978)
- [5] G.B. Zimmerman, R. M. More, J. Quant. Spectrosc. Rad. Transf., **23**, 517 (1980)
- [6] Strömngren B, Zs. Ap., **4** 118 (1932)
- [7] Mayer H., Los Alamos Sci. Lab. Rept. No. LA-647 (1948)
- [8] D.G. Hümmel, D. Mihalas, AP. J., **331**, 794-814 (1988)
- [9] D. Mihalas, W. Däppen, D.G. Hummer, AP. J., **331**, 815-825 (1988)
- [10] G.M. Harris, J.E. Roberts, J.G. Trullio, Phys. Rev., **119**, 1832 (1960)
- [11] F.J. Rogers, H.C. Graboske, Jr. and D.J. Harwood, Phys. Rev. A, **1**, 1577 (1970)
- [12] H.C. Grasboske, Jr. and D.J. Harwood, F.J. Rogers, Phys. Rev, **186**, 210 (1969)
- [13] David A. Liberman, Phys. Rev B, **20** 4981 (1979)
- [14] David A. Liberman, James R. Albritton, J. Quant. Spectrosc. Rad. Transf., **53**, 729 (1995)
- [15] P.A. Sterne, S.B. Hansen, B.G. Wilson, W.A. Isaacs, High Energy density physics, **3**, 278 (2007)
- [16] B. Wilson, V. Sonnad, P. Sterne, W. Isaacs, J. Quant. Spectrosc. Rad. Transf., **99**, 658 (2006)
- [17] H. Gündel, Beitr. Plasmaphys, **10**, 455 (1970)
- [18] H. Gündel, Beitr. Plasmaphys, **11**, 1 (1971)
- [19] D.V. Fisher, Y. Maron, Eur. Phys. J. D, **18**, 93-111 (2002)

- [20] D.V. Fisher, Y. Maron, *J. Quant. Spectrosc. Rad. Transf.*, **81**, 147-165 (2003)
- [21] G. Massacrier, Effets de densité et de température sur les ions des plasmas denses et chauds : structure atomique dans un modèle multiconfigurationnel : équilibre statistique, thèse (1988)
- [22] L.V. Chernysheva, N. A. Cherepkov, V. Radojevic, *Computer Physics Communications*, **28**, 87 (1979)
- [23] Hong Liu, Jinhua Xi, Baiwen Li, *Phys. Rev. a*, **48**, 228 (1993)
- [24] Bachau H, Cormier E, Decleva P, Hansen JE., *Rep Prog Phys* **64** 1815-943 (2001)
- [25] de Boor C., *A practical guide to splines*, 2nd ed. New-York : Springer (2001)
- [26] O. Peyrusse, *J. Quant. Spectrosc. Rad. Transf.*, **99**, 469 (2006)
- [27] Robert D. Cowan, *The theory of atomic structure and spectra* (Berkeley, CA : University of California Press) (1981)
- [28] *NUMERICAL RECIPES in fortran 77*, Second edition (Cambridge University Press) (1992)
- [29] *NUMERICAL RECIPES in fortran 90*, Second edition (Cambridge University Press) (1996)
- [30] O. Peyrusse, *J. Phys. B*, **32**, 683 (1999)
- [31] P. L. Hagelstein, *Phys. Rev. A*, **34**, 874 (1986)
- [32] R. J. W. Henry, *Phys. Rep.*, **68**, 1 (1981)
- [33] H. Van-Regemorter, *AP. J.*, **A132**, 132 (1962)
- [34] Wolfgang Lotz, *Zeitschrift für Physik* **216**, 241 (1968)
- [35] M. J. Seaton, *Advances in Atomic and Molecular Physics*, **4**, 331 (1968)
- [36] C. E. Moore, *Ionization Potentials and Ionization Limits Derived from the Analyses of Optical Spectra*, NSDRS-NBS 34 (1970)
- [37] U. Fano, *Phys. Rev*, **124**, 1866 (1961)
- [38] O. K. Andersen, *Physica B*, **91**, 317 (1945)
- [39] J. Bauche, C. Bauche-Arnoult, M. Klapisch, *Advances in Atomic and Molecular Physics*, **23**, 131 (1988)
- [40] Dharma-Wardana, Taylor, *J.Phys C*, **14**, 629 (1981)
- [41] Froese Fischer C., *The hartree-Fock method for atoms*. New York : Wiley (1977)
- [42] Hans R. Griem, *Phys. Rev*, **131**, 1170 (1963)

- [43] Yongqiang Li, Jiuanhua Wu, Yong Hou, Jianmin Yuan, *J. Phys. B*, **41**, 145002 (2008)
- [44] R. M. More, *Advances in Atomic and Molecular Physics*, **21**, 305 (1985)
- [45] J.C. Pain, G. Dejonghe, T. Blenski, *J. Quant. Spectrosc. Rad. Transf.*, **99**, 451 (2006)
- [46] Alexandre Y. Potekhin, G. Massacrier, Gilles Chabrier, *Phys. Rev. E*, **72**, 46402 (2005)
- [47] David Salzmänn, *Atomic Physics in Hot Plasmas* (Oxford University Press) (1998)
- [48] A.Bar Shalom, J. Oreg, M. Klapisch, *J. Quant. Spectrosc. Rad. Transf.*, **58**, 427 (1997)
- [49] W. Zakowicz, I.J. Feng, R.H. Pratt, *J. Quant. Spectrosc. Rad. Transf.*, **27**, 329 (1982)

