

CALCUL DES OPACITÉS DE PLASMAS DENSES. ÉCLATEMENT DU SPECTRE DÛ AUX INTERACTIONS ÉLECTRONIQUES DANS LE CAS DU FER

THÈSE N° 1232 (1994)

PRÉSENTÉE AU DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE

ÉCOLE POLYTECHNIQUE FÉDÉRALE DE LAUSANNE

POUR L'OBTENTION DU GRADE DE DOCTEUR ÈS SCIENCES

PAR

SAMY MOREL

Ingénieur physicien diplômé EPFL
originaire de Lentigny (FR)

acceptée sur proposition du jury:

Dr T. Blenski, rapporteur
Prof. C. Deutsch, corapporteur
M. F. Grimaldi, corapporteur
Prof. F. Troyon, corapporteur

Lausanne, EPFL
1994

TABLE DES MATIERES

Abstract	
Résumé	
I Introduction	1
I.1 Généralités sur le transfert radiatif	2
I.2 Recherches effectuées dans le domaine	7
I.3 Plan du travail	14
II Atome moyen et section efficace d'absorption des photons dans l'approximation des électrons indépendants	15
II.1 Modèle de Thomas-Fermi à température et densité finies	18
II.2 Modèle de l'atome moyen	19
II.3 Corrections relativistes	21
II.4 Section efficace d'absorption des photons	22
III Configurations électroniques et section efficace d'absorption des photons	27
III.1 Base des états électroniques d'un atome	27
III.2 Configurations électroniques et mélange de configurations	30
III.3 Section efficace d'absorption des photons	30
III.4 Energie moyenne des configurations électroniques	34
III.5 Différence d'énergie due à la promotion d'un électron	37

IV	Calcul de la probabilité des configurations électroniques	39
IV.1	Description de l'équilibre	40
IV.2	Fluctuations: Deuxième variation du grand potentiel thermodynamique	41
IV.3	Probabilité d'une configuration électronique	43
IV.4	Construction des configurations électroniques pour le calcul numérique	44
V	Abandon de la symétrie sphérique pour le traitement des interactions entre électrons liés	47
V.1	Diagonalisation simultanée des opérateurs	48
V.1.1	Restriction à un sous-espace	48
V.1.2	Diagonalisation simultanée de deux opérateurs	50
V.2	Section efficace d'absorption des photons	52
V.2.1	Couplage intermédiaire	52
V.2.2	Couplage de Russel-Saunders	56
VI	Résultats numériques et discussion	59
VI.1	Autocorrélations et probabilités des configurations électroniques	59
VI.2	Calcul des moyennes de Rosseland et de Planck	63
VI.3	Effet de la température sur un plasma de fer de 0.01 g/cm^3	65
VI.4	Effet du modèle de probabilité sur un plasma de fer d'une température de 20 eV et d'une densité de 0.01 g/cm^3	74
	Conclusion	77
	Annexe A	81
	Annexe B	85
	Annexe C	89
	Annexe D	95
	Annexe E	97
	Références	101
	Remerciements	107
	Curriculum Vitae	109

ABSTRACT

Radiative transfer is often the dominant energy transport channel in inertial confinement fusion experiments. It is a basic process needed in order to understand the behaviour of astrophysical plasmas, like stellar atmospheres and the inner parts of stars. Opacities account for photon absorption in matter.

During decades, opacities have been numerically calculated on the basis of different atomic models. Before the nineties, no direct measurement of opacities spectra has been performed. The first experimental results were carried out by British and American groups after 1989. Especially interesting was the measurement of relative transmission spectra, obtained by Da Silva's group, of iron plasma at 25 eV temperature and $8 \cdot 10^{-3} \text{ g/cm}^3$ density. The features of experimental spectrum (main effects coming from bound-bound transitions, spectrum complexity due to relatively high atomic number) make it especially useful for verification of theoretic models. One of our objectives is to obtain this spectrum via our theoretical calculations.

This work starts with a short review of the average atom model followed by derivation of photon absorption cross-section formula in the independent electrons approximation. Next, we introduce the Detailed Configuration Accounting approximation. This approximation describes the different ionicity and excitations states of an atom of the plasma in terms of electronic configurations. The absorption cross-section formula is derived in the Detailed Configuration Accounting approximation. This formula is based on configurations average energies and configurations probabilities.

The average atom model allows us to determine the mean ionicity of atoms and the mean occupation numbers of atomic orbitals. It provides also the occupation numbers of the most probable atom in the plasma. From the fluctuation theory applied to occupation numbers, we get the probabilities of different electronic configurations. The probability formula results

from the study of the second variation of the grand thermodynamic potential for a plasma atom. The Hartree-Fock theory for finite temperature is used to describe the atomic equilibrium.

We show the effect of interactions between bound and free electrons on the bound levels correlations for a iron plasma of different temperatures and densities. For 10 eV or more and at solid density, the inclusion of interactions between bound levels may decrease by 60% the autocorrelation of the 3d level. The effect of free electrons is less important. The interactions between electrons decrease the variance of the ionic probability distribution for a iron plasma at 50 eV or 100 eV and at solid density.

In the Detailed Configuration Accounting, the energies and the oscillator strengths of the N electron (where N stays for the number of bound electrons) atomic states are averaged for each electronic configurations. Without this approximation, the N electron states have to be explicitly calculated for each electronic configuration. This approach is called Detailed Term Accounting. If we neglect the spin-orbit coupling, the energies and the N electron eigenstates are calculated by simultaneous diagonalisation of the atomic hamiltonien H and the angular momentum operators \vec{L}^2 , L_z , \vec{S}^2 and S_z . When the spin-orbit coupling is included, the H , \vec{J}^2 and J_z are diagonalised. Finally, the absorption cross-section is calculated in this approximation.

One of the main conclusions of this work, found in the case of Detailed Term Accounting, calculations, is a spectrum similar to the one obtained in the Da Silva experiment. For the same plasma, the Detailed Configuration Accounting calculation failed to recover a spectrum similar to the experimental one. The relevance of the Detailed Term Accounting model has been already pointed out in the American work of Iglesias and Rogers. Let us stress however that their code OPAL is using a different model for plasma equilibrium.

The Rosseland mean opacity is calculated for a iron plasma at 0.01 g/cm^3 and temperatures of 20, 40, 80 and 150 eV. The effects due to Detailed Term Accounting are less important for higher temperature.

RESUME

Le transfert radiatif est souvent le processus dominant le transport d'énergie dans les plasmas réalisés dans les expériences concernant la fusion par confinement inertiel. Ce phénomène est également essentiel à la compréhension du comportement de certains plasmas rencontrés en astrophysique, comme la photosphère ou l'intérieur des étoiles. Les opacités décrivent l'absorption des photons par la matière, on comprend donc aisément l'intérêt que présente le calcul de ces dernières.

Pendant des décennies, les opacités ont été calculées numériquement sur la base de différents modèles atomiques. Avant les années quatre-vingt-dix, aucune mesure directe des spectres d'opacités n'avait été réalisée. Les premiers résultats expérimentaux ont été obtenus par des équipes britanniques et américaines à partir de 1989. En particulier, le groupe de Da Silva a effectué des mesures relatives du spectre de transmission d'un plasma de fer à une température de 25 eV et une densité de $8 \cdot 10^{-3} \text{ g/cm}^3$. La forme des spectres mesurés (prépondérance des effets dus aux transitions entre électrons liés, complexité du spectre liée au numéro atomique relativement élevé) rend ces résultats particulièrement intéressants pour la vérification des modèles théoriques. Un de nos objectifs est donc de retrouver ces spectres au moyen de calculs théoriques.

Ce travail commence par une brève présentation du modèle de l'atome moyen, suivie par le calcul de la section efficace d'absorption des photons dans l'approximation des électrons indépendants. L'approximation dite de "Detailed Configuration Accounting" est présentée. Celle-ci permet de décrire les différents états d'ionité et d'excitation des atomes du plasma en terme de configurations électroniques. La formule pour la section efficace d'absorption des photons dans le cadre de l'approximation de "Detailed Configuration Accounting" est dérivée. Cette dernière met en évidence le rôle joué par l'énergie moyenne et la probabilité des configurations électroniques dans le calcul des opacités.

Le modèle de l'atome moyen permet de déterminer l'ionicté moyenne des atomes du plasma ainsi que le taux d'occupation moyen de leurs orbitales électroniques. Cette ionicté et ce taux d'occupation sont ceux de l'atome le plus probable du plasma. Nous montrons qu'il est possible de décrire la probabilité d'une configuration électronique en terme des fluctuations du taux d'occupation de l'atome le plus probable. Ce résultat est obtenu en étudiant la deuxième variation du grand potentiel thermodynamique pour un atome du plasma dont l'équilibre est décrit au moyen de la théorie Hartree-Fock à température non nulle.

Nous montrons l'effet des interactions entre électrons liés et libres sur les corrélations des niveaux liés pour différentes températures et densités pour un plasma de fer. Pour quelques dizaines d'eV et la densité du solide, l'inclusion des interactions entre électrons liés peut produire une diminution de 60% de l'autocorrélation du niveau 3d. Par contre, l'effet des électrons libres est moins important. Les interactions entre électrons ont pour effet de diminuer la variance de distribution de probabilité ionique pour un plasma de fer de 50 eV ou de 100 eV à la densité du solide.

L'approximation de "Detailed Configuration Accounting", consiste à remplacer les énergies et les forces d'oscillateurs des états à N électrons (où N est le nombre d'électrons liés), par leur valeur moyenne pour chaque configuration électronique. Sans cette approximation, les états à N électrons doivent être déterminés pour chacune de ces configurations. Cette approche s'appelle "Detailed Term Accounting". Dans cette dernière, si le couplage spin-orbite est négligé, les énergies ainsi que les états propres des états à N électrons sont déterminés par diagonalisation simultanée des opérateurs hamiltonien H et de moment angulaire \vec{L}^2 , L_z , \vec{S}^2 et S_z . Lorsque le couplage spin-orbite n'est pas négligé, ce sont alors les opérateurs H , \vec{J}^2 et J_z qui sont diagonalisés. La section efficace d'absorption des photons dans le cadre de cette approximation est établie.

Une des conclusions principales de ce travail est d'avoir retrouvé le spectre expérimental de Da Silva, lorsque l'approche "Detailed Term Accounting" a été utilisée. Par contre, l'approximation "Detailed Configuration Accounting" produit dans les mêmes conditions un spectre totalement différent. La pertinence du modèle "Detailed Term Accounting" a déjà été mise en évidence, pour le même plasma, par les travaux américains de Iglesias et Rogers. Leur code OPAL est cependant basé sur une description différente de l'équilibre du plasma.

La moyenne de Rosseland pour un plasma de fer à 0.01 g/cm^3 et les températures de 20, 40, 80 et 150 eV, est calculée. Cette dernière indique une diminution de l'importance du traitement "Detailed Term Accounting" avec la température.

CHAPITRE I

Introduction

L'état de plasma caractérise des milieux aussi différents que les gaz interstellaires, la troposphère terrestre, l'atmosphère et l'intérieur des étoiles; sans parler des plasmas produits par l'homme comme les décharges gazeuses ou les plasmas à confinement magnétique et inertiel.

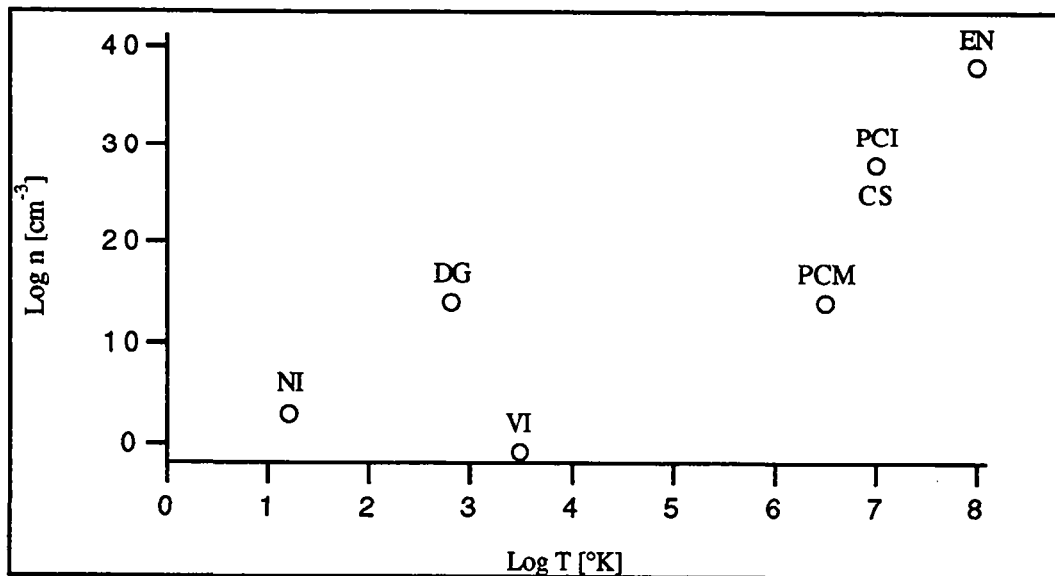


Figure I.1 Logarithme de la densité et de la température pour quelques plasmas. NI: Nuages Interstellaires. VI: Vide Interstellaire. DG: Décharges Gazeuses. PCM: Plasma à Confinement Magnétique. PCI: Plasma à Confinement Inertiel. CS: Centre du Soleil. EN: Etoile à Neutron.

La description de ces milieux requiert des modèles physiques qui couvrent des densités allant de quelques atomes par cm³, pour les plasmas interstellaires, à 10⁴⁰ neutrons par cm³, pour les étoiles à neutrons, ainsi que des températures pouvant s'étendre de quelques °K à plusieurs

millions de °K. A titre indicatif, la Figure I.1 [Réf. 1] donne la densité et la température de quelques plasmas observés en astrophysique ou créés par l'homme.

Le transport de l'énergie dans un plasma se fait soit par convection, conduction électronique ou transfert radiatif. Le transfert radiatif est dominant à haute température, alors que la conduction électronique domine à haute densité et pour des températures basses à moyennes. Les valeurs de la densité et de la température pour lesquelles la convection, le rayonnement ou la conduction électronique sont dominants forment les trois régions indiquées dans la Figure I.2 [Réf. 1].

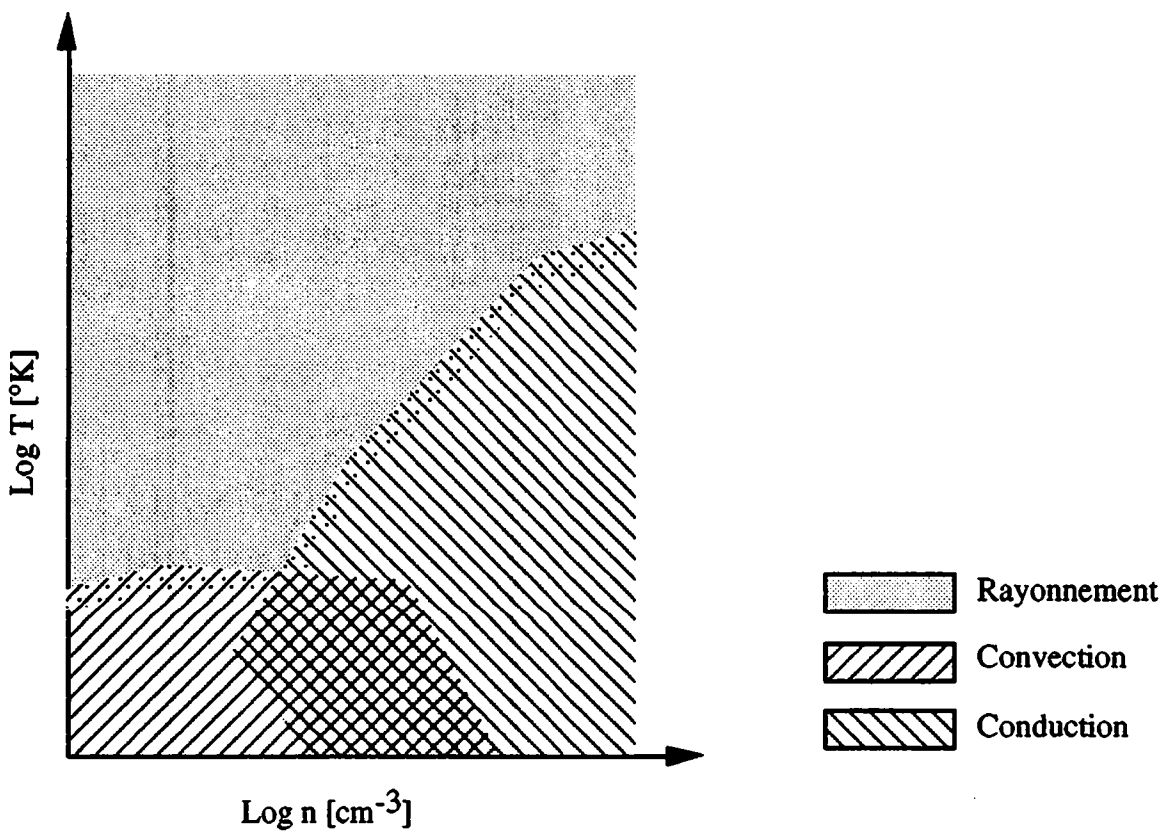


Figure I.2 Représentation schématique des trois processus de transport de l'énergie. Les échelles sont arbitraires car les frontières entre les différentes régions dépendent de la composition ainsi que d'autres paramètres du plasma.

I.1 Généralités sur le transfert radiatif

Dans le cadre de ce travail, notre intérêt se portera sur les domaines de température et de densité pour lequel le transfert radiatif est dominant; ce qui, en particulier, concerne les plasmas rencontrés dans l'étude de la fusion par confinement inertiel, de l'intérieur des étoiles et de leur photosphère. L'étude de l'équation de transfert radiatif n'étant pas le sujet de ce

travail, nous nous contenterons dans cette section d'une présentation plus ou moins heuristique. Un traitement complet est présenté, par exemple, dans les ouvrages de Armstrong et Nicholls [Réf. 1] ou de Mihalas [Réf. 2] (voir aussi Rusch et Ligou [Réf. 3]).

Dans le cas stationnaire et lorsque la diffusion des photons par le plasma est négligée, la propagation de ces derniers est décrite au moyen de l'équation de transfert radiatif

$$\frac{d}{ds} I_\nu(\vec{\Omega}) = \bar{n}_p j_\nu(\vec{\Omega}) - k_\nu \bar{n}_p I_\nu(\vec{\Omega}), \quad (\text{I.1.1})$$

où $I_\nu(\vec{\Omega})$ est l'intensité spécifique de radiation de fréquence ν , elle a la dimension d'une énergie par unité, de fréquence, d'angle solide et de surface perpendiculaire à la direction $\vec{\Omega}$; $j_\nu(\vec{\Omega})$ est l'émission spécifique du plasma pour la fréquence ν dans la direction $\vec{\Omega}$; k_ν est le coefficient d'absorption par unité de masse, ou opacité, du plasma à la fréquence ν dans la direction $\vec{\Omega}$; \bar{n}_p est le poids spécifique du plasma et s est la distance mesurée dans la direction $\vec{\Omega}$.

Remarquons que, pour un plasma composé d'un seul élément, l'opacité k_ν est reliée à la section efficace d'absorption des photons par l'intermédiaire de la relation

$$k_\nu = \sigma_a(\nu)/M_A, \quad (\text{I.1.2})$$

où M_A est la masse atomique des atomes du plasma et $\sigma_a(\nu)$ leur section efficace d'absorption. Dans la suite de ce travail, c'est la section efficace d'absorption $\sigma_a(\nu)$ qui sera calculée, le passage aux opacités étant assuré par la relation (I.1.2).

Dans l'équation (I.1.1), les interactions entre les photons et le plasma sont complètement décrites par les coefficients d'émission spécifique $j_\nu(\vec{\Omega})$ et d'absorption par unité de masse k_ν . Dans ce travail, nous allons nous intéresser uniquement aux plasmas qui peuvent être décrits dans le cadre de l'approximation d'équilibre thermodynamique local, appelée "Local Thermodynamic Equilibrium" et abrégée LTE dans la littérature [Réf. 2, p. 109]. Dans le cadre de cette approximation, le coefficient d'émission spécifique $j_\nu(\vec{\Omega})$ est relié au coefficient d'absorption k_ν par la loi de Kirchoff

$$j_\nu = k_\nu B_\nu(T), \quad (\text{I.1.3})$$

où $B_\nu(T)$ est la distribution de Planck et T est la température exprimée en unités d'énergie.

$$B_\nu(T) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{e^{-h\nu/T}}{1 - e^{-h\nu/T}}. \quad (\text{I.1.4})$$

Dans les équations (I.1.3-4), $j_\nu(\vec{\Omega})$ est supposée isotrope et h est la constante de Planck.

Afin d'obtenir l'équation de transfert radiatif dans le cadre de l'approximation LTE, il serait tentant de substituer le coefficient d'émission spécifique donné par la loi de Kirchoff (I.1.3) dans l'équation (I.1.1). Cette opération serait erronée [Réf. 1, p. 25], car la loi (I.1.3) néglige complètement l'émission stimulée. La prise en compte de cette dernière nous conduit à redéfinir la relation (I.1.3) de la manière suivante:

$$j_\nu = k'_\nu B_\nu(T) + e^{-h\nu/T} k_\nu I_\nu(\vec{\Omega}), \quad (\text{I.1.5})$$

où $k'_\nu = (1 - e^{-h\nu/T})k_\nu$.

Par substitution de l'égalité (I.1.5) dans l'équation de transfert (I.1.1) nous obtenons alors

$$\frac{d}{ds} I_\nu(\vec{\Omega}) = \bar{n}_p k'_\nu (B_\nu(T) - I_\nu(\vec{\Omega})). \quad (\text{I.1.6})$$

Afin d'établir la relation (I.1.5), seul le plasma est supposé obéir à l'approximation LTE. Par contre, nous n'avons par contre fait aucune hypothèse sur le champ de radiation. En fait, le spectre de ce dernier peut être très différent de la distribution de Planck pour la température du plasma dans la région considérée. Pour illustrer ce propos, considérons les deux cas limites suivants: le plasma opaque et le plasma transparent. Si nous introduisons le parcours moyen des photons $\lambda_\nu = 1/\bar{n}_p k_\nu$, un plasma est dit transparent (opaque) pour la fréquence ν si le parcours moyen des photons est beaucoup plus (moins) grand que la distance caractéristique du gradient de température dans le plasma. Dans le cas d'un plasma opaque, un photon émis par le plasma est absorbé dans le voisinage de son point d'émission. La température du plasma au point d'absorption est donc très proche de celle au point d'émission. Dans le cas du plasma transparent, la température du plasma au point d'absorption peut être très différente de la température du plasma au point d'émission. En conséquence, le spectre du champ de radiation au point d'absorption peut être très éloigné de la distribution de Planck pour la température du plasma en ce point.

Revenons à l'équation de transfert radiatif (I.1.6). Notre propos n'est pas de présenter les méthodes de résolution de cette équation. Nous allons uniquement nous intéresser aux deux

opacités moyennes qu'il est possible de définir pour les deux situations limites du plasma opaque et du plasma transparent.

Pour un plasma opaque, nous pouvons supposer que $B_\nu \cong I_\nu$. En première approximation, la relation (I.1.6) devient

$$I_\nu \cong B_\nu - \frac{1}{\bar{n}_p k'_\nu} \frac{dB_\nu}{ds}. \quad (\text{I.1.7})$$

L'intégration de (I.1.7) par rapport à $\bar{\Omega}$ et ν donne le flux total d'énergie

$$F = -\frac{32\pi^5}{45c^2 h^3} \frac{1}{\bar{n}_p k_R} T^3 \bar{\nabla} T, \quad (\text{I.1.8})$$

où

$$\frac{1}{k_R} = \frac{\int_0^\infty \frac{1}{k'_\nu} \frac{\partial B_\nu(T)}{\partial T} d\nu}{\int_0^\infty \frac{\partial B_\nu(T)}{\partial T} d\nu}. \quad (\text{I.1.9})$$

L'équation de transfert radiatif (I.1.6) conduit donc à une loi de Fick et finalement à l'équation de diffusion (I.1.8) (pour une analyse complète, voir Rusch et Ligou [Réf. 3]). La valeur du coefficient de diffusion de cette équation est déterminée, à une constante près, par le poids spécifique du plasma et par l'opacité moyenne de Rosseland k_R définie à travers la relation (I.1.9).

A l'opposé, pour des plasmas transparents, c'est l'opacité moyenne de Planck

$$k_p = \frac{\int_0^\infty k'_\nu B_\nu(T) d\nu}{\int_0^\infty B_\nu(T) d\nu}, \quad (\text{I.1.10})$$

qui doit être considérée.

Si nous introduisons la variable sans dimension $u = h\nu / T$ et substituons la distribution de Planck (I.1.4) dans les définitions (I.1.9-10), nous obtenons

$$k_P = \frac{15}{\pi^4} \int_0^\infty u^3 e^{-u} k_u du = \int_0^\infty W_P(u) k_u du,$$

$$\frac{1}{k_R} = \frac{15}{4\pi^4} \int_0^\infty \frac{u^4 e^{2u}}{k_u (e^u - 1)^3} du = \int_0^\infty \frac{W_R(u)}{k_u} du, \quad (\text{I.1.11})$$

où nous avons introduit les fonctions de pondération (voir Figure I.3)

$$W_P(u) = \frac{15}{\pi^4} u^3 e^{-u},$$

$$W_R(u) = \frac{15}{4\pi^4} \frac{u^4 e^{2u}}{(e^u - 1)^3}. \quad (\text{I.1.12})$$

La Figure I.3 nous indique quelles sont les fréquences qui dominent, pour une température donnée, dans le calcul des moyennes de Planck et de Rosseland. Les deux fonctions de pondération présentent un maximum en $u=3$ pour la moyenne de Planck et en $u \cong 3.74$ pour la moyenne de Rosseland.

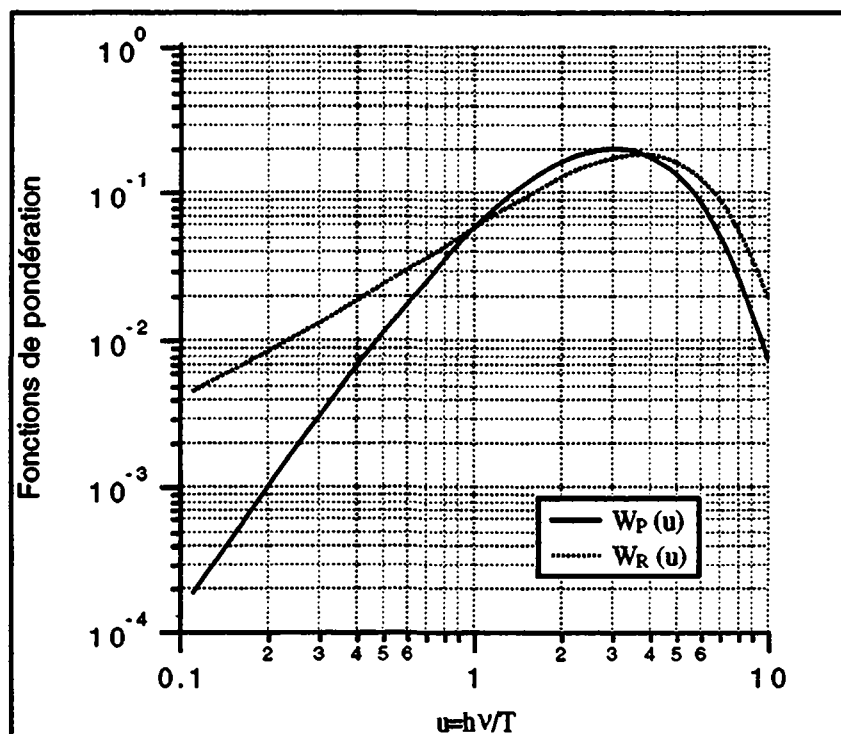


Figure I.3 Fonctions de pondération des opacités moyennes de Planck et de Rosseland.

Une dernière remarque sur l'opacité de Rosseland: chacune des interactions entre les photons et le plasma a une signature caractéristique dans le spectre d'opacité k_ν . En particulier, une transition entre états électroniques liés se traduit par la présence d'un pic à la fréquence de la transition. La moyenne de Rosseland est extrêmement sensible à la forme des ailes de ce pic [Réf. 1]. Cette constatation a des conséquences importantes, car elle signifie que la valeur de la moyenne de Rosseland est extrêmement dépendante du modèle utilisé pour décrire l'élargissement des transitions entre états électroniques liés.

I.2 Recherches effectuées dans le domaine

Une description des travaux effectués dans le domaine du calcul des opacités figure dans l'ouvrage d'Armstrong et Nicholls [Réf. 1], pour la période allant du début du siècle aux années soixante. Nous nous contenterons donc ici de retracer les grandes lignes de ces travaux.

L'importance du transfert radiatif comme mécanisme de transport de l'énergie dans les atmosphères stellaires ne fut réalisée qu'à partir des années 1915 à 1926. La première étude systématique consacrée à ce sujet fut présentée par Eddington [Réf. 4] en 1926 dans son livre portant sur la structure des étoiles. Ce travail fut rendu possible grâce au calcul semi-classique des coefficients d'absorption présenté par Kramers [Réf. 5] en 1923 et à la découverte par Rosseland [Réf. 6], en 1924, de la moyenne à utiliser pour décrire le transfert radiatif à l'intérieur des étoiles.

Dans ces travaux, l'origine de la production d'énergie dans les étoiles, ainsi que la nature exacte des structures atomiques, étaient encore mal connues. Les opacités calculées par Kramers se révélèrent dix fois inférieures aux valeurs observées pour le soleil. Cette différence avait plusieurs causes: les approximations utilisées dans les modèles stellaires, la composition chimique mal connue du soleil et bien sûr l'utilisation d'un modèle semi-classique pour le calcul des opacités.

Il faut attendre 1940 et les travaux de Marshak et Bethe [Réf. 7], ainsi que ceux de Morse [Réf. 8] pour que le modèle de la sphère ionique (voir chapitre II) soit utilisé dans le calcul des opacités. Ce modèle, proposé par Wigner, Seitz et Slater pour l'étude des métaux, avait été présenté par Slater et Krutter en 1935 [Réf. 9], comme un bon candidat pour le calcul des propriétés thermodynamiques des plasmas à haute densité et température.

A partir de 1945, l'importance que revêt le calcul des opacités pour les recherches militaires, provoque la quasi disparition des publications dans ce domaine. C'est à partir des années soixante que les résultats américains concernant le calcul des opacités réapparaissent dans la littérature. Nous pouvons citer, par exemple, les publications de Moszkowski [Réf. 10] ou de Cox [Réf. 11]. Dans les années soixante, Cox ainsi que d'autres groupes de chercheurs de Los Alamos, publièrent des tables d'opacités concernant les éléments de nombre atomique petit à moyen. Ces tables furent abondamment utilisées en astrophysique pendant les deux décennies qui suivirent.

Bien que les conséquences des approximations utilisées sur la valeur de ces opacités soient très difficiles à établir, ces opacités, abrégées OLA pour "Opacités de Los Alamos", ne furent pas remises en causes pendant toutes ces années. En effet, aucune mesure directe des opacités n'existant avant les années quatre-vingt-dix, seuls les modèles stellaires permettaient de déduire les opacités des éléments chimiques présents dans les étoiles à partir de la masse et de la luminosité de ces dernières. Les premiers doutes sur la validité des opacités OLA, vinrent malgré tout de l'astrophysique. Plusieurs auteurs montrèrent à partir des années quatre-vingt, que la multiplication des opacités OLA par un facteur 2 à 3 pour les températures comprises entre 10^5 °K et 10^6 °K, pouvait expliquer des phénomènes astrophysiques comme la relation entre la période de pulsation et la luminosité des étoiles du type Céphéides ou les modes de vibration dans le soleil.

Tous ces travaux mettaient en doute la validité des opacités OLA. Mais ce sont les travaux de Rogers et Iglesias [Réf. 12, 13] (voir aussi [Réf. 14] pour le calcul des opacités moyennes de Rosseland), qui à l'aide du code OPAL, mirent clairement en évidence que les interactions électroniques pouvaient modifier la valeur des opacités OLA. Précisons qu'un programme similaire de calcul détaillé des opacités a aussi été entrepris par le groupe appelé "Opacity Project" [Réf. 15, 16].

Ce n'est que très récemment que les résultats numériques purent être confrontés à des mesures expérimentales. Les premières de ces mesures furent réalisées en 1991 au moyen du laser au Nd-verre HELEN à Aldermaston en Angleterre [Réf. 17]. Les auteurs de ce travail soumièrent un échantillon de germanium au rayonnement X issu de deux plasmas d'or, chauffés séparément à l'aide des deux faisceaux principaux du laser HELEN (220 J par faisceau à $0.53 \mu\text{m}$ de longueur d'onde dans une impulsion de 200 ps). Afin de ralentir l'expansion du plasma de germanium et de le garder homogène, l'échantillon était pris entre deux couches de Parylène-N. L'échantillon atteignait ainsi une température de 76 eV pour une densité de 0.05 g/cm^3 . Il était alors soumis au rayonnement issu d'un troisième plasma créé

par un autre faisceau du laser HELEN (50 J à une longueur d'onde de $0.53 \mu\text{m}$ dans une impulsion de 200 ps), à partir d'une fibre de verre entourée de néodyme. La partie du rayonnement provenant directement de ce troisième plasma ainsi que celle ayant traversé l'échantillon furent alors envoyées sur un spectromètre. Les résultats expérimentaux s'avèrent en bon accord avec les résultats du code IMP [Réf. 17] basé sur l'approximation appelées "Detailed Configuration Accounting" abrégé DCA (voir chapitre III), qui permet de prendre en compte de façon détaillée l'effet des différents états d'excitation et d'ionisation des atomes sur les opacités.

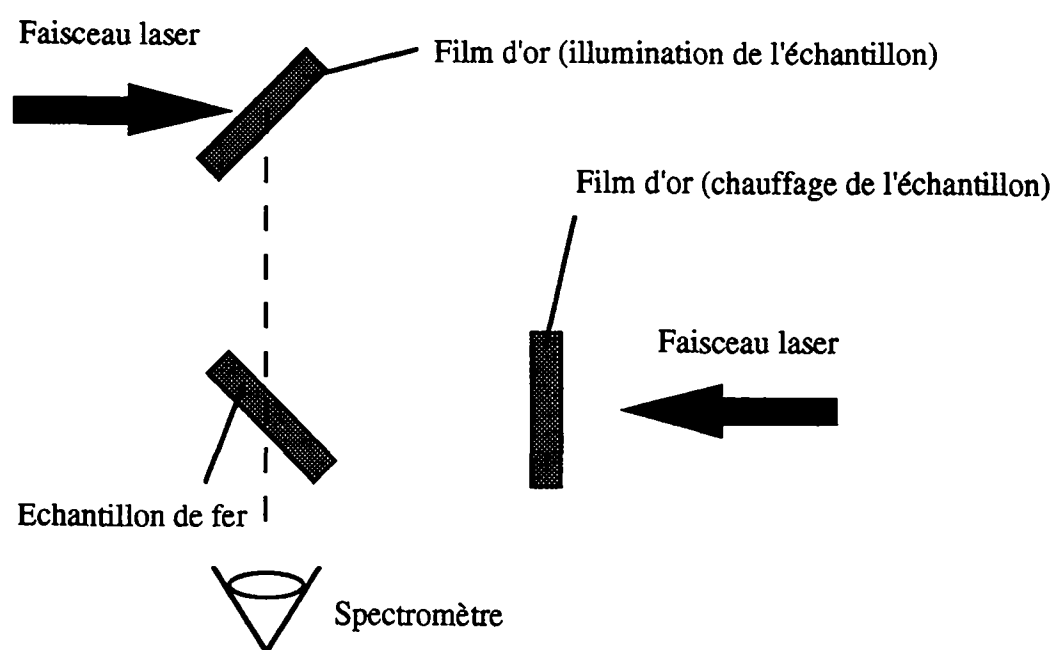


Figure I.4 Représentation schématique de l'expérience de Da Silva et al.

Une expérience similaire fut réalisée la même année au Lawrence Livermore National Laboratory à l'aide du laser NOVA [Réf. 18]. Cette dernière concernait un plasma d'aluminium qui était caractérisé par une température de 58 eV et une densité de 0.02 g/cm^3 . Une expérience ultérieure fut réalisée par Da Silva et al. [Réf. 19] (voir Figure I.4) sur ce même laser avec un montage expérimental modifié: un échantillon de fer était chauffé par le rayonnement issu d'un seul plasma d'or. Le plasma de fer ainsi créé était alors soumis au rayonnement issu d'un second plasma d'or. Le plasma de fer avait une température de 25 eV et une densité de $8 \cdot 10^{-3} \text{ g/cm}^3$. Les spectres de transmission obtenus (voir Figure I.5, [Réf 19]) confirmèrent, sur le plan qualitatif, la forte absorption qui avait été prévue par le code OPAL [Réf. 12] pour des énergies du rayonnement situées entre 60 eV et 80 eV. Afin d'obtenir ce

résultat, le code OPAL, contrairement à ses prédécesseurs, calculait de manière explicite la dépendance angulaire des interactions entre électrons liés, opération qui était réalisée dans le cadre de la méthode "Detailed Term Accounting" (voir chapitre V) abrégée DTA par la suite.

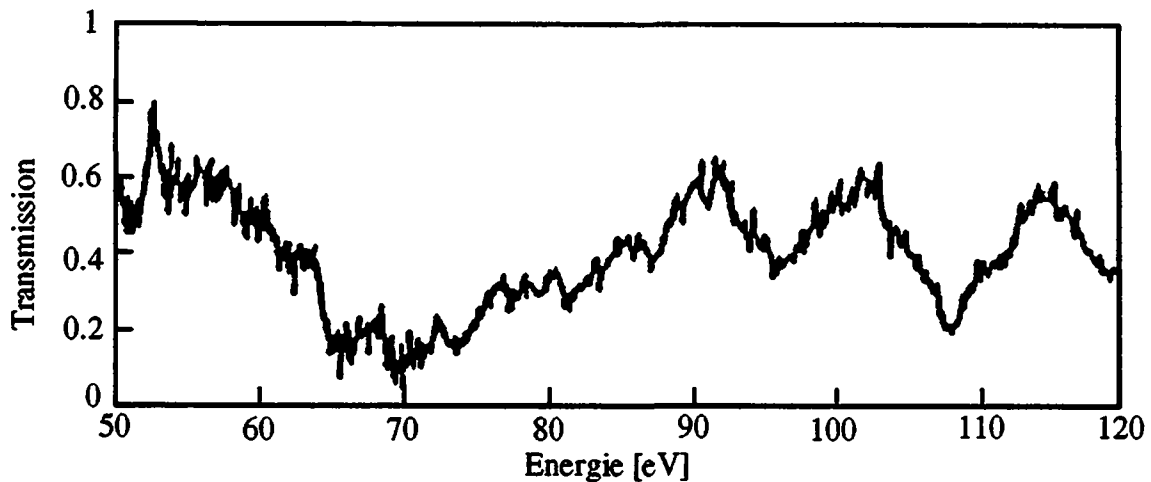


Figure I.5 Spectre de transmission obtenu dans l'expérience de Da Silva et al.

Les expériences réalisées sur les laser HELEN et NOVA ne concernent que des plasmas d'aluminium, de fer ou de germanium, c'est-à-dire des plasmas constitués d'atomes légers. Si les opacités des éléments légers suffisent à l'étude de la plupart des phénomènes rencontrés en astrophysique, ce n'est pas le cas pour l'étude de la fusion par confinement inertiel (abrégé FCI).

Dans cette approche, la fusion d'atomes de Deutérium et de Tritium (abrégé D-T) est obtenue par compression d'une sphère creuse (cible) composée de quatre couches (voir Figure I.6): "tamper", "absorber", "pusher" et "fuel" (voir aussi [Réf. 20]). Dans le cas du projet HIBALL [Réf. 21], mis sur pied par les Allemands dans les années quatre-vingt, ces différentes couches sont constituées par du plomb pour le "tamper", un mélange de plomb et de lithium pour l'"absorber" et le "pusher". La compression est réalisée au moyen d'un faisceau d'ions de bismuth de 10 GeV. La première couche ("tamper") a pour fonction de ralentir l'expansion de la sphère sous l'effet de l'énergie déposée dans la deuxième couche ("absorber") par le faisceau incident. Le mélange D-T est comprimé par la troisième couche ("pusher"). En fin de compression, la réaction de fusion D-T commence dans un "hot spot" situé près du centre de la cible et se propage vers la circonférence.

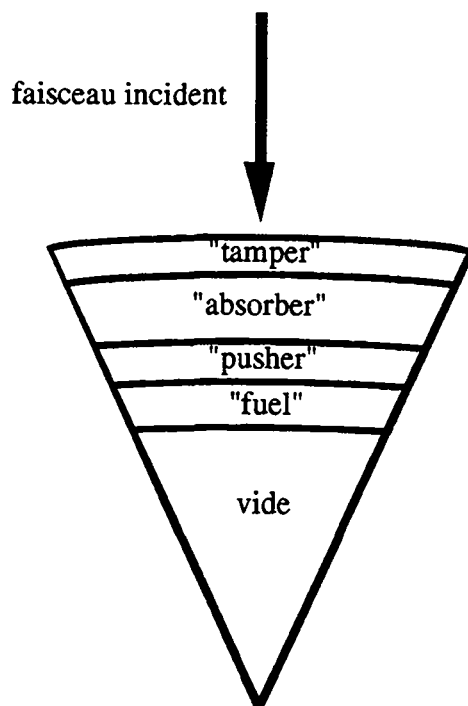


Figure I.6 Secteur d'une cible FCI. Représentation schématique des différentes couches.

La compression décrite ci-dessus est dite directe ("direct drive"), car le faisceau incident interagit directement avec la cible. La réalisation de la fusion par confinement inertiel requiert une très grande symétrie de l'implosion. Cette exigence est réalisable avec un confinement par faisceaux laser où la symétrie de l'implosion est obtenue en multipliant le nombre de faisceaux incidents. En raison de la charge d'espace, il est très difficile de focaliser plusieurs faisceaux d'ions sur la même cible. Afin d'éviter ce problème, on a recouru au concept de compression indirecte ("indirect drive"). Les faisceaux d'ions sont alors envoyés sur un milieu composé d'atomes lourds appelé convertisseur ("converter") (voir Figure I.7). Dans ce milieu, l'énergie cinétique des ions incidents est convertie en photons X, qui sont émis dans une cavité elliptique. Les parois de cette cavité sont également composées d'atomes lourds afin de pouvoir réfléchir plusieurs fois les photons avant que ces derniers n'arrivent sur la cible. Dans le cas du projet HIBALL, le convertisseur ainsi que les parois de la cavité devaient être réalisés en or.

La conception des cibles, ainsi que la réalisation de la compression indirecte, requiert l'utilisation de métaux lourds (plomb ou or dans le cas du projet HIBALL). Il est donc indispensable de connaître les opacités de ces éléments, afin de déterminer au mieux la géométrie ainsi que la composition des cibles, des convertisseurs et des parois réfléchissantes.

A part la publication concernant le calcul de l'opacité de l'or par Nardi et Zinamon [Réf. 22] en 1979, très peu de résultats concernant les opacités d'éléments lourds sont disponibles dans la littérature. Il est donc essentiel pour les groupes européens qui poursuivent des recherches dans les domaines liés à la fusion par confinement inertiel de calculer ces opacités.

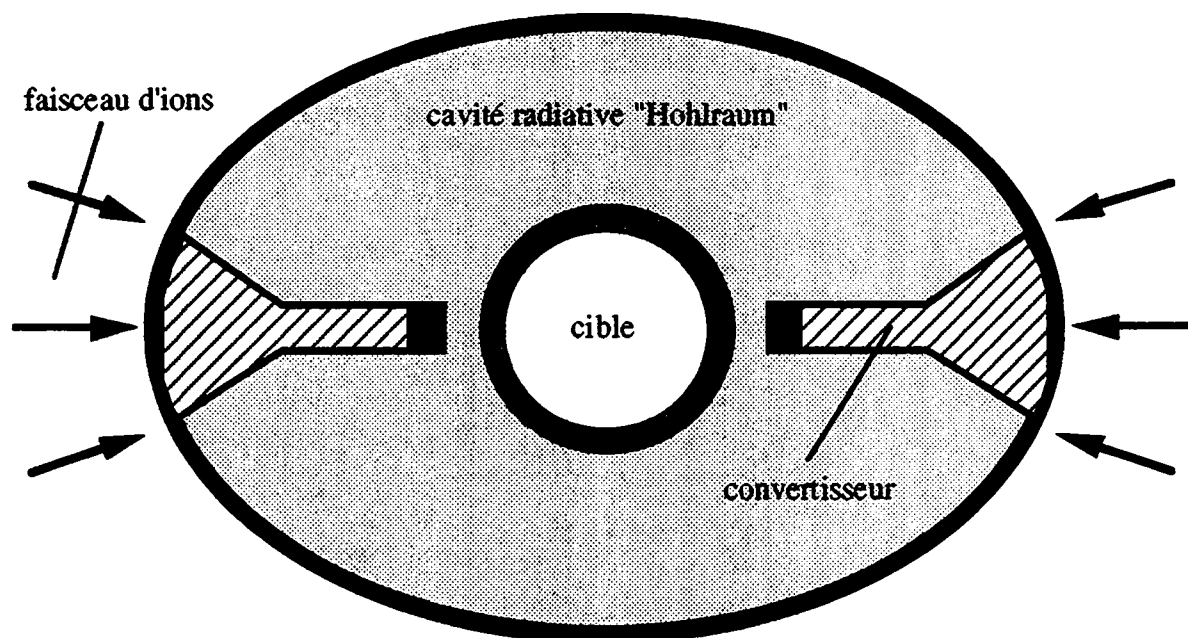


Figure I.7 Configuration proposée dans le projet HIBALL afin de comprimer une cible au moyen de deux faisceaux d'ions. On parle dans ce cas de compression indirecte "indirect drive", car la cible est comprimée par les photons X issus des deux convertisseurs "converter". Cette géométrie est destinée à accroître la symétrie du flux de photons et de la compression.

Notre groupe à l'EPFL, s'est intéressé au calcul des opacités à partir de 1986. Comme nous l'avons vu ci-dessus, cette activité était susceptible d'intéresser de nombreux groupes européens et certains résultats de nos calculs ont été communiqués aux groupes expérimentaux travaillant à l'université de Frankfurt et au GSI (abréviation pour "Gesellschaft für Schwerionenforschung").

Pour aborder le calcul des opacités, il était nécessaire de commencer par développer un code permettant de calculer la physique atomique des plasmas étudiés. Dans un premier temps, la densité électronique et le potentiel atomique ont été calculés au moyen du modèle de Thomas-Fermi [Réf. 23]. Ultérieurement, le potentiel atomique ainsi que les états électroniques furent déterminés par la résolution de l'équation de Schrödinger dans le potentiel de l'atome moyen (voir section II.2). Remarquons que les états propres et les valeurs propres de cette équation sont déterminés au moyen de la méthode de phase développée dans notre laboratoire [Réf. 24]. Cette méthode présente l'avantage de trouver tous les états liés par la seule donnée des nombres quantiques radial et angulaire caractérisant les états recherchés.

S'inspirant des travaux de Zangwill et Soven [Réf. 25], Grimaldi et al. [Réf. 26], la section efficace d'absorption des photons fut calculée dans l'approximation des électrons indépendants, appliquée à la polarisabilité atomique (voir section II.4). Cette approximation, conduit à la notion de transition entre les états électroniques liés et libres de l'atome. La contribution de ces transitions à la section efficace d'absorption des photons est décrite dans ce modèle par des distributions de Dirac. Afin d'évaluer cette contribution, la section efficace d'absorption des photons fut pondérée sur toute les fluctuations de densité possibles; la probabilité de chacune de ces fluctuations étant liée à la variation correspondante du grand potentiel thermodynamique. Ainsi, la probabilité des fluctuations reflétait les interactions entre électrons et, dans ce sens, ce modèle nous permettait donc d'inclure des effets qui ne se trouvent pas dans l'approximations des électrons indépendants. Ce modèle [Réf. 27], nous a permis d'évaluer l'opacité de Rosseland pour l'or [Réf. 28-31]. Ces résultats ont été utilisés par des chercheurs du GSI, de l'université de Francfort et de l'université de Paris-Sud [Réf. 31, 32].

L'approche présentée ci-dessus est essentiellement basée sur un traitement "statistique" de la physique atomique (atome moyen) et de la section efficace d'absorption des photons (pondération de la section efficace sur les fluctuations de densité). En raison des travaux expérimentaux réalisés entre autre au GSI, au KfK à Karlsruhe et à l'institut Max Planck à Garching, il était intéressant d'obtenir les opacités de plasmas moins denses ($1/10$ à $1/100$ de la densité du solide). A ces densités, l'éclatement des lignes de transition dû aux différents états d'excitation et d'ionisation des atomes du plasma devient important et une approche statistique n'est plus suffisante, ce qui nous a incité à nous tourner vers une approche basée sur l'approximation DCA.

Les résultats obtenus par Da Silva et al. pour un plasma de fer, étaient corroborés par les calculs réalisés par Iglesias et Rogers à l'aide du code OPAL [Réf. 33]. Notre modèle thermodynamique étant différent de celui utilisé par ces derniers, il a été nécessaire d'aborder le calcul des interactions entre électrons au moyen de la méthode DTA. Nous pouvions ainsi déterminer si notre approche permettait, elle aussi, de reproduire les résultats expérimentaux.

Soulignons que les résultats ainsi obtenus sont une étape indispensable à la vérification de la validité des méthodes approximatives qui doivent nécessairement être envisagées lors du calcul des opacités de plasmas lourds. En effet, le calcul explicite des transitions dans la méthode DTA, se révèle alors impossible en raison de leur nombre trop élevé.

L3 Plan du travail

Le modèle atomique ainsi que le calcul de la section efficace d'absorption des photons dans l'approximation des particules indépendantes font l'objet du chapitre II. Ce chapitre présente rapidement certaines des méthodes et des modèles rencontrés dans la littérature, et utilisés dans notre laboratoire depuis 1986, pour le calcul des opacités.

Afin d'aller plus loin que le traitement statistique des atomes présenté au chapitre II et de pouvoir prendre en compte explicitement les différents états d'ionisation et d'excitation de ces atomes, nous présenterons au chapitre III l'approche DCA. Cette approche introduit de façon ad hoc la notion de configuration électronique. Nous verrons alors que dans le cadre de l'approche DCA, la section efficace d'absorption des photons dépend de la probabilité et de l'énergie de ces configurations. Le chapitre III se terminera donc par le calcul de ces énergies.

Le calcul des probabilités fera l'objet du chapitre IV. Rappelons que le calcul de la probabilité des fluctuations basé sur la théorie fonctionnelle de la densité avait permis de traiter l'élargissement des lignes de transitions dans l'approximation des électrons indépendants [Réf. 27]. Dans ce modèle, le grand potentiel thermodynamique était une fonctionnelle de la densité. Le grand potentiel thermodynamique peut être également considéré comme une fonctionnelle de la matrice densité dans le formalisme Hartree-Fock à température non nulle. Ceci nous permet de remplacer les fluctuations de densité, par la fluctuation du nombre d'occupation des niveaux électroniques. La pondération de la section efficace sur toutes les fluctuations possibles de densité sera alors, dans un certain sens, remplacée par la somme sur toutes les configurations électroniques possibles.

L'approche DCA suppose qu'il est suffisant de considérer une distribution électronique moyenne de symétrie sphérique pour le calcul de l'énergie des états électroniques d'un atome. Afin de traiter correctement la dépendance angulaire des interactions entre électrons, nous présenterons au chapitre V la méthode DTA.

Le chapitre VI sera consacré à la présentation et à la discussion des résultats. Nous commencerons par présenter quelques résultats ayant trait au modèle de calcul des probabilités que nous avons développé au chapitre IV. Nous montrerons ensuite les spectres d'opacité ainsi que les opacités moyennes de Planck et de Rosseland pour un plasma de fer à différentes températures. L'influence du modèle utilisé pour le calcul de la probabilité des configurations électroniques sera mise en évidence.

CHAPITRE II

Atome moyen et section efficace d'absorption des photons dans l'approximation des électrons indépendants

Dans les pages précédentes, nous avons introduit la notion d'opacité ainsi que les deux opacités moyennes les plus souvent rencontrées dans la littérature: les moyennes de Planck et de Rosseland. Nous allons présenter les modèles atomiques que nous avons utilisé dans la physique des plasmas partiellement ionisés.

Les modèles que nous allons considérer sont basés sur la méthode du champ autoconsistant appliquée à un atome du plasma à l'équilibre thermodynamique. Ils appartiennent essentiellement à deux groupes génériques: la cellule sphérique ionique et la sphère de corrélation polarisée [Réf. 1].

La différence entre ces deux approximations concerne le couplage entre les ions. Ce dernier est caractérisé par le rapport entre l'énergie potentielle d'interaction entre les ions et l'énergie thermique du plasma. Si l'énergie thermique est beaucoup plus petite (grande) que l'énergie potentiel, on parle de plasma fortement (faiblement) couplé. Dans le cas d'un plasma fortement couplé, c'est le modèle de la cellule ionique sphérique qui est applicable alors que pour un plasma faiblement couplé c'est le modèle de la sphère de corrélation polarisée qui doit être utilisé.

Le modèle de la cellule sphérique ionique est particulièrement indiqué pour traiter des atomes de numéro atomique Z élevé. Il incorpore les principaux effets dus à la densité: ionisation due à la pression et l'écrantage à courte portée des ions. Pour cette raison, il est très utilisé pour calculer les opacités des plasmas à haute densité rencontrés en astrophysique [Réf. 2-5].

Le modèle de la sphère de corrélation polarisée est utilisé dans l'étude des plasmas à basse densité. A distance croissante du ion, le potentiel moyen $V(r)$ de ce dernier tend vers le potentiel de Debye-Hückel $V_D(r) = Ze^{-r/\lambda_D}/r$; où λ_D est la longueur d'écrantage du potentiel du noyau par les électrons et Z la charge du noyau. A basse densité, cette longueur peut être beaucoup plus grande que la distance moyenne entre les ions. L'interaction entre ces derniers doit donc être prise en compte.

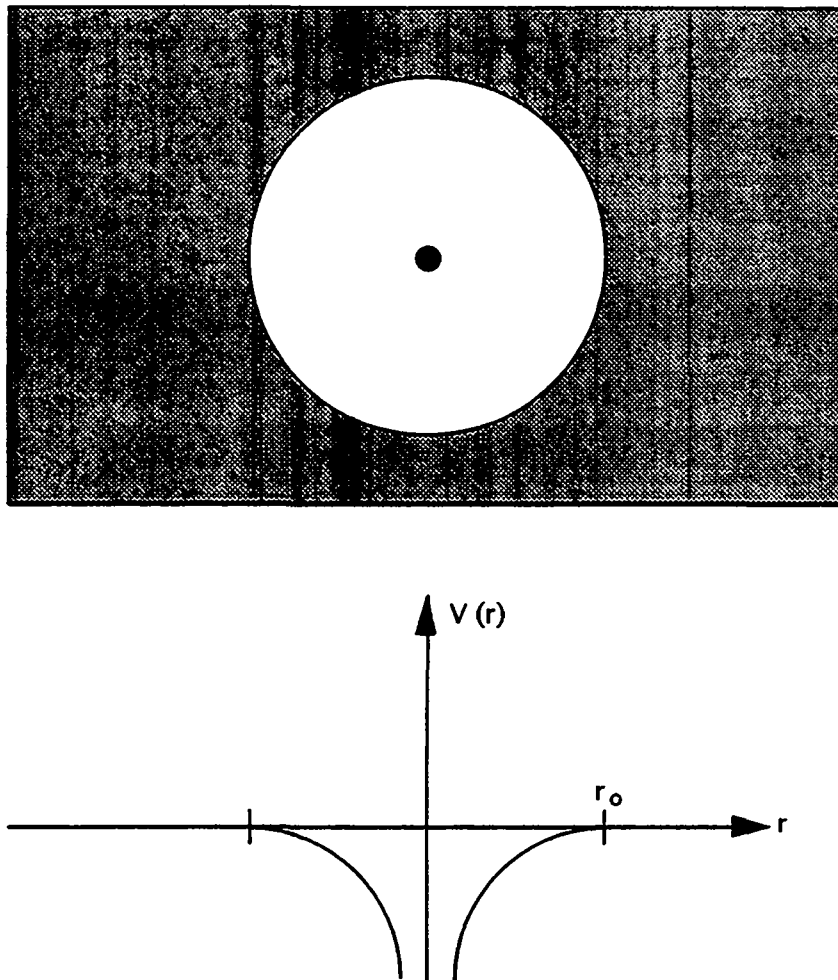


Figure II.1 Représentation schématique du modèle de la cellule sphérique et du potentiel ionique moyen.

Dans ce travail, nous allons uniquement nous intéresser aux plasmas fortement couplés. Les deux modèles que nous allons décrire dans ce chapitre recourent donc tout deux à l'approximation de la cellule ionique sphérique. Comme dans le modèle de Wigner-Seitz, utilisé pour les métaux, l'atome est représenté comme un noyau ponctuel entouré par ces

électrons et inclus dans une cavité sphérique située dans un plasma homogène (Figure II.1). Le fait d'associer une sphère à chaque ion est justifié par le couplage élevé du plasma. Dans ce cas, la répulsion coulombienne entre les ions est telle, que ceux-ci ne peuvent quasiment pas s'interpénétrer sous l'influence de l'énergie thermique du plasma [Réf. 1]. Dans la référence [Réf. 6], une autre approche, basée sur une expansion en "cluster", a aussi été proposée par Blenski et Cichocki.

Le rayon r_0 de la sphère de Wigner-Seitz est déterminé par la densité du plasma n_p , par la relation $r_0 = (3/4\pi n_p)^{1/3}$. Le potentiel électrostatique autoconsistant $V(r)$ satisfait à l'équation de Poisson

$$\nabla^2 V(r) = -4\pi(Ze\delta(\vec{r}) + en_+(r) - en(r)),$$

où $en_+(r)$ est la densité de charge positive et continue du fond externe à la cavité et $n(r)$ la densité électronique.

Dans le travail de Liberman [Réf. 5, 7], $n_+(r)$ est constante pour $r > r_0$ et disparaît pour $r < r_0$. D'autres approximations sont aussi considérées par Dharma-wardana et Perrot [Réf. 8], Berggren et Froman [Réf. 9], Davis et Blaha [Réf. 10], Cauble et al. [Réf. 11] et Perrot [Réf. 12]. Dans le cadre de ce travail, c'est la condition $n_+(r) = 0$ pour $r < r_0$ qui a été utilisée.

On peut supposer que $V(r) \rightarrow 0$ pour $r \rightarrow \infty$. Si le potentiel chimique des électrons est correctement choisi, le système est électriquement neutre et cette condition au bord est satisfaite. Une condition plus forte consiste à exiger $V(r) = 0$ pour tout $r > r_0$. Dans ce cas, la sphère elle-même est électriquement neutre et la densité de charge positive externe doit être égale à la densité de charge électronique extérieure.

Nous allons donc commencer par présenter succinctement le modèle atomique de Thomas-Fermi, qui a été étendu aux températures non nulles par Feynmann et al. [Réf. 13] et par Cowan et Ashkin [Réf. 14]. Les insuffisances de ce modèle nous conduiront à abandonner le traitement semi-classique des électrons. Pour cela, nous passerons à un autre modèle d'atome moyen dans lequel les électrons seront décrits par l'équation de Schrödinger. Afin d'étudier des plasmas de numéro atomique élevé, des corrections relativistes seront apportées. Nous terminerons ce chapitre par la dérivation des formules utilisées pour le calcul des opacités dans le cadre de l'approximation des électrons indépendants.

II.1 Modèle de Thomas-Fermi à température et densité finies

Dans ce modèle, on postule que la distribution des électrons dans l'espace de phase a la forme d'une fonction de Fermi-Dirac locale:

$$f_{T,F}(\vec{r}, \vec{p}) d\vec{r}d\vec{p} = \frac{2}{h^3} \frac{d\vec{r}d\vec{p}}{e^{(E(\vec{r}, \vec{p}) - \mu)/T} + 1}, \quad (\text{II.1.1})$$

où $E(\vec{r}, \vec{p})$ est l'énergie classique d'un électron:

$$E(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} - eV(\vec{r}), \quad (\text{II.1.2})$$

T la température, μ le potentiel chimique, h la constante de Planck et le facteur 2 tient compte des deux orientations de spin possibles. La charge de l'électron est $-e$.

La densité électronique $n(\vec{r}) = \int d^3\vec{p} f_{T,F}(\vec{r}, \vec{p})$ est liée au potentiel par l'équation de Poisson

$$\bar{\nabla}^2 V(\vec{r}) = 4\pi en(\vec{r}). \quad (\text{II.1.3})$$

Les conditions au bord pour l'équation (II.1.3) sont:

$$\begin{aligned} V(\vec{r}) &\rightarrow \frac{Ze}{r} && \text{pour } r = |\vec{r}| \rightarrow 0 \\ V(\vec{r}) &= 0 && \text{pour } |\vec{r}| > r_0 \\ \frac{d}{dr} V(r_0) &= 0, && \end{aligned} \quad (\text{II.1.4})$$

où r_0 est le rayon de la sphère de Wigner-Seitz et n_p est la densité du plasma.

En substituant (II.1.2) dans (II.1.1), l'équation (II.1.3) devient l'équation différentielle non linéaire:

$$\bar{\nabla}^2 V(\vec{r}) = \frac{16\pi^2 e (2mT)^{3/2}}{h^3} I_{1/2} \left(\frac{eV(r) + \mu}{T} \right), \quad (\text{II.1.5})$$

où $I_n(x) = \int_0^\infty \frac{dy y^n}{e^{y-x} + 1}$.

Le potentiel chimique μ est déterminé par la dernière des équations (II.1.4).

II.2 Modèle de l'atome moyen

Le modèle Thomas-Fermi a été largement utilisé dans l'étude des plasmas de haute densité et de température élevée. Pour des densités et des températures plus basses, les effets dus à la dégénérescence partielle des électrons peuvent devenir importants. Il faut alors abandonner le modèle de Thomas-Fermi et résoudre l'équation de Schrödinger pour les électrons (voir [Réf. 15, 16]). Comme nous ne considérons que des plasmas fortement couplés, nous conservons néanmoins le modèle de la cellule ionique sphérique.

Les états électroniques de l'atome moyen sont donc solutions de l'équation de Schrödinger

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \bar{\nabla}^2 - eV_{ac}(\bar{r}) \right) \varphi_i(\bar{r}) = E_i \varphi_i(\bar{r}). \quad (\text{II.2.1})$$

Le potentiel autoconsistant $V_{ac}(\bar{r})$ satisfait à l'équation:

$$eV_{ac}(\bar{r}) = eV_{el}(\bar{r}) + V_{ec}(\bar{r}), \quad (\text{II.2.2})$$

où $V_{el}(\bar{r})$ est la partie électrostatique déterminée par les charges nucléaire et électronique via l'équation de Poisson

$$\bar{\nabla}^2 V_{el}(\bar{r}) = 4\pi en(\bar{r}), \quad (\text{II.2.3})$$

avec les mêmes conditions au bord que pour le modèle de Thomas-Fermi. $V_{ec}(\bar{r})$ est le potentiel d'échange-corrélation. Ce dernier est issu de la théorie fonctionnelle de la densité à température finie telle qu'elle a été proposée par Mermin [Réf. 17], voir aussi [Réf. 18-20]. Pour les calculs pratiques, le potentiel d'échange-corrélation que nous utilisons a été proposé par Dharma-wardana et Perrot [Réf. 8, 21]. Le potentiel chimique μ découle de la condition de neutralité électrique pour la sphère atomique.

Nous posons que la densité électronique est donnée par la relation

$$n(r) = \frac{1}{4\pi} \left\{ \sum_{i \text{ lié}} 2(2l_i + 1) f\left(\frac{E_i - \mu}{T}\right) |y_{n_i, l_i}(r)|^2 + \sum_{l=0}^{\infty} 2(2l + 1) \int_0^{\infty} f(E) |y_{E, l}(r)|^2 dE \right\}, \quad (\text{II.2.4})$$

où le premier terme du membre de droite est la densité d'électrons liés et le deuxième la densité d'électrons libres, $f(x) = (\exp(x) + 1)^{-1}$ est la distribution de Fermi-Dirac.

Nous avons utilisé la décomposition suivante pour les fonctions d'ondes $\varphi_i(\mathbf{r})$

$$\begin{aligned}\varphi_{n,l_i}(\vec{r}) &= y_{n,l_i}(\mathbf{r}) Y_l^{m_l}(\theta, \phi) && \text{pour les états liés} \\ \varphi_{E,l}(\vec{r}) &= y_{E,l}(\mathbf{r}) Y_l^m(\theta, \phi) && \text{pour les états libres,}\end{aligned}\tag{II.2.5}$$

où Y_l^m désignent les harmoniques sphériques. Cette décomposition est toujours possible dans le cas d'un atome à symétrie sphérique. Dans la relation (II.2.4), le facteur 2 tient compte des deux orientations possibles pour le spin. Le facteur $(2l+1)$ provient de la somme sur les nombres quantiques magnétiques m_l , opération qui est effectuée au moyen du théorème de Unsöld [Réf. 22, p.107]

$$\sum_{m_l} Y_l^{*m_l}(\theta, \phi) Y_l^{m_l}(\theta, \phi) = \frac{2l+1}{4\pi},\tag{II.2.6}$$

où l'exposant * désigne le conjugué complexe. Afin d'éviter le calcul des fonctions d'ondes libres, le deuxième terme de l'équation (II.2.4) est souvent remplacé par la densité d'électrons libres issue du modèle de Thomas-Fermi [Réf. 4]

$$n_f(\vec{r}) = \frac{2}{h^3} \int_{E>0} d\vec{p} f\left(\frac{1}{T} \left(\frac{|\vec{p}|^2}{2m} - eV_{ac}(\vec{r}) - \mu \right)\right)\tag{II.2.7}$$

avec

$$E = \frac{|\vec{p}|^2}{2m} - eV_{ac}(\vec{r}).\tag{II.2.8}$$

Le code que nous avons utilisé dans ce travail calcule la densité des électrons libres via l'équation (II.2.4). En pratique on calcule la différence entre une densité constante et celle issue de l'équation (II.2.4). Nous pouvons limiter ainsi la valeur maximale du nombre quantique angulaire l à environ 10 [Réf. 8].

Le taux d'occupation des états électroniques est fixé par la statistique de Fermi-Dirac. C'est l'hypothèse centrale du modèle atomique présenté dans cette section, qui peut être justifiée dans le contexte des ensembles canoniques ou grands canoniques [Réf. 23].

La résolution des équations (II.2.1, II.2.3, II.2.4), avec les conditions au bord (II.1.4), commence par le calcul du potentiel initial $V(\vec{r})$ au moyen du modèle de Thomas-Fermi. Ce potentiel est introduit dans l'équation de Schrödinger (II.2.1). Les fonctions d'ondes ainsi que les énergies propres solutions de cette équation, sont utilisées pour calculer le potentiel chimique ainsi que la densité électronique au moyen de l'équation (II.2.4) et de la condition de neutralité. Cette densité permet alors de déterminer un nouveau potentiel au moyen de l'équation de Poisson (II.2.3). Potentiel qui sera réintroduit dans l'équation de Schrödinger (II.2.1) pour une nouvelle itération.

Afin de déterminer à quelle itération le calcul autoconsistant décrit ci-dessus doit prendre fin, il est nécessaire de définir une mesure de l'autoconsistance. Si $V_i(\vec{r})$ et $V_{i+1}(\vec{r})$ sont les potentiels issus de deux itérations successives, cette mesure prend en général la forme d'un critère sur les valeurs respectives des potentiels $V_i(\vec{r})$ et $V_{i+1}(\vec{r})$ en chaque point de l'espace. On peut par exemple choisir la valeur maximum du rapport $\left| \frac{V_i(\vec{r}) - V_{i+1}(\vec{r})}{V_i(\vec{r})} \right|$ (voir [Réf. 24, p. 4-4] pour d'autres critères). Le calcul autoconsistant est alors arrêté lorsque cette valeur maximum est plus petit qu'une valeur choisie.

II.3 Corrections relativistes

Comme nous l'avons vu dans la section précédente, les états électroniques de l'atome moyen sont solutions de l'équation de Schrödinger (II.2.1). Or les plasmas rencontrés dans l'étude de la fusion par confinement inertiel peuvent avoir un numéro atomique élevé. Il n'est dans ce cas plus possible d'ignorer les effets relativistes.

Pour un atome à un électron, la description correcte des effets relativistes passe par la résolution de l'équation de Dirac pour les états électroniques. Dans le cas où les électrons sont faiblement relativistes et le potentiel, dans lequel ils sont plongés a la symétrie sphérique, l'équation de Dirac se prête à un développement en puissances de v^2 / c^2 . Au premier ordre de ce développement on obtient [Réf. 22, p. 83]

$$\left(-\vec{\nabla}^2 - eV(\vec{r}) - \frac{\alpha^2}{4} (E_i + eV(\vec{r}))^2 + \frac{\alpha^2}{4} \frac{d}{dr} eV(\vec{r}) \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{2}{r} \vec{I} \cdot \vec{s} \right) \right) \phi_i(\vec{r}) = E_i \phi_i(\vec{r}), \quad (\text{II.3.1})$$

où α est la constante de structure fine. La comparaison avec l'équation de Schrödinger (II.2.1) nous montre que l'équation (II.3.1) ne diffère de l'équation de Schrödinger que par l'adjonction de trois termes. Le premier de ces termes est appelé terme de masse-vélocité car il

provient de la variation relativiste de la masse de l'électron. Le deuxième terme est nommé correction de Darwin et le dernier correction spin-orbite.

Les deux hypothèses servant à établir l'équation (II.3.1), sont toutes deux vérifiées, car le potentiel issu du modèle de l'atome moyen a la symétrie sphérique et les transitions électroniques impliquant des électrons fortement liés, donc fortement relativistes, sont très peu probables. Pour l'étude des opacités dans le cadre du modèle de l'atome moyen, il est donc suffisant de substituer l'équation (II.3.1) à l'équation (II.2.1).

Du point de vue pratique, nous calculerons l'atome moyen avec les corrections de masse-vélocité et de Darwin. Le terme de spin-orbite sera introduit au chapitre III.

II.4 Section efficace d'absorption des photons

Dans le cadre de l'approximation dipolaire, la règle d'or de Fermi [Réf. 25-28], nous permet d'obtenir l'expression suivante pour la section efficace d'absorption des photons

$$\sigma_a(\omega) = -\frac{4\pi\omega e^2}{3c} \text{Im} \int d\vec{r} d\vec{r}' \vec{r} \vec{r}' \chi^R(\vec{r}, \vec{r}', \omega), \quad (\text{II.4.1})$$

où $\chi^R(\vec{r}, \vec{r}', \omega)$ est la transformée de Fourier de la polarisation retardée [Réf. 29, §32]

$$\chi^R(\vec{r}, \vec{r}', t - t') = -\frac{i}{\hbar} \text{Tr} \left\{ \hat{P} \left[\hat{n}_H(\vec{r}, t), \hat{n}_H(\vec{r}', t') \right] \right\} \theta(t - t'). \quad (\text{II.4.2})$$

Dans l'équation (II.4.2), Tr désigne l'opération de trace, \hat{P} est l'opérateur statistique, $\hat{n}_H(\vec{r}, t)$ est l'opérateur de densité électronique en représentation de Heisenberg:

$$\hat{n}_H(\vec{r}, t) = e^{\frac{i\hbar t}{\hbar}} \hat{n}(\vec{r}) e^{-\frac{i\hbar t}{\hbar}}, \quad (\text{II.4.3})$$

$\theta(t - t')$ la fonction de Heaviside correspondant au principe de causalité et qui peut être exprimée sous la forme intégrale:

$$\theta(t - t') = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{i\omega(t-t')}}{\omega + i\eta}, \quad (\text{II.4.4})$$

où η est un infinitésimal positif.

Pour un système à l'équilibre thermodynamique, l'opérateur statistique a la forme

$$\hat{P} = \frac{e^{-(\hat{H}-\mu\hat{N})/T}}{\text{Tr} e^{-(\hat{H}-\mu\hat{N})/T}}; \quad (\text{II.4.5})$$

où \hat{H} et \hat{N} sont les opérateurs hamiltonien et nombre d'électrons respectivement.

En substituant (II.4.3) et (II.4.4) dans l'équation (II.4.2), en effectuant l'opération de trace et en insérant l'opérateur identité $\sum_m |m\rangle\langle m|$, la polarisabilité retardée (II.4.2) devient

$$\chi^R(\vec{r}, \vec{r}', t-t') = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{i\omega(t-t')}}{\omega + i\eta} \sum_{n,m} (e^{i(E_n - E_m)(t-t')/\hbar} P_n \langle n | \hat{n}(\vec{r}) | m \rangle \langle m | \hat{n}(\vec{r}') | n \rangle - e^{-i(E_n - E_m)(t-t')/\hbar} P_n \langle n | \hat{n}(\vec{r}') | m \rangle \langle m | \hat{n}(\vec{r}) | n \rangle), \quad (\text{II.4.6})$$

où P_n désigne les éléments diagonaux de l'opérateur statistique \hat{P} . Le changement de variable $\omega' = \omega \pm (E_m - E_n)$, où le signe plus concerne le premier terme de la somme et le signe moins le deuxième, nous permet d'écrire (II.4.6) de la façon suivante:

$$\chi^R(\vec{r}, \vec{r}', t-t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\omega(t-t')} \sum_{n,m} \left(\frac{P_n \langle n | \hat{n}(\vec{r}) | m \rangle \langle m | \hat{n}(\vec{r}') | n \rangle}{\hbar\omega - (E_m - E_n) + i\eta} - \frac{P_n \langle n | \hat{n}(\vec{r}') | m \rangle \langle m | \hat{n}(\vec{r}) | n \rangle}{\hbar\omega + (E_m - E_n) + i\eta} \right). \quad (\text{II.4.7})$$

On reconnaît dans l'équation (II.4.7) la transformée de Fourier de la polarisabilité retardée en fonction de la fréquence

$$\chi^R(\vec{r}, \vec{r}', \omega) = \sum_{n,m} \left(\frac{P_n \langle n | \hat{n}(\vec{r}) | m \rangle \langle m | \hat{n}(\vec{r}') | n \rangle}{\hbar\omega - (E_m - E_n) + i\eta} - \frac{P_n \langle n | \hat{n}(\vec{r}') | m \rangle \langle m | \hat{n}(\vec{r}) | n \rangle}{\hbar\omega + (E_m - E_n) + i\eta} \right). \quad (\text{II.4.8})$$

Considérons, pour l'instant, que les électrons de l'atome moyen peuvent être traités comme des particules indépendantes. La polarisabilité retardée (II.4.8) devient alors [Réf. 29, §12, §32]

$$\chi_0^R(\vec{r}, \vec{r}', \omega) = 2 \sum_{i,j} \frac{(f_i - f_j) \varphi_i^*(\vec{r}) \varphi_j(\vec{r}) \varphi_j^*(\vec{r}') \varphi_i(\vec{r}')}{\hbar\omega - (E_j - E_i) + i\eta}, \quad (\text{II.4.9})$$

où $f_i = f((E_i - \mu)/T)$ et f est la distribution de Fermi-Dirac. Les états $\varphi_i(\vec{r})$ sont les fonctions propres de l'atome moyen et le facteur 2 provient des deux orientations de spin. La formule de Plemelj

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{1}{x + i\eta} = \frac{P}{x} - i\pi\delta(x), \quad (\text{II.4.10})$$

où P désigne la partie principale, permet de calculer la partie imaginaire de (II.4.9)

$$\text{Im } \chi_0^R(\vec{r}, \vec{r}', \omega) = -\pi \sum_{i,j} 2 (f_i - f_j) \varphi_i^*(\vec{r}) \varphi_j(\vec{r}) \varphi_j^*(\vec{r}') \varphi_i(\vec{r}') \delta(\hbar\omega - (E_j - E_i)). \quad (\text{II.4.11})$$

La propriété

$$(f_i - f_j) \delta(\hbar\omega - (E_j - E_i)) = (1 - e^{-\hbar\omega/T}) f_i (1 - f_j) \delta(\hbar\omega - (E_j - E_i)), \quad (\text{II.4.12})$$

appliquée à la relation (II.4.11), nous donne finalement

$$\text{Im } \chi_0^R(\vec{r}, \vec{r}', \omega) = -2\pi (1 - e^{-\hbar\omega/T}) \sum_{i,j} f_i (1 - f_j) \varphi_i^*(\vec{r}) \varphi_j(\vec{r}) \varphi_j^*(\vec{r}') \varphi_i(\vec{r}') \delta(\hbar\omega - (E_j - E_i)). \quad (\text{II.4.13})$$

En substituant (II.4.13) dans (II.4.1), on obtient alors la section efficace d'absorption des photons dans l'approximation des électrons indépendants

$$\sigma_s(\omega) = \frac{8\pi^2 \omega e^2}{3c} (1 - e^{-\hbar\omega/T}) \sum_{i,j} f_i (1 - f_j) \left| \langle \varphi_i | \vec{r} | \varphi_j \rangle \right|^2 \delta(\hbar\omega - (E_j - E_i)). \quad (\text{II.4.14})$$

Notons que (II.4.14) contient déjà l'émission stimulée. La somme sur i et j dans (II.4.14), parcourt l'ensemble des états liés et libres de l'atome moyen. Cette somme peut être décomposée en trois termes de la façon suivante:

$$\sigma_s(\omega) = \sigma_s^{bb}(\omega) + \sigma_s^{bf}(\omega) + \sigma_s^{ff}(\omega). \quad (\text{II.4.15})$$

Les exposants b et f indiquent à quelle partie du spectre (b : lié et f : libre) appartiennent les états initiaux i et finaux f de la somme figurant dans l'équation (II.4.14). La relation (II.4.15), nous permet donc d'introduire la notion de transitions lié-lié, lié-libre et libre-libre et les

sections efficaces d'absorption du même nom. Les transitions lié-lié sont associées à la photoabsorption, les transitions lié-libre à la photoinisation et les transitions libre-libre au bremsstrahlung inverse.

Le calcul des intégrales angulaires [Réf. 30 p. 254], nous donne

$$\begin{aligned} \sum_{m_j} \left| \langle \varphi_i | \vec{r} | \varphi_j \rangle \right|^2 &= \frac{l_i}{2l_i + 1} \left| \langle y_{n_i, l_i}(r) | r | y_{n_j, l_i-1}(r) \rangle \right|^2 \delta_{l_i, l_j+1} + \\ &\quad \frac{l_i + 1}{2l_i + 1} \left| \langle y_{n_i, l_i}(r) | r | y_{n_j, l_i+1}(r) \rangle \right|^2 \delta_{l_i, l_j-1}. \end{aligned} \quad (\text{II.4.16})$$

La section efficace d'absorption (II.4.14), la définition (II.4.15), ainsi que la propriété (II.4.16) conduisent finalement aux relations suivantes [Réf. 31]:

$$\begin{aligned} \sigma_a^{bb}(\omega) &= \frac{8\pi^2 \omega e^2}{3c} (1 - e^{-\hbar\omega/T}) \sum_{i,j \neq i} (l_i \delta_{l_i, l_j+1} + l_j \delta_{l_i, l_j-1}) f\left(\frac{E_i - \mu}{T}\right) \\ &\quad \left(1 - f\left(\frac{E_i + \hbar\omega - \mu}{T}\right)\right) \left| \langle y_{n_i, l_i}(r) | r | y_{n_j, l_j}(r) \rangle \right|^2 \delta(\hbar\omega - (E_j - E_i)), \end{aligned} \quad (\text{II.4.17})$$

$$\begin{aligned} \sigma_a^{bf}(\omega) &= \frac{8\pi^2 \omega e^2}{3c} (1 - e^{-\hbar\omega/T}) \sum_{i \neq i} f\left(\frac{E_i - \mu}{T}\right) \left(1 - f\left(\frac{E_i + \hbar\omega - \mu}{T}\right)\right) \\ &\quad \left(l_i \left| \langle y_{n_i, l_i}(r) | r | y_{E_i + \hbar\omega, l_i-1}(r) \rangle \right|^2 + (l_i + 1) \left| \langle y_{n_i, l_i}(r) | r | y_{E_i + \hbar\omega, l_i+1}(r) \rangle \right|^2 \right), \end{aligned} \quad (\text{II.4.18})$$

$$\begin{aligned} \sigma_a^{ff}(\omega) &= \frac{8\pi^2 \omega e^2}{3c} (1 - e^{-\hbar\omega/T}) \sum_{l=0}^{\infty} \int_0^{\infty} dE' f\left(\frac{E' - \mu}{T}\right) \left(1 - f\left(\frac{E' + \hbar\omega - \mu}{T}\right)\right) \\ &\quad \left(l \left| \langle y_{E', l}(r) | r | y_{E' + \hbar\omega, l-1}(r) \rangle \right|^2 + (l+1) \left| \langle y_{E', l}(r) | r | y_{E' + \hbar\omega, l+1}(r) \rangle \right|^2 \right). \end{aligned} \quad (\text{II.4.19})$$

CHAPITRE III

Configurations électroniques et section efficace d'absorption des photons

Nous nous proposons d'abandonner l'approximation des électrons indépendants utilisée au chapitre précédent et de prendre en considération les différents états d'ionisation et d'excitation des atomes du plasma. Nous allons aborder ce problème au moyen de l'approche DCA [Réf. 1-3].

Dans de cette approche, nous verrons comment la section efficace d'absorption des photons peut être exprimée en fonction de la probabilité et de l'énergie des configurations électroniques. Pour cela nous commencerons par définir une base dans laquelle nous pourrions développer les états électroniques d'un atome. Nous verrons alors sous quelles hypothèses ces états électroniques peuvent être projetés sur la base associée à chaque configuration électronique. Nous clôturerons le chapitre avec le calcul de l'énergie moyenne de ces configurations.

III.1 Base des états électroniques d'un atome

Soit $\Xi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$, la fonction d'onde des électrons atomiques où \tilde{N} est le nombre total d'électrons. Cette fonction d'onde peut être développée de la façon suivante (voir [Réf. 4, p. 16])

$$\Xi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \sum_{v_1 \dots v_n=0}^1 \tilde{f}(v_1, \dots, v_n) \Phi_{v_1 \dots v_n}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N), \quad (\text{III.1.1})$$

avec

$$\Phi_{v_1 \dots v_N}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma} (-1)^{S_{\sigma}} \varphi_{\sigma(1)}(\vec{r}_1) \dots \varphi_{\sigma(N)}(\vec{r}_N). \quad (\text{III.1.2})$$

Les entiers v_1 à v_N désignent le nombre d'électrons dans chacun des états à un électron $\varphi_1(\vec{r}_1)$ à $\varphi_N(\vec{r}_N)$. Le principe de Pauli implique que ces nombres ne peuvent valoir que zéro ou un. Les facteurs $\tilde{f}(v_1, \dots, v_N)$ sont les coefficients du développement de l'état $\Xi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ dans la base (III.1.2). La somme sur les σ dans la définition (III.1.2) parcourt l'ensemble des permutations possibles pour les N électrons parmi les états $\varphi_1(\vec{r}_1)$ à $\varphi_N(\vec{r}_N)$. Cette somme permet de rendre $\Xi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ antisymétrique sous l'échange de deux électrons. S_{σ} est la signature de la permutation σ . Les termes $\Phi_{v_1 \dots v_N}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ sont appelés déterminants de Slater [Réf. 5]. Le facteur $1/(N!)^{1/2}$ dans (III.1.2) assure que ces derniers sont normalisés à un.

Notons que le développement (III.1.1) concerne les états à un électron appartenant au spectre lié et libre. Du point de vue pratique, il est évidemment hors de question de traiter de façon exacte la somme sur tous les états libres. Si nous supposons que les corrélations entre les électrons liés et libres sont faibles, il est possible de considérer séparément ces deux populations électroniques. Comme nous le verrons dans le chapitre IV (voir aussi [Réf. 6]), il est alors possible de traiter les électrons libres de façon statistique.

Le développement (III.1.1) peut donc être restreint aux états liés

$$\Xi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \sum_{v_1 \dots v_{\eta} \neq 0} \tilde{f}(v_1, \dots, v_{\eta}) \Phi_{v_1 \dots v_{\eta}}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \quad (\text{III.1.3})$$

où

$$\Phi_{v_1 \dots v_{\eta}}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma} (-1)^{S_{\sigma}} \varphi_{\sigma(1)}(\vec{r}_1) \dots \varphi_{\sigma(N)}(\vec{r}_N). \quad (\text{III.1.4})$$

Dans (III.1.3) η désigne le nombre d'états liés et N est le nombre d'électrons liés. Les états électroniques $\varphi_1(\vec{r}_1) \dots \varphi_{\eta}(\vec{r}_{\eta})$ seront, pour tout ce travail, les états liés de l'atome moyen.

Dans le cadre de l'atome moyen, les états à un électron sont entièrement déterminés par les nombres quantiques principal n , orbital l , magnétique m_l et de spin m_s . Comme dans tout modèle du type champ central, les énergies des états électroniques de l'atome moyen ne

dépendent que des nombres quantiques n et l . On appelle une couche, l'ensemble des états électroniques qui ont le même nombre quantique principal et une sous-couche l'ensemble des états électroniques qui ont les mêmes nombres quantiques principal et orbital.

Pour un nombre quantique l donné, il existe $2l+1$ états différents, caractérisés par leur nombre quantique magnétique m_l . Comme l'opérateur de spin s_z a deux valeurs propres $1/2$ et $-1/2$, une sous-couche (nl) possède $2(2l+1)$ états différents. Ainsi, en vertu du principe de Pauli, une sous-couche (nl) ne peut contenir au maximum que $4l+2$ électrons.

Dans l'équation (III.1.3), nous effectuons la somme sur les nombres d'occupation $v_1 \dots v_\eta$ des états à un électron. Comme nous allons introduire la notion de configuration électronique, il est utile d'exprimer cette somme en fonction des nombres d'occupations $\rho_1 \dots \rho_\eta$ des sous-couches électroniques, où η est le nombre de ces sous-couches. Les équations (III.1.3) et (III.1.4) deviennent

$$\Xi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \sum_{\rho_1=0}^{2(2l_1+1)} \dots \sum_{\rho_\eta=0}^{2(2l_\eta+1)} \sum_{i=1}^{N_S^{\rho_1 \dots \rho_\eta}} f(\rho_1, \dots, \rho_\eta, i) \Phi_{\rho_1 \dots \rho_\eta, i}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N), \quad \text{où } \sum_{i=1}^{\eta} \rho_i = N \quad (\text{III.1.5})$$

$$\Phi_{\rho_1 \dots \rho_\eta, i}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma} (-1)^{S_\sigma} \varphi_{\sigma(1)}(\vec{r}_1) \dots \varphi_{\sigma(N)}(\vec{r}_N). \quad (\text{III.1.6})$$

Les facteurs $f(\rho_1, \dots, \rho_\eta, i)$ sont les coefficients du développement de la fonction d'onde $\Xi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ dans la base formée par les déterminants $\Phi_{\rho_1 \dots \rho_\eta, i}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$. La somme sur i parcourt toutes les valeurs possibles des nombres quantiques magnétique et de spin pour les ρ_i électrons de chaque sous-couche. Le nombre total $N_S^{\rho_1 \dots \rho_\eta}$ de ces possibilités est

$$N_S^{\rho_1 \dots \rho_\eta} = \frac{(4l_1 + 2)!}{(4l_1 + 2 - \rho_1)! \rho_1!} \dots \frac{(4l_\eta + 2)!}{(4l_\eta + 2 - \rho_\eta)! \rho_\eta!}. \quad (\text{III.1.7})$$

La somme sur σ dans l'équation (III.1.6) parcourt toutes les permutations possibles des N électrons parmi les N fonctions d'ondes définies par les indices $\rho_1, \dots, \rho_\eta, i$.

III.2 Configurations électroniques et mélange de configurations

Nous appelons configuration électronique l'ensemble des nombres d'occupation $\rho_1 \dots \rho_\eta$. Si nous désirons indiquer les sous-couches par rapport auxquelles sont définies les configurations électroniques, nous adopterons la notation suivante:

$$(n_1 l_1)^{\rho_1} (n_2 l_2)^{\rho_2} \dots (n_q l_q)^{\rho_q}, \quad \text{où } \sum_{i=1}^q \rho_i = N \text{ et } q \leq \eta. \quad (\text{III.2.1})$$

Soit n_c l'indice parcourant l'ensemble des configurations électroniques. Avec cette notation, les relations (III.1.5-7) deviennent

$$\Xi(\bar{r}_1, \dots, \bar{r}_N) = \sum_{n_c} \sum_{i=1}^{N_S^{n_c}} f(n_c, i) \Phi_{n_c, i}(\bar{r}_1, \dots, \bar{r}_N), \quad (\text{III.2.2})$$

$$\Phi_{n_c, i}(\bar{r}_1, \dots, \bar{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma} (-1)^{S_{\sigma}} \Phi_{\sigma(1)}^{n_c, i}(\bar{r}_1) \dots \Phi_{\sigma(N)}^{n_c, i}(\bar{r}_N), \quad (\text{III.2.3})$$

$$N_S^{n_c} = \frac{(4l_1 + 2)!}{(4l_1 + 2 - \rho_1)! \rho_1!} \dots \frac{(4l_\eta + 2)!}{(4l_\eta + 2 - \rho_\eta)! \rho_\eta!}. \quad (\text{III.2.4})$$

Comme le montre la relation (III.2.2), un état à N électrons est, en principe, un mélange de différentes configurations électroniques. Si nous ne retenons qu'une valeur de n_c ou en d'autres termes, si nous supposons que l'état à N électrons appartient à une configuration électronique particulière, les déterminants de Slater (III.2.3) forment une base. Nous disons alors qu'il n'y a pas de mélange de configurations.

III.3 Section efficace d'absorption des photons

Reprenons la relation (II.4.1)

$$\sigma_s(\omega) = -\frac{4\pi\omega e^2}{3c} \text{Im} \int d\bar{r} d\bar{r}' \bar{r} \bar{r}' \chi^R(\bar{r}, \bar{r}', \omega), \quad (\text{III.3.1})$$

où la polarisabilité retardée est donnée par l'équation (II.4.8)

$$\chi^R(\bar{r}, \bar{r}', \omega) = \sum_{n, m} \left(\frac{P_n \langle n | \hat{n}(\bar{r}) | m \rangle \langle m | \hat{n}(\bar{r}') | n \rangle}{\hbar\omega - (E_m - E_n) + i\eta} - \frac{P_n \langle n | \hat{n}(\bar{r}') | m \rangle \langle m | \hat{n}(\bar{r}) | n \rangle}{\hbar\omega + (E_m - E_n) + i\eta} \right) \quad (\text{III.3.2})$$

où P_n sont les éléments diagonaux de l'opérateur statistique (II.4.5)

$$P_n = \frac{e^{-(E_n - \mu N_n)/T}}{\text{Tr} e^{-(E_n - \mu N_n)/T}}. \quad (\text{III.3.3})$$

Grâce à la relation de Plemelj (II.4.10) et à l'échange des indices n et m dans le deuxième terme de la somme de l'équation (III.3.2), on obtient la partie imaginaire de la polarisabilité retardée (III.3.2)

$$\text{Im} \chi^R(\vec{r}, \vec{r}', \omega) = -\pi \sum_{n,m} (P_n - P_m) \langle n | \hat{n}(\vec{r}) | m \rangle \langle m | \hat{n}(\vec{r}') | n \rangle \delta(\hbar\omega - (E_m - E_n)). \quad (\text{III.3.4})$$

La propriété $P_m \delta(\hbar\omega - (E_m - E_n)) = e^{-\hbar\omega/T} P_n \delta(\hbar\omega - (E_m - E_n))$, où on a posé que $N_n = N_m$, permet d'écrire (III.3.4) sous la forme

$$\text{Im} \chi^R(\vec{r}, \vec{r}', \omega) = -\pi (1 - e^{-\hbar\omega/T}) \sum_{n,m} P_n \langle n | \hat{n}(\vec{r}) | m \rangle \langle m | \hat{n}(\vec{r}') | n \rangle \delta(\hbar\omega - (E_m - E_n)). \quad (\text{III.3.5})$$

Avec la polarisabilité (III.3.5), la section efficace d'absorption (III.3.1) devient

$$\sigma_a(\omega) = \frac{4\pi^2 \omega e^2}{3c} (1 - e^{-\hbar\omega/T}) \int d\vec{r} d\vec{r}' \sum_{n,m} P_n \langle n | \hat{n}(\vec{r}) \cdot \vec{r} | m \rangle \langle m | \hat{n}(\vec{r}') \cdot \vec{r}' | n \rangle \delta(\hbar\omega - (E_m - E_n)). \quad (\text{III.3.6})$$

Il est utile de comparer cette équation avec la relation (II.4.14) dérivée au chapitre précédent. La relation (II.4.14) exprime la section efficace d'absorption des photons pour un atome constitué d'électrons indépendants. Ce sont donc les états propres à un électron de l'atome moyen qui entrent dans la relation (II.4.14). Dans l'équation (III.3.6), par contre, ce sont les états à N électrons de l'atome qui sont considérés.

Si nous supposons qu'il n'y a pas de mélange de configurations, la relation (III.3.6) peut s'écrire sous la forme suivante:

$$\sigma_a^{bb}(\omega) = \frac{4\pi^2 \omega e^2}{3c} (1 - e^{-\hbar\omega/T}) \sum_{n_c} P_{n_c} \sum_{i \in n_c} \frac{P_{n_c, i}}{P_{n_c}} \sum_{m_c} \sum_{j \in m_c} \int d\vec{r} d\vec{r}' \vec{r} \cdot \vec{r}' \langle n_c, i | \hat{n}(\vec{r}) | m_c, j \rangle \langle m_c, j | \hat{n}(\vec{r}') | n_c, i \rangle \delta(\hbar\omega - (E_{m_c, j} - E_{n_c, i})). \quad (\text{III.3.7})$$

Dans l'équation (III.3.7), n_c parcourt les configurations électroniques initiales et m_c les configurations électroniques finales. L'indice i parcourt tous les états électroniques à N électrons appartenant à la configuration n_c et l'indice j tous les états électroniques à N électrons appartenant à la configuration m_c . Notons que le nombre P_{n_c} , qui sera par la suite interprété comme la probabilité de la configuration électronique n_c , a été introduit ici de manière formelle.

Remarquons que la section efficace d'absorption des photons a été notée $\sigma_s^{bb}(\omega)$. L'exposant bb a été ajouté car à l'équation (III.3.7), seuls les électrons liés sont considérés. Dans ce travail, les contributions dues aux transitions lié-libre et libre-libre (cf. (II.4.15)) seront toujours calculées à l'aide des relations (II.4.18) et (II.4.19) [Réf. 7].

L'opérateur densité $\hat{n}(\vec{r})$ [Réf. 4, p. 20] est exprimé en représentation de position de la manière suivante:

$$n(\vec{r}) = \sum_{k=1}^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_k). \quad (\text{III.3.8})$$

A l'aide de (III.3.8) et de la propriété $\langle n_c, i | \hat{n}(\vec{r}) | m_c, j \rangle = \langle m_c, j | \hat{n}(\vec{r}) | n_c, i \rangle^*$ (où l'exposant * désigne le conjugué complexe), l'équation (III.3.7) devient

$$\sigma_s^{bb}(\omega) = \frac{4\pi^2 \omega e^2}{3c} (1 - e^{-\hbar\omega/\Gamma}) \sum_{n_c} P_{n_c} \sum_{i \in n_c} \frac{P_{n_c, i}}{P_{n_c}} \sum_{m_c} \sum_{j \in m_c} \left| \langle n_c, i | \sum_{k=1}^N \vec{r}_k | m_c, j \rangle \right|^2 \delta(\hbar\omega - (E_{m_c, j} - E_{n_c, i})). \quad (\text{III.3.9})$$

Nous avons introduit dans l'équation (III.3.7) la probabilité $P_{n_c, i}$ et l'énergie $E_{n_c, i}$ des états électroniques $|n_c, i\rangle$. Les probabilités $P_{n_c, i}$ sont les valeurs propres de l'opérateur statistique. Les probabilités P_{n_c} seront définies et calculées au chapitre IV.

Nous obtenons la section efficace d'absorption des photons dans le cadre du modèle DCA à l'aide des hypothèses suivantes:

- a) Les énergies des états $|n_c, i\rangle$ sont faiblement dispersées autour de la valeur de l'énergie moyenne de la configuration électronique n_c

$$E_{\text{moy}}^{n_c} = \frac{1}{N_S^{n_c}} \sum_{i=1}^{N_S^{n_c}} \langle \Phi_{n_c,i} | H | \Phi_{n_c,i} \rangle. \quad (\text{III.3.10})$$

Nous reconnaissons la trace de l'opérateur hamiltonien H dans la base des déterminants de Slater (III.2.3) associée à la configuration électronique n_c . La valeur de la trace d'un opérateur ne dépendant pas de la base choisie, cette définition assure donc une valeur unique à l'énergie moyenne.

b) Les états $|n_c, i\rangle$ sont équiprobables. Les rapports $P_{n_c,i}/P_{n_c}$ sont alors égaux à $1/N_S^{n_c}$.

L'hypothèse a) nous autorise à remplacer les énergies $E_{n_c,i}$ et $E_{m_c,j}$ par les valeurs moyennes $E_{\text{moy}}^{n_c}$ et $E_{\text{moy}}^{m_c}$, respectivement. La distribution de Dirac figurant dans l'équation (III.3.9) peut ainsi être mise en évidence avant la somme sur i et j . Cette dernière remarque et l'approximation b) appliquées à l'équation (III.3.9) donnent

$$\sigma_a^{\text{bb}}(\omega) = \frac{4\pi^2 \omega e^2}{3c} (1 - e^{-\hbar\omega/T}) \sum_{n_c} P_{n_c} \sum_{m_c} \delta(\hbar\omega - (E_{\text{moy}}^{m_c} - E_{\text{moy}}^{n_c})) \frac{1}{N_S^{n_c}} \sum_{i \in n_c} \sum_{j \in m_c} \left| \langle n_c, i | \sum_{k=1}^N \vec{r}_k | m_c, j \rangle \right|^2. \quad (\text{III.3.11})$$

La somme sur i et j dans l'équation (III.3.11) n'est rien d'autre que la somme sur les états finaux et la moyenne sur les états initiaux de l'opérateur $\sum \vec{r}_k$. On peut montrer [Réf. 8, p. 426], que cette somme est non nulle uniquement si la configuration électronique n_c et m_c ont le même nombre d'électrons dans toutes leurs sous-couches sauf deux. Si on désigne par r et s ces deux sous-couches, les nombres d'occupation $\rho_i^{n_c}$ et $\rho_i^{m_c}$ ($i = 1, \eta$), de ces dernières, (voir équation (III.2.1)) doivent satisfaire à la condition $\rho_r^{m_c} = \rho_r^{n_c} - 1$ et $\rho_s^{m_c} = \rho_s^{n_c} + 1$, avec $\rho_i^{n_c} = \rho_i^{m_c}$ si $i \neq r, s$. On a alors l'égalité

$$\frac{1}{N_S^{n_c}} \sum_{i \in n_c} \sum_{j \in m_c} \left| \langle n_c, i | \sum_{k=1}^N \vec{r}_k | m_c, j \rangle \right|^2 = \frac{2\rho_r(4l_s + 3 - \rho_s)}{(4l_r + 2)(4l_s + 2)} (\delta_{l_r, l_s + 1} l_r + \delta_{l_r, l_s - 1} l_s) \left| \langle y_{n_c, l_r}(r) | r | y_{m_c, l_s}(r) \rangle \right|^2. \quad (\text{III.3.12})$$

Nous retrouvons donc les éléments matriciels $\left| \langle y_{n_c, l_r}(r) | r | y_{m_c, l_s}(r) \rangle \right|^2$ que nous avons déjà rencontré dans le modèle de l'atome à un électron. Nous pouvons donc adopter la terminologie de ce modèle et parler de la transition d'un électron entre les états à un électron

$\varphi_r(\vec{r})$ et $\varphi_s(\vec{r})$. ρ_r désigne alors le nombre d'électrons dans l'état r avant la transition et ρ_s le nombre d'électrons dans l'état s après la transition.

Grâce à la relation (III.3.12), l'équation (III.3.11) devient

$$\sigma_r^{sr}(\omega) = \frac{8\pi^2\omega e^2}{3c} (1 - e^{-\hbar\omega/\pi}) \sum_{n_c} P_{n_c} \sum_{n_s} \frac{\rho_r(4l_r + 3 - \rho_r)}{(4l_r + 2)(4l_r + 2)} (l_r \delta_{l_r, l_s+1} + l_s \delta_{l_r, l_s-1}) \left| \langle y_{n_s, l_s}(r) | r | y_{n_r, l_r}(r) \rangle \right|^2 \delta(\hbar\omega - (E_{n_s}^{m_s} - E_{n_r}^{m_r})). \quad (\text{III.3.13})$$

Il est intéressant de comparer les résultats (III.3.13) et (II.4.17). Premièrement, nous constatons que les distributions de Fermi-Dirac apparaissant dans (II.4.17) ont été remplacées par la probabilité de la configuration électronique initiale P_{n_c} et par un facteur comprenant le taux d'occupation des états électroniques de départ et d'arrivée de la transition. Deuxièmement, les énergies à un électron de la relation (II.4.17) ont été remplacées par l'énergie moyenne des configurations électroniques.

III.4 Energie moyenne des configurations électroniques

Nous désirons inclure dans notre hamiltonien les effets relativistes ainsi que les interactions entre les électrons. Ainsi qu'au chapitre II, les effets relativistes seront traités au moyen des termes de masse-vélocité, de Darwin et de spin-orbite (cf. section II.3). Nous obtenons alors l'hamiltonien à N électrons suivant:

$$H = \sum_{i=1}^N \left(-\nabla_i^2 + 2Z/r_i - \frac{\alpha^2}{4} (E + eV(r_i))^2 + \frac{\alpha^2}{4} \frac{d}{dr_i} eV(r_i) \frac{\partial}{\partial r_i} + \frac{\alpha^2}{2} \frac{1}{r_i} \frac{d}{dr_i} eV(r_i) (\vec{l}_i \cdot \vec{s}_i) + \sum_{j>i=1}^N 2/r_{ij} \right). \quad (\text{III.4.1})$$

où E désigne les énergies propres, $r_{ij} = 1/|\vec{r}_i - \vec{r}_j|$, les autres notations étant identiques à celles de l'équation (II.3.1).

Avec l'hamiltonien (III.4.1), l'énergie moyenne (III.3.10) s'écrit [Réf. 8, p. 160]

$$\begin{aligned}
E_{\text{moy}}^{n_e} &= \sum_{i=1}^N \langle i | -\nabla_i^2 | i \rangle_{\text{moy}} + \sum_{i=1}^N \langle i | 2Z/r_i | i \rangle_{\text{moy}} \\
&+ \sum_{i=1}^N \langle i | -\frac{\alpha^2}{4} (E + eV(r_i))^2 + \frac{\alpha^2}{4} \frac{d}{dr_i} eV(r_i) \frac{\partial}{\partial r_i} + \frac{\alpha^2}{2} \frac{1}{r_i} \frac{d}{dr_i} eV(r_i) (\vec{l}_i \cdot \vec{s}_i) | i \rangle_{\text{moy}} \\
&+ \sum_{i < j}^N \left(\langle ij | 2/r_{ij} | ij \rangle_{\text{moy}} - \langle ij | 2/r_{ij} | ji \rangle_{\text{moy}} \right) \\
&= \sum_{i=1}^N (E_{\text{cin}}^i + E_{\text{noy}}^i + E_{\text{rel}}^i + \sum_{i \neq j}^N E^{ij}). \tag{III.4.2}
\end{aligned}$$

Les indices i et j parcourent l'ensemble des électrons de la configuration. E_{cin}^i est l'énergie cinétique moyenne de l'électron i , E_{noy}^i l'énergie moyenne d'interaction de ce même électron avec le noyau, E_{rel}^i la correction moyenne due aux effets relativistes et E^{ij} la contribution moyenne d'échange provenant de l'interaction entre les deux électrons i et j .

Si nous multiplions à gauche l'équation (II.3.1) par la fonction d'onde $\varphi_i(\vec{r})$ et que nous intégrons sur \vec{r} , nous avons l'égalité suivante:

$$E_{\text{cin}}^i + E_{\text{noy}}^i + E_{\text{rel}}^i = \int_0^\infty dr r^2 y_{n_i, l_i}(r) \left(\frac{2Z}{r} + eV(r) \right) y_{n_i, l_i}(r). \tag{III.4.3}$$

Remarquons que le potentiel $eV(r)$ comprend l'effet des électrons libres. La relation (III.4.3) n'est donc vraie que dans la mesure où cet effet est négligeable.

Pour la contribution due aux interactions entre électrons, nous devons utiliser l'expansion du potentiel $2/r_{ij}$ en polynômes de Legendre

$$\frac{2}{r_{ij}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} P_k(\cos \omega), \tag{III.4.4}$$

où $r_{<}$ et $r_{>}$ désignent respectivement la plus petite et la plus grande des deux valeurs r_i et r_j . ω est l'angle entre les deux vecteurs \vec{r}_i et \vec{r}_j . En utilisant le théorème d'addition des harmoniques sphériques [Réf. 8, pp. 44-48], l'expression (III.4.4) s'écrit aussi:

$$\frac{2}{r_{ij}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} \frac{4\pi}{2k+1} \sum_{q=-k}^k Y_k^{*q}(\theta_i, \varphi_i) Y_k^q(\theta_j, \varphi_j), \tag{III.4.5}$$

où (θ_i, φ_i) et (θ_j, φ_j) sont les positions angulaires des deux électrons. Les éléments matriciels de l'opérateur (III.4.5) s'expriment alors de la façon suivante [Réf. 8, p. 162]:

$$\begin{aligned} \langle rs|2/r_{ij}|tu\rangle &= \delta_{m_r, m_s} \delta_{m_t, m_u} \sum_{k=0}^{\infty} R^k(rs; tu) \\ &= \sum_{q=-k}^k \delta_{q, m_t - m_r} \delta_{q, m_u - m_s} (-1)^q c^k(l_r, m_r, l_t, m_t) c^k(l_s, m_s, l_u, m_u), \end{aligned} \quad (\text{III.4.6})$$

où les coefficients c^k sont définis au moyen des symboles $3j$ de Wigner [Réf. 8, p. 142] de la manière suivante

$$\begin{aligned} \delta_{q, m - m'} c^k(lm, l'm') &\equiv (-1)^m \sqrt{(2l+1)(2l'+1)} \begin{pmatrix} 1 & k & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & k & l' \\ -m & q & m' \end{pmatrix} \\ &= \left(\frac{4\pi}{2k+1} \right)^{1/2} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi d\theta \sin\theta d\varphi Y_l^{*m}(\theta, \varphi) Y_k^q(\theta, \varphi) Y_{l'}^{m'}(\theta, \varphi), \end{aligned} \quad (\text{III.4.7})$$

et les R^k

$$R^k(rs; tu) = \int_0^\infty \int_0^\infty dr_i dr_j r_i^2 r_j^2 \frac{2r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} y_{n_r, l_r}(r_i) y_{n_s, l_s}(r_j) y_{n_t, l_t}(r_i) y_{n_u, l_u}(r_j). \quad (\text{III.4.8})$$

Les éléments matriciels E_{ij} de l'interaction entre électrons sont des cas particuliers des éléments (III.4.8). Le terme direct vaut

$$\langle ij|2/r_{12}|ij\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} F^k(ij) c^k(l_i, m_i, l_i, m_i) c^k(l_j, m_j, l_j, m_j), \quad F^k(ij) = R^k(ij; ij), \quad (\text{III.4.9})$$

alors que le terme d'échange est donné par

$$\langle ij|2/r_{12}|ji\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} G^k(ij) \left[c^k(l_i, m_i, l_j, m_j) \right]^2, \quad G^k(ij) = R^k(ij; ji). \quad (\text{III.4.10})$$

Les intégrales F^k et G^k sont désignées dans la littérature sous le nom d'intégrales de Slater [Réf. 8]. Afin d'obtenir l'énergie moyenne d'une configuration électronique, il nous reste encore à calculer la valeur moyenne des éléments matriciels (III.4.9) et (III.4.10). En effectuant ce calcul [Réf. 8], on est amené à distinguer les cas où les deux électrons

appartiennent ou non à la même sous-couche. Dans le premier cas la valeur moyenne du terme d'échange vaut

$$E^{ii} = F^0(ii) - \frac{2l_i + 1}{4l_i + 1} \sum_{k>0} \begin{pmatrix} l_i & k & l_i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 F^k(ii) \quad (\text{III.4.11})$$

et dans le second cas

$$E^{ij} = F^0(ij) - \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{\infty} \begin{pmatrix} l_i & k & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 G^k(ij). \quad (\text{III.4.12})$$

L'énergie moyenne d'une configuration électronique est donc complètement définie par les relations (III.4.3) et (III.4.11-12) où figurent les éléments matriciels contenant les fonctions d'ondes radiales issues du modèle de l'atome moyen.

III.5 Différence d'énergie due à la promotion d'un électron

A la relation (III.3.13), nous constatons que la configuration électronique m_c est construite à partir de la configuration électronique n_c en retirant un électron de la sous-couche $n_r l_r$ pour l'ajouter dans la sous-couche $n_s l_s$. Afin d'obtenir la différence d'énergie entre ces deux configurations électroniques, nous pourrions calculer, puis soustraire, leurs énergies moyennes. Cette opération est réalisée très souvent pour le calcul de la section efficace d'absorption. Du point de vue numérique, il est donc intéressant de la rendre aussi rapide que possible. Pour cela, nous allons calculer algébriquement la différence d'énergie entre ces deux configurations.

Soit $\Delta E = E_{\text{moy}}^{m_c} - E_{\text{moy}}^{n_c}$ la différence d'énergie que nous calculons. Il est utile d'introduire les notations suivantes:

$$A(i) = \int_0^{\infty} dr r^2 y_{n_i, l_i}^*(r) \left(\frac{2Z}{r} + eV(r) \right) y_{n_i, l_i}(r), \quad (\text{III.5.1})$$

$$B(i, i) = F^0(ii) - \frac{2l_i + 1}{4l_i + 1} \sum_{k>0} \begin{pmatrix} l_i & k & l_i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 F^k(ii), \quad (\text{III.5.2})$$

$$B(i, j) = F^0(ij) - \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{\infty} \begin{pmatrix} l_i & k & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 G^k(ij). \quad (\text{III.5.3})$$

Au moyen des relations (III.4.2-3), (III.4.11-12) et (III.5.1-3), nous pouvons exprimer les énergies moyennes de la manière suivante:

$$\begin{aligned} E_{\text{moy}}^{n_c} &= \sum_{i=1}^N \rho_i^{n_c} \left(A(i) + \frac{1}{2} (\rho_i^{n_c} - 1) B(i, i) \right) + \sum_{i>j=1}^N \rho_i^{n_c} \rho_j^{n_c} B(i, j) \\ E_{\text{moy}}^{m_c} &= \sum_{i=1}^N \rho_i^{m_c} \left(A(i) + \frac{1}{2} (\rho_i^{m_c} - 1) B(i, i) \right) + \sum_{i>j=1}^N \rho_i^{m_c} \rho_j^{m_c} B(i, j). \end{aligned} \quad (\text{III.5.4})$$

Les nombres d'occupation des deux configurations électroniques remplissent les conditions suivantes:

$$\rho_r^{m_c} = \rho_r^{n_c} - 1; \quad \rho_s^{m_c} = \rho_s^{n_c} + 1; \quad \rho_i^{m_c} = \rho_i^{n_c} \text{ si } i \neq r, s. \quad (\text{III.5.5})$$

Des relations (III.5.4) on déduit que

$$\begin{aligned} \Delta E &= \sum_{i=1}^N \left\{ (\rho_i^{m_c} - \rho_i^{n_c}) A(i) + \frac{1}{2} (\rho_i^{m_c} (\rho_i^{m_c} - 1) - \rho_i^{n_c} (\rho_i^{n_c} - 1)) B(i, i) \right\} \\ &+ \sum_{i>j=1}^N (\rho_i^{m_c} \rho_j^{m_c} - \rho_i^{n_c} \rho_j^{n_c}) B(i, j). \end{aligned} \quad (\text{III.5.6})$$

A partir de l'équation (III.5.6) et des conditions (III.5.5), la différence d'énergie s'écrit finalement

$$\begin{aligned} \Delta E &= A(s) - A(r) - (\rho_r^{n_c} - 1) B(r, r) + \rho_s^{m_c} B(s, s) \\ &+ \sum_{i=1}^N \rho_r^{n_c} \left\{ (1 - \delta_{i,s}) B(i, s) - (1 - \delta_{i,r}) B(i, r) \right\} - B(r, s). \end{aligned} \quad (\text{III.5.7})$$

CHAPITRE IV

Calcul de la probabilité des configurations électroniques

Dans le chapitre précédent (équation III.3.9), nous avons introduit formellement la probabilité des configurations électroniques P_n dans l'expression de la section efficace d'absorption des photons. L'approche la plus souvent rencontrée dans la littérature pour le calcul de cette probabilité est basé sur l'équation de Saha [Réf. 1, 2] (voir également [Réf. 3, p. 192]). Cette équation permet de déterminer l'abondance relative des ions de différentes ionicités dans un plasma à l'équilibre thermodynamique. Cette équation est établie avec l'hypothèse que les interactions entre les ions et les électrons libres sont suffisamment faibles pour que chacune de ces deux populations puisse être traitée comme un gaz parfait. La résolution de l'équation de Saha passe par le calcul des fonctions de partition des électrons liés et de l'énergie d'ionisation des ions. Le calcul de ces deux grandeurs est le point délicat de la méthode et devient même problématique dans le cas de plasmas de moyenne ou haute densité [Réf. 4-5]. Une fois l'abondance des différents ions déterminée, la probabilité d'une configuration électronique est calculée à partir de la fonction de partition du ion auquel elle appartient.

Les situations d'équilibre décrites par l'équation de Saha et le modèle de l'atome moyen utilisé dans ce travail sont très différentes. Nous avons donc dû développer [Réf. 6-7] une méthode de calcul de la probabilité des configurations électroniques qui soit consistante avec le modèle de l'atome moyen.

Notons que dans le but d'éviter les problèmes liés à l'utilisation des équations de Saha pour le calcul de la probabilité des configurations électroniques, Iglesias et Rogers ont également proposé une autre approche basée sur une "expansion en activité" [Réf. 8].

Afin de présenter le modèle que nous avons développé, nous commencerons par rappeler les équations de la théorie Hartree-Fock à température non nulle. En particulier, nous calculerons la deuxième variation de la fonctionnelle du grand potentiel thermodynamique dans le cadre de cette théorie. Nous pourrions alors calculer la probabilité d'une configuration électronique. Nous terminerons ce chapitre par les implications de cette méthode de calcul des probabilités P_{n_c} , sur la construction des configurations électroniques initiales n_c entrant dans le calcul de la section efficace d'absorption des photons (III.3.9).

IV.1 Description de l'équilibre

Dans le formalisme de la matrice densité, les équations Hartree-Fock qui décrivent l'atome moyen à l'équilibre sont (voir Annexe A):

$$\tilde{\rho}_i \equiv \tilde{\rho}_{ii} = \frac{1}{e^{(\epsilon_i - \mu)/T} + 1}, \quad (\text{IV.1.1})$$

$$\epsilon_i \equiv \epsilon_{ii} = t_{ii} + v_{ii} + \sum \langle \text{in} | v | \text{in} \rangle \tilde{\rho}_n, \quad (\text{IV.1.2})$$

où $\tilde{\rho}_i$ est la matrice densité pour les électrons, t_{ii} l'énergie cinétique, v_{ii} l'énergie potentielle:

$$v_{ii} = \langle i | \frac{-Ze^2}{|\vec{r}|} | i \rangle \quad (\text{IV.1.3})$$

et les éléments de matrice $\langle \text{in} | V | \text{jm} \rangle$ ont la forme:

$$\langle \text{in} | v | \text{jm} \rangle = \langle \text{in} | v_{ee} | \text{jm} \rangle - \langle \text{in} | v_{ee} | \text{mj} \rangle \quad (\text{IV.1.4})$$

avec

$$v_{ee} = \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|}. \quad (\text{IV.1.5})$$

La base des fonctions d'ondes utilisée dans les relations ci-dessus est celle qui diagonalise les matrices $\tilde{\rho}$ et γ (voir Annexe A). Les états $|i\rangle$ peuvent être liés ou libres.

Le modèle d'atome moyen que nous avons présenté au chapitre II est basé sur la théorie fonctionnelle de la densité. Si nous supposons que les termes d'échange-corrélation de

l'équation (II.2.2) et le terme d'échange de l'équation (IV.1.4) sont comparables, nous pouvons dire, en première approximation, que l'équilibre décrit par les équations Hartree-Fock (IV.4.1-2) est le même que celui de l'atome moyen de la section II.2.

IV.2 Fluctuations: Deuxième variation du grand potentiel thermodynamique

Comme nous le montrons dans l'Annexe A (voir équation (A.16)), la deuxième variation du grand potentiel thermodynamique $\delta^2\Omega$, produite par la déviation $\delta\tilde{\rho}$ de la matrice densité, s'exprime par:

$$\delta^2\Omega = \frac{1}{2} \sum \delta\tilde{\rho}_{ij}^* \langle ij|U|mn \rangle \delta\tilde{\rho}_{mn}, \quad (\text{IV.2.1})$$

où

$$\langle ij|U|mn \rangle = \left(\frac{\epsilon_i - \epsilon_j}{\tilde{\rho}_i - \tilde{\rho}_j} \right) \delta_{im} \delta_{jn} + \langle in|v|jm \rangle \quad (\text{IV.2.2})$$

et la somme sur i et j parcourt tous les états électroniques liés et libres.

L'équation (IV.2.2) montre que les fluctuations autour de l'équilibre Hartree-Fock sont caractérisées par des paires d'états plutôt que par l'occupation des niveaux. La matrice $\delta\tilde{\rho}$ est en général non diagonale car il n'y a aucune raison qu'elle commute avec la matrice ρ caractérisant l'équilibre. Nous n'allons cependant considérer dans ce qui suit que les cas où les $\delta\tilde{\rho}$ sont diagonales: ce qui correspond au cas où les $\delta\tilde{\rho}$ peuvent être décrites en terme de fluctuation du nombre d'occupation des niveaux. On a alors

$$\langle ii|U|jj \rangle = \left(\frac{T}{\tilde{\rho}_i(1-\tilde{\rho}_i)} \right) \delta_{ij} + \langle ij|v|ij \rangle, \quad (\text{IV.2.3})$$

$$\delta^2\Omega = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \delta\tilde{\rho}_i \langle ii|U|jj \rangle \delta\tilde{\rho}_j, \quad (\text{IV.2.4})$$

où

$$\delta\tilde{\rho}_i \equiv \delta\tilde{\rho}_{ii}. \quad (\text{IV.2.5})$$

Tous ces éléments sont réels. Dans la somme de l'équation (IV.2.4), les indices i et j peuvent appartenir aussi bien au spectre lié (B) que libre (F). Nous faisons alors la simplification supplémentaire que les fluctuations conservent la symétrie sphérique. Si les états électroniques sont décrits par les fonctions d'onde sphériques, nous avons

$$\delta\tilde{\rho}_i \equiv \delta\tilde{\rho}_{n_i, l_i, m_i, s_i} \quad (\text{IV.2.6})$$

et la symétrie sphérique signifie que les nombres d'occupations ne dépendent que des nombres quantiques principaux n_i et angulaires l_i

$$\delta\tilde{\rho}_{n_i, l_i, m_i, s_i} = \delta\tilde{\rho}_{n_i, l_i} \quad (\text{IV.2.7})$$

c'est-à-dire que la distribution en fonction des nombres quantiques magnétique m_i et de spin s_i est uniforme. Cette approximation conduit à l'expression

$$\sum_{i,j} \delta\tilde{\rho}_i \langle ij|v|ij \rangle \delta\tilde{\rho}_j = \sum_{\substack{n_i, l_i \\ n_j, l_j}} \delta\tilde{\rho}_{n_i, l_i} \delta\tilde{\rho}_{n_j, l_j} \sum_{\substack{m_i, s_i \\ m_j, s_j}} (\langle ij|v_{ee}|ij \rangle - \langle ij|v_{ee}|ji \rangle) \quad (\text{IV.2.8})$$

La différence dans la parenthèse de l'équation (IV.2.8) est calculée dans la référence [Réf. 9, p. 163]

$$\sum_{k=0}^{\infty} F^k(ij) c^k(l_i, m_i; l_i, m_i) c^k(l_j, m_j; l_j, m_j) - \delta_{s_i, s_j} \sum_{k=0}^{\infty} G^k(ij) [c^k(l_i, m_i; l_j, m_j)]^2, \quad (\text{IV.2.9})$$

où on reconnaît les intégrales de Slater définies en (III.4.9-10) et les coefficients c^k définis en (III.4.7). Ces coefficients satisfont à l'égalité [Réf. 9, p. 145]

$$\sum_{\substack{m_i, s_i \\ m_j, s_j}} \delta_{s_i, s_j} c^k(ii) c^k(jj) = 4(2l_i + 1)(2l_j + 1) \delta_{k,0}. \quad (\text{IV.2.10})$$

A l'aide des équations (IV.2.9) et (IV.2.10), la deuxième variation du grand potentiel thermodynamique (IV.2.4) s'écrit enfin

$$\frac{\delta^2 \Omega}{T} = \frac{1}{T} \sum_{i,j} \delta\tilde{\rho}_i \langle ii|U|jj \rangle \delta\tilde{\rho}_j = \sum_{\substack{n_i, l_i \\ n_j, l_j}} \delta\rho_{n_i, l_i} \delta\rho_{n_j, l_j} X_{ij}, \quad (\text{IV.2.11})$$

où

$$X_{ij} = \frac{1}{2(2l_i + 1)} \left(\left(\frac{1}{\tilde{\rho}_{n_i, l_i} (1 - \tilde{\rho}_{n_i, l_i})} \right) \delta_{n_i, n_j} \delta_{l_i, l_j} + \frac{e^2}{2T} \left[F^0(ij) - \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{\infty} \left[\begin{pmatrix} l_i & k & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right]^2 G^k(ij) \right] \right), \quad (\text{IV.2.12})$$

et où nous avons posé que $\delta\rho_{n_i, l_i} = 2(2l_i + 1)\delta\tilde{\rho}_{n_i, l_i}$.

IV.3 Probabilité d'une configuration électronique

La probabilité d'un ensemble de $\delta\rho_i$ avec i appartenant aux états électroniques liés (B) et libres (F), devient dans la théorie standard des fluctuations [Réf. 10, 11]:

$$P[\delta\rho_i, i \in B, F] = C^{(B, F)} e^{-\delta^2 \Omega / T}, \quad (\text{IV.3.1})$$

où $C^{(B, F)}$ est la constante de normalisation.

Dans la pratique, les états du continu sont discrétisés. Comme le temps de vie des configurations électroniques des électrons libres est beaucoup plus court que celui des configurations électroniques liées, la relation (IV.3.1) peut être intégrée sur toutes les fluctuations possibles pour les nombres d'occupation des états libres:

$$P[\delta\rho_i, i \in B] = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{k \in F} d\delta\rho_k P[\delta\rho_i, i \in B, F]. \quad (\text{IV.3.2})$$

L'intégration sur tous les $\delta\rho_k$, $k \in F$, pour $\delta\rho_k$ variant de $-\infty$ à $+\infty$ viole le principe d'exclusion de Pauli. Nous pouvons cependant remarquer que la matrice X introduite à l'équation (IV.2.12) est définie positive et que son terme dominant est $1/\tilde{\rho}_i(1-\tilde{\rho}_i)$. Cette fonction a un minimum pour $\tilde{\rho}_i = 1/2$ et sa valeur en ce point est de 4. Les états électroniques caractérisés par un nombre d'occupation à l'équilibre proche de ce minimum sont ceux dont l'énergie est proche du potentiel chimique. Pour ces états, la correction $\delta\rho_i$ peut être même de $2l_i + 1$ sans violer le principe de Pauli. Pour des valeurs plus élevées de $\delta\rho_i$ la probabilité est très faible. D'autre part, pour les états qui ne sont pas à moitié remplis, le premier terme de la matrice X (IV.2.12), est très grand et, à nouveau, la probabilité d'une correction importante au nombre d'occupation de ces états sera très faible.

Introduisons les notations simplificatrices suivantes: le vecteur $\delta\rho_i$, $i \in B, F$ sera noté $\delta\rho_i$. La partie qui correspond aux états liés $\delta\rho_i$, $i \in B$, sera désignée par $\delta\rho_{(1)}$ et la partie libre $\delta\rho_i$, $i \in F$, par $\delta\rho_{(2)}$. Cette convention est aussi appliquée aux autres vecteurs ainsi qu'à la matrice X et à son inverse.

En effectuant l'intégration (IV.3.2), nous obtenons alors les probabilités cherchées:

$$P[\delta\rho_i, i \in B] = C^{(B)} e^{-G(\delta\rho_0)/2}, \quad (\text{IV.3.3})$$

où $C^{(B)}$ est la constante de normalisation et G la forme bilinéaire suivante:

$$G(\delta\rho_{(1)}) = \delta\rho_{(1)} X_{(1,1)} \delta\rho_{(1)} - \delta\rho_{(1)} X_{(1,2)} [X_{(2,2)}]^{-1} X_{(2,1)} \delta\rho_{(1)}. \quad (\text{IV.3.4})$$

Soit l'ensemble ρ_i , $i \in B$ des nombres d'occupation caractérisant une configuration électronique (voir définition (III.2.1)). Les $[\delta\rho_i, i \in B]$, dont nous avons déterminé la probabilité d'occurrence ci-dessus, peuvent aussi être exprimés par $\delta\rho_i = \rho_i - \rho_i^0$, $i \in B$, où l'ensemble ρ_i^0 , $i \in B$ sont les nombres d'occupation caractérisant l'atome moyen. Les équations (IV.3.3-4) donnent donc la probabilité d'une configuration électronique.

IV.4 Construction des configurations électroniques initiales pour le calcul numérique

Soient n_i , l_i , $i=1, \eta$ les nombres quantiques principaux et angulaires de l'ensemble des états liés, solutions de l'équation de Schrödinger dans le potentiel de l'atome moyen. Pour un plasma de fer à une température de quelques centaines d'électronvolts et à la densité du solide, le nombre d'états liés se situe entre dix et vingt et la valeur maximale de l_i est de deux ou trois. Dans ce cas, le nombre de configurations électroniques initiales est de plusieurs centaines de milliers. Il est pratiquement possible, quoique très lourd du point de vue numérique, de calculer toutes ces configurations. Si nous nous intéressons par contre à des plasmas de numéro atomique plus élevé ou de densité plus faible, le nombre des configurations initiales devient très vite supérieur au million. Il est dans ce cas hors de question de traiter numériquement toutes ces configurations.

Nous devons donc avoir recours à un critère qui nous permette d'éliminer les configurations initiales dont la contribution à la section efficace d'absorption des photons est négligeable. Comme nous pouvons le voir dans l'équation (III.3.9), cette contribution dépend

principalement de la probabilité de la configuration électronique et de la valeur de l'élément matriciel de l'opérateur dipolaire pour chaque transition.

Il n'est pas commode de déterminer à priori la valeur de ces éléments matriciels. Par contre les relations (IV.3.3-4) nous permettent de construire les configurations électroniques initiales les plus probables. Pour cette construction, les électrons seront supposés indépendants. Cette hypothèse revient à négliger le deuxième terme dans le membre de droite des équations (IV.2.12) et (IV.3.4). La probabilité (IV.3.3) d'une configuration électronique peut alors s'écrire

$$P[\rho_i, i \in B] = C'^{(B)} \prod_i e^{-\frac{2(2l_i+1)(\rho_i - \rho_i^0)^2}{2\rho_i(2(2l_i+1) - \rho_i)}}, \quad (\text{IV.4.1})$$

où $C'^{(B)}$ est la nouvelle constante de normalisation. Il est alors évident qu'une configuration électronique est d'autant plus improbable que les nombres d'occupation ρ_i qui la caractérisent sont éloignés des nombres d'occupation ρ_i^0 de la configuration de l'atome moyen.

La construction des configurations électroniques initiales est réalisée en variant la valeur des ρ_i autour de la valeur ρ_i^0 . Seules sont gardées les configurations dont la probabilité (IV.4.1) est plus grande qu'une valeur de référence. Cette dernière est choisie de manière à ne conserver que quelques milliers de configurations initiales.

Soulignons que la relation (IV.4.1) n'est utilisée que pour la construction des configurations électroniques initiales. Lors du calcul de la section efficace d'absorption (III.3.13), la probabilité des configurations électroniques est calculée en tenant compte des interactions (deuxième terme du membre de droite de l'équation (IV.2.12)).

CHAPITRE V

Abandon de la symétrie sphérique pour le traitement des interactions entre électrons liés

Dans l'approche DCA présentée au chapitre III, nous avons substitué les énergies moyennes des configurations électroniques aux énergies des états $|n_c, i\rangle$. Cette approximation nous avait permis d'éliminer ces états ainsi que leur énergie $E_{n_c, i}$ de la section efficace d'absorption (III.3.9). Nous avons ainsi obtenu l'expression (III.3.13) qui ne dépendait plus que des éléments matriciels de l'opérateur dipolaire entre les états à un électron, des nombres d'occupation des configurations électroniques et de leur probabilité.

L'approximation DCA a le mérite de simplifier considérablement le calcul de la section efficace d'absorption des photons. Elle permet de mettre clairement en évidence les effets liés aux différents états d'ionicté et d'excitation des atomes du plasma. Elle présente par contre l'inconvénient de supposer que la distribution de densité des électrons atomiques a la symétrie sphérique. En effet, dans la dérivation de l'énergie moyenne des configurations électroniques (section (III.4)), nous avons effectué la moyenne sur les nombres quantiques m_l et m_s . D'après le théorème de Unsöld (équation (II.2.6)), cette opération équivaut à considérer une distribution électronique moyenne qui a la symétrie sphérique. Autre inconvénient: dans l'approximation DCA, l'effet du couplage spin-orbite est nul.

Les considérations ci-dessus, les résultats théoriques de Iglesias et Rogers [Réf. 1] ainsi que les résultats expérimentaux de Da Silva et al. [Réf. 2], nous invite à abandonner l'approximation DCA pour lui substituer la méthode DTA [Réf. 3].

Afin de présenter cette méthode, nous commencerons par développer les états à N électrons $|n_c, i\rangle$ dans la base des déterminants de Slater (III.2.3) associée à chaque configuration

électronique n_c . Les coefficients de ces développements seront déterminés par la condition que les états $|n_c, i\rangle$ sont des états propres de l'hamiltonien H . Afin de lever complètement la dégénérescence en énergie de ces états, nous devons exiger qu'ils soient aussi états propres des opérateurs de moment angulaire \bar{L}^2 , \bar{S}^2 ou \bar{J}^2 , selon les conditions physiques régnant dans l'atome et selon l'approximation adoptée.

Si le terme d'interaction spin-orbite dans l'hamiltonien H (voir équation (III.4.1)) est négligé, les opérateurs \bar{L}^2 et \bar{S}^2 commutent avec H . Nous exigerons alors que les états à N électrons $|n_c, i\rangle$ soient des états propres des opérateurs \bar{L}^2 , \bar{S}^2 , L_z , S_z et H . Dans le cas contraire, les opérateurs \bar{L}^2 et \bar{S}^2 ne commutent plus avec H . Par contre l'opérateur \bar{J}^2 commute toujours avec H . Nous exigerons alors que les états à N électrons $|n_c, i\rangle$ soient des états propres des opérateurs \bar{J}^2 , J_z et H .

Les éléments matriciels des opérateurs hamiltonien H et de moment angulaire \bar{L}^2 , \bar{S}^2 et \bar{J}^2 , exprimés dans la base des déterminants de Slater (III.2.3) étant calculés dans l'Annexe C, nous aborderons d'abord le calcul des valeurs propres et des états propres des opérateurs de moment angulaire. Nous reprendrons ensuite la relation (III.3.9), afin de calculer la section efficace d'absorption des photons dans le cadre de la méthode DTA.

V.1 Diagonalisation simultanée des opérateurs

V.1.1 Restriction à un sous-espace

Comme nous le montre la relation (III.2.4), le nombre de déterminants de Slater $N_c^{n_c}$ nécessaires à la description des états $|n_c, i\rangle$ dépend du nombre quantique orbital l ainsi que du nombre d'électrons p dans chaque sous-couche de la configuration électronique n_c . Du point de vue du taux d'occupation, ce sont les sous-couches à moitié remplies qui demandent le plus de déterminants de Slater pour leur description. Lors de la présence de sous-couches à moitié remplies et possédants un nombre quantique orbital l supérieur à trois dans une configuration électronique, le nombre de déterminants de Slater peut dépasser plusieurs milliers. La diagonalisation de matrices de cette taille pose de nombreux problèmes quant à la précision numérique aussi qu'à la place mémoire disponible sur les ordinateurs actuels. Ces raisons nous invitent à limiter autant que possible la taille de la base nécessaire à la description des états d'une configuration électronique.

Pour cela, il est nécessaire de considérer plus en détail la nature des interactions entre les électrons et plus particulièrement la manière dont se couplent leurs moments orbitaux \vec{L} et de spin \vec{S} . Comme nous l'avons dit dans la partie introductive de ce chapitre, si l'interaction spin-orbite peut être négligée par rapport à l'interaction coulombienne entre les électrons, les opérateurs \vec{L}^2 et \vec{S}^2 commutent avec l'hamiltonien H . Du point de vue physique, cela signifie que l'interaction électrostatique est suffisamment forte pour que les moments orbitaux \vec{L} de différents électrons se couplent entre eux. Le couplage est dit alors de Russel-Saunders ou LS. Ce couplage s'observe principalement dans les atomes de faible numéro atomique. Dans le cas où le couplage spin-orbite domine l'interaction coulombienne entre électrons, l'hamiltonien H ne commute plus avec les opérateurs \vec{L} et \vec{S} . En effet, l'interaction spin-orbite est alors suffisamment forte pour provoquer le couplage entre le moment orbital \vec{L} et le moment de spin \vec{S} de chaque électron. Il faut alors coupler les moments angulaires total $\vec{j} = \vec{L} + \vec{S}$ de chaque électron. Dans ce cas, le couplage est dit couplage jj et ce dernier est observé dans les atomes de numéro atomique élevé. Ces deux types de couplages sont des cas limite et le spectre de nombreux atomes est le résultat d'un mélange de ces deux couplages. Cette situation est connue sous le nom de couplage intermédiaire.

Les déterminants de Slater (III.2.3) ne constituent pas une très bonne base pour décrire ces phénomènes, car ils ne tiennent aucun compte de la nature du couplage existant dans l'atome. La construction d'une base permettant de ne diagonaliser l'opérateur H que dans les sous-espaces où les éléments matriciels de cet opérateur sont non nuls a été proposée par Racah [Réf. 4-6].

Dans ce travail, nous avons choisi une approche entièrement numérique, évitant ainsi l'utilisation de l'algèbre de Racah. Les configurations électroniques qui ne peuvent pas être traitées numériquement à l'aide de la méthode DTA, en raison de la taille de la base nécessaire à leur description, le sont dans le cadre de l'approximation DCA présentée au chapitre III.

En fait, aucun ordinateur n'est actuellement capable de calculer les opacités d'atomes lourds comme l'or ou le plomb en traitant toutes les configurations électroniques dans le cadre de la méthode DTA. Pour les atomes lourds, l'analyse ligne par ligne de l'approche DTA est impossible; il faut donc envisager de calculer les transitions de manière statistique. Une approche de ce type a été proposée par Bauche et Klapisch dans les années quatre-vingt [Réf. 7-10], sous le nom de UTA pour "Unresolved Transition Arrays". Un UTA désigne le groupe de lignes qui résulte de la transition entre des états appartenant à des configurations initiale et finale données. Chaque paire de configurations génère un UTA qui est caractérisé par son énergie moyenne \bar{E} et sa largeur $\delta\bar{E}$:

$$\bar{E} = \sum_{ij} w_{ij} (E_i - E_j), \quad (\text{V.1.1})$$

$$\delta\bar{E} = \left(\sum_{ij} w_{ij} (E_i - E_j) \right)^{1/2}. \quad (\text{V.1.2})$$

Sans utiliser l'algèbre de Racah, il est tout de même possible de diminuer la dimension de l'espace sur lequel sont diagonalisés les opérateurs. Considérons d'abord le cas des opérateurs $\{\bar{J}^2, H\}$. Il est clair que l'hamiltonien H , équation (III.4.1), est indépendant de la valeur de M_J , où M_J $\{M_J = -J, \dots, J\}$ désigne les valeurs propres de l'opérateur J_z . Comme les opérateurs H et \bar{J}^2 commutent, il suffit de diagonaliser la restriction de l'opérateur H au sous-espace associé à chaque valeur propre M_J . De plus, seule la restriction de H au sous-espace propre associé à la plus petite valeur propre positive $M_{J,\min}$ de J_z doit être diagonalisée. En effet, les états appartenant aux sous-espaces associés aux valeurs propres $M_J = M_{J,\min} \pm 1$ produisent les mêmes niveaux d'énergie que ceux appartenant au sous-espace associé à la valeur propre $M_{J,\min}$, excepté le niveau correspondant à $J=0$. Quant aux états appartenant aux sous-espaces associés aux valeurs propres $M_J = M_{J,\min} \pm 2$, ils produisent les mêmes niveaux d'énergie que ceux appartenant au sous-espace associé à la valeur propre $M_{J,\min}$, excepté les niveaux correspondants à $J=0$ et $J=1$, etc. Dans le cas des opérateurs $\{\bar{L}^2, \bar{S}^2, H\}$, les mêmes arguments peuvent être utilisés pour les opérateurs \bar{L}^2 et \bar{S}^2 . Seule la restriction de l'hamiltonien H aux sous-espaces générés par les déterminants de Slater satisfaisant à la condition $M_L=0$ et $M_S=M_{S,\min}$ est à considérer. Remarquons que $M_{J,\min}$ et $M_{S,\min}$ valent 0 ou 1/2 selon que le nombre d'électrons de la configuration électronique est respectivement paire ou impaire.

V.1.2 Diagonalisation simultanée de deux opérateurs

Abordons maintenant le problème de la diagonalisation simultanée des opérateurs $\{\bar{L}^2, \bar{S}^2, H\}$ ou $\{\bar{J}^2, H\}$. Comme il n'y a pas de différence essentielle entre les cas à deux ou trois opérateurs, nous allons exposer brièvement la méthode de diagonalisation pour deux opérateurs \bar{J}^2 et H .

Soit $|\Phi_{n_c, k}\rangle$, $k = 1, N_S^{n_c}$, la base des déterminants de Slater associée à la configuration électronique n_c . Soient $|u_i\rangle$ et $\lambda_i^{d_i}$ ($i \leq N_S^{n_c}$), les vecteurs propres et les valeurs propres de J^2 dans la base $|\Phi_{n_c, k}\rangle$, l'exposant d_i étant la dégénérescence de la valeur propre λ_i . Les éléments matriciels de l'opérateur H dans la base formée par les vecteurs propres $|u_i\rangle$ sont donnés par:

$$\langle u_i | H | u_j \rangle = \sum_{k,l=1}^{N_c^2} \langle u_i | \Phi_{n_c,k} \rangle \langle \Phi_{n_c,l} | u_j \rangle \langle \Phi_{n_c,k} | H | \Phi_{n_c,l} \rangle. \quad (\text{V.1.3})$$

Les éléments matriciels $\langle \Phi_{n_c,k} | H | \Phi_{n_c,l} \rangle$ sont calculés à l'aide des relations (C.1.3-5). Les arguments développés à la section V.1 concernant les valeurs propres M_J de l'opérateur J_z , impliquent que la matrice (V.1.3) a la représentation par blocs suivante

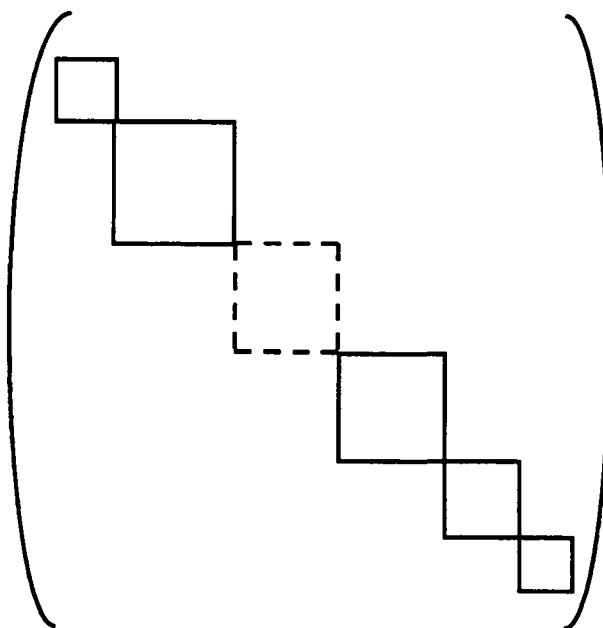


Figure V.1 Représentation par bloc de la matrice H dans la base des vecteurs propres de l'opérateur J^2 .

si les valeurs propres de \bar{J}^2 sont classées dans l'ordre. Chacun des blocs de la matrice représentée dans la Figure V.1 correspond à une valeur propre différente de \bar{J}^2 . Les valeurs propres et les vecteurs propres communs aux opérateurs \bar{J}^2 et H sont alors déterminés en diagonalisant l'opérateur H dans chacun des sous-espaces associé à un bloc de la matrice de la Figure V.1.

V.2 Section efficace d'absorption des photons

Reprenons la relation (III.3.9)

$$\sigma_a^{bb}(\omega) = \frac{4\pi^2\omega e^2}{3c} (1 - e^{-\hbar\omega/\Gamma}) \sum_{n_c} P_{n_c} \sum_{i \in n_c} \frac{P_{n_c,i}}{P_{n_c}} \sum_{m_c} \sum_{j \in m_c} \left| \langle n_c, i | \sum_{k=1}^N \vec{r}_k | m_c, j \rangle \right|^2 \delta(\hbar\omega - (E_{m_c,j} - E_{n_c,i})). \quad (\text{V.2.1})$$

La probabilité P_{n_c} des configurations électroniques est la même que celle utilisée au chapitre III dans l'approche DCA. La probabilité $P_{n_c,i}$ dépend de l'énergie $E_{n_c,i}$ par l'intermédiaire de la distribution de Boltzmann. Or les différences d'énergie entre les états électroniques appartenant à une même configuration sont faibles comparativement à l'énergie de cette configuration. Nous pouvons donc supposer que les différents états électroniques d'une même configuration électronique sont équiprobables. Comme dans les cas DCA, nous allons utiliser l'approximation $P_{n_c,i}/P_{n_c} = 1/N_S^{n_c}$.

Ainsi que nous l'avons vu à la section précédente, nous pouvons exiger que les états $|n_c, i\rangle$ soient des états propres des ensembles d'opérateurs $\{\vec{J}^2, H\}$ ou $\{\vec{L}^2, \vec{S}^2, H\}$, selon la nature du couplage qui domine dans l'atome considéré. Nous allons donc calculer la section efficace d'absorption des photons pour ces deux types de couplage.

V.2.1 Couplage intermédiaire

Dans ce cas, le couplage spin-orbite n'est pas négligé et les états à N électrons $|n_c, i\rangle$ sont états propres des opérateurs \vec{J}^2 et H . Ces états sont alors complètement déterminés par la donnée des nombre quantiques $\{E_{n_c}, J_{n_c}, M_{J_{n_c}}^{n_c}\}$, où E_{n_c} désigne les valeurs propres de l'opérateur H , J_{n_c} les valeurs propres de l'opérateur \vec{J}^2 et $M_{J_{n_c}}^{n_c}$ les valeurs propres de l'opérateur J_z pour la configuration électronique n_c .

Dans ces conditions, la somme sur i et j dans la relation (V.2.1), est remplacée par la somme sur les nombres quantiques $\{E_{n_c}, J_{n_c}, M_{J_{n_c}}^{n_c}\}$ et $\{E_{m_c}, J_{m_c}, M_{J_{m_c}}^{m_c}\}$. Comme nous l'avons remarqué à la section V.1, seule la diagonalisation de la restriction des opérateurs \vec{J}^2 et H au sous-espace associé à la valeur propre $M_{J_{m_c}, \min}^{m_c}$ est à considérer. Dans ce cas, seule la valeur des éléments matriciels du type $\langle E_{n_c}, J_{n_c}, M_{J_{n_c}}^{n_c} | \sum_k \vec{r}_k | E_{m_c}, J_{m_c}, M_{J_{m_c}, \min}^{m_c} \rangle$ est calculée. Il nous faut donc exprimer la somme sur $M_{J_{n_c}}^{n_c}$ et $M_{J_{m_c}}^{m_c}$ au moyen de ces éléments matriciels.

Le théorème de Wigner-Eckart [Réf. 11, p. 307] nous permet d'exprimer les éléments matriciels de l'opérateur de moment dipolaire $\sum \vec{r}_k$ en fonction des éléments matriciels réduits du tenseur de moment dipolaire $\mathbf{P}^{(1)}$ de la manière suivante:

$$\left| \left\langle E_{n_c}, J_{n_c}, M_J^{n_c} \left| \sum_{k=1}^N \vec{r}_k \right| E_{m_c}, J_{m_c}, M_J^{m_c} \right\rangle \right|^2 = \sum_q \begin{pmatrix} J_{n_c} & 1 & J_{m_c} \\ -M_J^{n_c} & q & M_J^{m_c} \end{pmatrix}^2 \left| \left\langle E_{n_c}, J_{n_c} \parallel \mathbf{P}^{(1)} \parallel E_{m_c}, J_{m_c} \right\rangle \right|^2, \quad (\text{V.2.2})$$

où $\begin{pmatrix} J_{n_c} & 1 & J_{m_c} \\ -M_J^{n_c} & q & M_J^{m_c} \end{pmatrix}$ désigne le symbole 3j de Wigner [Réf. 11, p. 142].

Le symbole 3j de Wigner figurant dans l'équation (V.2.2) est différent de zéro seulement si $-M_J^{n_c} + q + M_J^{m_c} = 0$. Comme $M_{J,\min}^{n_c} = M_{J,\min}^{m_c}$, la somme sur q se réduit au terme q=0. Nous avons donc

$$\left| \left\langle E_{n_c}, J_{n_c}, M_{J,\min}^{n_c} \left| \sum_{k=1}^N \vec{r}_k \right| E_{m_c}, J_{m_c}, M_{J,\min}^{m_c} \right\rangle \right|^2 = \begin{pmatrix} J_{n_c} & 1 & J_{m_c} \\ -M_{J,\min}^{n_c} & 0 & M_{J,\min}^{m_c} \end{pmatrix}^2 \left| \left\langle E_{n_c}, J_{n_c} \parallel \mathbf{P}^{(1)} \parallel E_{m_c}, J_{m_c} \right\rangle \right|^2. \quad (\text{V.2.3})$$

Grâce aux équations (V.2.2) et (V.2.3), la somme sur $M_J^{n_c}$ et $M_J^{m_c}$ des éléments matriciels de l'opérateur dipolaire devient

$$\sum_{M_J^{n_c}} \sum_{M_J^{m_c}} \left| \left\langle E_{n_c}, J_{n_c}, M_J^{n_c} \left| \sum_{k=1}^N \vec{r}_k \right| E_{m_c}, J_{m_c}, M_J^{m_c} \right\rangle \right|^2 = \sum_{M_J^{n_c}} \sum_{M_J^{m_c}} \sum_q \begin{pmatrix} J_{n_c} & 1 & J_{m_c} \\ -M_J^{n_c} & q & M_J^{m_c} \end{pmatrix}^2 \frac{\left| \left\langle E_{n_c}, J_{n_c}, M_{J,\min}^{n_c} \left| \sum_{k=1}^N \vec{r}_k \right| E_{m_c}, J_{m_c}, M_{J,\min}^{m_c} \right\rangle \right|^2}{\begin{pmatrix} J_{n_c} & 1 & J_{m_c} \\ -M_{J,\min}^{n_c} & 0 & M_{J,\min}^{m_c} \end{pmatrix}^2}. \quad (\text{V.2.4})$$

La somme sur $M_J^{n_c}$ et $M_J^{m_c}$ dans le membre de droite de l'équation (V.2.4) peut être effectuée au moyen de la propriété suivante des coefficients 3j de Wigner [Réf. 11, p. 145]:

$$\sum_{m_1} \sum_{m_2} (2j_3 + 1) \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3' \\ m_1 & m_2 & m_3' \end{pmatrix} = \delta_{j_3, j_3'} \delta_{m_3, m_3'} \delta(j_1 j_2 j_3), \quad (\text{V.2.5})$$

où $\delta(j_1 j_2 j_3)$ vaut un si j_1, j_2 et j_3 satisfont à l'inégalité du triangle, zéro si non.

La propriété (V.2.5) appliquée à l'équation (V.2.4) donne

$$\sum_{M_J^{n_c}} \sum_{M_J^{m_c}} \left| \langle E_{n_c}, J_{n_c}, M_J^{n_c} \left| \sum_{k=1}^N \tilde{r}_k \right| E_{m_c}, J_{m_c}, M_J^{m_c} \rangle \right|^2 = \delta(J_{n_c} J_{m_c} 1)$$

$$\frac{\left| \langle E_{n_c}, J_{n_c}, M_{J,\min}^{n_c} \left| \sum_{k=1}^N \tilde{r}_k \right| E_{m_c}, J_{m_c}, M_{J,\min}^{m_c} \rangle \right|^2}{\left(\begin{array}{ccc} J_{n_c} & 1 & J_{m_c} \\ -M_{J,\min}^{n_c} & 0 & M_{J,\min}^{m_c} \end{array} \right)^2} \quad (\text{V.2.6})$$

A l'aide des équations (V.2.6) et (V.2.1), l'expression de la section efficace d'absorption pour la restriction au sous-espace associé à la valeur propre $M_{J,\min}^{n_c}$ devient

$$\sigma_a(\omega) = \frac{4\pi^2 \omega e^2}{3c} (1 - e^{-\hbar\omega/T}) \sum_{n_c} \frac{P_{n_c}}{N_S^{n_c}} \sum_{m_c} \sum_{E_{n_c}, J_{n_c}} \sum_{E_{m_c}, J_{m_c}} \delta(J_{n_c} J_{m_c} 1) \delta(\hbar\omega - (E_{m_c} - E_{n_c})) \cdot$$

$$\frac{\left| \langle E_{n_c}, J_{n_c}, M_{J,\min}^{n_c} \left| \sum_{k=1}^N \tilde{r}_k \right| E_{m_c}, J_{m_c}, M_{J,\min}^{m_c} \rangle \right|^2}{\left(\begin{array}{ccc} J_{n_c} & 1 & J_{m_c} \\ -M_{J,\min}^{n_c} & 0 & M_{J,\min}^{m_c} \end{array} \right)^2} \quad (\text{V.2.7})$$

Comme nous avons supposé qu'il n'y avait pas de mélange de configurations, les états à N électrons $|E_{n_c}, J_{n_c}, M_{J,\min}^{n_c}\rangle$ et $|E_{m_c}, J_{m_c}, M_{J,\min}^{m_c}\rangle$ peuvent être développés sur les bases (III.2.3) des configurations électroniques n_c et m_c de la manière suivante:

$$|E_{n_c}, J_{n_c}, M_{J,\min}^{n_c}\rangle = \sum_{t=1}^{N_S^{n_c}} \langle \Phi_{n_c,t} | E_{n_c}, J_{n_c}, M_{J,\min}^{n_c} \rangle \Phi_{n_c,t} = \sum_{t=1}^{N_S^{n_c}} v_t |\Phi_{n_c,t}\rangle,$$

$$|E_{m_c}, J_{m_c}, M_{J,\min}^{m_c}\rangle = \sum_{u=1}^{N_S^{m_c}} \langle \Psi_{m_c,u} | E_{m_c}, J_{m_c}, M_{J,\min}^{m_c} \rangle \Psi_{m_c,u} = \sum_{u=1}^{N_S^{m_c}} \mu_u |\Psi_{m_c,u}\rangle. \quad (\text{V.2.8})$$

Rappelons que les entiers $N_S^{n_c}$ et $N_S^{m_c}$ sont le nombre de déterminants de Slater que comptent respectivement les bases des configurations électroniques n_c et m_c .

A l'aide des relations (V.2.8), la section efficace (V.2.7) devient

$$\sigma_a(\omega) = \frac{4\pi^2\omega e^2}{3c} (1 - e^{-\hbar\omega/\Gamma}) \sum_{n_c} \frac{P_{n_c}}{N_S^{n_c}} \sum_{m_c} \sum_{E_{n_c}, J_{n_c}} \sum_{E_{m_c}, J_{m_c}} \frac{\delta(J_{n_c} J_{m_c} 1) \delta(\hbar\omega - (E_{m_c} - E_{n_c}))}{\begin{pmatrix} J_{n_c} & 1 & J_{m_c} \\ -M_{J, \min}^{n_c} & 0 & M_{J, \min}^{n_c} \end{pmatrix}^2} \left| \sum_{t=1}^{N_S^{n_c}} \sum_{u=1}^{N_S^{m_c}} v_t \mu_u \langle \Phi_{n_c, t} | \sum_{k=1}^N \vec{r}_k | \Psi_{m_c, u} \rangle \right|^2. \quad (\text{V.2.9})$$

Comme dans l'Annexe C, nous pouvons introduire les ensembles de fonctions d'ondes à un électron associés à chaque déterminant de Slater (voir aussi Annexe B). Soit $\{\varphi_1^{n_c, t}, \dots, \varphi_N^{n_c, t}\}$, l'ensemble associé au déterminant de Slater $\Phi_{n_c, t}$ et $\{\psi_1^{m_c, u}, \dots, \psi_N^{m_c, u}\}$ celui associé au déterminant $\Psi_{m_c, u}$.

D'après les équations (B.1.2-4), les éléments matriciels $\langle \Phi_{n_c, t} | \sum_{k=1}^N \vec{r}_k | \Psi_{m_c, u} \rangle$ valent

$$\langle \Phi_{n_c, t} | \sum_{k=1}^N \vec{r}_k | \Psi_{m_c, u} \rangle = \pm \langle \varphi_r^{n_c, t} | \vec{r} | \psi_r^{m_c, u} \rangle, \quad (\text{V.2.10})$$

si les deux ensembles $\{\varphi_1^{n_c, t}, \dots, \varphi_N^{n_c, t}\}$ et $\{\psi_1^{m_c, u}, \dots, \psi_N^{m_c, u}\}$ diffèrent d'un état $\varphi_r^{n_c, t} \neq \psi_r^{m_c, u}$. Ils sont nuls si les déterminants de Slater $\Phi_{n_c, t}$ et $\Psi_{m_c, u}$ sont identiques car l'opérateur dipolaire est antisymétrique.

Remarquons que les éléments matriciels $\langle \Phi_{n_c, t} | \sum_{k=1}^N \vec{r}_k | \Psi_{m_c, u} \rangle$ sont différents de zéro seulement si les déterminants $\Phi_{n_c, t}$ et $\Psi_{m_c, u}$ ont la même dimension, c'est-à-dire que les configurations électroniques n_c et m_c ont le même nombre d'électrons.

Avec l'équation (V.2.10), la relation (V.2.9) devient

$$\sigma_a(\omega) = \frac{4\pi^2\omega e^2}{3c} (1 - e^{-\hbar\omega/\Gamma}) \sum_{n_c} \frac{P_{n_c}}{N_S^{n_c}} \sum_{m_c} \sum_{E_{n_c}, J_{n_c}} \sum_{E_{m_c}, J_{m_c}} \frac{\delta(J_{n_c} J_{m_c} 1) \delta(\hbar\omega - (E_{m_c} - E_{n_c}))}{\begin{pmatrix} J_{n_c} & 1 & J_{m_c} \\ -M_{J, \min}^{n_c} & 0 & M_{J, \min}^{n_c} \end{pmatrix}^2} \left| \sum_{t=1}^{N_S^{n_c}} \sum_{u=1}^{N_S^{m_c}} v_t \mu_u \langle \varphi_r^{n_c, t} | \vec{r} | \psi_r^{m_c, u} \rangle \right|^2. \quad (\text{V.2.11})$$

Les éléments matriciels $\langle \varphi_r^{n_c, t} | \vec{r} | \psi_r^{m_c, u} \rangle$ ont été calculés en référant aux équations de Bethe et Salpeter [Réf. 12, p. 253].

V.2.2 Couplage de Russel-Saunders

Dans ce cas, le couplage spin-orbite est négligé et les états à N électrons $|n_c, i\rangle$ sont états propres des opérateurs \bar{L}^2 , \bar{S}^2 et H . Ces états sont alors complètement déterminés par la donnée des nombres quantiques $\{E_{n_c}, L_{n_c}, S_{n_c}, M_L^{n_c}, M_S^{n_c}\}$ où E_{n_c} désigne les valeurs propres de l'opérateur H , L_{n_c} les valeurs propres de l'opérateur L^2 , S_{n_c} les valeurs propres de l'opérateur S^2 , $M_L^{n_c}$ les valeurs propres de l'opérateur L_z et $M_S^{n_c}$ les valeurs propres de l'opérateur S_z .

Dans ces conditions, la somme sur i et j dans la relation (V.2.1) est remplacée par la somme sur les nombres quantiques $E_{n_c}, L_{n_c}, S_{n_c}, M_L^{n_c}, M_S^{n_c}, E_{m_c}, L_{m_c}, S_{m_c}, M_L^{m_c}, M_S^{m_c}$. Comme nous l'avons relevé à la section V.1, seule la diagonalisation de la restriction des opérateurs \bar{L}^2 , \bar{S}^2 et H au sous-espace associé aux valeurs propres $M_L^{n_c} = 0$ et $M_S^{n_c} = 0, 1/2$ sont à considérer.

La somme sur $M_L^{n_c}$ peut être traitée de la même manière que la somme sur $M_J^{n_c}$ à la section V.2. La somme sur $M_S^{n_c}$ a pour effet d'ajouter un facteur $2S+1$. Avec les mêmes notations qu'à la section précédente, on trouve la section efficace d'absorption dans le couplage de Russel-Saunders

$$\sigma_a(\omega) = \frac{4\pi^2\omega e^2}{3c} (1 - e^{-\hbar\omega/T}) \sum_{n_c} \frac{P_{n_c}}{N_S^{n_c}} \sum_{m_c} \sum_{E_{n_c}, L_{n_c}, S_{n_c}} \sum_{E_{m_c}, L_{m_c}, S_{m_c}} (2S_{n_c} + 1) \frac{\delta(L_{n_c} L_{m_c} 1) \delta(\hbar\omega - (E_{m_c} - E_{n_c}))}{\begin{pmatrix} L_{n_c} & 1 & L_{m_c} \\ -M_{L,\min}^{n_c} & 0 & M_{L,\min}^{n_c} \end{pmatrix}^2} \left| \sum_{t=1}^{N_S^{n_c}} \sum_{u=1}^{N_S^{m_c}} v_t \mu_u \langle \Phi_r^{n_c,t} | \vec{r} | \Psi_r^{m_c,u} \rangle \right|^2. \quad (\text{V.2.12})$$

Notons que dans ce cas on a $M_{L,\min}^{n_c} = 0$. Le carré du coefficient $3j$ de Wigner figurant au membre de droite de l'équation (V.2.12) devient alors [Réf. 11, p. 145]

$$\begin{pmatrix} L_{n_c} & 1 & L_{m_c} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 = \frac{\max(L_{n_c}, L_{m_c})}{(2L_{n_c} + 1)(2L_{m_c} + 1)}. \quad (\text{V.2.13})$$

La section efficace d'absorption (V.2.12) s'écrit finalement

$$\sigma_a(\omega) = \frac{4\pi^2\omega e^2}{3c} (1 - e^{-\hbar\omega/\Gamma}) \sum_{n_c} \frac{P_{n_c}}{N_S^{n_c}} \sum_{m_c} \sum_{E_{n_c}, L_{n_c}, S_{n_c}} \sum_{E_{m_c}, L_{m_c}, S_{m_c}} (2L_{n_c} + 1)(2L_{m_c} + 1) \\ (2S_{n_c} + 1) \frac{\delta(L_{n_c} L_{m_c} 1) \delta(\hbar\omega - (E_{m_c} - E_{n_c}))}{\max(L_{n_c}, L_{m_c})} \left| \sum_{t=1}^{N_S^{n_c}} \sum_{u=1}^{N_S^{m_c}} v_t \mu_u \langle \phi_r^{n_c, t} | \vec{r} | \psi_r^{m_c, u} \rangle \right|^2. \quad (\text{V.2.14})$$

CHAPITRE VI

Résultats numériques et discussion

VI.1 Autocorrélations et probabilités des configurations électroniques

Le but de cette section est de présenter et de discuter certaines des conséquences du modèle de calcul des probabilités des configurations électroniques que nous avons exposé au chapitre IV.

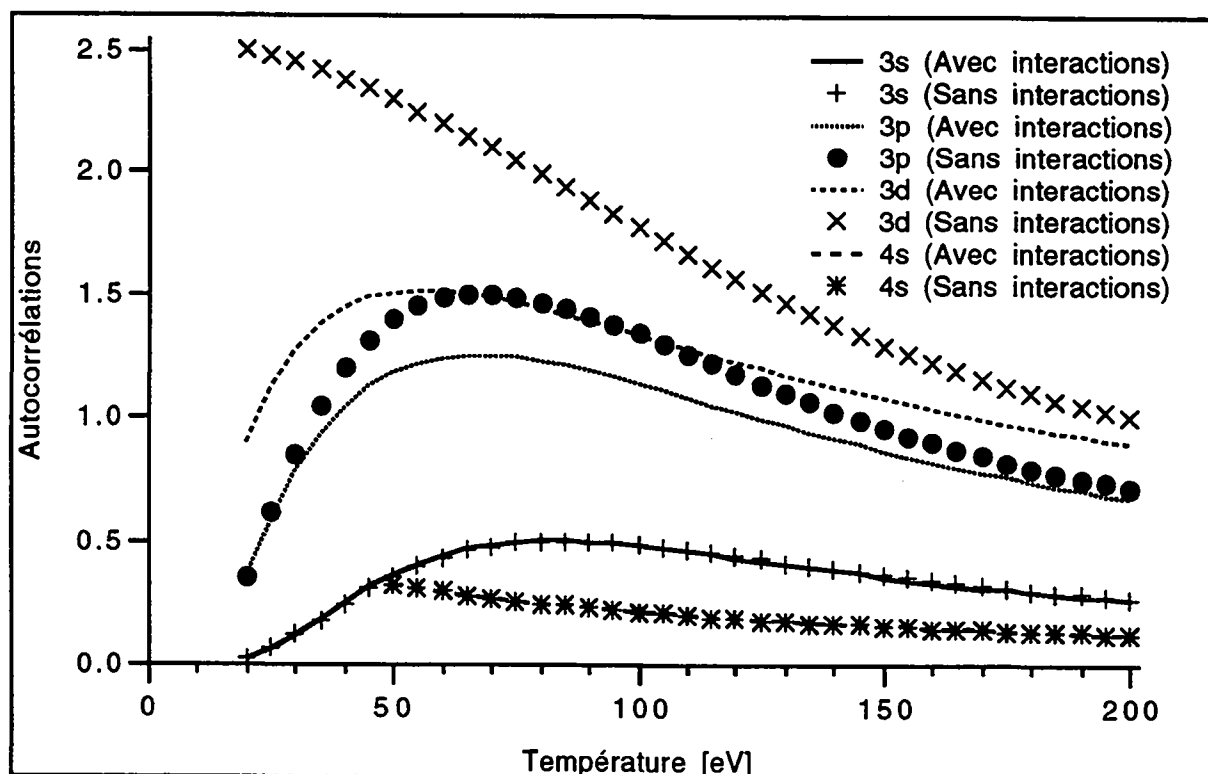


Figure VI.1 Dépendance en température de l'autocorrélation des nombres d'occupation de certains niveaux pour un plasma de fer à la densité du solide. Effet des interactions. Les lignes correspondent aux autocorrélations calculées en tenant compte des interactions. Les points montrent les mêmes autocorrélations obtenues sans les interactions.

La Figure VI.1 montre la dépendance en température de l'autocorrélation des nombres d'occupations (i.e. G_{ii}^{-1} équation (IV.3.4)) pour un plasma de fer à la densité du solide. Seuls les niveaux 3s, 3p, 3d et 4s ont été considérés. Pour chaque niveau, l'autocorrélation a été calculée avec et sans interactions. Par interaction, nous entendons le second terme dans l'équation (IV.2.12). Pour les niveaux 4s et 3s, les interactions n'apportent aucune contribution et les deux courbes sont identiques. Ces deux niveaux ne sont corrélés, ni avec les autres niveaux liés, ni avec les électrons libres. Dans ce cas, l'autocorrélation peut être obtenue simplement en inversant le premier terme du membre de droite de l'équation (IV.2.12). Pour les niveaux 3p et 3d, l'inclusion du terme d'interaction a pour effet de diminuer l'autocorrélation. Dans le cas du niveau 3d la différence peut même atteindre 60% pour les basses températures. Le fait de négliger les interactions peut donc conduire à des erreurs importantes dans le calcul de la probabilité des configurations électroniques, comme l'avait déjà remarqué F. Grimaldi et F. Perrot [Réf. 1-3].

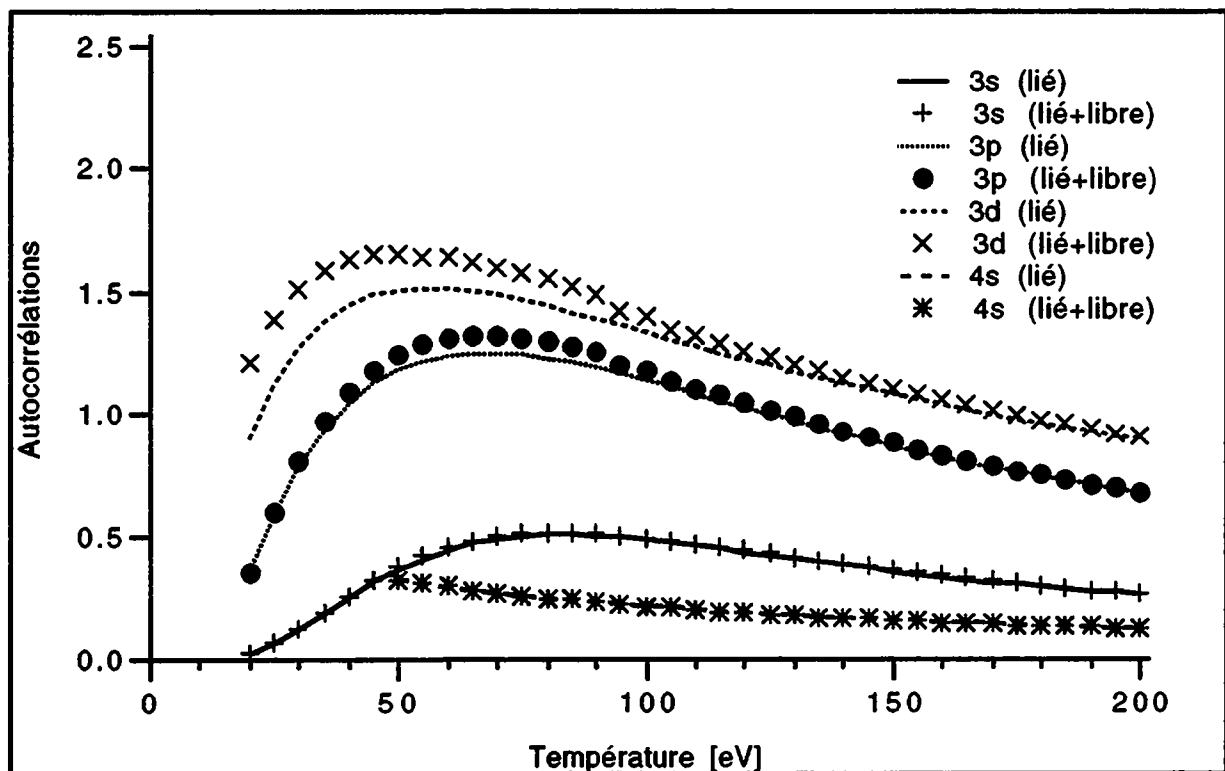


Figure VI.2 Dépendance en température de l'autocorrélation des nombres d'occupation de certains niveaux pour un plasma de fer à la densité du solide. Effet des électrons libres. Les lignes correspondent aux autocorrélations calculées en tenant compte uniquement des interactions entre niveaux liés. Les points montrent les mêmes autocorrélations obtenues en incluant les électrons libres.

La Figure VI.2 montre l'effet des électrons libres sur l'autocorrélation des niveaux 3s, 3p, 3d, 4s en fonction de la température. Afin de calculer l'effet des électrons libres, le spectre en énergie de ces derniers a été discrétisé. Le calcul de la densité des électrons libres au moyen

de l'équation de Schrödinger fait apparaître des résonances dans le spectre d'énergie de ces électrons. Nous avons apporté un soin particulier au traitement de ces résonances dans le cas où elles étaient présentes. Dans nos calculs, il s'est avéré suffisant de prendre huit points dans la région $[-5\Gamma, 5\Gamma]$, où Γ est la moitié de la largeur de la résonance. Pour les régions du spectre d'énergie situées en dehors des résonances, seuls sept points ont été utilisés. Nous n'observons bien sûr aucun effet des électrons libres sur les niveaux pour lesquels les effets des interactions sont négligeables (3s et 4s, voir Figure VI.1). Par contre, pour les niveaux 3p et 3d, l'inclusion des électrons libres a pour conséquence d'augmenter l'autocorrélation. Cet effet reste cependant moins important que celui dû aux interactions avec les autres niveaux liés (comparer les Figures VI.1 et VI.2).

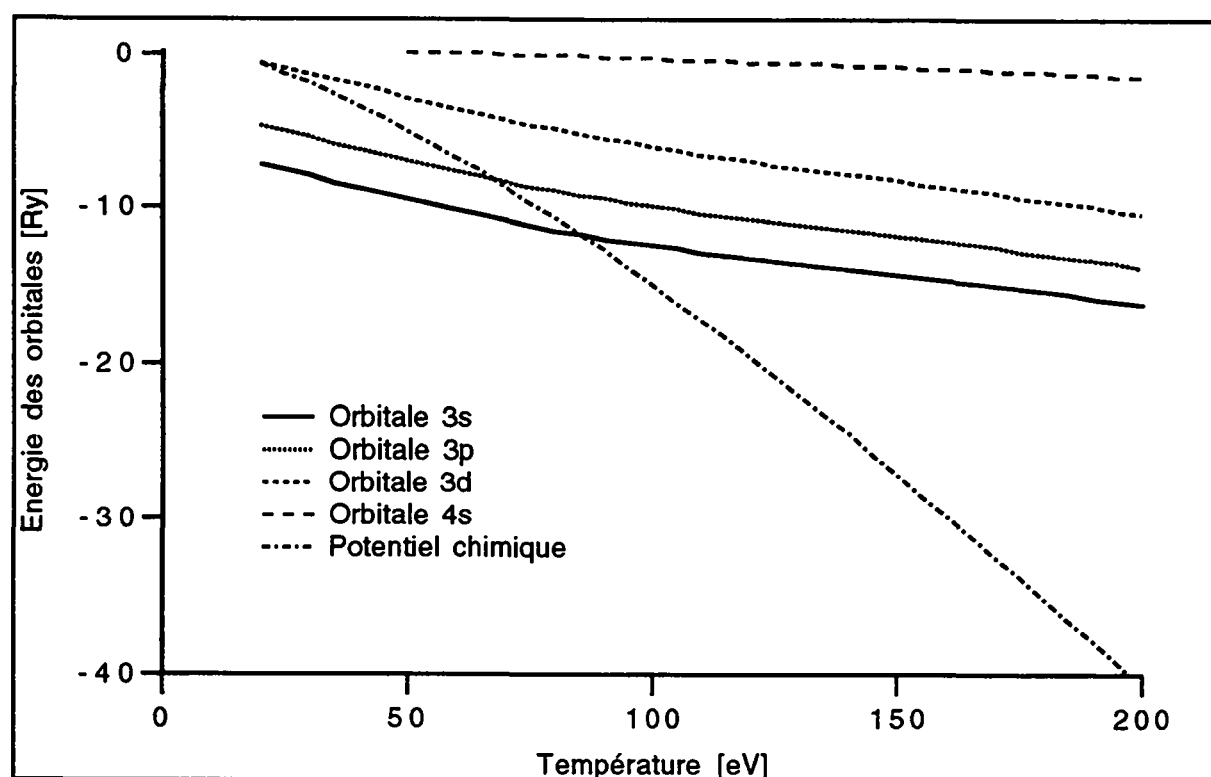


Figure VI.3 Dépendance en température de l'énergie de certains états liés de l'atome moyen pour un plasma de fer à la densité du solide.

La Figure VI.3 représente, pour un plasma de fer à la densité du solide, l'effet de la température sur certains niveaux d'énergie et le potentiel chimique de l'atome moyen. Nous constatons que le maximum de l'autocorrélation des niveaux 3d, 3p et 3s de la Figure VI.1 coïncide avec la température pour laquelle ces niveaux d'énergie traversent le potentiel chimique. Cet effet est une manifestation du comportement du terme $1/\tilde{\rho}(1-\tilde{\rho})$ (voir équation IV.2.12) pour des énergies proches du potentiel chimique.

La Figure VI.4 montre la dépendance en densité de l'autocorrélation pour un plasma de fer d'une température de 50 eV. La différence entre les autocorrélations avec et sans interactions diminue pour les densités élevées, excepté pour le niveau 3d qui n'existe plus pour des densités supérieures à 10 g/cm^3 .

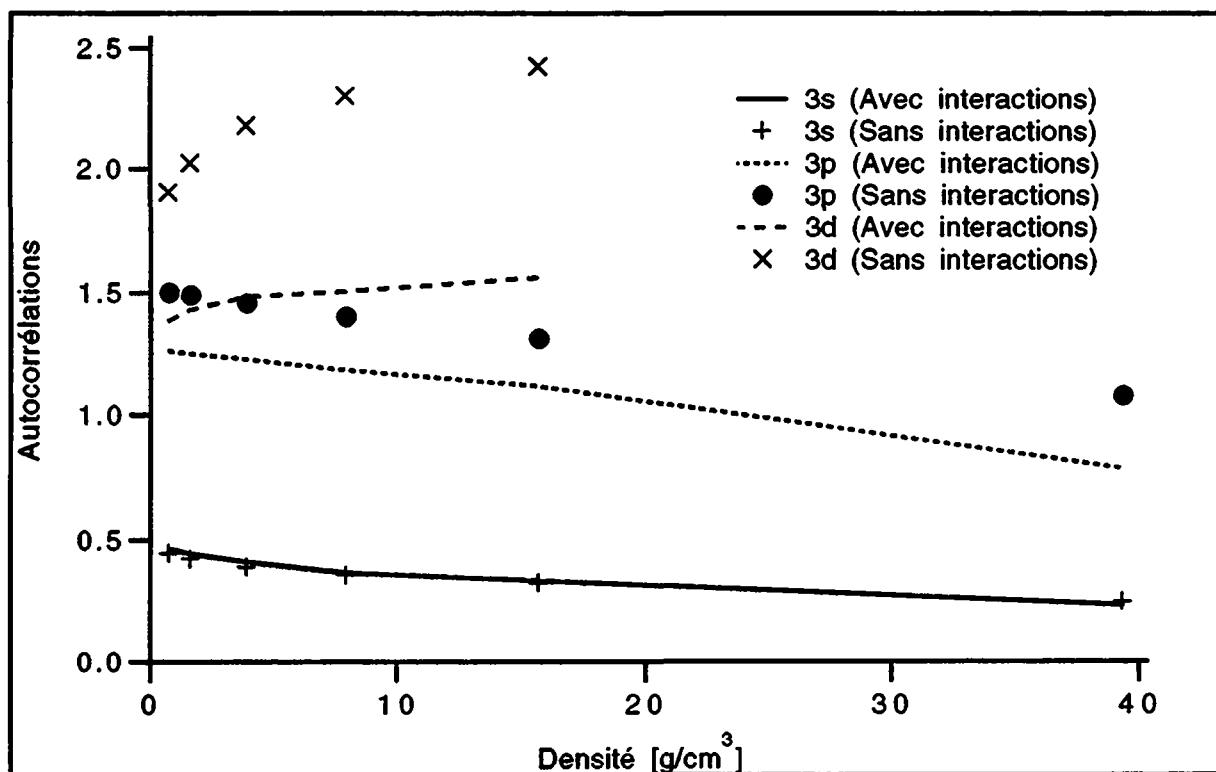


Figure VI.4 Dépendance en densité de l'autocorrélation des nombres d'occupation de certains niveaux pour un plasma de fer à 50 eV. Effet des interactions. Les lignes correspondent aux autocorrélations calculées en tenant compte des interactions. Les points montrent les mêmes autocorrélations obtenues sans les interactions.

Nous présentons dans la Figure VI.5 ci-dessous les distributions de charge ionique autour de la charge de l'atome moyen pour un plasma de fer à la densité du solide. Les températures de 50 et de 100 eV ont été considérées. La distribution de droite, correspondant au cas 50 eV, ressent plus l'effet de l'inclusion des interactions. Rappelons qu'à cette température, l'autocorrélation du niveau 3d montre une très forte dépendance par rapport à l'inclusion des interactions.

L'ensemble de ces résultats, et particulièrement la Figure VI.5, mettent en évidence l'importance des interactions entre les niveaux liés pour le calcul de la distribution de charge ionique.

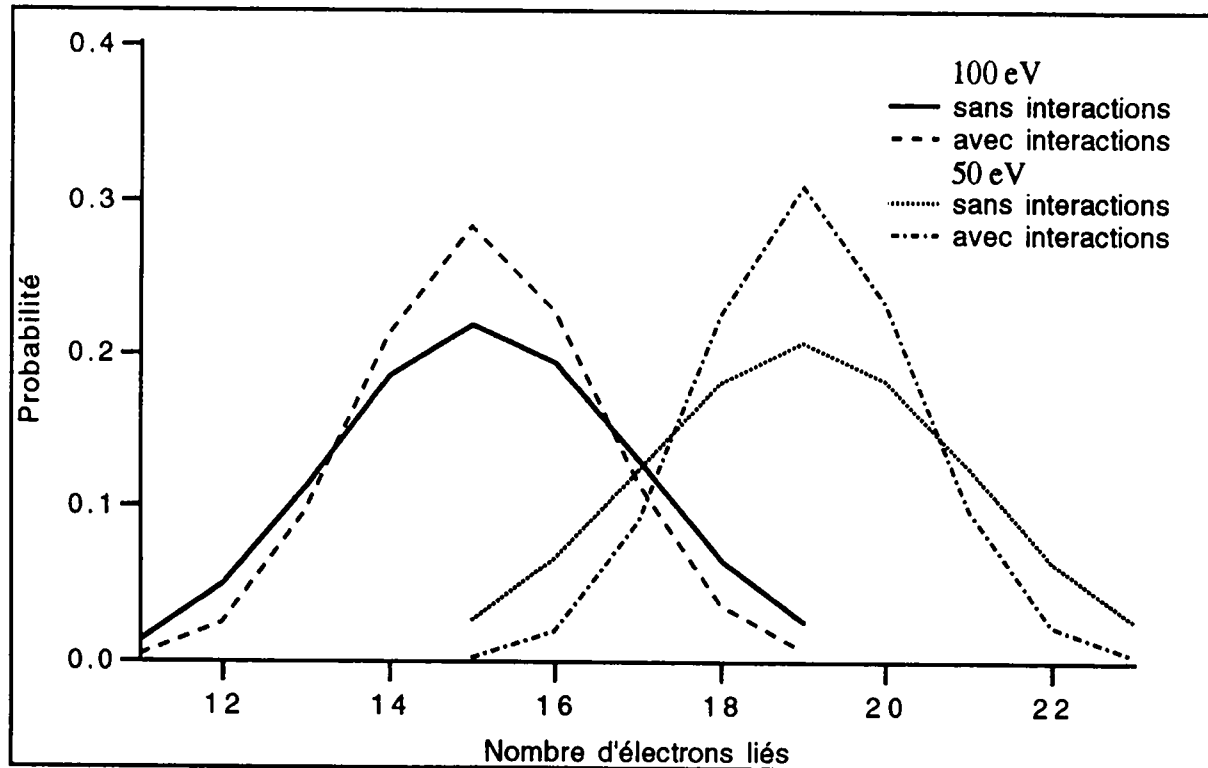


Figure VI.5 Distribution de charge ionique autour de la charge de l'atome moyen. Cas du fer à la densité du solide pour deux températures: 50 eV (distribution de droite) et 100 eV (distribution de gauche). Dans les deux cas, les distributions avec et sans interactions sont représentées.

VI.2 Calcul des moyennes de Rosseland et de Planck

Comme nous l'avons relevé à l'équation (II.4.15), la section efficace d'absorption des photons peut être décomposée en trois contributions: transitions lié-lié, lié-libre, libre-libre. Le calcul de la contribution des transitions lié-libre et libre-libre aux opacités moyennes de Planck et de Rosseland ayant été réalisé lors de travaux précédents [Réf. 4], nous allons ici nous intéresser aux problèmes soulevés par le calcul de la contribution due aux transitions lié-lié.

Les transitions entre états électroniques liés sont à l'origine de la structure de lignes observée dans le spectre d'absorption. Dans les modèles de calcul de la section efficace que nous avons développé dans ce travail, chacune de ces transitions est associée à une distribution de Dirac. En fait, plusieurs phénomènes physiques limitent les temps de vie de l'état excité, ce qui a pour conséquence d'élargir les lignes de transitions. Parmi les phénomènes responsables de cet élargissement, citons la pression des électrons libres sur l'atome émetteur, l'effet du champ électrique issu des autres ions du plasma (effet Stark) sur ce même atome, l'effet Doppler et le temps de vie naturel de la transition.

A part l'effet Doppler, qui donne lieu à une distribution de Gauss, tous ces phénomènes élargissent les lignes selon une distribution de Lorentz. Une description succincte des modèles et des formules utilisées pour le calcul des élargissements associés à chacun de ces phénomènes figure dans l'Annexe E (voir aussi [Réf. 5]).

Lorsque deux phénomènes physiques contribuent à l'élargissement d'une ligne de transition, la distribution résultante est le produit de convolution de leur distribution. Dans le cas d'une distribution de Gauss et de Lorentz, le résultat du produit de convolution est appelé distribution de Voigt (voir Annexe D).

Revenons au calcul des opacités moyennes de Planck et de Rosseland. L'intégration numérique sur la fréquence est réalisée au moyen de la formule des trapèzes. Le choix du pas d'intégration est délicat. En effet, au moment de ce choix, la fréquence ainsi que la largeur des lignes de transitions sont inconnues. Afin d'obtenir une précision d'intégration suffisante, il est nécessaire que chaque ligne soit intégrée sur plusieurs points. La largeur des lignes pouvant être très faible, nous nous trouvons très vite dans une situation où le maillage d'intégration comporte tellement de points (typiquement plusieurs millions!) que les temps d'intégration sont prohibitifs.

La solution que nous avons retenue implique que la fréquence, l'amplitude et l'élargissement de chaque transition doivent être calculés et mémorisés avant l'intégration numérique. Soit N_{bb} le nombre de transitions entre états liés. A chaque ligne de transition de fréquence f_i , $i = 1, N_{bb}$, est associé l'intervalle d'intégration $[(f_{i-1} + f_i)/2, (f_i + f_{i+1})/2]$. Soit Γ_i la demi largeur de la ligne f_i . Afin de traiter correctement le centre de la ligne de transition, l'intervalle $[(f_{i-1} + f_i)/2, (f_i + f_{i+1})/2]$ est lui-même subdivisé en trois intervalles de la façon suivante: $I_{i-1} = [(f_{i-1} + f_i)/2, f_i - \alpha\Gamma_i]$, $I_i = [f_i - \alpha\Gamma_i, f_i + \alpha\Gamma_i]$ et $I_{i+1} = [f_i + \alpha\Gamma_i, (f_i + f_{i+1})/2]$. Le paramètre α a typiquement une valeur de 50 et dans chacun des trois intervalles I_{i-1} , I_i , I_{i+1} , nous choisissons généralement 50 points d'intégration.

Le domaine d'intégration se trouve ainsi divisé en intervalles dont le pas d'intégration est déterminé par la largeur de la ligne de transition associée. L'intégration sur la fréquence est donc effectuée en traitant successivement chaque ligne de transition. La section efficace d'absorption des photons pour une fréquence donnée est la somme des contributions de toutes les lignes de transition pour cette fréquence. Si N_{pi} est le nombre total de pas d'intégration, nous devrions donc appeler $N_{pi} \cdot N_{bb}$ fois la fonction de Voigt. Le temps de calcul requis par cette opération peut très vite devenir prohibitif. Pour cette raison, nous ne calculons que les contributions issues des lignes de transition voisines en fréquence. Cette approximation est

applicable dans la mesure où l'élargissement des lignes est faible et la queue des distributions courte. Dans le cas où les distributions de Voigt sont proches d'une gaussienne, il suffit de ne considérer que les 20 ou 30 lignes de transition les plus proches, alors que si les distributions de Voigt tendent vers une lorentzienne, plusieurs centaines de lignes voisines s'avèrent nécessaires. En variant le nombre de lignes de transition considérées en chaque point d'intégration, il est possible de déterminer l'effet de cette approximation sur la valeur des moyennes de Planck et de Rosseland.

Remarquons que cette méthode présente l'inconvénient de limiter le nombre de lignes considérées en raison de la place mémoire disponible. Dans la pratique, cette limitation s'avère beaucoup moins contraignante que celle concernant la taille des matrices à diagonaliser dans le cadre de l'approche DTA (voir chapitre V).

VI.3 Effet de la température sur un plasma de fer de 0.01 g/cm^3

Comme l'ont montré Iglesias et Rogers [Réf. 6] pour un plasma de fer à une température de 20 eV et une densité de $6.82 \cdot 10^{-5} \text{ g/cm}^3$, le traitement des transitions électroniques au moyen de la méthode DTA a pour effet de multiplier la moyenne de l'opacité de Rosseland d'un facteur 3 à 4. Cette augmentation avait pour cause une forte augmentation de l'opacité pour des photons dont l'énergie s'étendait de 60 eV à 80 eV; effet qui a été confirmé ultérieurement par l'expérience de Da Silva et al. (voir Figure I.5 et [Réf. 7]).

Dans les Figures VI.6 à VI.10 ci-dessous, nous commençons par présenter les spectres d'opacité dans un cas proche de celui de l'expérience de Da Silva et al., c'est-à-dire 20 eV et 0.01 g/cm^3 . Ces différents spectres ont été calculés dans le cadre des différentes approximations que nous avons exposées dans les chapitres précédents: l'approximation des électrons indépendants, ainsi que les approches DCA et DTA. Dans tous les cas, l'élargissement de ligne ne tient compte que de l'élargissement par effet Doppler ainsi que celui dû à la pression des électrons libres (voir Annexe E).

Dans la Figure VI.6 est présenté le spectre d'opacité totale à 20 eV et une densité de 0.01 g/cm^3 pour un plasma de fer calculé dans le cadre du modèle des électrons indépendants. Seuls les états électroniques de moment angulaire et de nombre quantique radial inférieurs à quatre ont été considérés, le nombre quantique principal étant limité à cinq. Pour le calcul de la densité des électrons libres, seuls les états propres de l'équation de Schrödinger dont le nombre quantique angulaire était inférieur à huit ont été retenus. Le nombre d'états liés

solutions de l'équation de Schrödinger dans le potentiel de l'atome moyen est de quinze, ce qui donne lieu à 40 transitions électroniques possibles.

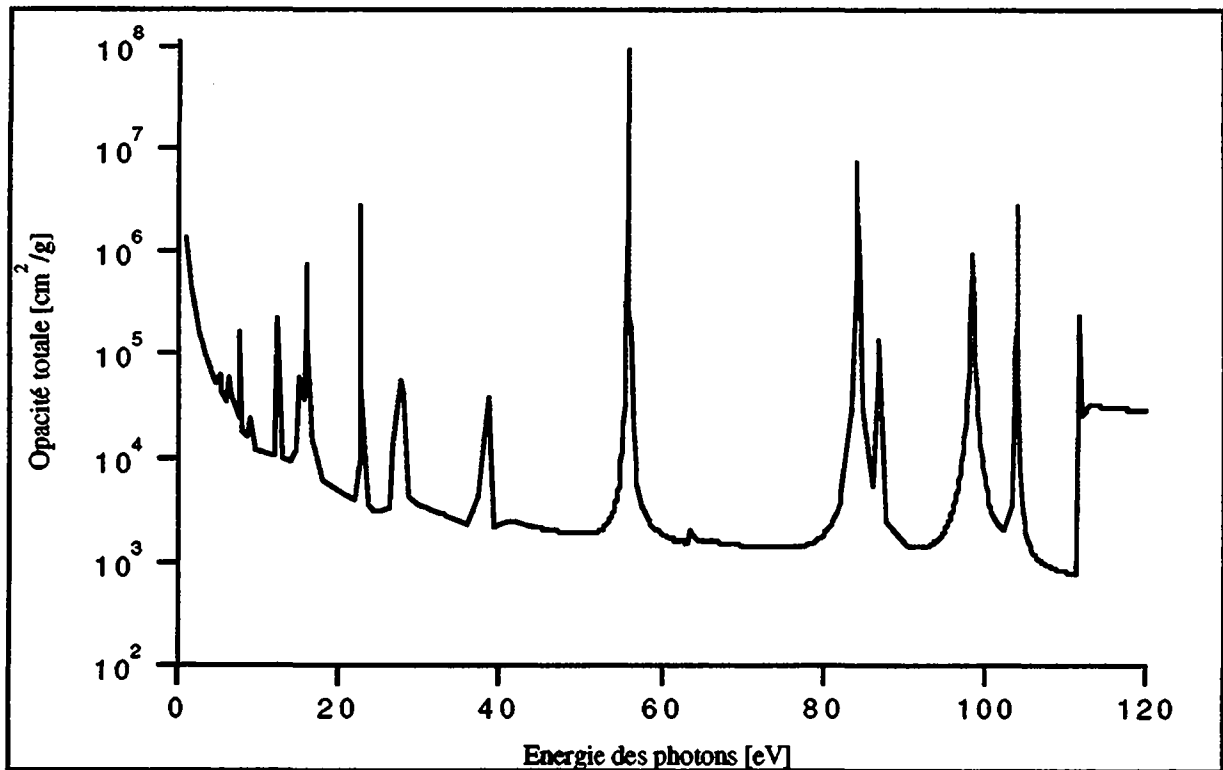


Figure VI.6 Opacité totale pour le fer à une température de 20 eV et une densité de 0.01 g/cm^3 . Modèle des électrons indépendants. Nombre de transitions électroniques: 40.

La Figure VI.7 montre le spectre d'opacité pour le même plasma et la même physique atomique, mais dans le cadre de l'approximation DCA. La probabilité des configurations électroniques est calculée en tenant compte à la fois des corrélations entre les niveaux liés et les niveaux liés et libres. Seules 29 configurations électroniques initiales sont traitées, donnant lieu à 670 transitions électroniques. En comparant les résultats des Figures VI.6 et VI.7, nous constatons que les transitions situées autour de 60 eV sont les plus affectées par le calcul DCA.

La Figure VI.8 présente le même calcul DCA, mais cette fois en retenant 13079 configurations électroniques différentes. Le nombre de transitions électroniques passe de 670 à 362517, ce qui a pour effet de remplir le spectre de la Figure VI.7. Néanmoins, la forme ainsi que l'extension en énergie des groupes de transitions électroniques ne sont pas particulièrement affectées par le changement drastique du nombre de transitions électroniques.

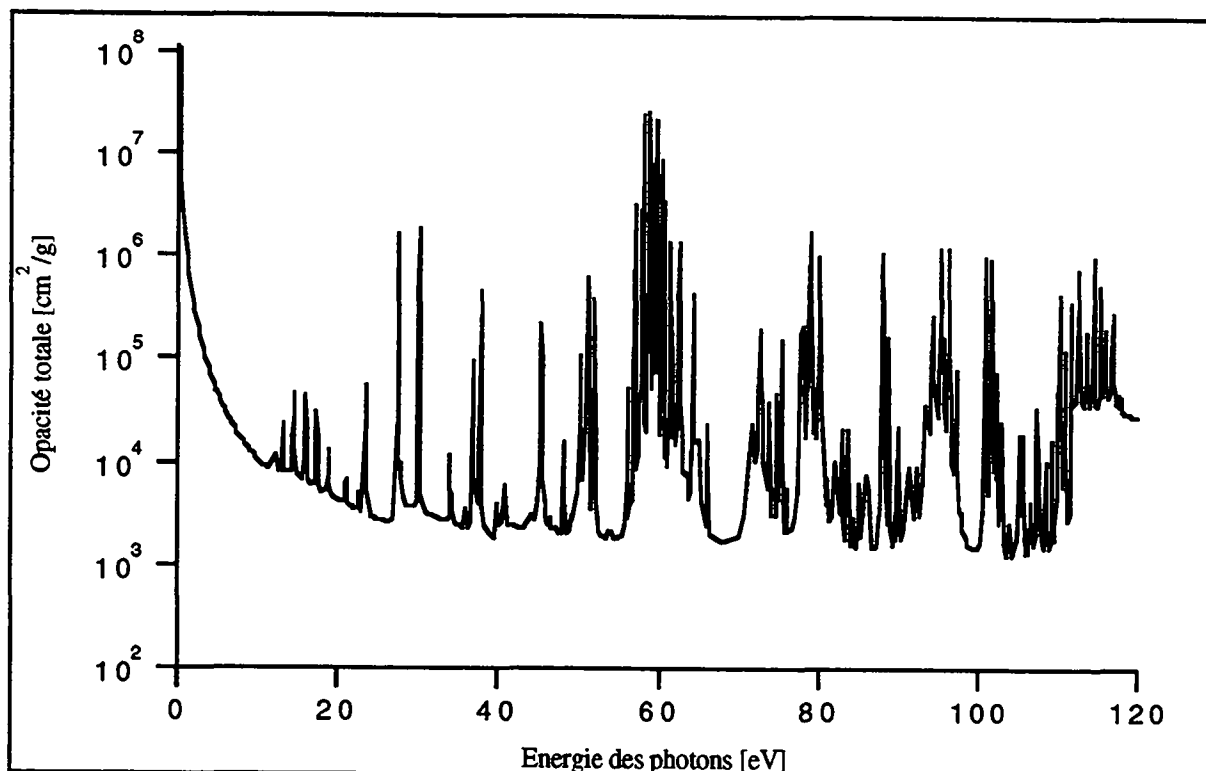


Figure VI.7 Opacité totale pour le fer à une température de 20 eV et une densité de 0.01 g/cm³. Modèle DCA. Nombre de transitions électroniques: 670. Nombre de configurations électroniques initiales traitées: 29. Nombre de configurations électroniques possibles: 37785.

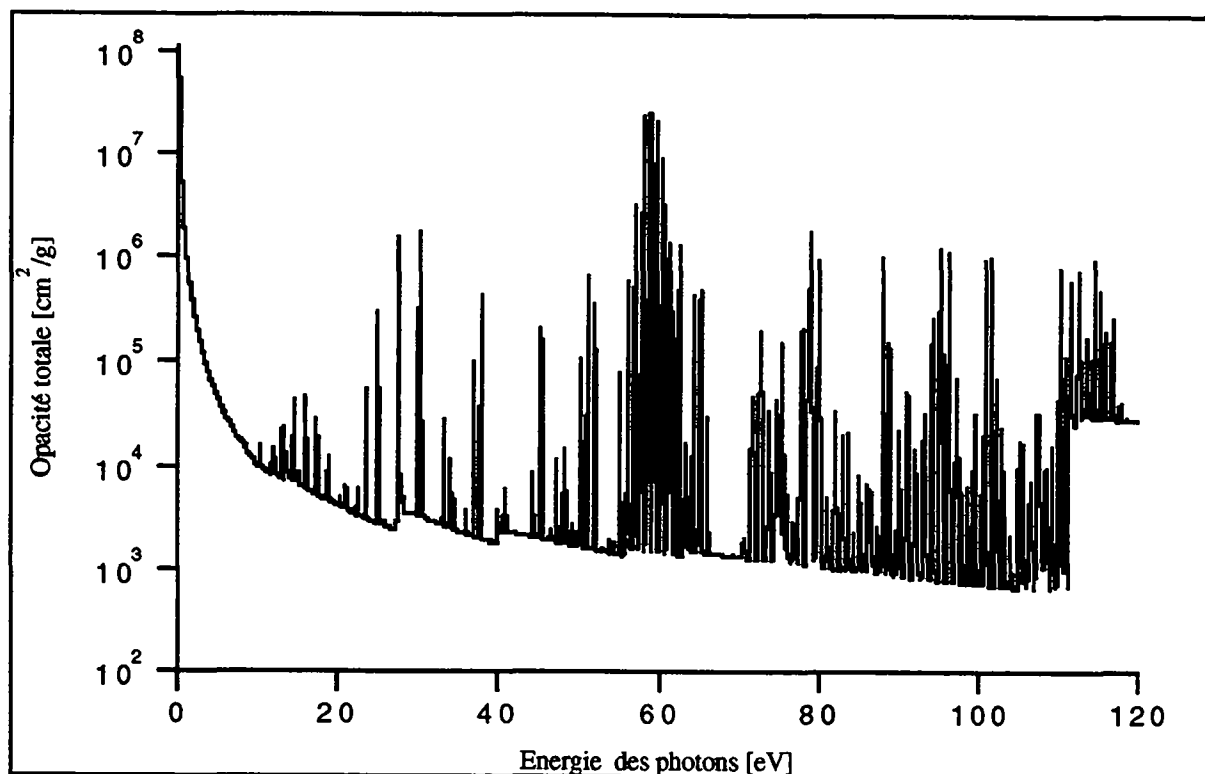


Figure VI.8 Opacité totale pour le fer à une température de 20 eV et une densité de 0.01 g/cm³. Modèle DCA. Nombre de transitions électroniques: 362517. Nombre de configurations électroniques initiales traitées: 13079. Nombre de configurations électroniques possibles: 37785.

Dans la Figure VI.9 le spectre d'opacité est calculé dans le cadre de la méthode DTA dans le cas du couplage intermédiaire. Pour 29 configurations électroniques initiales traitées, nous obtenons 180310 transitions. La taille maximale des matrices diagonalisées lors du calcul DTA a été fixée à 200. Environ 70% des transitions sont traitées au moyen de l'approximation DCA, les configurations électroniques initiales et finales associées à ces transitions nécessitant une base de plus de 200 déterminants de Slater à leur description. Malgré le nombre réduit de transitions traitées dans la méthode DTA et le fait que nous avons deux fois moins de transitions que dans le cas DCA de la Figure VI.8, nous observons une modification importante de la répartition des lignes de transitions entre 60 eV et 80 eV. Non seulement l'amplitude mais aussi les énergies des raies de transition sont modifiées par le traitement des interactions entre électrons liés. Qualitativement, c'est le résultat obtenu par Da Silva et al. La comparaison avec le spectre d'opacité obtenu dans le cadre de l'approximation des électrons indépendants (voir Figure VI.6), révèle que c'est la transition située près de 60 eV qui est redistribuée par le traitement DTA. Cette transition a lieu entre deux états électroniques de nombre quantique principal égal à trois (transition $3p \rightarrow 3d$).

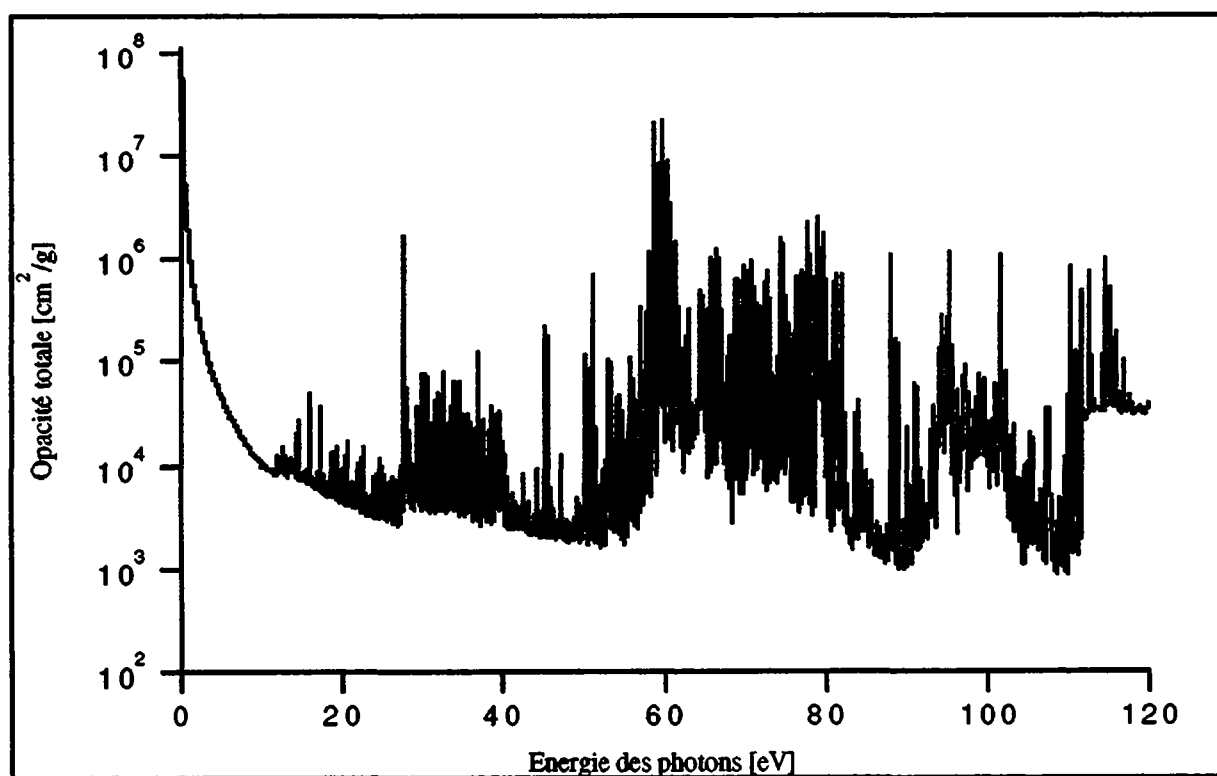


Figure VI.9 Opacité totale pour le fer à une température de 20 eV et une densité de 0.01 g/cm^3 . Modèle DTA, couplage intermédiaire. Nombre de transitions électroniques: 180310. Nombre de configurations électroniques initiales traitées: 29. Nombre de configurations électroniques possibles: 37785.

Dans la Figure VI.10, le même calcul DTA a été réalisé dans le cas du couplage de Russel-Saunders. Nous observons une diminution du nombre de lignes de transitions qui passe de 180310 à 100741, pour le même nombre de configurations électroniques initiales. L'effet de redistribution des lignes de transition, déjà observé pour le spectre de la Figure VI.9, devient encore plus important. Ce résultat s'explique de la manière suivante: dans le couplage de Russel-Saunders, les conditions sur les valeurs propres M_L et M_S associées aux sous-espaces sur lesquels sont diagonalisés les opérateurs \bar{L}^2 , \bar{S}^2 et H sont beaucoup plus contraignantes que celles imposées aux valeurs propres M_J dans le cas du couplage intermédiaire. La dimension des sous-espaces est ainsi plus petite dans le cas du couplage Russel-Saunders, permettant de traiter plus de transitions dans le cadre de cette approximation. D'après les résultats des Figures VI.9 et VI.10, nous pouvons également conclure que le couplage spin-orbite n'a pas d'effet observable.

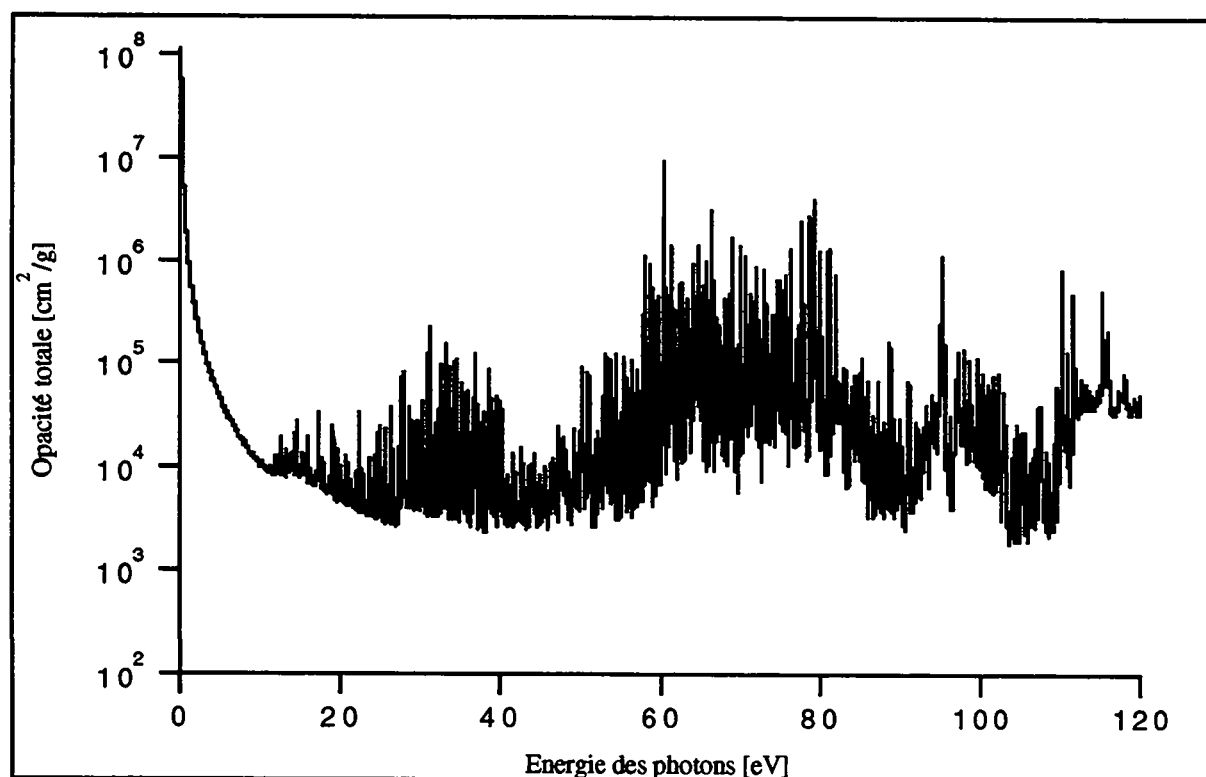


Figure VI.10 Opacité totale pour le fer à une température de 20 eV et une densité de 0.01 g/cm³. Modèle DTA, couplage de Russel-Saunders. Nombre de transitions électroniques: 100741. Nombre de configurations électroniques initiales traitées: 29. Nombre de configurations électroniques possibles: 37785.

Remarquons que Da Silva et al. ont mesuré le spectre de transmission d'un plasma de fer d'une température de 25 eV et de $8 \cdot 10^{-3}$ g/cm³, alors que nous n'avons parlé jusqu'à maintenant que du spectre d'opacité totale d'un plasma de fer dans des conditions similaires de

densité et de température. Afin de comparer nos résultats avec le spectre de transmission expérimental, nous montrons à la Figure VI.11 le spectre de transmission théorique correspondant au spectre d'opacité de la Figure VI.10 ainsi que le spectre de transmission mesuré par Da Silva et al. [Réf 7]. Le spectre de transmission théorique a été obtenu en utilisant la densité par unité de surface de $2 \cdot 10^{-5} \text{ g/cm}^2$ indiquée dans le papier de Da Silva et al. [Réf 7].

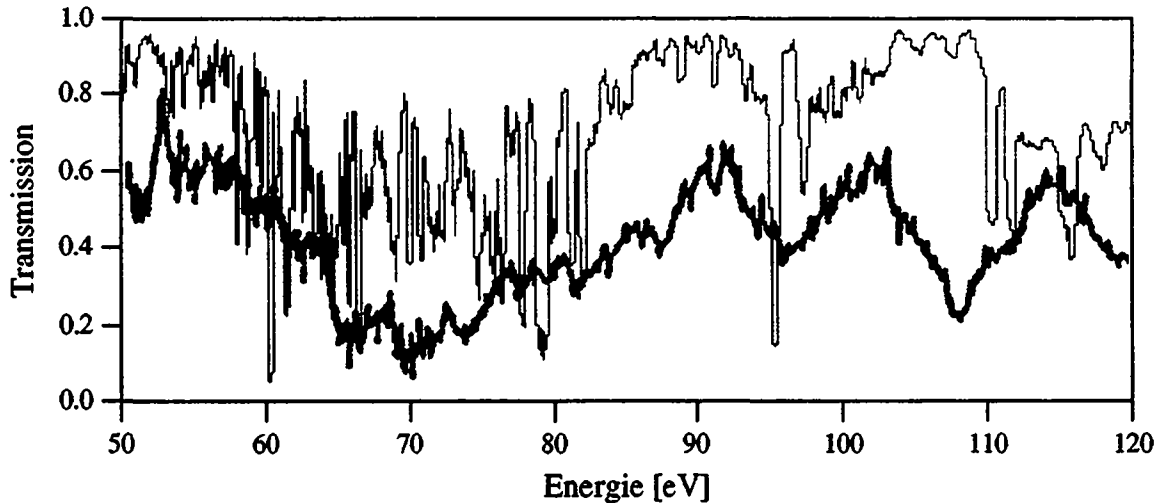


Figure VI.11 Spectre de transmission calculé (trait fin) et mesuré (trait gras) pour le plasma de fer réalisé dans l'expérience de Da Silva et al. Le spectre de transmission théorique est obtenu à partir du spectre d'opacité de la Figure VI.10.

Sur l'intervalle d'énergie considéré, la transmission théorique peut être jusqu'à deux fois plus grande que la transmission expérimentale. Par contre la diminution de la transmission pour les photons dont l'énergie est située entre 60 eV et 80 eV est bien reproduite par la transmission théorique. Rappelons que cette diminution est due à la redistribution des forces d'oscillateurs.

Afin de déterminer si cet effet persiste lorsque la température augmente, nous présentons ci-dessous les moyennes de Planck (voir Tableau VI.1) et de Rosseland (voir Tableau VI.2) pour des plasmas de fer de 20, 40, 80 et 150 eV et une densité de 0.01 g/cm^3 . Notons que seules quatre températures ont été considérées, en raison du temps de calcul nécessaire (plusieurs dizaines d'heures dans certains cas).

Pour ces quatre températures, les transitions entre états liés fournissent la contribution la plus importante à l'opacité moyenne de Planck. Pour chacun de ces cas, cette contribution représente environ le 90% de l'opacité moyenne totale de Planck (les 10% restant provenant des transitions lié-libre et libre-libre). Pour les plasmas qui ont une température de 40 et 80 eV, la moyenne de Planck n'est pas particulièrement affectée par le type d'approximation

utilisée pour les calculs de la section efficace d'absorption des photons. Par contre, pour les températures de 20 et 150 eV, cette moyenne diminue de 20 à 25% dans le cas du traitement DTA avec couplage de Russel-Saunders et ne change presque pas dans le cas DTA avec couplage intermédiaire.

Température [eV]	Electrons indépendants [cm ² /g]	DCA [cm ² /g]	DTA Intermédiaire [cm ² /g]	DTA Russel-Saunders [cm ² /g]
20	48618	50142	45699	37621
40	16587	17984	16824	15488
80	2273	2195	2326	2258
150	1964	2044	1803	1455

Tableau VI.1 Moyennes de Planck pour le fer à 0.01 g/cm³ en fonction de la température dans les approximations des électrons indépendants, DCA, DTA (couplage intermédiaire et de Russel-Saunders).

Température [eV]	Electrons indépendants [cm ² /g]	DCA [cm ² /g]	DTA Intermédiaire [cm ² /g]	DTA Russel-Saunders [cm ² /g]
20	2877	4618	6153	11302
40	914	1570	2894	4475
80	189	199	231	212
150	29	31	39	34

Tableau VI.2 Moyennes de Rosseland pour le fer à 0.01 g/cm³ en fonction de la température dans les approximations des électrons indépendants, DCA, DTA (couplage intermédiaire et de Russel-Saunders).

La différence entre les couplages intermédiaire et de Russel-Saunders trouve sa source dans le nombre de transitions qui sont traitées dans la méthode DTA. Comme nous l'avons relevé ci-dessus, il est possible de traiter beaucoup plus de transitions dans la méthode DTA dans le cas du couplage de Russel-Saunders. La différence observée vient donc du fait que pour le couplage intermédiaire la majorité des transitions sont traitées dans le cadre de l'approximation DCA.

La différence entre le traitement DCA et le traitement DTA avec couplage de Russel-Saunders trouve son origine dans la redistribution de l'amplitude des transitions provenant de la diagonalisation des opérateurs \bar{L}^2 , \bar{S}^2 et H. Nous savons que le traitement DTA a pour effet

de provoquer l'éclatement des lignes de transition existant dans le traitement DCA. En principe, l'amplitude de chacune des transitions produites par cet éclatement doit être calculée au moyen des relations (V.2.11) ou (V.2.14), ce qui a été réalisé pour les résultats présentés dans les Tableaux VI.1 et VI.2. Nous avons donc effectué le même calcul pour le cas 150 eV, mais cette fois en supposant que les amplitudes des transitions issues de l'éclatement d'une ligne DCA étaient égales à l'amplitude de cette ligne DCA, divisée par le nombre de transitions produites par l'éclatement. Nous avons alors observé que la différence avec la moyenne de Planck issue du traitement DCA n'était plus que de 7% alors que la différence sur la moyenne de Rosseland était inférieure à 1%.

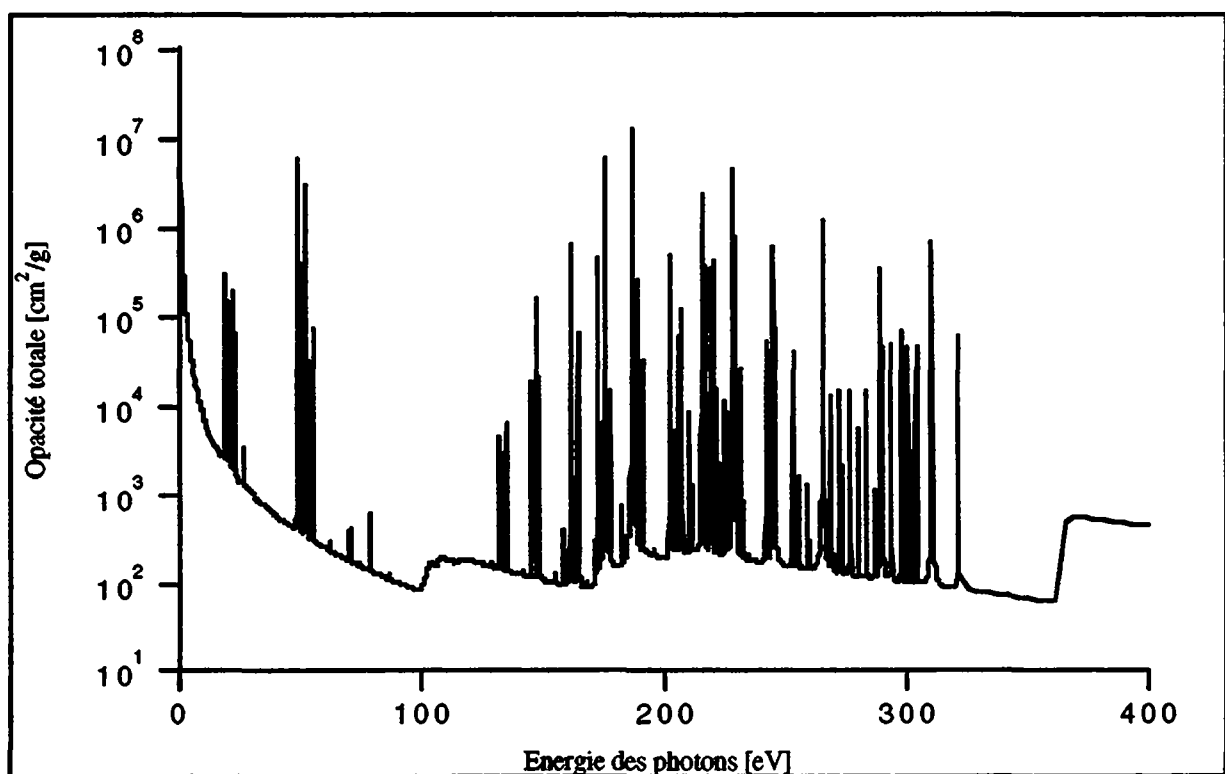


Figure VI.12 Opacité totale pour le fer à une température de 80 eV et une densité de 0.01 g/cm^3 . Modèle DCA. Nombre de transitions électroniques: 5070. Nombre de configurations électroniques initiales traitées: 289.

Du point de vue quantitatif, l'effet de redistribution des lignes de transitions observé dans les Figures VI.9 et VI.10 se retrouve dans la valeur de l'opacité moyenne de Rosseland. Comparons les opacités moyennes de Rosseland pour l'approximation des électrons indépendants (première colonne du Tableau VI.2) avec celles de la méthode DTA avec couplage de Russel-Saunders (quatrième colonne de ce même tableau). Pour les températures de 20 et 40 eV, nous constatons que cette moyenne augmente d'un facteur 3 à 4, alors que l'effet disparaît complètement à 80 et 150 eV. Du point de vue physique, cette augmentation

de la moyenne de Rosseland s'explique de la manière suivante: le traitement DTA a pour effet de redistribuer en énergie et en amplitude les transitions dont l'énergie se situe aux environs de 60 à 80 eV, énergie pour laquelle la fonction de pondération figurant dans la moyenne de Rosseland atteint son maximum (voir Figure I.3).

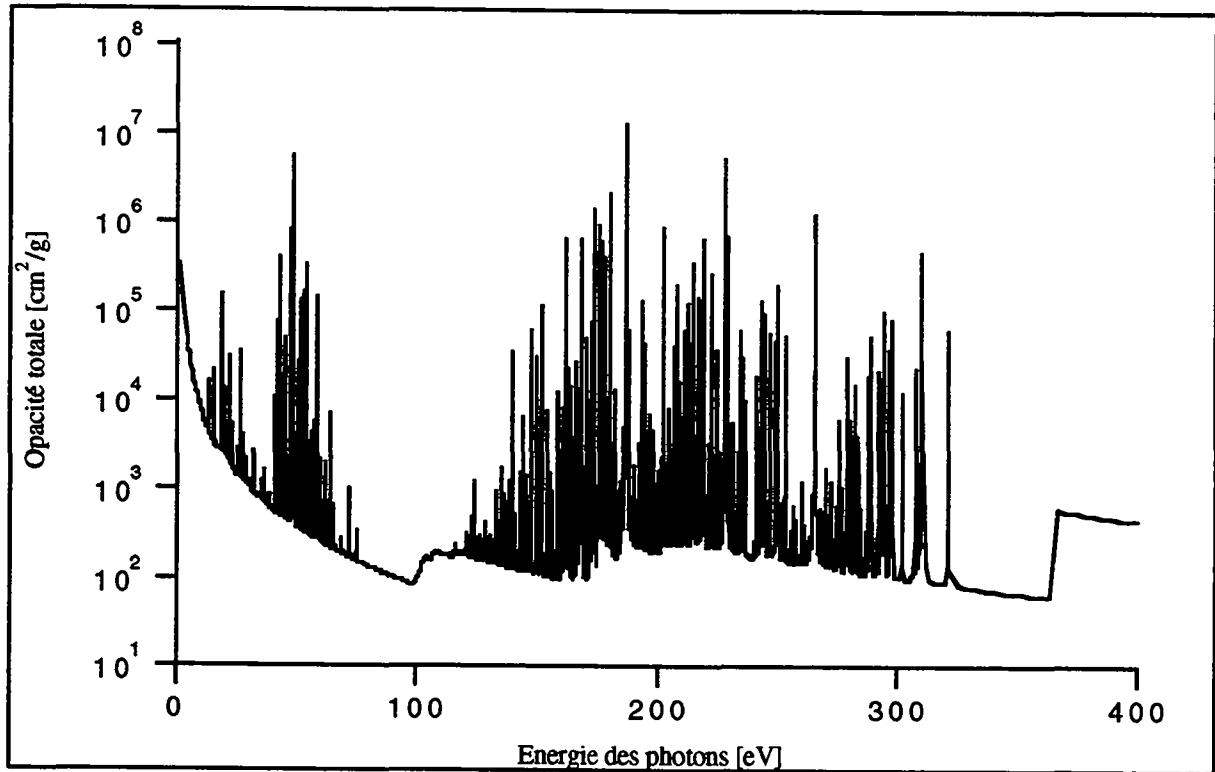


Figure VI.13 Opacité totale pour le fer à une température de 80 eV et une densité de 0.01 g/cm^3 . Modèle DTA, couplage de Russel-Saunders. Nombre de transitions électroniques: 12785. Nombre de configurations électroniques initiales traitées: 17.

Afin de vérifier la disparition de l'effet du traitement des transitions au moyen de la méthode DTA sur les spectres d'opacité, nous proposons dans les Figures VI.12 et VI.13 le cas de deux plasmas de fer à la densité de 0.01 g/cm^3 et une température de 80 eV. La Figure VI.12 indique le résultat obtenu lorsque les transitions électroniques sont traitées à l'aide de l'approximation DCA et la Figure VI.13 lorsque c'est la méthode DTA qui est utilisée. Comme pour le plasma de fer à 20 eV, nous observons un éclatement des lignes de transitions situées à une énergie d'environ 60 eV. La valeur de l'opacité moyenne de Rosseland pour ces cas (199 et $212 \text{ cm}^2/\text{g}$), prouve que cet éclatement n'a quasiment aucun effet sur les propriétés de transfert radiatif. Ce résultat s'explique si nous considérons la valeur du maximum de la fonction de pondération de la moyenne de Rosseland. En effet, pour un plasma de 80 eV, ce maximum vaut environ 280 eV. Cette valeur est très supérieure au 60 eV de la transition

électronique. L'éclatement de cette dernière ne contribue donc que fort peu à la moyenne de Rosseland.

VI.4 Effet du modèle de probabilité sur un plasma de fer d'une température de 20 eV et d'une densité de 0.01 g/cm³

Nous avons vu à la section VI.1 l'effet de la prise en compte des interactions entre électrons sur la variance de la distribution de charge ionique. L'importance de cet effet nous conduit naturellement à nous interroger sur les conséquences de ce changement de variance sur le spectre d'opacité ainsi que sur les opacités moyennes de Planck et de Rosseland pour les cas considérés.

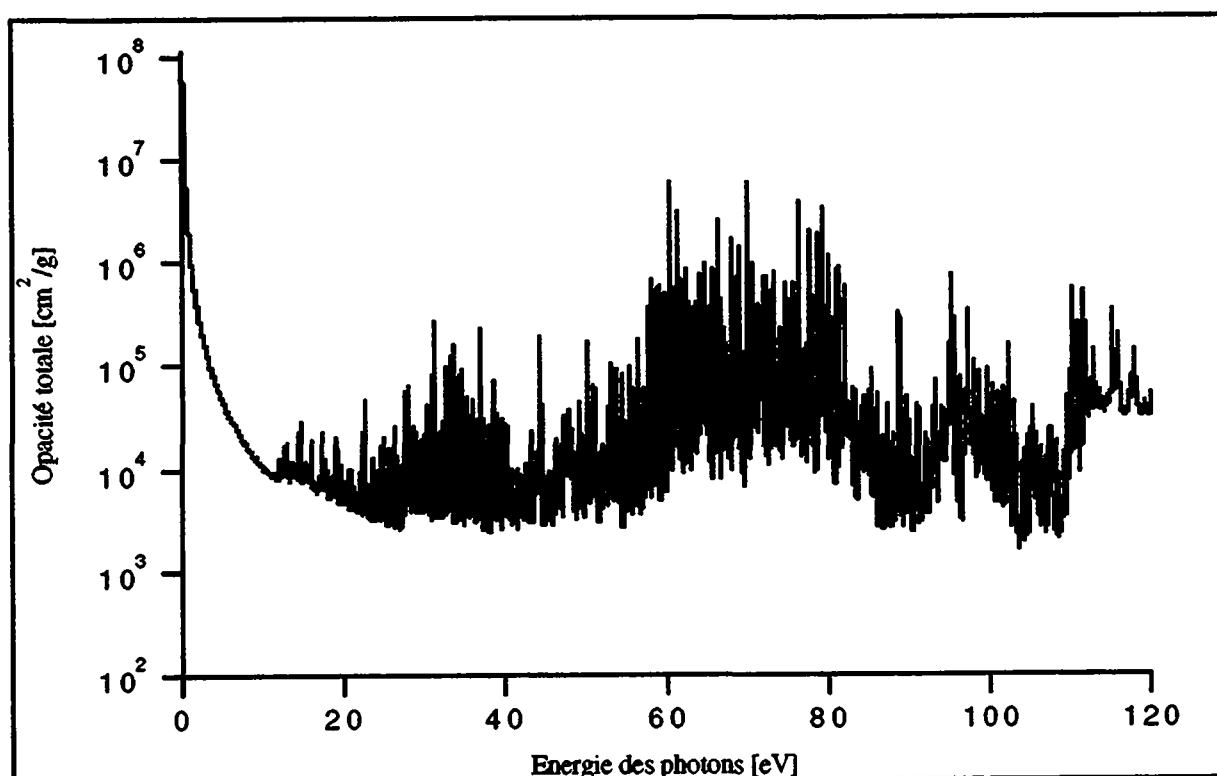


Figure VI.14 Opacité totale pour le fer à une température de 20 eV et une densité de 0.01 g/cm³. Modèle DTA, couplage de Russel-Saunders. La probabilité des configurations électroniques est calculée sans tenir compte des interactions. Nombre de transitions électroniques: 100741. Nombre de configurations électroniques initiales traitées: 29. Nombre de configurations électroniques possibles: 37785.

Afin d'apporter un élément de réponse à cette question, la Figure VI.14 présente le spectre d'opacité pour un plasma de fer à 20 eV et 0.01 g/cm³, pour lequel la probabilité des configurations électroniques a été calculée sans tenir compte des interactions. Par comparaison avec la Figure VI.10, aucun changement significatif n'est visible. Cette première

impression est confirmée par les opacités moyennes de Planck et de Rosseland, qui valent respectivement $36724 \text{ cm}^2/\text{g}$ et $11292 \text{ cm}^2/\text{g}$; ce qui correspond à une diminution de 2% et 0.1%, respectivement, par rapport aux opacités moyennes calculées en tenant compte des interactions (voir les Tableaux VI.1 et VI.2). Un calcul identique a été réalisé pour le même plasma, mais cette fois à une température de 40 eV. Les opacités moyennes de Planck et de Rosseland sont alors de $15830 \text{ cm}^2/\text{g}$ et de $4756 \text{ cm}^2/\text{g}$, respectivement. Ces deux valeurs correspondant à une augmentation de 2% pour la moyenne de Planck et de 6% pour la moyenne de Rosseland. Pour les deux plasmas étudiés, les modifications apportées par la prise en compte des interactions sont relativement faibles, ce qui n'exclut bien sûr pas l'existence de cas où la différence serait beaucoup plus importante.

CONCLUSION

La partie principale de ce travail a été consacrée au développement deux méthodes de calcul des opacités. Ces méthodes sont basées sur le concept de configuration électronique. Ces configurations permettent de décrire les différents états d'excitation et d'ionisation des atomes du plasma. Précisons que cette approche ne tient pas compte du mélange de configurations.

Nous avons développé une méthode de calcul des probabilités des configurations électroniques sur la base de la théorie des fluctuations. Cette théorie est consistante avec la description de l'équilibre atomique.

Les spectres d'opacité, obtenus à l'aide des méthodes "Detailed Configuration Accounting" et "Detailed Term Accounting", ont été comparés au spectre expérimental obtenu par Da Silva et al. [Réf. 1]. Ce groupe a mesuré le spectre de transmission d'un plasma de fer à une température de 25 eV et une densité de $8 \cdot 10^{-3} \text{ g/cm}^3$. Il s'avère que les deux spectres calculés pour un plasma de température et de densité similaires, sont très différents l'un de l'autre. Seul le spectre "Detailed Term Accounting" permet de retrouver les principales caractéristiques du spectre expérimental. L'effet des termes résultants de la diagonalisation de l'hamiltonien atomique, pour chaque configuration électronique, est donc très important pour ce plasma. Iglesias et al. [Réf. 2]) sont parvenu a des conclusions similaires. Soulignons cependant que le modèle utilisé pour décrire la situation d'équilibre du plasma est différent du nôtre. Il semble donc que pour ce plasma en particulier, le traitement des termes soit plus important que le choix du modèle décrivant l'équilibre.

La différence entre les spectres calculés par les méthodes "Detailed Configuration Accounting" et "Detailed Term Accounting", est confirmée par les valeurs de la moyenne de Rosseland correspondantes. L'inclusion des termes au moyen de l'approche "Detailed Term Accounting" augmente cette moyenne d'un facteur deux à trois. L'origine de cette différence

s'explique par la redistribution des forces d'oscillateurs, provoquée par le traitement des transitions dans l'approche "Detailed Term Accounting".

En comparant les spectres issus du modèle des électrons indépendants et de l'approximation "Detailed Configuration Accounting", nous constatons qu'ils sont dominés par les transitions non hydrogénoïdes 3-3 de type $p \rightarrow d$ situées entre 60 et 80 eV. L'éclatement de ces lignes dans l'approximation "Detailed Term Accounting", a pour effet de créer des groupes de lignes entre 60 et 80 eV, plage d'énergie importante pour le transfert radiatif (maximum de la fonction de pondération de la moyenne de Rosseland).

Pour la même densité et des températures plus élevées, l'effet des termes semble être moins important. Les calculs ont été effectués pour les températures de 40, 80 et 150 eV. La différence entre les valeurs de l'opacité moyenne de Rosseland obtenues par les approches "Detailed Configuration Accounting" et "Detailed Term Accounting" diminue lorsque la température augmente. La redistribution des transitions 3-3 observée à 20 eV pour les énergies comprises entre 60 à 80 eV existe toujours pour des températures plus élevées. Par contre, la contribution de ces transitions à la moyenne de Rosseland est moins importante. Les transitions situées au-delà de 80 eV semblent peu touchées par l'effet de redistribution des termes.

Pour les plasmas de fer que nous avons étudié, l'effet du couplage spin-orbite semble négligeable. Remarquons néanmoins que l'importance de ce terme dépend fortement du numéro atomique. Nos conclusions, qui ne concernent que quelques plasmas de fer, ne peuvent donc en aucun cas être généralisées à des numéros atomiques plus élevés.

Les cas présentés dans ce travail se situent déjà à la limite des possibilités des ordinateurs actuels. Il est donc hors de question de traiter des éléments lourds par la méthode "Detailed Term Accounting". Dans cette perspective, les cas traités constituent un point de départ indispensable au développement ultérieur de méthodes statistiques. Ces résultats doivent donc être vus comme des cas de référence ("benchmark"), d'autant plus intéressants qu'ils sont corroborés par des résultats expérimentaux.

Le code issu de cette recherche se prête naturellement à de nombreuses améliorations: inclusion des états électroniques de nombre quantique principal supérieur à cinq, élargissement de Stark, optimisation du calcul de la physique atomique et des termes d'interaction entre électrons, par exemple. Il pourrait aussi être utilisé pour calculer des cas d'opacité concernant des plasmas de numéro atomique plus élevé.

Dans ce travail, nous nous sommes limités à des cas qui sont proches de résultats expérimentaux. Nous n'avons pas étudié en détail toutes les conséquences du modèle de probabilité que nous avons développé pour le calcul des opacités. Pour les plasmas de fer que nous avons traité, l'inclusion des interactions dans le calcul des probabilités ne changeait pas les opacités. Il serait intéressant de vérifier l'importance de ces interactions pour d'autres plasmas.

Enfin, remarquons qu'en général les fluctuations contiennent les effets dus au mélange de configurations (relaxation des orbitales atomiques), ce qui a été complètement négligé dans notre approche. Il serait donc important de vérifier l'impact de cette approximation.

Approximation de Hartree-Fock à température non nulle

Soit \hat{H} l'opérateur hamiltonien d'un système d'électrons interagissant par l'intermédiaire du potentiel coulombien. Soient \hat{P} l'opérateur statistique caractérisant ce système et \hat{N} l'opérateur nombre de particules. Dans l'équilibre thermodynamique caractérisé par une température T et un potentiel chimique μ , l'opérateur statistique \hat{P}_0 est celui qui minimise le grand potentiel thermodynamique

$$\Omega = \text{Tr} \hat{P}(\hat{H} - \hat{N}) + T \text{Tr} \hat{P} \ln(\hat{P}) \quad (\text{A.1})$$

parmi tous les opérateurs \hat{P} de trace unité. Tr désigne l'opération trace.

La solution \hat{P}_0 au problème variationel $\delta\Omega=0$ est

$$\hat{P}_0 = \frac{e^{-(\hat{H}-\mu\hat{N})/T}}{\text{Tr} e^{-(\hat{H}-\mu\hat{N})/T}}. \quad (\text{A.2})$$

Comme l'a montré Mermin [Réf. 1], afin d'obtenir la théorie Hartree-Fock à température non nulle, le potentiel thermodynamique (A.1) doit être minimisé sur la classe suivante d'opérateurs statistiques

$$\hat{P} = \frac{e^{-\sum \gamma_{ij} \hat{c}_i \hat{c}_j}}{\text{Tr} e^{-\sum \gamma_{ij} \hat{c}_i \hat{c}_j}}. \quad (\text{A.3})$$

Dans la même représentation, l'hamiltonien \hat{H} prend la forme

$$\hat{H} = \sum K_{ij} \hat{c}_i^+ \hat{c}_j + \frac{1}{2} \sum \langle ij | v_{ee} | kl \rangle \hat{c}_i^+ \hat{c}_j^+ \hat{c}_k \hat{c}_l, \quad (\text{A.4})$$

où \hat{c}_i^+ et \hat{c}_i sont respectivement les opérateurs de création et d'annihilation pour l'état i , γ_{ij} les éléments de matrice d'un opérateur hermitien γ ,

$$v_{ee} = \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (\text{A.5})$$

et

$$K = E_{\text{cin}} - V_{\text{ext}}; \quad (\text{A.6})$$

avec E_{cin} l'énergie cinétique des électrons et V_{ext} l'énergie potentielle externe.

Avec les opérateurs \hat{P} et \hat{H} définis en (A.3) et (A.4), le grand potentiel thermodynamique (A.1) devient fonctionnelle d'une matrice $\tilde{\rho}$:

$$\Omega = \sum \tilde{\rho}_{ij} K_{ij} + \frac{1}{2} \sum \tilde{\rho}_{ji} \tilde{\rho}_{mn} \langle in | v | jm \rangle + T \sum \left[\left(\tilde{\rho}_{ji} (\ln \tilde{\rho})_{ij} + (1 - \tilde{\rho})_{ji} (1 - \ln \tilde{\rho})_{ij} \right) \right], \quad (\text{A.7})$$

qui est définie de la manière suivante:

$$\tilde{\rho} \equiv \frac{1}{1 + e^\gamma} \quad (\text{A.8})$$

et

$$\langle in | v | jm \rangle = \langle in | v_{ee} | jm \rangle - \langle in | v_{ee} | mj \rangle. \quad (\text{A.9})$$

Afin de minimiser le grand potentiel thermodynamique (A.7) parmi tous les opérateurs γ hermitiens, ce qui est équivalent à minimiser cette même fonctionnelle parmi tous les opérateurs $\tilde{\rho}$ dont le spectre est compris entre 0 et 1, nous calculons la première variation

$$\delta\Omega = \text{Tr} \delta\tilde{\rho} \left(\varepsilon + T \ln \frac{\tilde{\rho}}{1 - \tilde{\rho}} \right), \quad (\text{A.10})$$

où ε est l'opérateur d'éléments matriciels

$$\varepsilon_{ij} = K_{ij} + \sum \langle in | v | jm \rangle \tilde{\rho}_{mn}. \quad (\text{A.11})$$

Comme la variation (A.10) doit être nulle pour toute valeur de $\delta\tilde{\rho}$, nous concluons que la matrice ϵ doit satisfaire l'égalité

$$\frac{\epsilon}{T} = -\ln \frac{\tilde{\rho}}{1-\tilde{\rho}} = \gamma \quad (\text{A.12})$$

où la définition (A.8) de $\tilde{\rho}$ a été utilisée.

Notons que ϵ est diagonale dans la base qui diagonalise les opérateurs $\tilde{\rho}$ et γ . Dans cette base il est aisé de voir que la relation (A.11), ainsi que l'égalité (A.12) et la définition (A.8) conduisent aux équations de Hartree-Fock à température non nulle

$$\epsilon_i = K_{ii} + \sum \langle \text{in} | v | \text{in} \rangle \tilde{\rho}_n \quad (\text{A.13})$$

$$\tilde{\rho}_i = \frac{1}{e^{\epsilon_i/T} + 1}. \quad (\text{A.14})$$

Afin d'évaluer la deuxième variation, nous pouvons utiliser l'égalité [Réf. 1]

$$\ln \left(\frac{\tilde{\rho}}{1-\tilde{\rho}} \right) = P \int_{-1}^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \frac{1}{1-\lambda(2\tilde{\rho}-1)}. \quad (\text{A.15})$$

où P désigne la partie principale.

Finalement, nous obtenons

$$\delta^2 \Omega = \frac{1}{2} \left[\sum \delta\tilde{\rho}_{ji} \frac{\epsilon_j - \epsilon_i}{\tilde{\rho}_i - \tilde{\rho}_j} \delta\tilde{\rho}_{ij} + \sum \delta\tilde{\rho}_{ji} \langle \text{in} | v | \text{jm} \rangle \delta\tilde{\rho}_{mn} \right]. \quad (\text{A.16})$$

La matrice hermitienne $\delta\tilde{\rho}$ ne commute en principe pas avec la matrice $\tilde{\rho}$ et ainsi n'est pas diagonale dans la base des états propres de $\tilde{\rho}$.

Pour les états diagonaux $i=j$ nous avons

$$\left(\frac{\epsilon_j - \epsilon_i}{\rho_i - \rho_j} \right)_{i=j} = -\frac{\partial \epsilon_i}{\partial \rho_i} = \frac{T}{\rho_i(1-\rho_i)}. \quad (\text{A.17})$$

ANNEXE B

Eléments matriciels d'un opérateur à un ou deux électrons

Soient $\{\varphi_1, \dots, \varphi_N\}$ et $\{\psi_1, \dots, \psi_N\}$, deux ensembles de N fonctions d'ondes à un électron (dans ce cas les fonctions propres de l'équation de Schrödinger dans le potentiel de l'atome moyen). Les N fonctions d'ondes composant ces deux ensembles sont a priori choisies de manière complètement arbitraire parmi les états liés de l'atome. Pour les calculs qui vont suivre, il est important de définir une relation d'ordre pour les fonctions d'ondes. Cela peut être, par exemple, l'ordre des énergies croissantes. Les deux états antisymétriques à N électrons correspondants à ces deux ensembles peuvent être décrits par les déterminants de Slater

$$\begin{aligned}\Phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma} (-1)^{S_{\sigma}} \varphi_{\sigma(1)}(\vec{r}_1) \dots \varphi_{\sigma(N)}(\vec{r}_N) \\ \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\tau} (-1)^{S_{\tau}} \psi_{\tau(1)}(\vec{r}_1) \dots \psi_{\tau(N)}(\vec{r}_N),\end{aligned}\tag{B.1}$$

où la somme sur σ et τ parcourt l'ensemble des permutations de N fonctions d'ondes. S_{σ} et S_{τ} sont les signatures des permutations σ et τ .

Dans cet appendice, nous citons les formules pour les valeurs attendues d'opérateurs à un et deux électrons pour les déterminants de Slater (B.1) obtenues par Condon et Shortley [Réf. 1].

B.1 Opérateur à un électron

Soit l'opérateur à un électron

$$F = \sum_{i=1}^N f(i), \quad (\text{B.1.1})$$

où l'opérateur $f(i)$ agit sur les fonctions d'onde à un électron.

Les valeurs attendues $\langle \Phi | F | \Psi \rangle$ de cet opérateur sont les suivantes:

- a) Si les deux ensembles $\{\varphi_1, \dots, \varphi_N\}$ et $\{\psi_1, \dots, \psi_N\}$ ont deux fonctions d'onde différentes ou plus

$$\langle \Phi | F | \Psi \rangle = 0. \quad (\text{B.1.2})$$

- b) Si les fonctions d'onde de l'ensemble $\{\varphi_1, \dots, \varphi_N\}$ sont toutes identiques aux fonctions d'onde de l'ensemble $\{\psi_1, \dots, \psi_N\}$ sauf une: $\varphi_r \neq \psi_r$

$$\langle \Phi | F | \Psi \rangle = \pm \langle \varphi_r | f | \psi_r \rangle. \quad (\text{B.1.3})$$

Le signe \pm est la signature de la permutation ν telle que $\varphi_k = \psi_{\nu(k)}$, pour $k = 1, N$ et $k \neq r$.

- c) Si les ensembles $\{\varphi_1, \dots, \varphi_N\}$ et $\{\psi_1, \dots, \psi_N\}$ sont identiques

$$\langle \Phi | F | \Psi \rangle = \sum_{i=1}^N \langle \varphi_i | f | \varphi_i \rangle. \quad (\text{B.1.4})$$

B.2 Opérateur à deux électrons

Soit l'opérateur à deux électrons

$$G = \sum_{i>j=1}^N g(i, j), \quad (\text{B.2.1})$$

où $g(i, j)$ agit sur deux fonctions d'onde à un électron.

Les valeurs attendues $\langle \Phi | G | \Psi \rangle$ de cet opérateur sont les suivantes

- a) Si les deux ensembles $\{\varphi_1, \dots, \varphi_N\}$ et $\{\psi_1, \dots, \psi_N\}$ ont trois fonctions d'onde différentes ou plus

$$\langle \Phi | G | \Psi \rangle = 0. \quad (\text{B.2.2})$$

- b) Si les fonctions d'onde de l'ensemble $\{\varphi_1, \dots, \varphi_N\}$ sont toutes identiques aux fonctions d'onde de l'ensemble $\{\psi_1, \dots, \psi_N\}$ sauf deux: $\varphi_r \neq \psi_r$ et $\varphi_s \neq \psi_s$

$$\langle \Phi | G | \Psi \rangle = \pm (\langle \varphi_r \varphi_s | g | \psi_r \psi_s \rangle - \langle \varphi_r \varphi_s | g | \psi_s \psi_r \rangle). \quad (\text{B.2.3})$$

Le signe \pm est la signature de la permutation ν telle que $\varphi_k = \psi_{\nu(k)}$, pour $k = 1, N$ et $k \neq r, s$.

- c) Si les fonctions d'onde de l'ensemble $\{\varphi_1, \dots, \varphi_N\}$ sont toutes identiques aux fonctions d'onde de l'ensemble $\{\psi_1, \dots, \psi_N\}$ sauf une: $\varphi_r \neq \psi_r$

$$\langle \Phi | G | \Psi \rangle = \pm \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq r}}^N (\langle \varphi_r \varphi_i | g | \psi_r \varphi_i \rangle - \langle \varphi_r \varphi_i | g | \varphi_i \psi_r \rangle). \quad (\text{B.2.3})$$

Le signe \pm est la signature de la permutation ν telle que $\varphi_k = \psi_{\nu(k)}$, pour $k = 1, N$ et $k \neq r$.

- d) Si les ensembles $\{\varphi_1, \dots, \varphi_N\}$ et $\{\psi_1, \dots, \psi_N\}$ sont identiques

$$\langle \Phi | G | \Psi \rangle = \sum_{i>j=1}^N (\langle \varphi_i \varphi_j | g | \varphi_i \varphi_j \rangle - \langle \varphi_i \varphi_j | g | \varphi_j \varphi_i \rangle). \quad (\text{B.2.4})$$

ANNEXE C

Éléments matriciels des opérateurs hamiltonien et de moment angulaire

C.1 Éléments matriciels de l'hamiltonien

Soit l'hamiltonien

$$H = \sum_{i=1}^N -\nabla_i^2 + \sum_{i=1}^N 2Z/r_i + \sum_{i<j}^N 2/r_{ij} + \sum_{i=1}^N \xi_i(r_i)(\vec{l}_i \cdot \vec{s}_i). \quad (\text{C.1.1})$$

Soient deux déterminants de Slater Φ et Ψ appartenant à la même configuration électronique (pour les notations voir (III.1.2))

$$\begin{aligned} \Phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma} (-1)^{S_{\sigma}} \varphi_{\sigma(1)}(\vec{r}_1) \dots \varphi_{\sigma(N)}(\vec{r}_N) \\ \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\tau} (-1)^{S_{\tau}} \psi_{\tau(1)}(\vec{r}_1) \dots \psi_{\tau(N)}(\vec{r}_N). \end{aligned} \quad (\text{C.1.2})$$

Les sommes sur σ et τ dans (C.1.2) rendent $\Phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ et $\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ antisymétriques sous l'échange de deux électrons. La valeur des éléments matriciels $\langle \Phi | O | \Psi \rangle$ d'un opérateur O dépend du nombre d'électrons sur lequel agit cet opérateur ainsi que du nombre de fonctions d'onde qui diffèrent entre les ensembles $\{\varphi_1, \dots, \varphi_N\}$ et $\{\psi_1, \dots, \psi_N\}$. Comme nous l'indiquons à l'Annexe B, trois cas sont à considérer:

- A. Deux fonctions d'onde sont différentes, c'est-à-dire que $\varphi_r \neq \psi_r$, $\varphi_s \neq \psi_s$. Pour toutes les autres fonctions d'onde $\varphi_i = \psi_i$.

- B. Une fonction d'onde est différente, autrement dit $\varphi_r \neq \psi_r$ et toutes les autres fonctions d'onde sont identiques.
- C. Toutes les fonctions d'onde des deux ensembles $\{\varphi_1, \dots, \varphi_N\}$ et $\{\psi_1, \dots, \psi_N\}$ sont identiques. Il s'agit alors des éléments diagonaux $\langle \Phi | O | \Phi \rangle$.

Dans la suite de cette annexe, il sera fait référence à ces trois cas par Cas A, Cas B et Cas C. Pour un opérateur à un ou deux électrons, les éléments matriciels $\langle \Phi | O | \Psi \rangle$ correspondant à des situations où plus de deux fonctions d'onde sont différentes sont nuls.

Revenons à l'hamiltonien (C.1.1). Ce dernier est la somme de quatre contributions: l'énergie cinétique, l'interaction coulombienne entre les électrons, l'interaction coulombienne des électrons avec le noyau et le couplage spin-orbite. Sur ces quatre contributions, seule celle d'interaction entre les électrons est un opérateur à deux particules, toutes les autres sont des opérateurs à une particule.

Cas A

$$\langle \Phi | H | \Psi \rangle = \pm (\langle \varphi_r \varphi_s | 2/r_{rs} | \psi_r \psi_s \rangle - \langle \varphi_r \varphi_s | 2/r_{rs} | \psi_s \psi_r \rangle). \quad (\text{C.1.3})$$

Cas B

$$\begin{aligned} \langle \Phi | H | \Psi \rangle = \pm \{ \int_0^\infty dr \varphi_r^*(r) \left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2Z}{r} \right) \psi_r(r) + \frac{\xi(r)}{\hbar^2} \langle \varphi_r | \vec{l} \cdot \vec{s} | \psi_r \rangle \\ + \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq r}}^N (\langle \varphi_r \varphi_i | 2/r_{ir} | \psi_r \varphi_i \rangle - \langle \varphi_r \varphi_i | 2/r_{ir} | \varphi_i \psi_r \rangle) \}. \end{aligned} \quad (\text{C.1.4})$$

Cas C

$$\begin{aligned} \langle \Phi | H | \Phi \rangle = \sum_{i=1}^N \int_0^\infty dr \varphi_i^*(r) \left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l_i(l_i+1)}{r^2} - \frac{2Z}{r} \right) \varphi_i(r) + \sum_{i=1}^N \frac{\xi_i(r)}{\hbar^2} m_i^i m_s^i \\ + \sum_{i>j=1}^N (\langle \varphi_i \varphi_j | 2/r_{ij} | \varphi_i \varphi_j \rangle - \langle \varphi_i \varphi_j | 2/r_{ij} | \varphi_j \varphi_i \rangle). \end{aligned} \quad (\text{C.1.5})$$

C.2 Eléments matriciels des opérateurs de moment angulaire

Les opérateurs de moment angulaire \vec{L}^2 , \vec{S}^2 et \vec{J}^2 sont définis à partir des opérateurs à un électron \vec{l} et \vec{s} de la manière suivante:

$$\vec{L}^2 = \sum_{i=1}^N \vec{l}_i^2 \quad (\text{C.2.1})$$

$$\vec{S}^2 = \sum_{i=1}^N \vec{s}_i^2 \quad (\text{C.2.2})$$

$$\vec{J}^2 = \sum_{i=1}^N (\vec{l}_i + \vec{s}_i)^2. \quad (\text{C.2.3})$$

Les valeurs attendues $\langle \Phi | \vec{L}^2 | \Psi \rangle$, $\langle \Phi | \vec{S}^2 | \Psi \rangle$ et $\langle \Phi | \vec{J}^2 | \Psi \rangle$ peuvent être exprimées en fonction des éléments matriciels [Réf. 1, p. 221]

$$\langle \varphi_r | l_x | \psi_s \rangle = \frac{\hbar}{2} \delta_{n^r, n^s} \delta_{l^r, l^s} \delta_{m_l^r, m_l^s} \delta_{m_l^r \pm 1, m_l^s} \sqrt{(l^s \pm m_l^s)(l^s \mp m_l^s + 1)} \quad (\text{C.2.4})$$

$$\langle \varphi_r | s_x | \psi_s \rangle = \frac{\hbar}{2} \delta_{n^r, n^s} \delta_{l^r, l^s} \delta_{m_l^r, m_l^s} \delta_{m_l^r \pm 1, m_l^s} \quad (\text{C.2.5})$$

$$\langle \varphi_r | \vec{l} \cdot \vec{s} | \psi_s \rangle = \hbar^2 \delta_{n^r, n^s} \delta_{l^r, l^s} \delta_{m_l^r + m_l^s, m_l^r + m_l^s} \left(\delta_{m_l^r, m_l^s} + \delta_{m_l^r, m_l^s \pm 1} \sqrt{(l^r - m_l^r - m_l^s + 1/2)(l^r + m_l^r + m_l^s + 1/2)} \right), \quad (\text{C.2.6})$$

où n^r et n^s sont les nombres quantiques principaux, l^r et l^s angulaires, m_l^r et m_l^s magnétiques, m_s^r et m_s^s de spin, des fonctions d'ondes φ_r et ψ_s respectivement.

C.2.1 Eléments matriciels de \vec{L}^2

Cas A

$$\langle \Phi | \vec{L}^2 | \Psi \rangle = 0. \quad (\text{C.2.7})$$

Cas B

$$\langle \Phi | \vec{L}^2 | \Psi \rangle = \pm 4 \left\{ \langle \varphi_r | l_x | \psi_r \rangle \langle \varphi_s | l_x | \psi_s \rangle - \langle \varphi_r | l_x | \psi_s \rangle \langle \varphi_s | l_x | \psi_r \rangle \right\} \delta_{M_\Phi^{l^s, m_l^s}, M_\Psi^{l^s, m_l^s}} \quad (\text{C.2.8})$$

Les indices M_{Φ}^{LS} et M_{Ψ}^{LS} figurant dans le delta de Kronecker sont les valeurs propres des équations

$$\begin{aligned} (L_z + S_z)|\Phi\rangle &= M_{\Phi}^{LS}|\Phi\rangle \\ (L_z + S_z)|\Psi\rangle &= M_{\Psi}^{LS}|\Psi\rangle. \end{aligned} \quad (\text{C.2.9})$$

Cas C

$$\langle\Phi|\tilde{L}^2|\Phi\rangle = \hbar^2 M_{\Phi}^{L^2} + \hbar^2 \sum_{i=1}^N \left\{ l^i(l^i + 1) - (m_i^i)^2 \right\} - 4 \sum_{i < j=1}^N \langle\varphi_i|l_x|\varphi_j\rangle^2. \quad (\text{C.2.10})$$

M_{Φ}^L est la valeur propre de l'équation $L_z|\Phi\rangle = M_{\Phi}^L|\Phi\rangle$.

C.2.2 Éléments matriciels de \tilde{S}^2

Cas A

$$\langle\Phi|\tilde{S}^2|\Psi\rangle = 0. \quad (\text{C.2.11})$$

Cas B

$$\langle\Phi|\tilde{S}^2|\Psi\rangle = \pm 4 \left\{ \langle\varphi_r|s_x|\varphi_r\rangle \langle\varphi_s|s_x|\varphi_s\rangle - \langle\varphi_r|s_x|\varphi_s\rangle \langle\varphi_s|s_x|\varphi_r\rangle \right\} \delta_{M_{\Phi}^{LS}, M_{\Psi}^{LS}}. \quad (\text{C.2.12})$$

Les indices M_{Φ}^{LS} et M_{Ψ}^{LS} sont définis par (C.2.9).

Cas C

$$\langle\Phi|\tilde{S}^2|\Phi\rangle = \hbar^2 \left(M_{\Phi}^{S^2} + \frac{N}{2} - N' \right). \quad (\text{C.2.13})$$

$M_{\Phi}^{S^2}$ est la valeur propre de l'équation $S_z|\Phi\rangle = M_{\Phi}^{S^2}|\Phi\rangle$. N est le nombre d'électrons de la configuration électronique et N' est le nombre de paires de fonctions d'ondes φ_i qui ne se différencient que par la valeur du nombre quantique de spin m_i^s .

C.2.3 Éléments matriciels de $\bar{\mathbf{J}}^2$

Le calcul des éléments matriciels de cet opérateur se déduit de la relation

$$\bar{\mathbf{J}}^2 = \bar{\mathbf{L}}^2 + \bar{\mathbf{S}}^2 + 2\bar{\mathbf{L}} \cdot \bar{\mathbf{S}}, \quad (\text{C.2.14})$$

car les opérateurs $\bar{\mathbf{L}}$ et $\bar{\mathbf{S}}$ commutent.

Les éléments matriciels des deux premiers opérateurs ont été calculés ci-dessus, il nous reste donc à calculer les éléments matriciels de l'opérateur $\bar{\mathbf{L}} \cdot \bar{\mathbf{S}}$.

Cas A

$$\begin{aligned} \langle \Phi | \bar{\mathbf{L}} \cdot \bar{\mathbf{S}} | \Psi \rangle = & \pm 2 \{ \langle \varphi_r | l_x | \psi_r \rangle \langle \varphi_s | s_x | \psi_s \rangle - \langle \varphi_r | s_x | \psi_r \rangle \langle \varphi_s | l_x | \psi_s \rangle \\ & - \langle \varphi_r | l_x | \psi_s \rangle \langle \varphi_s | s_x | \psi_r \rangle - \langle \varphi_s | l_x | \psi_r \rangle \langle \varphi_r | s_x | \psi_s \rangle \} \delta_{M_\Phi^{\text{LS}}, M_\Psi^{\text{LS}}}. \end{aligned} \quad (\text{C.2.15})$$

Les indices M_Φ^{LS} et M_Ψ^{LS} sont valeurs propres des équations (C.2.9).

Cas B

$$\begin{aligned} \langle \Phi | \bar{\mathbf{L}} \cdot \bar{\mathbf{S}} | \Psi \rangle = & \pm \{ \langle \varphi_r | \bar{\mathbf{l}} \cdot \bar{\mathbf{s}} | \psi_r \rangle - 2 \sum_{i=1}^N \langle \varphi_r | l_x | \varphi_i \rangle \langle \varphi_i | s_x | \psi_r \rangle \\ & - 2 \sum_{i=1}^N \langle \psi_r | l_x | \varphi_i \rangle \langle \varphi_i | s_x | \varphi_r \rangle \} \delta_{M_\Phi^{\text{LS}}, M_\Psi^{\text{LS}}}. \end{aligned} \quad (\text{C.2.16})$$

Les indices M_Φ^{LS} et M_Ψ^{LS} sont valeurs propres des équations (C.2.9).

Cas C

$$\langle \Phi | \bar{\mathbf{L}} \cdot \bar{\mathbf{S}} | \Phi \rangle = \hbar^2 M_\Phi^{\text{S}} M_\Phi^{\text{L}}. \quad (\text{C.2.17})$$

M_Φ^{S} est la valeur propre de l'équation $S_z | \Phi \rangle = M_\Phi^{\text{S}} | \Phi \rangle$ et M_Φ^{L} de l'équation $L_z | \Phi \rangle = M_\Phi^{\text{L}} | \Phi \rangle$.

ANNEXE D

Distributions de Gauss, de Lorentz et de Voigt

Selon le phénomène physique, la distribution en fréquence des lignes de transition entre états électroniques liés peut être une distribution de Gauss ou de Lorentz. Lorsque deux phénomènes physiques différents contribuent à élargir une transition électronique, la distribution en fréquence de cette dernière est donnée par le produit de convolution de la distribution de chacun de ces phénomènes. Le produit de convolution d'une distribution de Gauss et d'une distribution de Lorentz est appelé distribution de Voigt. L'objet de cette annexe est de présenter succinctement ces trois distributions (voir [Réf. 1]).

D.1 Distribution de Gauss

Si σ^2 est la variance et ν_0 le centre de la distribution, la distribution de Gauss s'exprime de la manière suivante

$$g(\nu) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-(\nu-\nu_0)^2/2\sigma^2} \quad (\text{D.1.1})$$

où le facteur devant l'exponentielle tient compte de la normalisation.

D.2 Distribution de Lorentz

Appelons λ la demi-largeur de cette distribution à mi-hauteur. Si ν_0 est le centre de cette distribution, nous avons

$$l(v) = \frac{\lambda}{\pi} \frac{1}{(v - v_0)^2 + \lambda^2}. \quad (\text{D.2.1})$$

D.3 Distribution de Voigt

La distribution de Voigt est définie de la manière suivante:

$$v(v) = \int_{-\infty}^{\infty} dv' g(v - v') l(v'). \quad (\text{D.3.1})$$

En substituant les équations (D.1.1, D.2.1) dans la définition (D.3.1), on obtient [Réf. 1]

$$v(x, y) = \frac{\lambda}{2\pi^{3/2} v_0^2 \sigma^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{e^{-t^2}}{y^2 + (x - t)^2}, \quad (\text{D.3.2})$$

où nous avons posé $x = (v - v_0)/\sqrt{2}v_0\sigma$ et $y = \lambda/\sqrt{2}v_0\sigma$.

Elargissement des lignes de transition

Les transitions radiatives entre niveaux liés donnent lieu à la structure de lignes dans le spectre d'absorption. Dans le cas d'un atome isolé, ces lignes subissent un élargissement dit naturel dû au temps de vie fini des niveaux excités. Dans le cas d'un plasma, l'élargissement de ligne naturel est négligeable comparé à l'élargissement causé par l'effet Doppler et par la pression des électrons libres et des ions.

Le calcul de l'élargissement de ligne dû à la pression doit à la fois tenir compte de l'effet des collisions ions-électrons et ions-ions. Ce calcul est grandement simplifié si la corrélation entre ces deux types de collisions est faible. Cette hypothèse est d'autant mieux vérifiée que la température du plasma est élevée et la densité faible. Elle permet de traiter séparément les contributions à l'élargissement dues aux ions et aux électrons. Le profil de la ligne est alors le résultat de la convolution des profils de ces deux contributions.

La différence de vitesse entre les électrons libres et les ions détermine le type d'approximation impliquée dans le calcul de l'élargissement de ligne.

Soit $\Delta\omega$ la largeur de l'élargissement de raie (en unités de fréquence). Si la particule perturbant l'émission radiative peut être considérée comme classique, la durée de la collision τ peut être évaluée par la formule [Réf. 1]: $\tau = b/v$, où v est la vitesse de la particule incidente et b le paramètre d'impact de la collision.

Lorsque la durée de la collision τ est bien supérieure au temps caractérisant la transition radiative $1/\Delta\omega$ (i.e. la vitesse de la particule est basse), il est possible d'ignorer complètement

le mouvement des particules perturbant l'émission. Cette approximation qui est connue dans la littérature sous le nom "d'approximation quasi-statique" est applicable aux ions.

A l'opposé, si la durée de la collision τ est courte par rapport au temps $1/\Delta\omega$ (i.e. la vitesse de la particule est élevée), l'effet des particules perturbant l'émission est décrit sous forme de collisions bien séparées dans le temps. Cette approximation se nomme "approximation d'impact" et s'applique aux électrons libres.

Nous allons présenter succinctement les relations utilisées dans ce travail pour le calcul de l'élargissement dû à l'effet Doppler, l'effet Stark et à la pression des électrons libres.

E.1 Effet Doppler

Si M_A est la masse de l'atome émetteur, T la température du plasma, ω la fréquence angulaire et ω_0 la fréquence de transition de l'atome non perturbé, l'élargissement dû à l'effet Doppler est donné par la gaussienne [Réf. 2, p. 279],

$$F_{\text{Doppler}}(\omega) = \left(\frac{M_A c^2}{2\pi T \omega_0^2} \right)^{1/2} \exp \left(- \frac{M_A c^2}{2T} \left(\frac{\omega - \omega_0}{\omega_0} \right)^2 \right). \quad (\text{E.1.1})$$

Pour des températures supérieures à quelques eV et des densités inférieures à 10^{15} cm^{-3} , l'élargissement Doppler peut être plus important que l'élargissement dû à la pression des ions et des électrons. Mais pour la grande majorité des plasmas rencontrés dans l'étude de la fusion par confinement inertiel l'effet de la pression des autres particules est dominant.

E.2 Elargissement dû aux ions

Les atomes perturbant l'émission peuvent être neutres ou chargés, mais pour un plasma, même faiblement ionisé, l'effet des ions est tellement important que l'effet des atomes neutres peut être négligé.

Les ions perturbant la transition peuvent être considérés comme immobiles (approximation "quasi-statique"). La forme $F_{\alpha\beta}(\omega)$ de la raie de transition entre les niveaux α et β est donnée par la relation [Réf. 3]

$$F_{\alpha\beta}(\omega) = \int_0^{\infty} \left| \langle \alpha(\vec{E}) | \vec{d} | \beta(\vec{E}) \rangle \right|^2 \delta \left(\omega - \omega_{\alpha\beta} - \frac{\delta E_{\alpha}(\vec{E}) - \delta E_{\beta}(\vec{E})}{\hbar} \right) P(\vec{E}) d\vec{E}, \quad (\text{E.2.1})$$

où \vec{E} est le champ électrique créé par les autres ions sur celui qui rayonne, $\delta E_{\alpha}(\vec{E})$ et $\delta E_{\beta}(\vec{E})$ sont les déplacements en énergie que le champ \vec{E} produit sur les niveaux α et β respectivement, $P(\vec{E})$ la fonction de distribution du champ \vec{E} au niveau de l'atome rayonnant et \vec{d} le moment dipolaire de ce même atome.

Pour évaluer $F_{\alpha\beta}(\omega)$, il est nécessaire de connaître la distribution du champ électrique au voisinage de l'ion émetteur. Pour les plasmas qui font l'objet de ce travail, l'élargissement dû à l'effet Stark a été négligé par rapport à l'élargissement dû à la pression des électrons libres [Réf. 4, p. 218].

E.3 Elargissement dû aux électrons libres

Une relation pour l'élargissement de raie dû à la pression des électrons libres a été dérivée par Baranger [Réf. 5] dans le cadre de l'approximation d'impact. Cette approximation admet les points suivants:

1. Il n'y a pas de transition non rayonnante entre des états liés bien séparés en énergie.
2. Le temps d'autocorrélation d'un train d'onde est long par rapport à la durée d'une collision.
3. Les collisions sont si brèves que deux collisions ne peuvent être simultanées.

A l'aide de ces hypothèses, l'élargissement de raie Γ_{Impact} prend la forme:

$$\Gamma_{\text{Impact}} = \left\{ \frac{1}{2} n_f v_f \left(\sigma_i^{\text{in}} + \sigma_j^{\text{in}} + \int d\Omega |f_i(\Omega) - f_j(\Omega)|^2 \right) \right\}, \quad (\text{E.3.1})$$

où n_f est la densité des électrons libres, v_f leur vitesse, σ_i^{in} et σ_j^{in} les sections efficaces de collision inélastique de l'ion dans l'état initial i et l'état final j respectivement, $f_i(\Omega)$ et $f_j(\Omega)$ les amplitudes de diffusion élastique dans ces mêmes états et Ω l'angle solide. L'accolade $\{ \}$ signifie qu'il faut pondérer la formule sur la distribution de vitesse des électrons libres.

Dans le modèle hydrogénoïde, Nardi et Zinamon [Réf. 6] arrivent à la formule

$$\Gamma_{\text{impact}} = \left(\frac{h^2}{2\pi m} \right)^{3/2} \frac{n_i^4 + n_f^4}{\sqrt{T} (Z^*)^2}, \quad (\text{E.3.2})$$

où h est la constante de Planck, m la masse de l'électron, Z^* la charge effective, n_i et n_f les nombres quantiques principal de l'état à un électron avant et après la transition électronique.

REFERENCES

Chapitre I

- [1] B. H. Armstrong and R. W. Nicholls, *Emission, Absorption and Transfer of Radiation in Heated Atmospheres*, Pergamon Press (1972)
- [2] D. Mihalas, *Stellar Atmospheres*, Freeman (1978)
- [3] R. Rusch and J. Ligou, *Proceeding of the 7 th International Conference on Emerging Nuclear Energy Systems*, 20-24 September, Chiba, Japan (1993)
- [4] A. S. Eddington, *The Internal Constitution of the Stars*, Cambridge Univ. Press, Dover Reprint 1959 (1926)
- [5] H. A. Kramers, *Phil. Mag.*, **46** 836 (1923)
- [6] S. Rosseland, *Monthly Not. Roy. Astron. Soc.*, **84** 525 (1924)
- [7] Marshak and Bethe, *Ap. J.*, **91** 239 (1940)
- [8] Morse, *Ap. J.*, **92** 27 (1940)
- [9] J. C. Slater and H. M. Krutter, *Phys. Rev.*, **47** 559 (1935)
- [10] S. A. Moszkowski, *Prog. of Theoretical Phys.*, **28** 1 (1962)
- [11] A. N. Cox, *Stellar Absorption Coefficients and Opacities* in L. H. Aller and D. B. McLaughlin (eds), *Stars and Stellar Systems*, **8**, *Stellar Structures*, University of Chicago Press (1965)
- [12] F. J. Rogers, C. A. Iglesias and B. G. Wilson, *Ap. J.*, **322** L45 (1987)
- [13] F. J. Rogers and C. A. Iglesias, *Ap. J.*, **371** 408 (1991)
- [14] F. J. Rogers and C. A. Iglesias, *Ap. J.*, **79** 507 (1992)
- [15] J.M Seaton, *J. Phys.*, **B20** 6363 (1987)
- [16] K. A. Berrington, P. G. Burke, K. Butler, M. J. Seaton, P. J. Storey, K. T. Taylor and Y. Yan, *J. Phys.*, **B20** 6397 (1987)
- [17] J. M. Foster, D. J. Hoarty, C. C. Smith, P. A. Rosen, S. J. Davidson, S. J. Rose, T. S. Perry and F. J. D. Serduke, *Phys. Rev. Lett.*, **67** 3255 (1991)

- [18] T. S. Perry, S. J. Davidson, F. J. D. Serduke, D. R. Bach, C. C. Smith, J. M. Foster, R. J. Doya, R. A. Ward, C. A. Iglesias, F. J. Rogers, J. Abdallah, R. E. Steward, J. D. Kilkenny and R.W. Lee, *Phys. Rev. Lett.*, **67** 3784 (1991)
- [19] L. B. Da Silva, B. J. MacGowan, D. R. Kania, B. A. Hammel, C. A. Back, E. Hsieh, R. Doya, C. A. Iglesias, F. J. Rogers and W. Lee, *Phys. Rev. Lett.*, **69** 438 (1992)
- [20] C. Deutsch, P. Fromy, X. Garbet, *Fusion Technology*, **13** 362 (1988)
- [21] D. Böhne, I. Hoffman, G. Kessler, G. L. Kulcinski, J. Meyer-ter-Vehn, U. von Möllendorff, G. A. Moses, R. W. Müller, I. N. Swiatoslavsky, D. K. Sze and W. Vogelsang, *Nucl. Engin. and Design*, **73** 195 (1982)
- [22] E. Nardi and Z. Zinamon, *Phys. Rev.*, **20** 1197 (1979)
- [23] T. Blenski, S. Buzenet, A. Kumar, J. Ligou, P. Miazza, *Triennial Research Report* (1988)
- [24] T. Blenski and J. Ligou, *Computer Physics Communications*, **50** 303 (1988)
- [25] A. Zangwill and P. Soven, *Phys. Rev. A*, **21** 1561 (1980)
- [26] F. Grimaldi, A. Grimaldi-Lecourt, M. W. C. Dharma-wardana, *Phys. Rev. A*, **32** 1063 (1985)
- [27] T. Blenski and B. Cichocki, *Phys. Rev.*, **A41** 6973 (1990)
- [28] T. Blenski and J. Ligou, *Proceeding of the 19 th Conference on Laser Interaction with Matter*, G. Velarde, E. Minguez and J. M. Perlado, Eds., World Scientific (1989)
- [28] T. Blenski and J. Ligou, *Laser and Particule Beams*, **8** 265 (1990)
- [29] T. Blenski, B. Cichocki, J. Ligou and S. Morel, *Proceeding of the 21 th Conference on Laser Interaction with Matter*, (1991)
- [30] T. Blensi, J. Ligou and S. Morel, *Transactions of Fusion Technology*, **20** 813 (1991)
- [31] T. Blenski, N. A. Tahir, R. C. Arnold, J. Ligou and C. Deutsch, *Nucl. Fusion.*, **32** 581 (1992)
- [32] T. Blenski, N. A. Tahir, D. H. H. Hoffmann, J. A. Maruhn, J. Ligou and C. Deutsch, *Phys. lett. A*, **172** 162 (1992)
- [33] F. J. Rogers, *Ap. J.*, **310** 723 (1986)

Chapitre II

- [1] B. J. B. Crowley, *Phys. Rev.*, **A41** 2179 (1990)
- [2] T. Carson, D. Mayers and D. Stibbs, *Mon. Not. Roy. Astr. Soc.*, **140** 483 (1968)
- [3] T. Carson and D. Hollingsworth, *Mon. Not. Roy. Astr. Soc.*, **141** 77 (1968)
- [4] B. F. Rozsnyai, *Phys. Rev.*, **A5** 1137 (1972)
- [5] D. A. Liberman, *Phys. Rev.*, **B20** 4981 (1979)
- [6] T. Blenski and B. Cichocki, *Laser and Particle Beams*, **10** 299 (1992)

-
- [7] D. A. Liberman, *JQSRT*, **27** 335 (1982)
- [8] M. C. Dharma-Wardana and F. Perrot, *Phys. Rev.*, **A26** 2096 (1982)
- [9] K. F. Berggren and A. Froman, *Ark. Fys. Kungl. Svenska Vetenskapsakad.*, **39** 355 (1969)
- [10] J. Davis and M. Blaha, in *Physics of Electronic and Atomic Collisions*, S. Datz ed., North-Holland Publ., Amsterdam (1982)
- [11] R. Cauble, M. Blaha and J. Davis, *Phys. Rev.*, **A29** 3280 (1984)
- [12] F. Perrot, *Phys. Rev.*, **A26** 1035 (1982)
- [13] R. P. Feynmann, N. Metropolis and E. Teller, *Phys. Rev.*, **75** 1561 (1949)
- [14] R. D. Cowan and J. Ashkin, *Phys. Rev.*, **105** 144 (1957)
- [15] B. F. Rozsnyai, *Phys. Rev.*, **A5** 1137 (1972)
- [16] X. Garbet, C. Deutsch and G. Maynard, *J. Appl. Phys.*, **61** 907 (1987)
- [17] N. D. Mermin, *Ann. Phys.*, **21** 99-121 (1963)
- [18] P. Hohenberg, W. Kohn, *Phys. Rev.*, **B136** 864 (1964)
- [19] N. D. Mermin, *Phys. Rev.*, **A137** 1441 (1965)
- [20] W. Kohn, L. J. Sham, *Phys. Rev.*, **A140** 1133 (1965)
- [21] M. C. Dharma-Wardana and F. Perrot, *Phys. Rev.*, **A30** 2619 (1984)
- [22] R. D. Cowan, *The Theory of Atomic Structure and Spectra*, Los Alamos Series in Basic and Applied Sciences, University of California Press (1981)
- [23] J. Green, *JQSRT*, **4** 639 (1964)
- [24] F. Herman and S. Skillman, *Atomic Structure Calculations*, Prentice-Hall Inc., New Jersey (1963)
- [25] B. H. Armstrong and R. W. Nicholls, *Emission, Absorption and Transfer of Radiation in Heated Atmospheres*, Pergamon Press, Oxford (1972)
- [26] A. Zangwill and P. Soven, *Phys. Rev.*, **A21** 1561 (1980)
- [27] F. Grimaldi, A. Grimaldi-Lecourt, and M. W. C. Dharma-wardana, *Phys. Rev.*, **A32** 1063 (1985)
- [28] T. Blenski and B. Cichocki, *Phys. Rev.*, **A41** 6973 (1990)
- [29] A. L. Fetter and J. P. Walecka, *Quantum Theory of Many-Body Systems*, MacGraw-Hill, New York (1971)
- [30] H. A. Bethe and E. E. Salpeter, *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms*, Springer Verlag, Berlin, (1957)
- [31] T. Blenski, S. Buzenet, A. Kumar, J. Ligou, P. Miazza, *Triennial Research Report* (1988)

Chapitre III

- [1] C. A. Iglesias, F. J. Rogers and B. G. Wilson, *Ap. J.*, **322** L45 (1987)
- [2] W. F. Huebner, *Physics of the Sun*, **1**, Ed. P. A. Sturrock (1986)
- [3] A. N. Cox, *Stellar Absorption Coefficients and Opacities* in L. H. Aller and D. B. McLaughlin (eds), *Stars and Stellar Systems*, **8**, *Stellar Structures*, University of Chicago Press (1965)
- [4] A. L. Fetter and J. P. Walecka, *Quantum Theory of Many-Body Systems*, MacGraw-Hill, New York (1971)
- [5] J. C. Slater, *Phys. Rev.*, **34** 1293 (1929)
- [6] F. Perrot, *Phys. Rev.*, **A35** 1235 (1987)
- [7] T. Blenski, S. Buzenet, A. Kumar, J. Ligou, P. Miazza, *Triennial Research Report* (1988)
- [8] R. D. Cowan, *The Theory of Atomic Structure and Spectra*, University of California Press, (1981)

Chapitre IV

- [1] E. Nardi and Z. Zinamon, *Phys. Rev.*, **20** 1197 (1979)
- [2] W. F. Huebner, *Physics of the Sun*, **1**, Ed. P. A. Sturrock (1986)
- [3] Ya. B. Zel'dovich et al., *Physics of Shock Waves and High-Temperature Hydrodynamic Phenomena*, Academic Press (1966)
- [4] F. Perrot, *Phys. Rev.*, **A35** 1235 (1987)
- [5] C. A. Iglesias, F. J. Rogers and B. G. Wilson, *Ap. J.*, **322** L45 (1987)
- [6] T. Blenski, S. Morel, *Fluctuations near average atom equilibrium. Application to Detailed Configuration Accounting in Opacity Calculations*, présenté à International Symposium of Heavy Ion Fusion, Frascati 25-28 mai 1993. A paraître dans *Nuovo Cimento*
- [7] T. Blenski, S. Morel, *Application of Hartree-Fock Theory of Fluctuations to Opacity Calculations*, présenté à 6th International Workshop on Atomic Physics for Ion Driven Fusion, 7-12 novembre 1993, Santa Fe, New Mexico. A paraître dans *Laser and Particule Beams*
- [8] F. J. Rogers, *Ap. J.*, **310** 723 (1986)
- [9] R. D. Cowan, *The Theory of Atomic Structure and Spectra*, University of California Press, Berkley (1981)
- [10] L. Landau, E. Lifchitz, *Physique Statistique*, Editions Mir, Moscou (1967)

- [11] N. G. Van Kampen, *Stochastic Process in Physics and Chemistry*, North-Holland, Amsterdam (1981)

Chapitre V

- [1] C. A. Iglesias, F. J. Rogers and B. G. Wilson, *Ap. J.*, **322** L45 (1987)
- [2] L. B. Da Silva, B. J. MacGowan, D. R. Kania, B. A. Hammel, C. A. Back, E. Hsieh, R. Doya, C. A. Iglesias, F. J. Rogers and W. Lee, *Phys. Rev. Lett.*, **69** 438 (1992)
- [3] C.A. Iglesias and B.G. Wilson, *Application of Statistical Methods in Opacity Calculations*, International Workshop. *Radiative Properties of Hot Dense Matter*, Santa Barbara, California, 2-6.11.1992
- [4] G. Racah, *Phys. Rev.*, **62** 438 (1942)
- [5] G. Racah, *Phys. Rev.*, **63** 367 (1943)
- [6] G. Racah, *Phys. Rev.*, **76** 1352 (1949)
- [7] C. Bauche-Arnoult and J. Bauche, *Phys. Rev.*, **A20** 2424 (1979)
- [8] C. Bauche-Arnoult and J. Bauche, *Phys. Rev.*, **A25** 2641 (1982)
- [9] C. Bauche-Arnoult and J. Bauche, *Phys. Rev.*, **A30** 3026 (1984)
- [10] C. Bauche-Arnoult and J. Bauche, *Phys. Rev.*, **A31** 2248 (1985)
- [11] R. D. Cowan, *The Theory of Atomic Structure and Spectra*, University of California Press, (1981)
- [12] H. A. Bethe and E. E. Salpeter, *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms*, Springer Verlag, Berlin, (1957)

Chapitre VI

- [1] F. Grimaldi and A. Grimaldi-Lecourt, *JQSRT*, **27** 373 (1982)
- [2] F. Grimaldi, Proceeding of the 4th "Radiative Properties of Hot Dense Matter" Workshop, 22 octobre 1990, Santa Fe.
- [3] F. Perrot, *Physica A*, **150** 357 (1988)
- [4] T. Blenski and J. Ligou, *Laser and Particule Beams*, **8** 265 (1990)
- [5] B. F. Rozsnyai, *JQSRT*, **17** 77 (1977)
- [6] C. A. Iglesias, F. J. Rogers and B. G. Wilson, *Ap. J.*, **322** L45 (1987)
- [7] L. B. Da Silva, B. J. MacGowan, D. R. Kania, B. A. Hammel, C. A. Back, E. Hsieh, R. Doya, C. A. Iglesias, F. J. Rogers and W. Lee, *Phys. Rev. Lett.*, **69** 438 (1992)

Conclusion

- [1] L. B. Da Silva, B. J. MacGowan, D. R. Kania, B. A. Hammel, C. A. Back, E. Hsieh, R. Doya, C. A. Iglesias, F. J. Rogers and W. Lee, *Phys. Rev. Lett.*, **69** 438 (1992)
- [2] C. A. Iglesias, F. J. Rogers and B. G. Wilson, *Ap. J.*, **322** L45 (1987)

Annexe A

- [1] N. D. Mermin, *Ann. Phys. (N. Y.)*, **21**, 99 (1963)

Annexe B

- [1] E. U. Condon, G. H. Shortley, *The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge at the University Press (1967)

Annexe C

- [1] E. U. Condon, G. H. Shortley, *The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge at the University Press (1967)

Annexe D

- [1] B. H. Armstrong and R. W. Nicholls, *Emission, Absorption and Transfer of Radiation in Heated Atmospheres*, Pergamon Press, Oxford (1972)

Annexe E

- [1] C. R. Cowley, *The Theory of Stellar Spectra*, Gordon and Breach Science Publishers (1970), p. 155
- [2] D. Mihalas, *Stellar Atmospheres*, Freeman (1978)
- [3] H. R. Griem, *Spectral line Broadening by Plasmas*, Academic Press (1974)
- [4] A. N. Cox, *Stars and Stellar Systems*, ed. L. H. Allen and D. B. McLaughlin (1965)
- [5] M. Baranger, *Phys. Rev.*, **112**, 855, (1958)
- [6] E. Nardi and Z. Zinamon, *Phys. Rev.*, **20** 1197 (1979)

REMERCIEMENTS

Je remercie vivement le Dr. T. Blenski d'avoir accepté d'être mon directeur de thèse. Je lui suis tout particulièrement gré de sa constante disponibilité, de la pertinence de ses remarques et de la qualité des nombreuses conversations que nous avons eu.

Je remercie le Prof. J. Ligou de m'avoir accueilli dans son laboratoire et pour l'intérêt qu'il a porté à ce travail.

Mes remerciements vont également aux membres du jury, MM. les Prof. C. Deutsch, F. Troyon, A. Baldereschi ainsi que M. F. Grimaldi, pour avoir accepté de juger ce travail.

Un très vif remerciement aux collègues que j'ai côtoyé et sans lesquels les pauses café n'auraient pas eu la même saveur.

Le financement de ce travail a été assuré par le Verband Schweizerischer Elektrizitätswerke ainsi que le Fonds National Suisse de la Recherche Scientifique.

CURRICULUM VITAE

Samy Morel

né à Lausanne, le 23 octobre 1963,
de nationalité suisse, célibataire.

Formation

06/83 Certificat de maturité - Type C.

10/83 - 01/88 École Polytechnique Fédérale de Lausanne, diplôme d'ingénieur-physicien.

Expérience professionnelle

03/88 - 06/88 Assistant à l'institut de micro-électronique et opto-électronique à l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne.

04/89 - Assistant-doctorant au laboratoire de physique des réacteurs, institut de génie atomique, École Polytechnique Fédérale de Lausanne.

01/92 - System manager des stations de travail du laboratoire et du département (Sun, SiliconGraphics, HP).

10/92 - 06/93 Assistant aux travaux pratiques de physique.

Publications

T. Blenski, J. Ligou and S. Morel, "Atomic Physics for ICF studies: Stopping Power and Opacities", *Transactions of Fusion Technology*, vol. 20, pp. 813-818 (1991).

T. Blenski, B. Cichocki, J. Ligou and S. Morel, "Density Functional Approach to Photo-Absorption in High-Z Plasmas", H. Fiederowicz et al., Eds., Book of Proceedings "21st European Conference on Laser Interaction with Matter", 21-25 October, 1991, Warsaw (1991).

T. Blenski and S. Morel, "Fluctuations near the Average Atom Equilibrium. Application to Detailed Configuration Accounting in Opacity Calculation", à paraître dans *Il Nuovo Cimento*.

