

## DESCRIPTION STATISTIQUE ET QUANTIQUE DES PLASMAS CHAUDS

J.-C. PAIN, G. DEJONGHE, P. ARNAULT, F. GILLERON  
CEA - DAM - Île-de-France

**L'**étude des plasmas chauds consiste à déterminer l'ionisation moyenne, la pression, l'énergie interne, ou les coefficients d'absorption et d'émission du rayonnement. La notion de supraconfiguration permet d'aborder la physique atomique de ces plasmas, en transformant le problème des ions dans un grand nombre d'états possibles en un problème plus simple et accessible au calcul, par des regroupements et des moyennes adéquates. De nombreux développements ont été effectués récemment au CEA - DAM, pour étendre les possibilités de calcul et de diagnostic des propriétés structurales et radiatives des plasmas chauds dans le formalisme des supraconfigurations.

Les plasmas chauds, dont la température est au moins de quelques dizaines d'eV, contiennent, pour chacun de leurs constituants, des ions distribués sur des millions de niveaux d'énergie, et soumis à une dizaine de processus atomiques. Il est compréhensible que des milieux aussi complexes aient d'abord été analysés au moyen des méthodes de la mécanique statistique. Ainsi, dans une description simplifiée à l'extrême, nous considérons un "atome moyen" comme représentant unique de l'ensemble des états possibles des ions du plasma. Avec le développement des supercalculateurs, l'utilisation plus importante des méthodes de la physique atomique a permis d'améliorer le calcul de l'équation d'état et de l'opacité spectrale, nécessaires à l'étude de l'évolution du plasma par un code hydrodynamique, et à la compréhension, au-delà du calcul informatique, de la structure d'un milieu complexe.

Le plasma est constitué d'ions immergés dans un bain d'électrons libres et de photons. Dans de nombreuses circonstances, l'équilibre entre les différents processus radiatifs et collisionnels assure que le plasma est à l'équilibre thermodynamique local en chacun de ses points, pour une certaine température. Les lois de *Saha* et de *Boltzmann* donnent alors la distribution des états quantiques des ions.

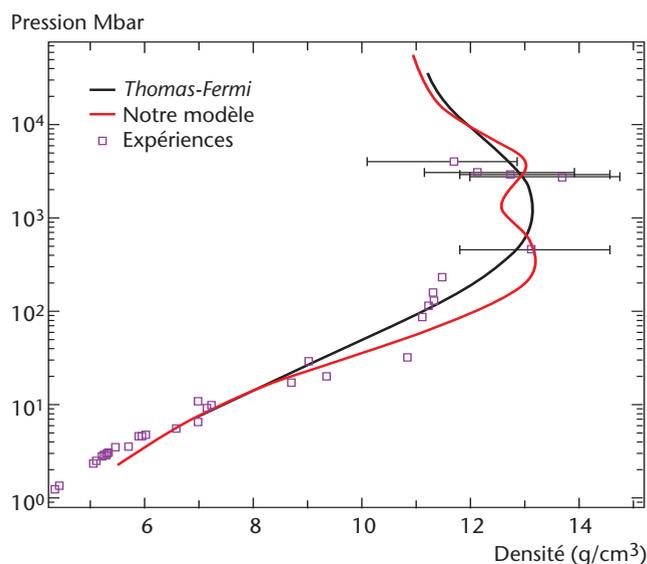
### Des niveaux aux supraconfigurations

Le traitement individuel de tous les niveaux d'énergie des ions est, en pratique, irréalisable car leur nombre est beaucoup trop important. De plus, l'utilité d'un tel calcul reste à démontrer lorsque nous nous intéressons à des grandeurs globales, comme la pression, qui résultent des contributions de tous les ions. À l'inverse, si le modèle de l'atome moyen peut paraître trop simplifié, en particulier pour déterminer le spectre d'absorption radiative, il n'en reste pas moins utile. Il repose sur un atome fictif permettant de calculer de manière auto-cohérente la structure électronique moyenne du plasma. Il donne ainsi une liste d'orbitales dans un potentiel central écranté, et leurs occupations de *Fermi-Dirac*. Ces orbitales permettent de définir les configurations électroniques du plasma. Le nombre de ces configurations pouvant être gigantesque, on les regroupe en supraconfigurations (SC). Par exemple, la SC  $(1s2s2p3s3p3d4s4p4d4f)^{29}$  est l'ensemble des configurations  $(1s)^a(2s)^b(2p)^c(3s)^d(3p)^e(3d)^f(4s)^g(4p)^h(4d)^i(4f)^j$  avec  $a+b+c+d+e+f+g+h+i+j = 29$ ; elle contient 2 635 464 configurations et plus de  $1,144 \cdot 10^{17}$  états. Cette notion est le fondement de la technique de calcul SCO (SuperConfiguration Opacity) initiée par *T. Blenski* (CEA - Saclay). La structure électronique d'une SC est obtenue à l'issue d'un calcul auto-cohérent, similaire à celui de l'atome moyen, mais imposant des populations entières pour les orbitales. La densité électronique est la somme des densités électroniques liée (*quantique*) et libre (Thomas-Fermi ou *quantique*) [1].

### L'équation d'état : du microscopique au macroscopique

Calculer l'équation d'état consiste à déterminer la pression et l'énergie interne à partir de la connaissance de la température et de la densité. L'équation d'état peut être obtenue, soit à l'issue du calcul de l'atome moyen, soit comme moyenne sur les SC. Pour le calcul de ces moyennes, la méthode des SC repose sur une algèbre de fonctions de partition canoniques. Nous en avons proposé une méthode robuste de calcul par récurrence, que nous venons d'optimiser en 2007 [2].

Le fait de décrire les électrons libres de manière quantique fournit une meilleure continuité des grandeurs thermodynamiques en cas d'ionisation par pression d'une orbitale [1], au prix d'une augmentation du temps de calcul. Dans le cas où les électrons libres sont semi-classiques (Thomas-Fermi), le processus de moyenne sur les SC adoucit les discontinuités. Nous avons proposé un formalisme variationnel, consistant à obtenir la cohérence thermodynamique en définissant un seuil du continuum propre à chaque SC [3]. Nous avons également explicité le rôle des conditions aux limites sur les fonctions d'onde dans les différentes manières de calculer la pression quantique : tenseur des contraintes, théorème du viriel, et dérivée de l'énergie libre par rapport au volume [3]. Désormais, il est possible de calculer les propriétés électroniques de chaque degré de charge et de chaque configuration, ainsi que leur contribution à l'équation d'état, pour des corps simples ou des mélanges. Nous voyons nettement, sur la courbe d'Hugoniot principale de l'aluminium (figure 1),

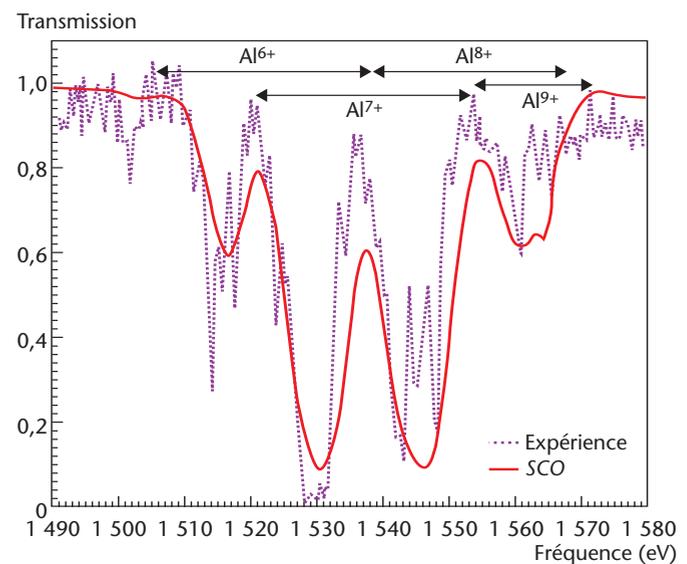


**Figure 1**  
Hugoniot principal de l'aluminium. Comparaison entre des valeurs expérimentales (<http://teos.ficp.ac.ru/rusbank>), un calcul fondé sur une description Thomas-Fermi des électrons, et notre calcul quantique.

les oscillations dues à la prise en compte des orbitales [4], absente du modèle Thomas-Fermi. Une nouvelle méthode de calcul du taux de compression maximale, atteignable lors d'un choc simple, a également été développée [5], [6].

### L'opacité monochromatique

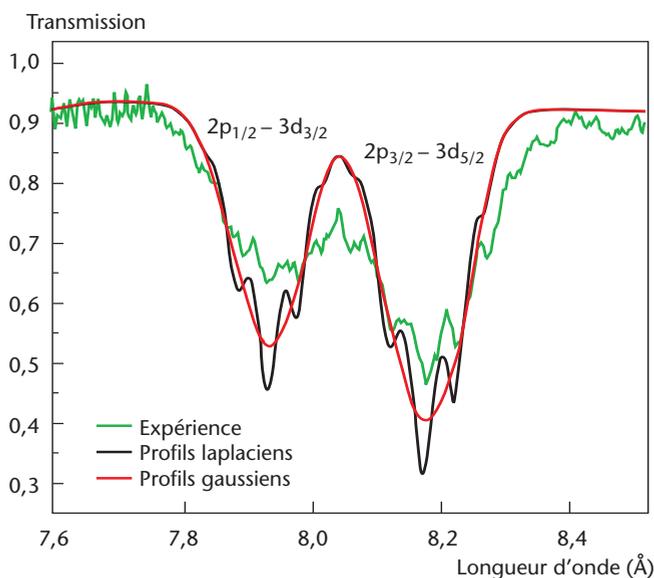
Une contribution importante à l'opacité spectrale d'un plasma est constituée par les raies, c'est-à-dire par les transitions radiatives entre les niveaux d'énergie des ions. Dans les plasmas de Z assez élevé, les raies sont souvent si nombreuses qu'elles peuvent coalescer par recouvrement de leurs largeurs physiques individuelles (effets Doppler, Stark, etc.), et former de larges structures non résolues dans l'opacité. L'approche UTA – Unresolved Transition Array – permet de modéliser simplement ces structures par une distribution gaussienne, dont les deux premiers moments (position, variance) sont calculés grâce à l'algèbre de Racah et aux techniques de seconde quantification de Judd. Le formalisme des SC apporte beaucoup de souplesse au calcul statistique, puisqu'il permet de contrôler le degré de raffinement de l'opacité spectrale, en rassemblant les faisceaux en supra-faisceaux ou STA – Super Transition Array. Un STA est l'ensemble des transitions résultant d'un saut mono-électronique entre deux SC, et est habituellement modélisé, lui aussi, par une fonction gaussienne de l'énergie. Un code comme SCO, basé sur les SC, possède donc un domaine de validité très large [7] (figures 2 et 3). Nous avons montré [8] qu'il est souvent nécessaire d'aller au-delà de l'ordre 2 pour modéliser correctement



**Figure 2**  
L'expérience laser de Davidson et al. (plasma d'aluminium à  $T = 40$  eV et  $p = 0,01$  g/cm<sup>3</sup>) est globalement en bon accord avec le code SCO pour les transitions  $1s-2p$  des ions  $Al^{6+}$  à  $Al^{9+}$ , malgré l'absence de raies détaillées dans le calcul.

la distribution statistique des raies dans un UTA ou un STA. Ainsi, nous avons proposé d'abandonner la gaussienne au profit de la gaussienne généralisée (figure 3), qui permet de prendre en compte l'aplatissement du faisceau ou kurtosis (moment d'ordre 4).

La méthode des supraconfigurations permet de calculer à la fois l'équation d'état et l'opacité d'un plasma chaud. Elle est très prometteuse pour la mise au point de nouvelles méthodes en physique atomique.



**Figure 3**  
 Comparaison entre une expérience Z-pinch de Bailey et Al. (structures du brome d'un plasma de bromure de sodium NaBr à  $T = 47$  eV et  $\rho = 0,04$  g/cm<sup>3</sup>), et deux calculs avec modélisation gaussienne et laplacienne (cas particulier de gaussienne généralisée). Cette dernière permet de mieux résoudre les structures correspondant aux transitions 2p-3d du brome.

## Références

- [1] J.-C. PAIN, G. DEJONGHE, T. BLENSKI, "Quantum-mechanical model for the study of pressure ionization in the superconfiguration approach", *J. Phys. A: Math. Gen.*, **39**, p. 4659-4666 (2006).
- [2] B. G. WILSON, F. GILLERON, J.-C. PAIN, "Further stable methods for the calculation of partition functions in the superconfiguration approach", *Phys. Rev. E*, **76**, p. 032103 (2007).
- [3] J.-C. PAIN, "A model of dense-plasma atomic structure for equation-of-state calculations", *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **40**, p. 1553-1573 (2007).
- [4] J.-C. PAIN, "Quantum-statistical equation-of-state models of dense plasmas: high-pressure Hugoniot shock adiabats", *Contrib. Plasma Phys.*, **47**, p. 421-434 (2007).
- [5] J.-C. PAIN, "Shell-structure effects on high-pressure Rankine-Hugoniot shock adiabats", *High Energy Density Phys.*, **3**, p. 204-210 (2007).
- [6] J.-C. PAIN, "Equation-of-state model for shock compression of hot dense matter", *Phys. Lett. A*, **362**, p. 120-124 (2007).
- [7] P. ARNAULT, G. DEJONGHE, T. BLENSKI, "Interpretation of some X-ray and XUV absorption experiments using SCO", *High Energy Density Phys.*, **3**, p. 1-7 (2007), et références incluses.
- [8] F. GILLERON, J.-C. PAIN, J. BAUCHE, C. BAUCHE-ARNOULT, "Impact of high-order moments on the statistical modeling of transition arrays", *Phys. Rev. E*, **77**, p. 026708 (2008).