

Opacité radiative des plasmas chauds : des approches statistiques aux calculs détaillés

Les spectres d'absorption et d'émission des plasmas d'ions multichargés comprennent un grand nombre de raies dipolaires électriques et de configurations, imposant de recourir à des méthodes globales. Nous avons étudié l'effet des moments d'ordre élevé de la distribution des raies sur la modélisation des faisceaux de transitions, et amélioré le traitement des interactions électron-électron dans le cadre de l'approche des superconfigurations. Nous avons également proposé des méthodes numériques efficaces pour dénombrer les niveaux et les états des ions et par conséquent le nombre de raies d'un faisceau. Ces études ont pour objectif de développer un code de calcul d'opacité hybride combinant l'approche [statistique] des superconfigurations et le calcul [détaillé] de la structure atomique.

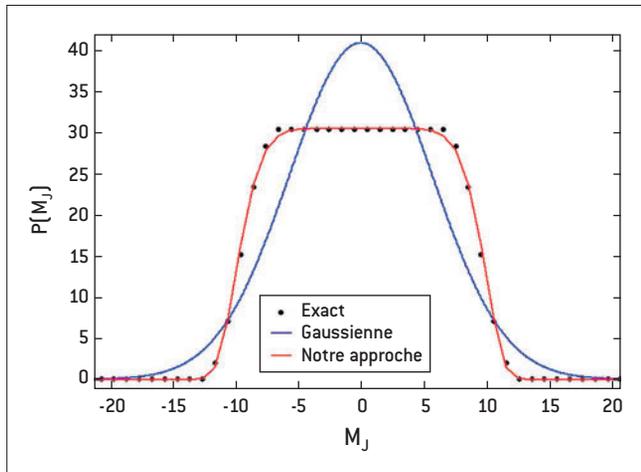
J.-C. Pain • F. Gilleron • Q. Porcherot CEA - DAM Île-de-France

Le nombre de niveaux et de raies dipolaires-électriques (E1) est considérable surtout dans les plasmas ayant des configurations électroniques avec une ou plusieurs couches ouvertes très dégénérées. Heureusement, les raies coalescent alors en une structure spectrale non résolue et il est possible de regrouper les niveaux en configurations, et les raies entre deux configurations en faisceaux de transitions. Parfois, la coalescence des raies est imposée par leurs élargissements physiques. C'est le cas des plasmas denses, pour lesquels l'effet Stark électronique domine. Chaque faisceau peut être modélisé de manière statistique par une enveloppe continue dont les deux premiers moments sont calculés en utilisant les techniques de seconde quantification de Judd, l'algèbre de Racah et les méthodes graphiques de Jucys. Dans ce formalisme (UTA : Unresolved Transition Arrays), la distribution est souvent choisie Gaussienne, mais cela impose une asymétrie et un aplatissement du faisceau qui ne sont pas toujours réalistes. Nous avons mené une étude de l'impact des moments d'ordre >2 en suggérant d'autres distributions (Hypergaussienne, Pearson IV, etc.) [1]. Cette modélisation a également été appliquée au calcul des pertes radiatives [2]. La prolifération des niveaux et des raies atteint son paroxysme lorsque le nombre de configurations (et donc de faisceaux) devient à son tour considérable. Une solution consiste à rassembler les

configurations en superconfigurations (SC). L'ensemble des raies, associées à un saut mono-électronique donné entre deux SCs, représente un superfaisceau de transitions (ou STA : Super Transition Array) modélisé par une distribution statistique dont les deux premiers moments (centre de gravité et variance) s'expriment à l'aide de fonctions de partition. En utilisant notre algorithme récursif robuste de calcul des fonctions de partition et l'approche variationnelle de Jensen-Feynman [3], nous avons amélioré la prise en compte des interactions électron-électron dans la théorie STA.

Modélisation d'un faisceau de transitions : les raies détaillées

Le spectre d'un plasma (en absorption ou émission) peut contenir des faisceaux riches en raies, pour lesquels une approche globale est parfaitement adaptée, et d'autres comportant une poignée de raies, nécessitant la diagonalisation de la matrice hamiltonienne. L'estimation du nombre de raies d'un faisceau est un élément important (avec les élargissements physiques : Doppler, Stark, etc.) pour décider du calcul détaillé ou non du faisceau, tout comme le nombre de niveaux de moment angulaire J fixé qui constitue la taille d'un bloc de la matrice à diagonaliser. Cela nous a amené à développer des algorithmes rapides de calcul des termes spectroscopiques LS et des niveaux J [4]. Nous avons également étendu la modélisation



statistique de la distribution des états quantiques pour traiter des configurations comportant des sous-couches ouvertes de grand moment cinétique orbital (voir [figure 1](#) le cas de la configuration p^2m).

Élaboration d'un modèle hybride

Le travail de thèse de Q. Porcherot [\[5\]](#) consiste à développer un modèle de calcul d'opacité proposant le meilleur compromis entre précision et temps de calcul. Il s'agit de coupler le code d'opacité SCO (SuperConfigurations Opacity) écrit par T. Blenski *et al.* [\[6\]](#), fondé sur la théorie STA, à des calculs détaillés. Cela implique de définir des critères pour décider de la nécessité du traitement détaillé des raies et cerner la validité des approches statistiques. Les données nécessaires au calcul des

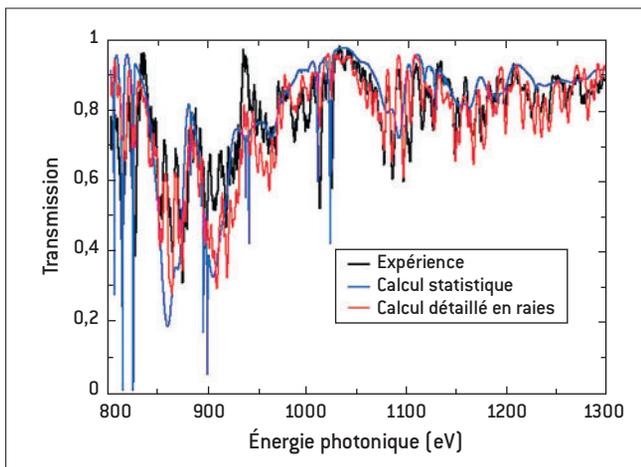


Figure 2. Comparaison entre un calcul statistique (SCO), un calcul détaillé préliminaire [\[5\]](#) et un spectre expérimental (Z-pinch) de fer à $T=155$ eV et $\rho = 0,05$ g/cm³ obtenu par Bailey *et al.* [\[9\]](#).

Figure 1. Modélisation de la distribution des projections M_J du moment angulaire J par une fonction Gaussienne et une fonction Hypergaussienne pour la configuration p^2m (une orbitale m correspond à $l = 9$).

faisceaux détaillés (intégrales de Slater, de spin-orbite et élément dipolaire) sont calculées et transmises par SCO. Ainsi, les effets d'environnement plasma (écranage) sur les fonctions d'onde sont pris en compte en bénéficiant de la thermodynamique élaborée de SCO. Ensuite, les énergies des niveaux et les raies (position et force) sont calculées par le code de R.D. Cowan [\[7\]](#). L'outil obtenu permettra d'obtenir des opacités précises, requises pour l'astrophysique et la FCI, et d'étudier les propriétés des spectres atomiques complexes. Il renforcera nos capacités d'interprétation de spectres expérimentaux tels que ceux obtenus au Laboratoire pour l'Utilisation des Lasers Intenses de l'École Polytechnique [\[8\]](#) et au Sandia National Laboratory (Z-pinch, voir [figure 2](#)) [\[9\]](#).

RÉFÉRENCES

- [1] J.-Ch. PAIN, F. GILLERON, J. BAUCHE, C. BAUCHE-ARNOULT, "Effect of third- and fourth- order moments on the modeling of unresolved transition arrays", *High Energy Density Phys.*, **5**, p. 294-301 [2009].
- [2] D. BENREDJEM, A. CALISTI, J.-C. PAIN, F. GILLERON, "Radiative power losses and opacity of mid-Z impurities", *J. Phys.: Conf. Ser.*, à paraître [2010].
- [3] J.-Ch. PAIN, F. GILLERON, G. FAUSSURIER, "Jensen-Feynman approach to the statistics of interacting electrons", *Phys. Rev. E*, **80**, 026703 [2009].
- [4] F. GILLERON, J.-C. PAIN, "Efficient methods for calculating the number of states, levels and lines in atomic configurations", *High Energy Density Phys.*, **5**, p. 320-327 [2009].
- [5] Q. PORCHEROT, "Développement d'un modèle atomique permettant le calcul des propriétés radiatives des plasmas chauds", Thèse de l'École Polytechnique (en cours).
- [6] T. BLENSKI, A. GRIMALDI, F. PERROT, "A Superconfiguration code based on the local density approximation", *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, **65**, p. 91-100 [2000].
- [7] R.D. COWAN, "The Theory of atomic structure and spectra", University of California Press, Berkeley and Los Angeles [1981].
- [8] G. LOISEL *et al.*, "Absorption spectroscopy of mid and neighboring Z plasmas: Iron, nickel, copper and germanium", *High Energy Density Phys.*, **5**, p. 173-181 [2009].
- [9] J.E. BAILEY *et al.*, "Diagnosis of x-ray heated Mg/Fe opacity research plasmas", *Rev. Sci. Instrum.*, **79**, 113101 [2008].