

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université Abou-Bekr Belkaïd - Tlemcen

**Faculté des Sciences
Département de Physique
Laboratoire de Physique Théorique**

Thèse

présentée en vue de l'obtention du diplôme de

Docteur Es-Sciences

Spécialité : Physique Théorique

par

Latifa BETTADJ épouse BOUFATAH

**RECOMBINAISON RADIATIVE DES IONS FORTEMENT CHARGES DANS DES ETATS EXCITES :
POLARISATION DES RAIES DE FLUORESCENCE X**

Soutenue en Décembre 2010 devant la commission d'examen :

Bachir LIANI	Professeur (Université de Tlemcen)	Président du Jury
Mokhtar K. INAL	Professeur (Université de Tlemcen)	Directeur de Thèse
Mammar BOUAMOUD	Professeur (Université de Tlemcen)	Examineur
Boumédiène LASRI	MC Classe A (Université de Saïda)	Examineur
Ferhat MENAS	MC Classe A (Université de Tizi-Ouzou)	Examineur
Messaoud NEMOUCHI	MC Classe A (USTHB)	Examineur

A la mémoire de mon père qu'il se repose en paix

A ma très chère mère et mes généreux frères

A ma famille

Latifa BETTADJ épouse BOUFATAH

Remerciements

Le travail présenté dans cette thèse a été réalisé au Laboratoire de Physique Théorique (LPT) du département de Physique de la Faculté des Sciences de l'Université de Tlemcen. J'adresse naturellement des remerciements tout particuliers au Professeur Mokhtar Kemal INAL qui a dirigé cette thèse. Ses grandes qualités scientifiques et humaines ont permis que ce travail puisse avancer rigoureusement, dans un esprit toujours amical. Qu'il veuille bien trouver ici l'expression de mon profond respect et de ma reconnaissance.

Je tiens à remercier profondément Monsieur le Professeur Bachir LIANI, directeur du Laboratoire de Physique Théorique, pour m'avoir fait l'honneur de présider le jury de ma thèse.

J'exprime ma profonde gratitude à tous les membres du jury qui ont accepté de juger ce travail de thèse. A Messieurs, Mammar BOUAMOUD, Professeur à l'Université de Tlemcen, Messaoud NEMOUCHI, Maître de Conférences à l'USTHB, Ferhat MENAS, Maître de Conférences à Université de Tizi-Ouzou, Boumedienne LASRI, Maître de Conférences à l'Université de Saïda, pour leur disponibilité et pour avoir bien voulu examiner ce travail.

Un grand merci à tous mes collègues du Laboratoire de Physique Théorique et à tous mes amis. Enfin, je remercie du fond du coeur toute ma famille pour son appui durant toutes ces années. Particulièrement, à mon mari Monsieur Mohammed Réda BOUFATAH, Maître assistant à l'Université de Tlemcen, pour son soutien moral et son aide précieuse, et à ma belle mère que j'adresse mon profond respect et reconnaissance.

Latifa BETTADJ épouse BOUFATAH

Résumé

Dans cette thèse, nous avons étudié théoriquement la polarisation linéaire et le rapport d'intensité des raies Lyman- α émises par les ions hydrogénoïdes Fe^{25+} , par suite de collisions avec un faisceau unidirectionnel d'électrons d'énergie variant de 1 à 50 keV. Nous avons tenu compte, dans cette étude, de la recombinaison radiative des ions Fe^{26+} comme processus supplémentaire s'ajoutant à l'excitation collisionnelle dans le peuplement des états excités 2s et 2p. Les effets des cascades radiatives issues des niveaux supérieurs (avec $n \geq 3$) sont prises en compte dans nos calculs, aussi bien pour l'excitation que pour la recombinaison radiative. Nous avons considéré l'anisotropie de l'émission de la raie Ly- α_1 ($2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$) et la contribution de la raie dipolaire magnétique M1 ($2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$) superposée à la raie Ly- α_2 ($2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$). Les calculs des sections efficaces partielles de recombinaison radiative dans les différents sous-niveaux magnétiques des ions hydrogénoïdes ont été effectués dans le cadre de la théorie relativiste exacte dans laquelle nous avons inclu tous les multipôles du champ du photon de recombinaison émis. Une comparaison a été menée entre les résultats des sections efficaces partielles de recombinaison radiative obtenus dans la théorie relativiste exacte et ceux obtenus dans l'approximation dipolaire non-relativiste. Nous avons également calculé les sections efficaces partielles d'excitation collisionnelle directe dans les différents sous-niveaux magnétiques des ions hydrogénoïdes en utilisant le code FAC.

Nos résultats montrent que l'effet de l'inclusion du processus de la recombinaison radiative sur le degré de polarisation linéaire de la raie Ly- α_1 et le rapport d'intensité Ly- α_1 /Ly- α_2 est faible sous les conditions de l'équilibre d'ionisation. Cet effet peut, cependant, être significatif à des énergies situées en dessous ou au voisinage du seuil d'ionisation des ions Fe^{25+} dans le domaine ($\sim 7 - 10$ keV) pourvu que la proportion des ions nus Fe^{26+} soit relativement importante. Une telle situation peut être réalisée dans les expériences EBIT.

Table des matières

1	Introduction	3
2	Théorie de Dirac des systèmes hydrogénoïdes	13
2.1	Introduction	13
2.2	Equation de Dirac	14
2.3	Solutions de l'équation de Dirac pour un potentiel central	17
2.3.1	Fonctions d'onde liées	20
2.3.2	Fonctions d'onde du continuum	23
3	Recombinaison radiative	25
3.1	Introduction	25
3.2	Recombinaison radiative : Traitement théorique	30
3.2.1	Description relativiste exacte	30
3.2.2	Evaluation de l'amplitude de transition	31
3.3	Sections partielles de recombinaison radiative dans des ions nus	37
3.4	Approximation dipolaire non-relativiste	39
4	Intensité et polarisation linéaire des raies Lyman-α	47
4.1	Introduction	47
4.2	Expression du degré de polarisation linéaire : formalisme de la matrice densité	51
4.2.1	Matrice densité au premier ordre de la théorie des perturbations	51
4.2.2	Degré de polarisation linéaire des raies associées à des transi- tions dipolaires	60

4.3	Application à la raie Lyman- α_1 de l'ion Fe^{25+}	60
4.4	Rapport des intensités des raies Ly- α	62
4.5	Modèle de population des sous-niveaux magnétiques	63
5	Recombinaison radiative : Résultats et discussions	71
5.1	Sections efficaces partielles de recombinaison radiative	72
5.1.1	Résultats du traitement relativiste exact	72
5.1.2	Résultats de l'approximation dipolaire non-relativiste	83
5.1.3	Comportement de la polarisation de la raie Ly- α_1 le long de la séquence isoélectronique	86
6	Effets de la RR sur les propriétés des raies Ly-α	91
6.1	Sections efficaces partielles d'excitation collisionnelle	92
6.2	Polarisation et rapport d'intensité des raies Ly- α	93
6.2.1	Energies inférieures au seuil d'excitation $n = 1 \rightarrow 2$	96
6.2.2	Energies supérieures au seuil d'excitation $n = 1 \rightarrow 2$	98
6.2.3	Energies supérieures au seuil d'ionisation	100
6.3	Comportement le long de la séquence isoélectronique de H	104
	Conclusions	111
	Bibliographie	113
A	Niveaux d'énergie de l'ion Fe^{25+}	119
B	Probabilités de transition radiative dans Fe^{25+}	121

Chapitre 1

Introduction

Grâce au progrès expérimental dans les accélérateurs des ions lourds et des techniques de confinement, il devient possible de nos jours de produire, d'accélérer et ensuite de confiner des ions fortement chargés jusqu'à l'uranium à l'état nu de charge U^{92+} [1-4]. Les expériences avec des ions fortement chargés ont fourni des opportunités promettantes en physique atomique. Celles-ci sont généralement reliées à l'étude des systèmes à un ou plusieurs électrons dans les champs électromagnétiques intenses produits par des noyaux lourds. Dans de telles conditions, il est intéressant d'étudier aussi bien la structure électronique de ces ions que la dynamique de leurs collisions. Evidemment, ces deux aspects de la physique atomique des ions hautement chargés sont fortement corrélés entre eux. Lorsque, par exemple, les collisions avec des ions sont généralement utilisées dans les études de la structure atomique afin de peupler les états excités, la connaissance de la structure est nécessaire pour une analyse appropriée des expériences de collision.

Dans les études de la structure atomique, les ions moyennement lourds et lourds constituent l'unique possibilité de tester les effets de l'électrodynamique quantique (QED) dans un régime où le traitement standard basé sur le développement perturbatif en puissance du paramètre $(\alpha \cdot Z)$ [5] n'est plus approprié. Par exemple, pour l'hydrogène ($Z = 1$), la constante de structure fine $\alpha = 1/137.036 \ll 1$ assure la convergence rapide du développement en puissance de $(\alpha \cdot Z)$. Pour les ions de charge nucléaire Z élevée, la quantité $(\alpha \cdot Z)$ se rapproche de l'unité, il est alors

nécessaire dans ce cas de considérer les ordres supérieurs dans le développement en $(\alpha \cdot Z)$. L'un des moyens efficaces pour étudier ces corrections électrodynamiques quantiques est de mesurer le Lamb shift dans les ions lourds. A ce propos, un grand nombre d'expériences a été réalisé afin de mesurer le Lamb shift de l'état fondamental des ions hydrogénoïdes et héliumoïdes de l'uranium [6, 7]. Ces mesures avaient fournies des résultats qui étaient bien interprétés par des traitements théoriques entièrement relativistes [8, 9]. Outre la structure électronique, le champ électromagnétique intense créé par les noyaux lourds affecte fortement le comportement dynamique de ces ions. Afin d'explorer cet aspect important, des études expérimentales et théoriques intenses ont été effectuées sur les collisions relativistes ion-atome et électron-ion. Nous nous intéressons, particulièrement, dans ce travail de thèse aux collisions électron-ion.

Lors des collisions entre des ions et un faisceau unidirectionnel d'électrons, il y a émission de rayonnement, en général, polarisé et dont la distribution angulaire est anisotrope. Ceci résulte d'une population inégale des différents sous-niveaux magnétiques à l'intérieur du niveau excité émetteur durant le processus de collision. L'étude de la polarisation des raies X des ions fortement chargés par suite des collisions avec un faisceau directif d'électrons a fait l'objet, depuis le début des années 1980, de multiples travaux théoriques et expérimentaux [10-17]. Ce domaine de recherche a initialement suscité l'intérêt des astrophysiciens [18] qui cherchaient à détecter la présence d'électrons énergétiques à distribution de vitesses anisotropes accélérés lors des éruptions solaires. La détection de tels électrons est d'une importance capitale pour la compréhension des mécanismes de libération brutale d'énergie dans les éruptions solaires. Cependant, il était difficile d'effectuer des mesures fiables de la polarisation des raies X émises lors de ces éruptions solaires à cause des faibles intensités et des variations temporelles rapides.

Les premières mesures du degré de polarisation linéaire des raies X émergent des plasmas chauds produits en laboratoire ont été reportées [19] pour les plasmas denses créés par irradiation avec un laser de puissance. Ces mesures ont fourni de précieuses informations sur les fonctions de distribution angulaire et d'énergie des

électrons suprathermiques anisotropes générés dans de tels plasmas. La connaissance de ces fonctions de distribution est d'une grande importance pour mieux comprendre les processus qui prennent place dans les plasmas chauds. Des électrons non thermiques, dont la distribution angulaire est fortement anisotrope, règnent aussi dans les plasmas de fusion à confinement magnétique (plasmas de tokamak) lorsque ces derniers sont soumis au chauffage par des ondes radiofréquences. Des observations de la polarisation des raies X émises par ce type de plasmas ont été envisagées [20, 21].

Outre ces applications potentielles dans les diagnostics spectroscopiques des plasmas de hautes températures présents dans l'univers ou produits en laboratoire à des fins de fusion thermonucléaire ou de laser X, la polarisation linéaire des raies X a connu un net regain d'intérêt pour la physique fondamentale depuis la mise au point, en 1988 à Livermore (USA), de nouvelles expériences de collisions électron-ion utilisant des machines appelées EBIT (Electron Beam Ion Trap) [22, 23]. Actuellement, plusieurs machines EBIT sont opérationnelles à travers le monde (USA, Russie, Japon, Allemagne, Angleterre).

A partir des mesures de la polarisation linéaire des raies X effectuées dans EBIT, il est possible de mieux tester les diverses théories et approximations utilisées dans le traitement des collisions entre électrons et ions, par rapport aux mesures conventionnelles des intensités des raies émises par des ions excités par impact d'électrons isotropes. En effet, le degré de polarisation dépend des sections efficaces partielles des différents sous-niveaux magnétiques, qui révèlent plus d'informations sur la dynamique des processus collisionnels mises en jeu que les sections efficaces totales obtenues en sommant sur tous les nombres quantiques magnétiques. L'étude de la polarisation des raies X est aussi d'une grande importance pour la modélisation et le diagnostic des plasmas chauds astrophysiques et de laboratoire dans lesquels la distribution de vitesses des électrons n'est pas Maxwellienne et dévie de l'isotropie [20]. Les intensités relatives des raies émises de ces plasmas peuvent être affectées par les anisotropies angulaires liées à leurs polarisations. Par conséquent, dans le but de faire des diagnostics pour déduire, à partir des rapports d'intensité des raies, différents paramètres du plasma étudié tels que la densité, la température ainsi que

l'équilibre d'ionisation, la connaissance de la polarisation de ces raies est nécessaire [18, 19, 21, 24, 25, 26].

Les raies X émises par des ions fortement chargés par suite des collisions avec des électrons libres peuvent être formés par une variété de processus atomiques. En plus de la contribution majeure de l'excitation collisionnelle des ions X^{z+} , les processus de recombinaison des ions $X^{(z+1)+}$ (incluant la recombinaison radiative, la recombinaison à trois corps, et la recombinaison diélectronique), ainsi que l'ionisation de couches internes des ions $X^{(z-1)+}$ devraient être considérés. Pour des ions initialement nus, la recombinaison diélectronique ne peut pas se produire et les processus de formation des raies d'émission des ions hydrogénoïdes peuvent se limiter à l'excitation collisionnelle et à la recombinaison radiative tant que la densité des électrons n'est pas trop élevée. En effet, dans ces conditions de densités relativement basses, la recombinaison à trois corps joue un rôle vraiment négligeable. Par ailleurs, le processus d'ionisation de couches internes des ions héliumoïdes initialement dans ses états excités $1snl$ (avec $n \geq 2$) intervient de manière très négligeable dans le peuplement des états excités des ions hydrogénoïdes, car la presque totalité des ions héliumoïdes se trouvent dans leur niveau fondamental $1s^2$. Ceci nous permet, donc, de nous intéresser seulement au processus de recombinaison radiative comme correction à l'excitation collisionnelle pour la formation des raies X émises par les ions hydrogénoïdes.

Plusieurs études théoriques ont été effectuées afin de mieux comprendre le rôle des différents processus d'excitation sur l'émission des raies X des plasmas. Souvent, ces processus conduisent à une polarisation (linéaire) et une distribution angulaire anisotrope des photons émis lors de la désexcitation si des électrons directionnels sont présents dans le plasma. Parmi ces études théoriques nous pouvons citer, l'excitation collisionnelle directe [10, 27, 28, 29], les cascades radiatives qui suivent l'excitation vers des niveaux supérieurs [12, 30], la recombinaison radiative [31] ainsi que l'ionisation de couches internes [14]. En plus des raies de résonance, les raies satellites émises durant le processus de recombinaison diélectronique des ions, qui apparaissent à côté des raies de résonance, ont également fait l'objet de nombreuses

études [11, 13, 32, 33].

Des calculs théoriques accomplis par Reed et Chen [28] avaient montré que le degré de polarisation de la raie Lyman- α_1 ($2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$) produite suite à l'excitation directe peut être appréciable, atteignant $\sim 34\%$ pour une énergie d'impact égale à deux fois le seuil d'excitation et $\sim 17\%$ pour cinq fois le seuil d'excitation. Des mesures de la polarisation de la raie Ly- α_1 ont été effectuées, dans EBIT, par Nakamura *et al* [34] pour l'élément titane Ti^{21+} et par Robbins *et al* [35] pour les deux ions d'argon Ar^{17+} et de fer Fe^{25+} pour diverses énergies du faisceau d'électrons rapportées au seuil d'excitation. Les résultats expérimentaux obtenus dans EBIT se trouvent être substantiellement inférieurs aux prédictions théoriques basées sur l'excitation collisionnelle dont les sections efficaces partielles ont été calculées dans l'approximation entièrement relativiste distorted-wave par le code de Zhang *et al* [36]. Nous avons pensé que la prise en compte du processus de recombinaison radiative des ions nus pourrait amoindrir les différences entre les résultats expérimentaux et théoriques.

D'après des travaux antérieurs [37] concernant des plasmas à distribution d'électrons Maxwellienne et isotrope, il a été montré que la recombinaison radiative contribue faiblement au peuplement des niveaux excités. Notons toutefois que même si la contribution d'un certain processus collisionnel à l'intensité moyenne d'une raie est faible (quelques %), elle peut avoir un effet important sur l'intensité mesurée dans un certain angle par rapport à la direction des électrons incidents. Un tel effet peut être significatif si la distribution des populations des sous-niveaux magnétiques dans le niveau supérieur de la raie due au processus en question est très différente de celle due au processus qui participe de manière dominante à l'émission de cette raie. En d'autres termes, si la polarisation de la raie induite par le processus considéré comme faible est relativement importante en valeur absolue et de signe opposée à la polarisation induite par le processus dominant.

Dans ce travail de thèse, nous nous intéressons à explorer théoriquement l'effet du processus de la recombinaison radiative sur la polarisation linéaire de la raie Ly- α_1 émise par les ions hydrogénéoïdes de fer Fe^{25+} , ainsi que le rapport des inten-

sités des raies Ly- α_1 sur Ly- α_2 (associée à la transition $2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$). Mentionnons que la plupart des études théoriques effectuées dans le passé sur le processus de recombinaison radiative portaient sur le calcul des sections efficaces totales, où les collisions électron-ion étaient supposées être isotropes. Ces sections efficaces étaient utilisées principalement dans la détermination de la distribution des états de charge des différents ions présents dans les plasmas astrophysiques et de laboratoire. Cependant, durant la dernière décennie, il y a eu publication de quelques articles [38-43] traitant différents aspects de la recombinaison radiative, qui impliquent les effets de polarisation.

Notre choix pour l'élément fer a été motivé en partie à cause de son abondance cosmique relativement élevée. Les raies Ly- α de Fe²⁵⁺ avaient été observées dans le spectre des raies X-mous de divers plasmas astrophysiques, notamment les plasmas d'éruptions solaires [44, 45], les étoiles doubles et les noyaux actifs de galaxie (AGN) [46]. Une autre raison dictant notre choix de l'élément fer est que l'ion Fe²⁵⁺ est l'un des trois ions hydrogénoïdes (en plus de Ar¹⁷⁺ et Ti²¹⁺) dont les intensités des raies Ly- α avaient été mesurées dans des expériences antérieures dans EBIT [34, 35, 47]. Pour l'ion Fe²⁵⁺, la durée de vie radiative la plus grande est celle du niveau $2s_{1/2}$ qui est de 0.35 ns [48]. Cette durée de vie est suffisamment petite de sorte à pouvoir négliger la désexcitation collisionnelle à partir des trois niveaux $n = 2$ pour des densités électroniques inférieures à $\sim 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Nous avons effectué nos calculs en prenant en compte, dans l'évaluation des populations des sous-niveaux magnétiques des niveaux supérieurs des raies considérées, aussi bien l'excitation collisionnelle à partir du niveau fondamental $1s_{1/2}$ que la recombinaison radiative. Ces populations sont déterminées en incluant aussi les cascades radiatives provenant des niveaux excités supérieurs $n \geq 3$. Notre étude de la polarisation linéaire et du rapport d'intensité des raies des ions hydrogénoïdes, que nous exposons dans le cas d'électrons monoénergétiques et unidirectionnels, devrait susciter un intérêt pour les expériences d'EBIT et contribuer à éventuellement résoudre le désaccord constaté entre les résultats expérimentaux et les résultats théoriques [47]. Nos résultats devraient également être utiles pour les diagnostics des plasmas chauds astrophysiques (éruptions solaires et

stellaires) ou de laboratoire (plasmas de tokamak) dans lesquels sont générés des faisceaux énergétiques d'électrons.

Cette thèse est organisée selon le plan suivant. Dans le deuxième chapitre, nous rappelons l'essentiel du formalisme relativiste basé sur l'équation de Dirac pour donner ensuite les solutions des fonctions d'onde entièrement relativistes qui décrivent aussi bien les états d'un électron lié que ceux d'un électron libre (système hydrogénoïde). Cette description relativiste servira à traiter, dans le troisième chapitre, le processus de la recombinaison radiative d'ions fortement chargés par impact d'électrons unidirectionnels. Nous établissons, dans la première partie de ce troisième chapitre, l'expression des sections efficaces partielles de recombinaison radiative dans des sous-niveaux magnétiques spécifiques de l'ion recombiné et ceci dans le cadre de la théorie relativiste exacte. Dans cette théorie, outre les fonctions d'onde électroniques relativistes utilisées, nous tenons compte du développement multipolaire de l'interaction électron-photon. Dans la deuxième partie, nous procédons à une description détaillée du processus de recombinaison radiative dans l'approximation dipolaire électrique non-relativiste, où les sections efficaces partielles sont exprimées analytiquement dans le cas des systèmes hydrogénoïdes.

Le chapitre 4 est consacré aux propriétés de polarisation et au rapport d'intensité des raies émises par les ions hydrogénoïdes. Après avoir donné une brève description de la machine EBIT pour laquelle nos calculs peuvent s'appliquer et après application du formalisme de la matrice densité, nous établissons une expression générale du degré de polarisation linéaire d'une raie associée à une transition dipolaire électrique ou magnétique, en fonction des populations des sous-niveaux magnétiques du niveau supérieur de la raie. En particulier, nous exprimons le degré de polarisation de la raie Ly- α_1 en fonction des populations des sous-niveaux magnétiques $m = 1/2$ et $m = 3/2$ du niveau supérieur $2p_{3/2}$ des ions hydrogénoïdes émetteurs. Nous donnons ensuite le rapport de l'intensité de la raie Ly- α_1 sur celle de la raie Ly- α_2 en discutant, d'une part l'effet de l'anisotropie spatiale de l'émission de la raie Ly- α_1 et d'autre part la contribution de la transition dipolaire magnétique M1 ($2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$) à l'intensité de la raie Ly- α_2 .

Nous consacrons ensuite le chapitre 5 aux résultats obtenus en considérant la recombinaison radiative comme seul processus de peuplement des niveaux excités. Dans une première partie, nous donnons les sections efficaces directes de recombinaison radiative dans les différents sous-niveaux magnétiques des états excités $n=2$ et $n=3$ de Fe^{25+} pour des énergies des électrons incidents comprises entre 1 et 50 keV. Les sections efficaces effectives dans lesquelles nous avons inclus les contributions des cascades radiatives issues de tous les niveaux supérieurs jusqu'à $n=6$ sont également reportées. Les effets de ces cascades radiatives d'une part, et de l'inclusion des ordres multipolaires supérieurs autres que le dipôle électrique dans le champ du photon d'autre part seront profondément discutés. Dans la deuxième partie, nous donnons les sections efficaces partielles de recombinaison radiative que nous avons calculé dans l'approximation dipolaire non-relativiste tout en faisant une comparaison avec les résultats obtenus dans la théorie relativiste exacte. A partir de ces résultats, nous présentons les valeurs du degré de polarisation linéaire de la raie $\text{Ly-}\alpha_1$ calculées pour différents ions hydrogénoïdes pour diverses énergies de l'électron incident rapportées au seuil d'ionisation de l'ion considéré initialement dans son état fondamental $1s_{1/2}$, et ceci aussi bien dans le cas relativiste que non-relativiste.

Nous abordons dans le chapitre 6 tous les résultats numériques se rapportant aux propriétés des raies $\text{Ly-}\alpha$ des ions Fe^{25+} par suite de collision avec un faisceau mono-énergétique et unidirectionnel d'électrons d'énergie variant de 1 jusqu'à 50 keV. La recombinaison radiative sera considérée comme processus supplémentaire s'ajoutant à l'excitation collisionnelle dans le peuplement des états excités. Pour cela, nous présentons dans un premier temps, les sections efficaces directes et effectives d'excitation collisionnelle dans les différents sous-niveaux magnétiques de $n=2$ et $n=3$ et ceci pour des énergies des électrons incidents allant de 7 keV, juste au dessus du seuil d'excitation $n=1 \rightarrow n=2$ de Fe^{25+} , jusqu'à 50 keV. Nous illustrons à travers une série de figures, l'effet de la recombinaison radiative sur les variations du degré de polarisation linéaire de la raie $\text{Ly-}\alpha_1$ et du rapport d'intensité des raies $\text{Ly-}\alpha_1/\text{Ly-}\alpha_2$ en fonction de l'énergie des électrons incidents dans trois domaines distincts. Le premier domaine se situe en dessous du seuil d'excitation du niveau 2p ($1- \sim 7$ keV)

où les raies Ly- α sont émises à la suite du seul processus de recombinaison radiative. Le deuxième domaine ($\sim 7 - \sim 9.3$ keV) est entre les seuils d'excitation et d'ionisation des ions Fe²⁵⁺. Dans ce domaine, les calculs ont été effectués en considérant des valeurs arbitraires du rapport d'abondance ionique Fe²⁶⁺/Fe²⁵⁺ entre 0.1 et 100. Le troisième domaine se situe au dessus du seuil d'ionisation du niveau fondamental 1s ($\sim 9.3 - 50$ keV). Dans les deux domaines d'énergie précédents, on a tenu compte des deux processus d'excitation et de recombinaison radiative dans les populations des sous-niveaux magnétiques de $n = 2$. Par conséquent, nous examinons l'effet dépolarisant de la raie Ly- α_1 dû au processus de recombinaison radiative introduit comme correction par rapport à l'excitation collisionnelle. Finalement, dans la troisième partie, nous examinons l'évolution de l'effet de la recombinaison radiative sur la polarisation linéaire de la raie Ly- α_1 le long de la séquence isoélectronique de l'hydrogène.

Enfin, les conclusions et des perspectives d'avenir sont présentées dans le chapitre 7.

Chapitre 2

Théorie de Dirac des systèmes hydrogénoïdes

2.1 Introduction

Dans des ions fortement chargés, les électrons liés subissent un potentiel coulombien très intense ce qui nécessite leur description relativiste. Cette description est faite à l'aide de l'équation de Dirac. L'équation de Dirac est une équation d'onde relativiste appropriée aux particules élémentaires de spin demi-entier comme les électrons. Dirac cherchait à transformer l'équation de Schrödinger afin de la rendre invariante par l'action du groupe de Lorentz, en d'autres termes à la rendre compatible avec les principes de la relativité restreinte. Cette équation prend en compte de manière naturelle la notion de spin introduite peu de temps avant et permet de prédire l'existence des antiparticules. En effet, outre la solution correspondante à l'électron, il découvre une nouvelle solution correspondante à une particule d'énergie négative et de charge opposée à celle de l'électron, soit le positron [49].

La fonction d'onde relativiste solution de l'équation de Dirac est donnée par un spineur à quatre composantes dans lequel les deux premières composantes, avec un spin up et un spin down, sont relatives aux états d'énergies positives. Les deux composantes inférieures sont relatives aux états d'énergies négatives.

Dans les sections qui vont suivre, nous allons essayer de rappeler l'essentiel de ce

formalisme en commençant par l'équation de Dirac et ensuite donner les solutions des fonctions d'onde relativistes qui décrivent aussi bien les états électroniques liés que ceux du continuum d'un système hydrogénoïde.

2.2 Equation de Dirac

Afin de trouver l'analogue relativiste de l'équation de Schrödinger, considérons la théorie classique de la relativité. D'après cette théorie, l'énergie totale d'un électron de masse m_e en présence d'un champ électromagnétique défini par les potentiels scalaire $\phi(\mathbf{r})$ et vecteur $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ est donnée par :

$$(E + e\phi(\mathbf{r}))^2 = (c\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2 + m_e^2 c^4. \quad (2.1)$$

Une équation d'onde relativiste peut être obtenue en remplaçant dans l'équation (2.1) la quantité de mouvement de l'électron et son énergie par les opérateurs associés donnés, respectivement, par $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ et $E = i\hbar\partial/\partial t$, et en opérant sur une fonction d'onde $\psi(\mathbf{r}, t)$. Ceci permet d'écrire :

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + e\phi(\mathbf{r})\right)^2 \psi(\mathbf{r}, t) = [(-i\hbar c\nabla + e\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2 + m_e^2 c^4] \psi(\mathbf{r}, t). \quad (2.2)$$

Cependant, l'équation d'onde (2.2), connue sous l'appellation de l'équation de Klein-Gordan, ne convient pas physiquement. Ceci du fait que l'équation d'onde (2.2) est non symétrique par rapport aux dérivées spatiales et temporelles, elle est donc non-relativiste. De plus, les dérivées temporelles présentes dans cette équation sont au second ordre et donc les solutions n'obéissent plus au principe de superposition, et en outre la fonction d'onde à $t = 0$ ne détermine pas complètement le système pour un temps arbitraire t .

Dirac, en 1928, a résolu ce problème en postulant que l'équation fondamentale doit avoir la forme hamiltonienne générale :

$$H_D \varphi(\mathbf{r}) = E \varphi(\mathbf{r}), \quad (2.3)$$

où

$$\begin{aligned}
H_D &= \boldsymbol{\alpha} \cdot (c \mathbf{p} + e \mathbf{A}) - e \phi + m_e c^2 \gamma^0 \\
&= \boldsymbol{\alpha} \cdot (-i \hbar c \boldsymbol{\nabla} + e \mathbf{A}) - e \phi + m_e c^2 \gamma^0
\end{aligned} \tag{2.4}$$

est l'hamiltonien de Dirac. Les coefficients $\boldsymbol{\alpha}$ et γ^0 qui figurent dans l'équation ci-dessus sont indépendants des dérivées spatiales et temporelles du fait que l'hamiltonien de Dirac (2.4) doit avoir une dépendance linéaire de ces dérivées. Par conséquent, nous pouvons conclure que $\boldsymbol{\alpha}$ et γ^0 sont indépendants de \mathbf{r} , t , \mathbf{p} et E et donc commutent avec eux. Ceci ne veut pas forcément dire que $\boldsymbol{\alpha}$ et γ^0 sont des nombres car il n'y a aucune raison pour qu'ils commutent entre eux. De ce fait, $\boldsymbol{\alpha}$ et γ^0 sont représentés par des matrices (opérateurs) et donc, conformément à l'équation (2.3), φ ne peut pas être une fonction scalaire mais un vecteur colonne.

Dans l'équation (2.4), le premier terme $(-i \hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla})$ est l'opérateur relatif à l'énergie cinétique de l'électron. Le terme $(-e \phi + e \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{A})$ remplace l'expression classique de l'hamiltonien

$$H'_{\text{classique}} = -e \left(\phi - \frac{1}{c} \mathbf{v} \cdot \mathbf{A} \right) \tag{2.5}$$

relatif à l'interaction d'une charge $(-e)$ avec un champ électromagnétique avec \mathbf{v} qui est l'opérateur vitesse. Le dernier terme de l'équation (2.4) $(m_e c^2 \gamma^0)$ représente l'énergie au repos de l'électron.

Afin de définir les matrices $\boldsymbol{\alpha}$ et γ^0 certaines conditions doivent être imposées. Similairement au cas non relativiste, l'hamiltonien de Dirac doit être hermitique, c'est-à-dire $H_D = H_D^\dagger$ et donc on doit avoir :

$$\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\alpha}^\dagger, \quad \gamma^0 = \gamma^{0\dagger}, \tag{2.6}$$

où la notation X^\dagger désigne l'opérateur adjoint de X . De plus, les solutions de l'équation de Dirac doivent, en accord avec la relation relativiste (2.1) entre l'énergie, la quantité de mouvement et la masse, être aussi solutions de l'équation de Klein-Gordan (2.2) conduisant aux relations de commutation :

$$\begin{aligned}
\alpha_x^2 = \alpha_y^2 = \alpha_z^2 &= (\gamma^0)^2 = 1 \\
[\alpha_x, \alpha_y]_+ &= [\alpha_y, \alpha_z]_+ = [\alpha_z, \alpha_x]_+ = 0
\end{aligned} \tag{2.7}$$

$$[\alpha_x, \gamma^\circ]_+ = [\alpha_y, \gamma^\circ]_+ = [\alpha_z, \gamma^\circ]_+ = 0$$

avec la notation $[A, B]_+$ qui désigne l'anticommutateur :

$$[A, B]_+ = AB + BA.$$

Pour satisfaire les conditions (2.6) et (2.7), α et γ° doivent être des matrices de dimension paire. Dans cette représentation il existe une infinité de solutions à (2.6) et (2.7) conduisant toutes au même résultat physique. Un choix particulier de α et γ° utile pour l'étude de la limite non-relativiste est donné par des matrices (4×4) qui s'expriment, sous une forme condensée, par :

$$\alpha = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad \gamma^\circ = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{I} \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

où $\boldsymbol{\sigma}$ représente l'ensemble des matrices de spin de Pauli (2×2) dont les composantes sont définies par :

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.9)$$

et qui vérifient les relations d'anticommutation :

$$\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 2 \delta_{ij} \mathbf{I} \quad \text{avec } i = x, y, z. \quad (2.10)$$

\mathbf{I} est la matrice carrée identité et $\mathbf{0}$ étant la matrice carrée nulle. Du fait que α et γ° sont des matrices (4×4), la fonction d'onde relativiste, en vertu de l'équation (2.3), doit être une matrice colonne (4×1) appelée spineur à quatre composantes :

$$\varphi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \varphi_1(\mathbf{r}) \\ \varphi_2(\mathbf{r}) \\ \varphi_3(\mathbf{r}) \\ \varphi_4(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

Souvent, il est plus commode d'exprimer le spineur à quatre composantes en fonction de deux spineurs à deux composantes, soit :

$$\varphi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \varphi_A(\mathbf{r}) \\ \varphi_B(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

avec

$$\varphi_A(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \varphi_1(\mathbf{r}) \\ \varphi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad \varphi_B(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \varphi_3(\mathbf{r}) \\ \varphi_4(\mathbf{r}) \end{pmatrix}.$$

Dans ce cas, tenant compte des expressions (2.4) et (2.8) de l'hamiltonien de Dirac et des matrices $\boldsymbol{\alpha}$ et γ^0 , respectivement, la substitution du spineur (2.12) dans l'équation de Dirac (2.3) fournit les équations couplées suivantes :

$$(E - m_e c^2) \varphi_A(\mathbf{r}) = \boldsymbol{\sigma} \cdot (c \mathbf{p} + e \mathbf{A}(\mathbf{r})) \varphi_B(\mathbf{r}) - e \phi(\mathbf{r}) \varphi_A(\mathbf{r}) \quad (2.13)$$

$$(E + m_e c^2) \varphi_B(\mathbf{r}) = \boldsymbol{\sigma} \cdot (c \mathbf{p} + e \mathbf{A}(\mathbf{r})) \varphi_A(\mathbf{r}) - e \phi(\mathbf{r}) \varphi_B(\mathbf{r}).$$

2.3 Solutions de l'équation de Dirac pour un potentiel central

Considérons maintenant l'électron placé dans un champ central où $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = 0$ et $\phi(r) = V(r)$ possède une symétrie sphérique. La fonction d'onde spatio-temporelle pour un potentiel sphérique $V(r)$ s'écrit sous la forme générale :

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r}) e^{-iEt/\hbar}. \quad (2.14)$$

Les états propres sont définis comme étant les solutions de l'équation stationnaire de Dirac

$$H\varphi(\mathbf{r}) = (-i\hbar c \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\nabla} + V(r) + m_e c^2 \gamma^0) \varphi(\mathbf{r}) = E \varphi(\mathbf{r}), \quad (2.15)$$

où \mathbf{r} représente l'ensemble des coordonnées de l'électron par rapport à une origine définie.

Contrairement à la théorie non-relativiste, l'hamiltonien H ne commute pas avec le moment angulaire orbital \mathbf{l} de l'électron, nous avons

$$[H, \mathbf{l}] = -i \hbar c \boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{p}. \quad (2.16)$$

D'autre part, en définissant un opérateur à quatre composantes

$$\mathbf{s} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}, \quad (2.17)$$

et en utilisant les relations de commutation sur les matrices de spin de Pauli $\boldsymbol{\sigma}$, on peut montrer que :

$$[s_x, s_y] = i \hbar s_z \quad (2.18)$$

et

$$s^2 \varphi(\mathbf{r}) = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix} \varphi(\mathbf{r}). \quad (2.19)$$

Donc, à partir des équations (2.18) et (2.19), \mathbf{s} peut être interprété comme l'opérateur du moment angulaire de spin auquel on associe le nombre quantique $s = 1/2$ et sa projection sur un axe de quantification $m_s = \pm 1/2$. En utilisant à nouveau les relations de commutation des matrices de Pauli, on a

$$[H, \mathbf{s}] = +i \hbar c \boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{p}. \quad (2.20)$$

Considérons maintenant le moment angulaire total de l'électron défini par la somme des moments angulaires orbital et de spin, $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$. A partir des relations (2.16) et (2.20), on en déduit que \mathbf{j} commute avec l'hamiltonien de Dirac, ç-à-d

$$[H, \mathbf{j}] = 0. \quad (2.21)$$

L'interprétation de ces relations de commutation est qu'il y a une interaction, en accord avec l'expérience, entre les moments angulaires orbital et de spin de l'électron.

En plus de la symétrie angulaire, l'opérateur de Dirac possède une symétrie d'inversion et il est donc utile d'étudier les relations de commutation pour l'opérateur

parité. Cependant, l'hamiltonien de Dirac ne commute pas avec l'opérateur parité non relativiste Π . A partir des relations $[\boldsymbol{\alpha}, \gamma^\circ]_+ = 0$, il est montré que l'opérateur de la forme $\gamma^\circ \Pi$ commute avec H [50]

$$[H, \gamma^\circ \Pi] = 0, \quad (2.22)$$

et également avec l'opérateur du moment angulaire total \mathbf{j} de l'électron [50, 51].

$$[\mathbf{j}, \gamma^\circ \Pi] = 0. \quad (2.23)$$

Les relations de commutation établies ci dessus impliquent que H , j^2 , j_z et $\gamma^\circ \Pi$ forment un ensemble d'opérateurs qui commutent mutuellement l'un avec l'autre. Les fonctions propres simultanées de ces opérateurs s'expriment comme :

$$\varphi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \varphi_A(\mathbf{r}) \\ \varphi_B(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_{lj}(r) \chi_{lsjm_j}(\theta, \varphi) \\ i f_{lj}(r) \chi_{l'sjm_j}(\theta, \varphi) \end{pmatrix} \quad (2.24)$$

avec les fonctions radiales $g_{lj}(r)$ et $f_{lj}(r)$ des composantes supérieure et inférieure φ_A et φ_B , respectivement, de φ . La dépendance angulaire quant à elle est incluse dans les fonctions angulaires de spin $\chi_{lsjm_j}(\theta, \varphi)$ appelées spineur de Pauli et définies par [52] :

$$\chi_{lsjm_j}(\theta, \varphi) = \sum_{m_l m_s} \left\langle l m_l \frac{1}{2} m_s \middle| j m_j \right\rangle Y_l^{m_l}(\theta, \varphi) \chi_{1/2 m_s}. \quad (2.25)$$

tel que la notation $\left\langle l m_l \frac{1}{2} m_s \middle| j m_j \right\rangle$ représente le coefficient de Clebsh-Gordan. Les fonctions (2.25) sont obtenues par le couplage des harmoniques sphériques $Y_l^{m_l}(\theta, \varphi)$ avec les fonctions de spin

$$\chi_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_{\frac{1}{2} -\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

et donc les valeurs possibles de j sont $|l - 1/2| \leq j \leq l + 1/2$ et sa projection $m_j = -j, -j + 1, \dots, j - 1, j$. De plus, pour que $\varphi(\mathbf{r})$ soit une fonction propre de l'opérateur parité, le moment angulaire orbital de la composante inférieure l' doit être relié à celui de la composante supérieure l par la relation

$$l' = \begin{cases} l + 1 & \text{pour } j = l + 1/2 \\ l - 1 & \text{pour } j = l - 1/2 \end{cases} \quad (2.26)$$

Dans la théorie relativiste, il est plus commode de définir le nombre quantique de Dirac κ reliant l et j tel que :

$$\kappa = \pm \left(j + \frac{1}{2} \right) \quad \text{pour } l = j \pm \frac{1}{2} \quad (2.27)$$

qui peut être positif ou négatif, $\kappa = \pm 1, \pm 2, \dots$, et d'exprimer ainsi les fonctions propres (2.24) comme

$$\varphi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \varphi_A(\mathbf{r}) \\ \varphi_B(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_\kappa(r) \chi_{\kappa m_j}(\theta, \varphi) \\ f_\kappa(r) \chi_{-\kappa m_j}(\theta, \varphi) \end{pmatrix}. \quad (2.28)$$

En insérant l'expression (2.28) dans l'équation de Dirac (2.15) avec les substitutions $F(r) = r f_\kappa(r)$ et $G(r) = r g_\kappa(r)$ nous obtenons, pour un potentiel sphérique $V(r)$, un système d'équations couplées pour les fonctions radiales [4, 50] :

$$\begin{aligned} \hbar c \left(\frac{d}{dr} - \frac{\kappa}{r} \right) F &= - (E - V - m_e c^2) G \\ \hbar c \left(\frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r} \right) G &= + (E - V + m_e c^2) F. \end{aligned} \quad (2.29)$$

2.3.1 Fonctions d'onde liées

Considérons le cas d'un ion hydrogéoïde de charge nucléaire Ze , dans ce cas l'électron est soumis au potentiel coulombien $V(r) = -Ze^2/r$. Introduisons la constante de structure fine α ainsi que les notations :

$$s = \sqrt{\kappa^2 - \zeta^2} \quad \text{avec } \zeta = \alpha Z, \quad (2.30)$$

les énergies des états hydrogéoïdes s'expriment comme [50]

$$E_{n\kappa} = m_e c^2 W_{n\kappa} \quad \text{avec } W_{n\kappa} = \left[1 + \left(\frac{\zeta}{n' + s} \right)^2 \right]^{-1/2}, \quad (2.31)$$

où $n' = 0, 1, 2, \dots$, est relié au nombre quantique principal $n = 1, 2, 3, \dots$ par $n = n' + |\kappa|$. Soit la longueur d'onde de Compton de l'électron $\lambda_c = \hbar/m_e c$ et

$$q = \frac{1}{\lambda_c} \sqrt{1 - W_{n\kappa}^2} \quad (2.32)$$

est le nombre d'onde de l'état lié. Avec ces notations, les fonctions radiales peuvent s'exprimer en terme des fonctions confluentes hypergénométriques ${}_1F_1(a, c; x)$, soit :

$$\begin{aligned} g_\kappa(r) = & N_g (2qr)^{s-1} e^{-qr} \left[-n' {}_1F_1(-n' + 1, 2s + 1; 2qr) \right. \\ & \left. - \left(\kappa - \frac{\zeta}{q\lambda_c} \right) {}_1F_1(-n', 2s + 1; 2qr) \right], \end{aligned} \quad (2.33)$$

$$\begin{aligned} f_\kappa(r) = & N_f (2qr)^{s-1} e^{-qr} \left[n' {}_1F_1(-n' + 1, 2s + 1; 2qr) \right. \\ & \left. - \left(\kappa - \frac{\zeta}{q\lambda_c} \right) {}_1F_1(-n', 2s + 1; 2qr) \right] \end{aligned}$$

avec les constantes

$$\begin{aligned} N_g &= \frac{\sqrt{2} q^{5/2} \lambda_c}{\Gamma(2s + 1)} \left[\frac{\Gamma(2s + n' + 1) (1 + W_{n\kappa})}{n'! \zeta (\zeta - \kappa q \lambda_c)} \right]^{\frac{1}{2}}, \\ N_f &= -N_g \left(\frac{1 - W_{n\kappa}}{1 + W_{n\kappa}} \right)^{\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

En évaluant à l'aide de l'équation (2.31) les énergies des états excités, nous remarquons que pour un niveau n donné l'énergie est la même pour les mêmes valeurs de j mais elle est différente pour les mêmes valeurs de l . Pour une valeur donnée de l , l'écart spin-orbite entre les états avec $j = l + 1/2$ et $j = l - 1/2$ est responsable de la structure fine dans le spectre des atomes hydrogéoïdes. Comme illustration, l'état fondamental et le premier état excité d'un système hydrogéoïde fortement chargé sont présentés dans la figure (2.1). Nous donnons également, dans le tableau (2.1), les valeurs des nombres quantiques κ , j , l et l' de quelques états hydrogéoïdes ainsi que leur notation spectroscopique.

TABLE 2.1 – Nombres quantiques relativistes de quelques états hydrogéoïdes et leur notation spectroscopique. Les états dégénérés selon l'équation (2.31) sont groupés ensemble.

Couche	n	$n' = n - \kappa $	κ	j	l	l'	Notation
K	1	0	-1	1/2	0	1	1s _{1/2}
L	2	1	-1	1/2	0	1	2s _{1/2}
		1	+1	1/2	1	0	2p _{1/2}
		0	-2	3/2	1	2	2p _{3/2}
M	3	2	-1	1/2	0	1	3s _{1/2}
		2	+1	1/2	1	0	3p _{1/2}
		1	-2	3/2	1	2	3p _{3/2}
		1	+2	3/2	2	1	3d _{3/2}
		0	-3	5/2	2	3	3d _{5/2}
N	4	3	-1	1/2	0	1	4s _{1/2}
		3	+1	1/2	1	0	4p _{1/2}
		2	-2	3/2	1	2	4p _{3/2}
		2	+2	3/2	2	1	4d _{3/2}
		1	-3	5/2	2	3	4d _{5/2}
		1	+3	5/2	3	2	4f _{5/2}
		0	-4	7/2	3	4	4f _{7/2}

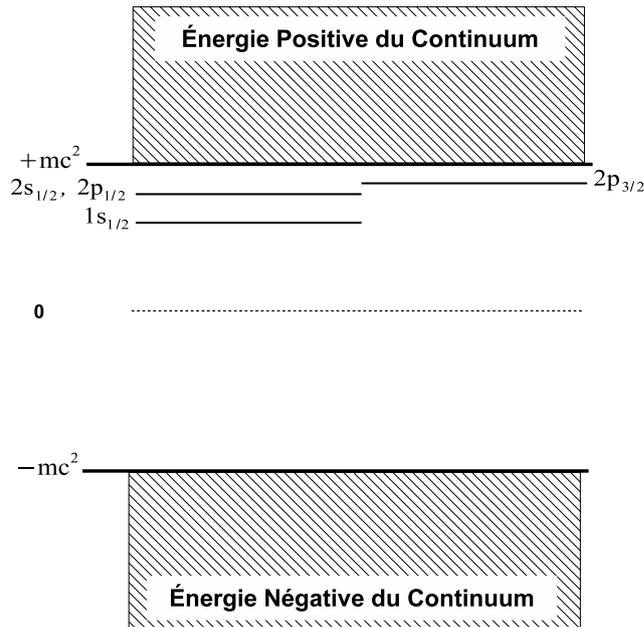


FIGURE 2.1 – Schéma représentant le niveau fondamental et les niveaux du premier état excité $n = 2$ d'un système hydrogénoïde.

2.3.2 Fonctions d'onde du continuum

Similairement au cas des fonctions d'onde liées, chaque onde partielle caractérisée par les nombres quantiques κ et m_j peut être traitée en résolvant le système d'équations radiales (1.29) avec des conditions aux limites appropriées.

Exprimons l'énergie de l'électron en unité de son énergie au repos, soit $W = E/m_e c^2$, et considérons le nombre d'onde de l'électron

$$k = \frac{1}{\lambda_c} \sqrt{W^2 - 1}, \quad (2.34)$$

ainsi que le paramètre de Sommerfield relativiste

$$\eta = \frac{\zeta W}{k \lambda_c}, \quad (2.35)$$

qui est positif pour un électron soumis à un champ coulombien nucléaire. En définissant le facteur de phase δ_κ et le facteur de normalisation N_κ par :

$$\delta_\kappa = \frac{1}{2} \arg \left(\frac{-\kappa + i\eta/W}{s + i\eta} \right),$$

$$N_\kappa = \frac{1}{(m_e c^2)^{1/2}} \frac{2 k^{1/2}}{\pi^{1/2} \lambda_c} e^{\pi \eta/2} \frac{|\Gamma(s + i\eta)|}{\Gamma(2s + 1)}, \quad (2.36)$$

respectivement, les fonctions d'onde radiales du continuum qui figurent dans le spineur

$$\varphi_{E, \kappa m_j}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} g_\kappa(r) \chi_{\kappa m_j}(\theta, \varphi) \\ i f_\kappa(r) \chi_{-\kappa m_j}(\theta, \varphi) \end{pmatrix}, \quad (2.37)$$

s'expriment pour une onde partielle donnée, avec $W > 1$, comme :

$$\begin{aligned} g_\kappa &= N_\kappa (W + 1)^{1/2} (2 k r)^{s-1} \operatorname{Re} \left[e^{-i k r} e^{i \delta_\kappa} (s + i\eta) \right. \\ &\quad \left. \times {}_1F_1(s + 1 + i\eta, 2s + 1; 2 i k r) \right], \end{aligned} \quad (2.38)$$

$$\begin{aligned} f_\kappa &= -N_\kappa (W - 1)^{1/2} (2 k r)^{s-1} \operatorname{Im} \left[e^{-i k r} e^{i \delta_\kappa} (s + i\eta) \right. \\ &\quad \left. \times {}_1F_1(s + 1 + i\eta, 2s + 1; 2 i k r) \right]. \end{aligned}$$

Les fonctions d'onde sont normalisées tel que si φ_E et $\varphi_{E'}$ sont solutions avec les énergies propres E et E' , nous avons

$$\int \varphi_{E', \kappa m_j}^*(\mathbf{r}) \varphi_{E, \kappa m_j}(\mathbf{r}) d^3 r = \delta(E - E'). \quad (2.39)$$

De plus, le comportement asymptotique des fonctions d'onde (2.38) est donné par

$$\begin{aligned} g_\kappa &\simeq \frac{1}{(\hbar c)^{1/2} r} \left(\frac{W + 1}{\pi k \lambda_c} \right)^{1/2} \cos(kr + \sigma_\kappa) \\ f_\kappa &\simeq -\frac{1}{(\hbar c)^{1/2} r} \left(\frac{W - 1}{\pi k \lambda_c} \right)^{1/2} \sin(kr + \sigma_\kappa), \end{aligned} \quad (2.40)$$

où le déphasage coulombien est [4]

$$\sigma_\kappa = \Delta_\kappa + \eta \ln(2kr) \quad (2.41)$$

avec

$$\Delta_\kappa = \delta_\kappa - \arg \Gamma(s + i\eta) - \frac{1}{2} \pi s + (l + 1) \frac{\pi}{2}. \quad (2.42)$$

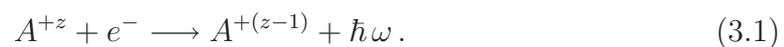
Chapitre 3

Recombinaison radiative

3.1 Introduction

Quand des électrons et des ions sont confinés dans un plasma chaud de température électronique excédant 10^6 K, des processus variés de collision se produisent à travers essentiellement les interactions électron-ion qui sont les plus dominantes. En plus de la contribution majeure des processus collisionnels d'excitation et d'ionisation, les processus de recombinaison sont importants dans la détermination de l'équilibre d'ionisation et dans la population des états excités dans les plasmas hors équilibre. La recombinaison électron-ion peut se produire par différents modes, deux qui sont directs, à savoir la recombinaison radiative et la recombinaison à trois corps, et un qui est indirect, à savoir la recombinaison diélectronique.

- La recombinaison radiative (RR) est le processus dans lequel un électron libre incident est capturé dans un état lié d'un ion de charge z , considéré au repos, pour aboutir à un ion final de charge $(z - 1)$ avec l'émission simultanée d'un photon dit photon de recombinaison. Cette réaction est schématisée par :



La recombinaison radiative correspond donc au processus inverse de la photoionisation (voir figure (3.1)).

- La recombinaison à trois corps dans laquelle deux électrons incidents inter-

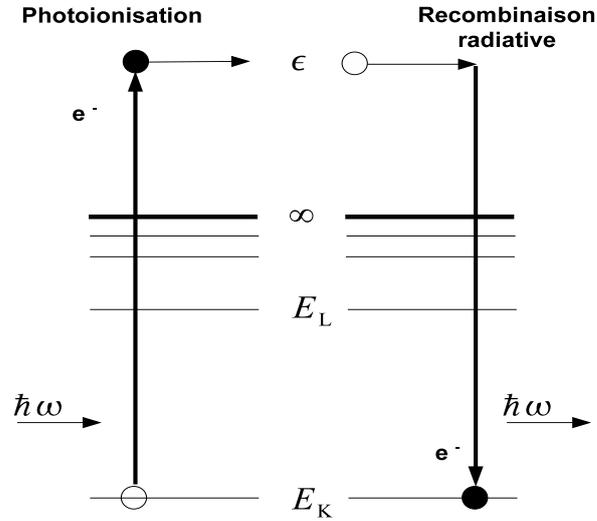
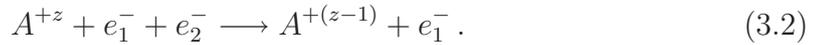


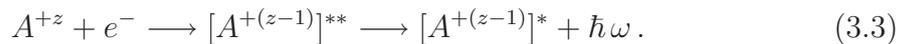
FIGURE 3.1 – Schéma représentant le processus de recombinaison radiative et son processus inverse : la photoionisation.

agissent simultanément avec un ion. Un des électrons est capturé dans un état lié de l'ion et l'autre est diffusé :



Donc la recombinaison à trois corps est le processus inverse de l'ionisation collisionnelle. Elle constitue un mécanisme important dans la distribution de l'état de charge des ions dans les plasmas denses.

Par contraste aux modes directs, le mode indirect est la recombinaison diélectronique qui est un processus résonnant se produisant en deux étapes. Un électron incident est d'abord capturé dans un état autoionisant de l'ion, puis suivi par une stabilisation radiative de l'ion recombiné dans la deuxième étape :



La première étape de la recombinaison diélectronique constitue un processus à double électron appelé capture diélectronique, à travers laquelle, un électron libre est capturé et un autre électron lié de l'ion est simultanément excité formant ainsi un

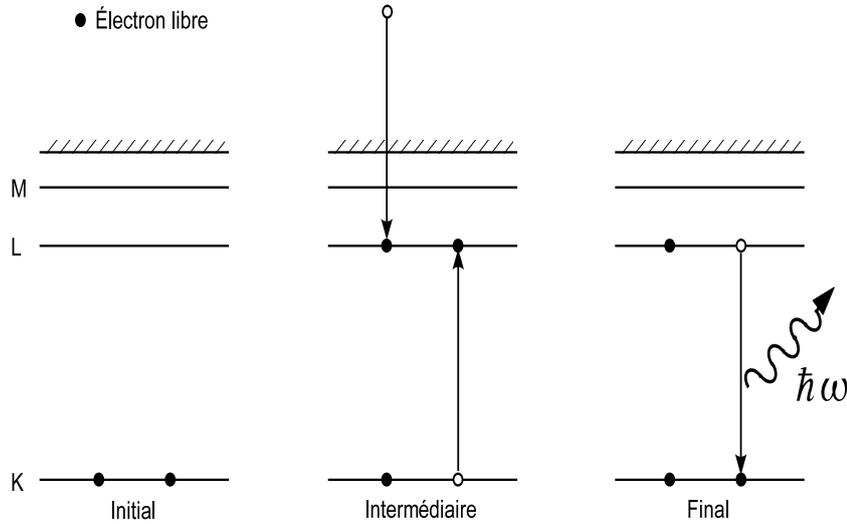


FIGURE 3.2 – Représentation schématique du processus de recombinaison diélectronique pour la transition résonnante KLL dans un ion héliumoïde.

état doublement excité $[A^{+(z-1)}]**$. Ceci montre que la recombinaison diélectronique ne peut se produire que si l'ion A^{+z} possède au moins un électron lié, en d'autre terme, la recombinaison diélectronique ne peut pas se produire dans des ions nus. Dans la deuxième étape, l'ion dans l'état doublement excité émet un photon en se désexcitant vers un état stable qui se situe en dessous de la limite d'ionisation. Un processus compétitif à la recombinaison diélectronique pour le déclin de l'ion doublement excité se produit par transition Auger ou autoionisation associée non pas à une transition radiative mais à l'éjection d'un électron :

$$[A^{+(z-1)}]** \longrightarrow [A^{+z}]^* + e^- . \quad (3.4)$$

Cependant, pour les ions fortement chargés, le déclin par recombinaison diélectronique avec émission de photon est plus probable que la stabilisation Auger avec émission d'un électron libre.

Dans cette thèse, nous nous intéressons seulement à la recombinaison radiative. La recombinaison radiative est l'un des processus radiatifs fondamentaux qui se produisent lors de l'interaction entre des électrons libres et des ions positifs. Elle joue un rôle crucial dans la détermination de l'équilibre entre l'ionisation et la recombinaison.

naison aussi bien dans les expériences de collisions électron-ion que dans les plasmas astrophysiques et de laboratoire. La recombinaison radiative joue également un rôle important dans l'évaluation des pertes par rayonnement dues à des impuretés présentes dans les plasmas de fusion thermonucléaire contrôlée. Ainsi, la détermination des sections efficaces de recombinaison radiative est nécessaire pour la modélisation des phénomènes de transport d'énergie dans le plasma étudié et son diagnostic par la détermination de ses propriétés de base telles que sa température et sa densité. De plus, les rayons x émis suite à la recombinaison radiative dans des ions nus (à l'état de noyau) ainsi que le rayonnement x subséquent émis par suite des désexcitations par cascades radiatives fournissent de nouvelles possibilités pour étudier les effets électrodynamiques quantiques (QED) dans les ions hydrogénoïdes fortement chargés [53].

La recombinaison radiative a été étudiée théoriquement dès les années 1920. La première expression analytique de la section efficace de recombinaison radiative dans des ions nus avait été établie par Kramers en 1923 [54] en utilisant une approche semi-classique. Celle-ci a été modifiée, par la suite, dans le but d'inclure les effets de la mécanique quantique. Gordan [55] avait été le premier à appliquer la théorie de perturbation au premier ordre au processus de recombinaison radiative, et la méthode a été adoptée ensuite par Stobbe [56]. Ce dernier a présenté, en 1930, un formalisme général décrivant la recombinaison radiative dans des états arbitraires d'ions hydrogénoïdes dans le cadre de l'approximation dipolaire non-relativiste. Des effets relativistes ont été incorporés dans cette approche non-relativiste. Par exemple, l'approximation relativiste de Born au premier ordre était appliquée, en 1931, par Sauter [57] pour calculer les sections efficaces totales et différentielles de la recombinaison radiative dans la couche K des ions recombinaisonnés. Cependant, la théorie de Sauter s'est avérée être insuffisante quand la charge nucléaire de l'ion recombinaisonnant augmente et, donc, était modifiée au début des années soixantes par Gavrilin [58], Nagel [59] et Pratt [60] en incluant des corrections de Born d'ordres supérieurs. Bien sûr, à cause de difficultés numériques, ces corrections restent basées sur des fonctions d'onde approximatives aussi bien pour les électrons liés que ceux du continuum. Avec

le développement des moyens informatiques et des codes de calcul, des traitements relativistes rigoureux deviennent possibles, incluant à la fois des fonctions d'onde électroniques relativistes exactes et les multipôles supérieurs autres que le dipôle électrique dans l'opérateur d'interaction électron-photon [50, 60, 61].

Les sections efficaces de recombinaison radiative et de photoionisation sont reliées entre elles par le principe du bilan détaillé. D'après ce principe, chaque processus élémentaire est invariant sous l'inversion du temps et les probabilités des réactions dans les sens direct et inverse sont reliées entre elles par le principe du bilan détaillé. En mécanique quantique, ce principe résulte de la symétrie des équations quantiques du mouvement par rapport à l'inversion du temps.

En utilisant le principe du bilan détaillé, la section efficace de recombinaison radiative dans un sous-niveau magnétique d'un ion σ^{RR} peut s'obtenir à partir de celle de sa photoionisation σ^{ph} par la relation de Milne [62] :

$$\sigma^{\text{RR}} = \frac{(\hbar\omega/c)^2}{p^2} \sigma^{\text{ph}}. \quad (3.5)$$

Dans l'équation (3.5), c représente la vitesse de la lumière et ω est la pulsation du photon de recombinaison émis. Le facteur de conversion $(\hbar\omega/c)^2/p^2$ remplace le facteur de phase spatiale de l'électron éjecté dans la photoionisation avec la quantité de mouvement p par celui du photon émis dans la recombinaison radiative de vecteur d'onde $k = \omega/c$.

Dans ce chapitre nous allons établir l'expression de la section efficace partielle de recombinaison radiative utilisant un formalisme relativiste exact et ceci pour le cas d'un ion multichargé de charge nucléaire Z . Nous allons ensuite considérer le cas particulier d'un ion recombinant nu. En effet, le modèle hydrogénoïde de la recombinaison radiative est d'importance théorique fondamentale puisqu'il permet d'avoir des résultats exacts. Il est d'utilité pratique du fait qu'il constitue une bonne approximation pour la recombinaison radiative sur des états très excités de systèmes à plusieurs électrons, en particulier des systèmes à un seul électron de valence. Cependant, il y a souvent besoin de calculer beaucoup de coefficients de recombinaison correspondants à un grand nombre d'états excités. Le calcul direct devient difficile

et compliqué lorsque n devient grand. On utilise alors des expressions approchées pour les sections efficaces de recombinaison radiative. A cet effet, nous allons aussi évaluer ces sections dans l'approximation dipolaire non-relativiste.

3.2 Recombinaison radiative : Traitement théorique

3.2.1 Description relativiste exacte

Une évaluation précise des sections efficaces de recombinaison radiative ou de photoionisation nécessite une description rigoureuse utilisant des fonctions d'onde relativistes qui décrivent aussi bien les électrons liés que ceux du continuum, et incluant tous les multipôles dans l'interaction électron- photon [63, 64].

Afin de présenter la théorie dans sa forme la plus générale, considérons le cas de la recombinaison radiative d'un électron dans un ion de charge nucléaire Z contenant N électrons. Pour cela, introduisons la notation des états initial et final du système total, soit "électron + ion" et "photon + ion", respectivement.

Soit un électron incident caractérisé initialement par la quantité de mouvement \mathbf{p} et la projection de son spin m_s sur un axe de quantification (qui sera désigné ultérieurement), qui interagit avec un ion situé dans son niveau d'énergie E_i . L'ion est supposé être dans l'état propre correspondant $|\alpha_i J_i M_{J_i}\rangle$ avec un moment angulaire total bien défini J_i des N électrons et de projection M_{J_i} , α_i représentant l'ensemble des nombres quantiques additionnels nécessaires pour une spécification unique de l'état. Après l'interaction, l'électron se trouve capturé dans un état lié de l'ion d'énergie E_f avec l'émission simultanée d'un photon d'énergie $\hbar\omega$. Ainsi, l'état final du système total est donné par l'ion recombiné dans l'état propre $|\alpha_f J_f M_{J_f}\rangle$ et le photon de recombinaison caractérisé par le vecteur d'onde \mathbf{k} et le vecteur $\hat{\mathbf{u}}_\lambda$ associé aux états de polarisation circulaire, à droite ($\lambda = +1$) et à gauche ($\lambda = -1$), du photon.

La conservation de l'énergie totale E (l'énergie au repos comprise) avant et après recombinaison radiative s'exprime par la relation :

$$E = \varepsilon + m_e c^2 + E_i = \hbar\omega + E_f, \quad (3.6)$$

où ε est l'énergie cinétique de l'électron incident et m_e est sa masse. L'équation (3.6) de conservation de l'énergie totale E est aussi valable pour le processus inverse de la recombinaison radiative, ç-à-d, l'ionisation d'un ion d'énergie totale E_f par un photon incident d'énergie $\hbar\omega$ pour aboutir à un ion d'énergie E_i et un électron émis avec l'énergie cinétique ε . Ceci montre que nous pouvons utiliser soit ε soit $\hbar\omega$ pour caractériser le processus étudié. D'autre part, en exprimant la quantité de mouvement p d'un électron relativiste en fonction du rapport $\beta = v/c$, où v est la vitesse de l'électron, et du facteur de Lorentz γ :

$$p = m_e c \beta \gamma \quad \text{avec} \quad \gamma = 1/\sqrt{1 - \beta^2}, \quad (3.7)$$

la relation (3.5) devient :

$$\sigma^{\text{RR}} = \left(\frac{\hbar\omega}{m_e c^2} \right)^2 \frac{1}{\beta^2 \gamma^2} \sigma^{\text{ph}}. \quad (3.8)$$

L'équation (3.8) s'applique aussi aux sections efficaces totales et différentielles [50, 65, 66]. Ainsi, en mesurant la section efficace de photoionisation nous pouvons accéder à celle de la recombinaison radiative et inversement.

3.2.2 Evaluation de l'amplitude de transition

Comme la recombinaison radiative est le processus inverse de la photoionisation, nous allons calculer la section efficace partielle de photoionisation pour déduire ensuite, en utilisant la relation (3.8) du bilan détaillé, la section efficace de recombinaison radiative dans un sous-niveau magnétique spécifique de l'ion recombiné.

Evidemment le calcul des sections efficaces de photoionisation nécessite l'évaluation de l'amplitude de transition relative à l'éjection d'un électron initialement lié par un photon incident. Avec les notations adoptées précédemment pour désigner les états initial et final du système, cette amplitude est donnée par [67, 68] :

$$M_{if} = \left\langle \alpha_i J_i M_{J_i}, \mathbf{p} m_s \left| \hat{R}(\mathbf{k}) \right| \alpha_f J_f M_{J_f}, \mathbf{k} \lambda \right\rangle. \quad (3.9)$$

Dans l'équation (3.9) figurent un état de diffusion avec un électron dans le continuum et un état lié de l'ion exprimés, respectivement, par $|\alpha_i J_i M_{J_i}, \mathbf{p} m_s\rangle$ et $|\alpha_f J_f M_{J_f}, \mathbf{k} \lambda\rangle$.

De plus, l'opérateur $\hat{R}(\mathbf{k})$ décrit l'interaction (relativiste) électron-photon que nous allons développer par la suite.

Afin d'évaluer l'amplitude de transition (3.9) et conformément à la physique atomique nous avons besoin de décomposer la fonction d'onde de l'électron libre sur une base d'ondes partielles pour construire ensuite les états de diffusion $|\alpha_i J_i M_{J_i}, \mathbf{p} m_s\rangle$. Cependant, en se référant à certains travaux [38, 39, 69], il y a lieu de fixer un axe de quantification qui sera pris selon l'axe z pour effectuer cette décomposition et qui dépend du processus considéré. Pour la photoionisation, le choix naturel est de considérer la direction du photon suivant l'axe z et de quantifier toutes les projections des moments angulaires par rapport à cet axe. Ceci permet aussi une simple décomposition de la fonction d'onde du photon. Pour la réaction inverse, ç-à-d la recombinaison radiative, la direction la plus privilégiée est celle de l'électron incident, soit : $\mathbf{p} \parallel z$ (voir figure (3.3)). Notons que les sections efficaces totales et différentielles sont indépendantes du choix de l'axe de quantification, cependant, certaines propriétés en dépendent. Par exemple, la notion de l'alignement, ç-à-d, la population non statistique des sous-niveaux magnétiques due à la recombinaison radiative de l'électron dans des états excités de l'ion recombinaison qui déclinent ensuite radiativement, ne peut être mesurée que si les moments angulaires sont quantifiés selon la quantité de mouvement de l'électron.

Ainsi, pour ce choix particulier de l'axe de quantification, la fonction d'onde de l'électron libre s'exprime comme [4, 38, 50] :

$$|\mathbf{p} m_s\rangle = \sum_{\kappa} i^l e^{-i\Delta_{\kappa}} \sqrt{4\pi(2l+1)} \langle l 0 1/2 m_s | j m_s \rangle |\varepsilon \kappa j m_s\rangle . \quad (3.10)$$

La sommation de l'équation (3.10) porte sur toutes les ondes partielles $\kappa = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$, autrement dit sur toutes les valeurs possibles du nombre quantique de Dirac $\kappa = \pm(j + 1/2)$ pour $l = j \pm 1/2$. Dans cette notation, le moment angulaire (non relativiste) l représente la parité de l'onde partielle et j est le moment angulaire total de l'électron, Δ_{κ} est le déphasage induit par le noyau et les électrons de l'ion. De plus, la notation $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m \rangle$ désigne le coefficient de Clebsch-Gordan et l'onde partielle est donnée par un spineur à quatre composantes (cf. Eq (2.37) du chapitre

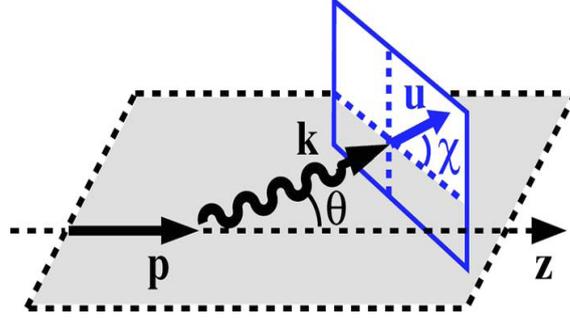


FIGURE 3.3 – Géométrie du processus de recombinaison radiative. L'axe z définit la direction d'incidence de l'électron ayant la quantité de mouvement \mathbf{p} . Le vecteur unitaire $\mathbf{u}(\chi)$ de la polarisation linéaire se situe dans le plan perpendiculaire au photon émis de vecteur d'onde \mathbf{k} , et caractérisé par un angle χ par rapport au plan de réaction.

2), soit :

$$\langle r | \varepsilon \kappa j m_s \rangle = \begin{pmatrix} g_{\varepsilon\kappa}(r) \chi_{\kappa m_s}(\hat{\mathbf{r}}) \\ i f_{\varepsilon\kappa}(r) \chi_{-\kappa m_s}(\hat{\mathbf{r}}) \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

Il est utile de rappeler que l'onde partielle écrite sous forme condensée dans l'équation ci-dessus se sépare en deux parties radiale et angulaire. La partie radiale est donnée par les fonctions d'onde réelles $g_{\varepsilon\kappa}(r)$ et $f_{\varepsilon\kappa}(r)$ des composantes supérieure et inférieure, respectivement. Les fonctions angulaires de spin $\chi_{\pm\kappa m_s}(\hat{\mathbf{r}})$ définies par l'équation (2.25) composent la partie angulaire.

L'utilisation de l'équation (3.10) tout en considérant le couplage entre le moment angulaire total J_i des N électrons de l'ion initial et celui j de l'électron libre permet d'obtenir le développement en ondes partielles des états de diffusion :

$$\begin{aligned} |\alpha_i J_i M_{J_i}, \mathbf{p} m_s \rangle &= A \sum_{\kappa} i^l e^{-i\Delta_{\kappa}} \sqrt{4\pi(2l+1)} \langle l 0 1/2 m_s | j m_s \rangle \\ &\quad \times |\varepsilon \kappa j m_s \rangle |\alpha_i J_i M_{J_i} \rangle \\ &= A \sum_{\kappa J M} i^l e^{-i\Delta_{\kappa}} \sqrt{4\pi(2l+1)} \langle l 0 1/2 m_s | j m_s \rangle \\ &\quad \times \langle J_i M_{J_i} j m_s | J M \rangle |(\alpha_i J_i, \varepsilon \kappa j) J M \rangle, \end{aligned} \quad (3.12)$$

où l'opérateur A est utilisé pour assurer l'antisymétrisation de l'électron incident par rapport aux électrons liés de l'ion recombinant. J et M représentent les nombres quantiques du moment angulaire total des $N + 1$ électrons de l'ion recombiné. La substitution du développement (3.12) dans l'équation (3.9) permet d'exprimer l'amplitude de transition par :

$$M_{if} = \sum_{\kappa J M} i^{-l} e^{i\Delta\kappa} \sqrt{4\pi(2l+1)} \langle l 0 1/2 m_s | j m_s \rangle \langle J_i M_{J_i} j m_s | J M \rangle \\ \times \left\langle (\alpha_i J_i, \varepsilon \kappa j) J M \left| \hat{R}_\lambda(\mathbf{k}) \right| \alpha_f J_f M_{J_f} \right\rangle. \quad (3.13)$$

Il reste maintenant à exprimer l'interaction des électrons avec le champ du photon responsable de la transition de l'état lié à l'état libre ou vice versa. Cette interaction est décrite par l'opérateur [42] :

$$\hat{R}_\lambda(\mathbf{k}) = \sum_{i=1}^N \boldsymbol{\alpha}_i \cdot \hat{\mathbf{u}}_{\lambda,i} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i}, \quad (3.14)$$

avec $\boldsymbol{\alpha}_i = (\alpha_{ix}, \alpha_{iy}, \alpha_{iz})$ est le vecteur de Dirac du i^{me} électron et \mathbf{r}_i est son vecteur position. Afin de simplifier davantage l'expression (3.13) de l'amplitude de transition, nous devons décomposer l'opérateur d'interaction électron-photon en terme de composantes multipolaires électrique et magnétique. Par ailleurs, la décomposition de l'onde plane du photon dépend aussi de la direction de quantification. Pour une direction d'incidence arbitraire $\hat{\mathbf{k}}$ du photon ionisant, la fonction d'onde du photon est donnée par l'expression :

$$\hat{\mathbf{u}}_\lambda e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \sqrt{2\pi} \sum_{L=1}^{\infty} \sum_{M_L=-L}^{+L} i^L \sqrt{2L+1} \mathcal{A}_{LM_L}^\lambda D_{M_L\lambda}^L(\hat{\mathbf{k}} \rightarrow \hat{\mathbf{z}}), \quad (3.15)$$

dans laquelle les sommations s'étendent sur le moment angulaire total L du photon et sur sa projection M_L . $D_{M_L\lambda}^L$ étant la matrice rotation de Wigner nécessaire pour effectuer la rotation dans l'espace de la fonction d'onde du photon de la direction $\hat{\mathbf{k}}$ à la direction de la quantité de mouvement de l'électron prise suivant l'axe z et considérée comme axe de quantification. De plus, $\mathcal{A}_{LM_L}^\lambda$ se décompose en multipôles magnétique $\mathbf{A}_{LM_L}(m)$ et électrique $\mathbf{A}_{LM_L}(e)$ selon [52] :

$$\mathcal{A}_{LM_L}^\lambda = \mathbf{A}_{LM_L}(m) + i \lambda \mathbf{A}_{LM_L}(e). \quad (3.16)$$

Ces multipôles sont donnés par :

$$\begin{aligned}
\mathbf{A}_{LM_L}(m) &= j_L(kr) \mathbf{T}_{L,L}^{M_L} \\
\mathbf{A}_{LM_L}(e) &= j_{L-1}(kr) \sqrt{\frac{L+1}{2L+1}} \mathbf{T}_{L,L-1}^{M_L} \\
&\quad - j_{L+1}(kr) \sqrt{\frac{L}{2L+1}} \mathbf{T}_{L,L+1}^{M_L},
\end{aligned} \tag{3.17}$$

où $j_\Lambda(kr)$ est la fonction de Bessel sphérique et le vecteur des harmoniques sphériques $\mathbf{T}_{L,\Lambda}^M$ sont des tenseurs sphériques de rang L qui résultent du couplage des vecteurs unitaires sphériques $\xi_o = \hat{\mathbf{z}}$ et $\xi_{\pm 1} = \mp 2^{-1/2}(\hat{\mathbf{x}} \pm i\hat{\mathbf{y}})$ avec les harmoniques sphériques Y_l^m . Soit :

$$\mathbf{T}_{L,\Lambda}^{M_L} = \sum_m \langle \Lambda M - m \ 1 \ m | L \ M_L \rangle Y_\Lambda^{M_L - m} \xi_m. \tag{3.18}$$

Notons que les parités des multipôles magnétique et électrique $\mathbf{A}_{LM_L}(m, e)$ sont $(-1)^L$ et $(-1)^{L+1}$, respectivement. Tenant compte des équations (3.14) et (3.15), et en appliquant le théorème de Wigner-Eckart, l'amplitude de transition (3.13) devient :

$$\begin{aligned}
M_{if} &= 2\pi\sqrt{2} \sum_{L=1}^{\infty} \sum_{M_L=-L}^{+L} \sum_{\kappa J M} i^{L-l} e^{i\Delta\kappa} \sqrt{\frac{(2l+1)(2L+1)}{2J+1}} \\
&\quad \times \langle l \ 0 \ 1/2 \ m_s | j \ m_s \rangle \langle J_i \ M_{J_i} \ j \ m_s | J \ M \rangle \langle J_f \ M_{J_f} \ L \ M_L | J \ M \rangle \\
&\quad \times \left\langle (\alpha_i J_i, \varepsilon \ \kappa \ j) J \left\| \sum_{i=1}^N \alpha_i \mathcal{A}_L^{\lambda, i} \right\| \alpha_f J_f \right\rangle D_{M_L \lambda}^L(\hat{\mathbf{k}} \rightarrow \hat{\mathbf{z}}).
\end{aligned} \tag{3.19}$$

L'équation (3.19) représente la forme générale de la matrice de transition de la recombinaison radiative ou de la photoionisation, relative à la capture ou à l'émission d'un électron par un ion multichargé, respectivement.

Dans le cas particulier de la recombinaison radiative dans un ion nu, nous avons $J_i = M_{J_i} = 0$ et $(\alpha_f J_f M_{J_f}) = (n_f j_f m_f) \equiv (n_f \kappa_f m_f)$ pour désigner un état hydrogénoïde lié de l'ion recombinaison. Dans ce cas, l'amplitude de transition (3.19) se simplifie sous la forme :

$$\begin{aligned}
M_{if} &= 2\pi\sqrt{2} \sum_{L=1}^{\infty} \sum_{M_L=-L}^{+L} \sum_{\kappa} i^{L-l} e^{i\Delta\kappa} \sqrt{\frac{(2l+1)(2L+1)}{2j+1}} \langle l 0 1/2 m_s | j m_s \rangle \\
&\quad \times \langle j_f m_f L M_L | j m_s \rangle \langle \varepsilon j | \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathcal{A}_L^\lambda | n_f j_f \rangle D_{M_L \lambda}^L(\hat{\mathbf{k}} \rightarrow \hat{\mathbf{z}}), \quad (3.20)
\end{aligned}$$

où $\langle \varepsilon j | \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathcal{A}_L^\lambda | n_f j_f \rangle$ est l'élément de matrice réduit relatif à la transition de l'électron de l'état lié à l'état libre (ou libre-lié). Ce dernier se décompose, à l'aide de l'équation (3.16), en deux éléments de matrice réduits associés aux multipôles magnétique et électrique selon :

$$\langle \varepsilon j | \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathcal{A}_L^\lambda | n_f j_f \rangle = \langle \varepsilon j | \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{A}_L(m) | n_f j_f \rangle + i\lambda \langle \varepsilon j | \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{A}_L(e) | n_f j_f \rangle \quad (3.21)$$

qui, en vertu des équations (3.17), s'écrit aussi sous la forme :

$$\begin{aligned}
\langle \varepsilon j | \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathcal{A}_L^\lambda | n_f j_f \rangle &= \langle \varepsilon j | j_L(kr) \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{T}_{L,L} | n_f j_f \rangle \\
&\quad + i\lambda \left[\sqrt{\frac{L+1}{2L+1}} \langle \varepsilon j | j_{L-1}(kr) \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{T}_{L,L-1} | n_f j_f \rangle \right. \\
&\quad \left. - \sqrt{\frac{L}{2L+1}} \langle \varepsilon j | j_{L+1}(kr) \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{T}_{L,L+1} | n_f j_f \rangle \right]. \quad (3.22)
\end{aligned}$$

L'évaluation relativiste exacte des éléments de matrice réduits, qui figurent dans (3.22), permet une décomposition en parties radiale et angulaire [4, 38], soit :

$$\begin{aligned}
\langle \varepsilon j | j_\Lambda(kr) \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{T}_{L,\Lambda} | n_f j_f \rangle &= \mathcal{T}_{L,\Lambda}(\kappa, \kappa_f) \\
&= iU_\Lambda(\kappa, \kappa_f) \langle \chi_\kappa | \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{T}_{L,\Lambda} | \chi_{-\kappa_f} \rangle \\
&\quad - iV_\Lambda(\kappa, \kappa_f) \langle \chi_{-\kappa} | \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{T}_{L,\Lambda} | \chi_{\kappa_f} \rangle \quad (3.23)
\end{aligned}$$

avec $U_\Lambda(\kappa, \kappa_f)$ et $V_\Lambda(\kappa, \kappa_f)$ qui composent la partie radiale sont des intégrales réelles définies par :

$$\begin{aligned}
U_\Lambda(\kappa, \kappa_f) &= \int_0^\infty g_\kappa(r) j_\Lambda(kr) f_{\kappa_f}(r) r^2 dr, \\
V_\Lambda(\kappa, \kappa_f) &= \int_0^\infty f_\kappa(r) j_\Lambda(kr) g_{\kappa_f}(r) r^2 dr. \quad (3.24)
\end{aligned}$$

Du fait que l'opérateur :

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{T}_{L,\Lambda} = [\boldsymbol{\sigma} \otimes Y_\Lambda]_L \quad (3.25)$$

est un opérateur tensoriel sphérique de rang L agissant sur l'espace orbital et l'espace de spin, il peut être décomposé sur ces deux espaces pour obtenir le résultat final en fonction des intégrales radiales (3.24), des coefficients de Clebsh-Gordan et des symboles $9j$ de Wigner [4, 38] :

$$\begin{aligned}
\mathcal{T}_{L,\Lambda}(\kappa, \kappa_f) &= \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sqrt{(2j+1)(2j_f+1)(2\Lambda+1)(2L+1)} \\
&\times U_{\Lambda}(\kappa, \kappa_f) \sqrt{2l'_f+1} \langle l'_f 0 \Lambda 0 | l 0 \rangle \begin{Bmatrix} l'_f & 1/2 & j_f \\ \Lambda & 1 & L \\ l & 1/2 & j \end{Bmatrix} \\
&- V_{\Lambda}(\kappa, \kappa_f) \sqrt{2l_f+1} \langle l_f 0 \Lambda 0 | l' 0 \rangle \begin{Bmatrix} l_f & 1/2 & j_f \\ \Lambda & 1 & L \\ l' & 1/2 & j \end{Bmatrix}. \quad (3.26)
\end{aligned}$$

3.3 Sections partielles de recombinaison radiative dans des ions nus

Généralement, lorsqu'on traite le processus de photoionisation, la direction du photon incident est prise comme axe de quantification des moments angulaires [50, 64, 63] ce qui permet d'effectuer une décomposition simple de la fonction d'onde du photon. Cependant, cette direction de quantification n'est pas appropriée dans le cas où nous avons besoin de considérer des états de spin définis aussi bien pour l'électron incident ou émis que pour l'ion résiduel. Par conséquent, nous avons adopté, dans le traitement actuel, la direction de l'émission de l'électron comme axe de quantification afin de tenir compte des projections de spin du système final et car c'est un choix naturel pour traiter le processus de recombinaison radiative dans lequel la direction des électrons incidents définit l'axe z .

Du fait que pour la recombinaison radiative, la direction de la quantité de mouvement des électrons incidents \mathbf{p} est toujours fixée et bien définie, il est instructif

d'établir l'expression des sections efficaces partielles de recombinaison radiative dans des ions nus. Pour cela, commençons par donner la section efficace de photoionisation à partir d'un sous-niveau magnétique spécifique $|n_f j_f m_f\rangle$ de l'ion hydrogénoïde. Cette section s'obtient en moyennant sur toutes les valeurs possibles de la polarisation circulaire $\lambda = \pm 1$ du photon incident du fait que dans l'état initial les photons ne sont pas polarisés, et en sommant sur toutes les orientations du spin de l'électron ionisé m_s du fait que les électrons éjectés ne sont pas détectés :

$$\sigma^{\text{ph}}(n_f j_f m_f) = \frac{\alpha m_e c^2}{4\hbar\omega} \lambda_c^2 \left[\frac{1}{2} \sum_{\lambda=\pm 1} \sum_{m_s=\pm \frac{1}{2}} \int d\Omega_k |\langle \mathbf{p} m_s | \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{u}}_\lambda e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} | n_f j_f m_f \rangle|^2 \right], \quad (3.27)$$

avec $\lambda_c = \hbar/m_e c$ est la longueur d'onde de Compton de l'électron, et α est la constante de structure fine. En plus, l'intégration dans l'équation (3.27) est effectuée sur toutes les directions du photon incident ayant la pulsation $\omega = kc$.

En insérant l'expression de l'amplitude de transition (3.20) dans (3.27) et en effectuant l'intégration angulaire par l'utilisation de la relation d'orthogonalité des matrices de rotation :

$$\int D_{M_L \lambda}^L D_{M_{L'} \lambda}^{L'*} d\Omega_k = \frac{4\pi}{2L+1} \delta_{M_L M_{L'}} \delta_{LL'}, \quad (3.28)$$

la forme finale de la section efficace de photoionisation à partir d'un sous-niveau magnétique $|n_f j_f m_f\rangle$ de l'ion hydrogénoïde s'écrit comme :

$$\begin{aligned} \sigma^{\text{ph}}(n_f j_f m_f) &= \frac{\alpha m_e c^2}{4\hbar\omega} \lambda_c^2 (16\pi^3) \sum_{\lambda=\pm 1} \sum_{m_s=\pm \frac{1}{2}} \sum_{L=1}^{\infty} \sum_{M_L=-L}^{+L} \left| \sum_{\kappa} i^{-l} e^{i\Delta\kappa} \sqrt{\frac{2l+1}{2j+1}} \right. \\ &\quad \left. \times \langle l 0 1/2 m_s | j m_s \rangle \langle j_f m_f L M_L | j m_s \rangle \langle \varepsilon j || \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathcal{A}_L^\lambda || n_f j_f \rangle \right|^2. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Ainsi, l'intégration sur la direction du photon conduit à une sommation incohérente sur les multipôles, quand aux ondes partielles de l'électron, elles sont superposées d'une façon cohérente. D'autre part, si l'axe de quantification est pris suivant la direction du photon [64], nous aurons une sommation incohérente sur les ondes partielles de l'électron et une sommation cohérente sur les multipôles.

Nous avons exprimé, dans l'équation (3.29), la section efficace partielle de photoionisation de systèmes hydrogéoïdes. Etant donné que la recombinaison radiative est le processus inverse de la photoionisation, en utilisant le principe du bilan détaillé, l'insertion de (3.29) dans (3.8) permet d'exprimer la section efficace de recombinaison radiative dans un sous-niveau magnétique hydrogéoïde $|n_f j_f m_f\rangle$ de l'ion recombinié :

$$\begin{aligned} \sigma^{\text{RR}}(n_f j_f m_f) &= \frac{\alpha k}{4\beta^2 \gamma^2} (16\pi^3) \sum_{\lambda=\pm 1} \sum_{m_s=\pm \frac{1}{2}} \sum_{L=1}^{\infty} \sum_{M_L=-L}^{+L} \left| \sum_{\kappa} i^{-l} e^{i\Delta_{\kappa}} \sqrt{\frac{2l+1}{2j+1}} \right. \\ &\quad \left. \times \langle l 0 1/2 m_s | j m_s \rangle \langle j_f m_f L M_L | j m_s \rangle \langle \varepsilon j || \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathcal{A}_L^\lambda || n_f j_f \rangle \right|^2, \end{aligned} \quad (3.30)$$

dans laquelle nous avons considéré le système d'unités relativistes $\hbar = m_e = c = 1$ et $e^2 = \alpha \simeq 1/137.037$ puisqu'on a adopté un traitement relativiste exact.

3.4 Approximation dipolaire non-relativiste

Dans le cas où $\hbar\omega \ll m_e c^2$ et $\alpha Z \ll 1$, il serait suffisant d'utiliser une approche non-relativiste pour décrire la recombinaison radiative. Dans ce cas, les sections efficaces correspondantes peuvent être évaluées de façon analytique pour les systèmes hydrogéoïdes [50, 56, 70].

Afin d'évaluer l'amplitude de transition dans l'approche non-relativiste exprimons les fonctions d'onde, solutions de l'équation de Schrödinger, décrivant les états initial et final du système. L'état hydrogéoïde final d'énergie ε_n caractérisé par les nombres quantiques n , l et m_l est décrit par la fonction d'onde non-relativiste

$$\varphi_{nlm_l}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} P_{nl}(r) Y_l^{m_l}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (3.31)$$

dans laquelle la fonction radiale est donnée par :

$$P_{nl}(r) = N_{nl} r^{l+1} e^{(\alpha Z/n)(r/\lambda_c)} {}_1F_1 \left(l+1-n, 2l+2; \frac{2\alpha Z}{n} \frac{r}{\lambda_c} \right) \quad (3.32)$$

avec la constante de normalisation :

$$N_{nl} = \sqrt{\frac{(n+l)!}{2n(n-l-1)!}} \left(\frac{\alpha Z}{n\lambda_c} \right)^{l+3/2} \frac{1}{(2l+1)!} \quad (3.33)$$

et ${}_1F_1(a, c; x)$ qui représente la fonction confluyente hypergéométrique.

Pour un potentiel coulombien produit par la charge nucléaire de l'ion Z , la fonction d'onde initiale décrivant un électron incident avec le vecteur d'onde asymptotique \mathbf{k} dans la direction $\hat{\mathbf{k}} = \mathbf{k}/k$ est donnée par le développement en ondes partielles [71, 72] :

$$\begin{aligned} |\varphi_{\varepsilon l' m_{l'}}\rangle &= \sqrt{4\pi} \sum_{l'=0}^{\infty} \sum_{m_{l'}=-l'}^{l'} i^{l'} e^{i\sigma_{l'}} \sqrt{2l'+1} |\varepsilon l' m_{l'}\rangle \delta_{m_{l'},0} \\ &= \sqrt{4\pi} \sum_{l'=0}^{\infty} \frac{1}{r} i^{l'} e^{i\sigma_{l'}} \sqrt{2l'+1} F_{kl'}(r) Y_{l'}^0(\hat{\mathbf{r}}), \end{aligned} \quad (3.34)$$

avec $\sigma_{l'}$ qui représente le déphasage coulombien :

$$\sigma_{l'} = \arg \Gamma(l' + 1 - iZ/k). \quad (3.35)$$

l' et $m_{l'}$ sont les nombres quantiques du moment angulaire orbital de l'électron incident d'énergie cinétique $\varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m_e$ et de quantité de mouvement p , $F_{kl'}$ est la fonction radiale de l'onde partielle $|\varepsilon l' m_{l'}\rangle$. En considérant le développement (3.34), nous avons pris l'axe de quantification suivant la direction z de l'électron incident ce qui constitue un choix naturel pour traiter le processus de recombinaison radiative.

Les fonctions d'onde radiales P_{nl} et $F_{kl'}$ présentes dans les équations (3.31) et (3.34), respectivement, satisfont aux équations différentielles (exprimées en unités atomiques) :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2Z}{r} + \begin{Bmatrix} -Z^2/n^2 \\ k^2 \end{Bmatrix} \right] \begin{Bmatrix} P_{nl}(r) \\ F_{kl}(r) \end{Bmatrix} = 0 \quad (3.36)$$

où P_{nl} est normalisée tel que :

$$\int_0^{\infty} dr P_{nl}(r) P_{n'l'}(r) = \delta_{nn'} \quad (3.37)$$

tandis que la fonction radiale du continuum est normalisée de telle sorte que son comportement asymptotique, quand $r \rightarrow \infty$, est :

$$F_{kl'}(r) \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{k}} \sin \left[kr - \frac{Z}{k} \ln(2kr) - \frac{l'\pi}{2} + \sigma_{l'} \right]. \quad (3.38)$$

L'hamiltonien d'interaction responsable de la transition de l'électron de l'état libre à l'état lié est donné, dans l'approximation non-relativiste, par l'expression [71, 72] :

$$H = \frac{-e}{m_e} \left(\frac{2\pi\hbar}{\omega} \right)^{1/2} \hat{\mathbf{u}}_\lambda^* e^{-i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}} \cdot \mathbf{p} = -ie\sqrt{2\pi\hbar\omega} \hat{\mathbf{u}}_\lambda^* e^{-i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}} \cdot \mathbf{r}, \quad (3.39)$$

où \mathbf{p} et \mathbf{r} représentent, respectivement, les opérateurs quantité de mouvement et position de l'électron. De plus, ω est la pulsation du photon de recombinaison émis avec le vecteur d'onde \mathbf{k}_f . On définit ainsi l'amplitude de transition de l'électron de l'état libre à l'état lié comme :

$$M_{if} = \int d^3r \varphi_{nlm_l}^* H \varphi_{\varepsilon l' m_{l'}}. \quad (3.40)$$

Cette amplitude sert à définir la probabilité de transition par unité de temps de l'état initial i vers l'état final f comme :

$$W_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{if}|^2 \rho_f \quad (3.41)$$

où ρ_f est la densité des photons émis dans l'état final, définie par :

$$\rho_f = \frac{\hbar^2 \omega^2}{(2\pi\hbar c)^3} d\hat{\mathbf{k}}_f. \quad (3.42)$$

La section efficace différentielle de recombinaison radiative est donnée par :

$$d\sigma_{if}^{\text{RR}} = \frac{W_{if}}{J_i} \quad (3.43)$$

avec J_i qui représente le flux de l'électron incident ayant $\hbar k$ pour quantité de mouvement et exprimé comme :

$$J_i = \frac{\hbar k}{m_e} = v. \quad (3.44)$$

On suppose que les électrons incidents ne sont pas polarisés et que les photons de recombinaison radiative ne sont pas observés. Dans ce cas, la section efficace partielle de recombinaison radiative dans un sous-niveau magnétique (nlm_l) de l'ion hydrogénoïde recombinaison est proportionnelle au carré du module de l'amplitude

de transition (3.40), tout en sommant sur les valeurs de la polarisation $\lambda = \pm 1$ du photon émis, et intégrant sur toutes ses directions [71] :

$$\sigma^{\text{RR}}(n l m_l) = \frac{1}{(2\pi)^2} \left(\frac{\omega^2}{\hbar^2 c^4} \right) \left(\frac{m_e c}{p} \right) \sum_{\lambda=\pm 1} \int |M_{if}|^2 d\hat{\mathbf{k}}_f. \quad (3.45)$$

Cette dernière équation s'exprime encore, en tenant compte du développement (3.34) et de l'expression (3.39) dans M_{if} :

$$\begin{aligned} \sigma^{\text{RR}}(n l m_l) &= \frac{1}{2\pi} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right) \left(\frac{\omega}{c} \right)^3 \left(\frac{m_e c}{p} \right) \sum_{\lambda=\pm 1} \int \left| \sqrt{4\pi} \sum_{l'} \sum_{m_{l'}=-l'}^{l'} i^{l'} e^{i\sigma_{l'}} \right. \\ &\quad \left. \times \sqrt{2l'+1} \langle n l m_l | \hat{\mathbf{u}}_{\lambda}^* e^{-i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}} \cdot \mathbf{r} | \varepsilon l' m_{l'} \rangle \delta_{m_{l'} 0} \right|^2 d\hat{\mathbf{k}}_f. \end{aligned} \quad (3.46)$$

Si de plus, on adopte l'approximation dipolaire électrique où $e^{-i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}}$ tend vers l'unité, l'amplitude de transition qui figure dans l'équation (3.46) est donnée par [3]

$$\begin{aligned} \langle n l m_l | \hat{\mathbf{u}}_{\lambda}^* e^{-i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}} \cdot \mathbf{r} | \varepsilon l' m_{l'} \rangle &= -\sqrt{2\pi} \sum_{\mu} D_{\mu\lambda}^{(1)}(\hat{\mathbf{k}}_f \rightarrow \hat{\mathbf{p}}) (-1)^{\mu+1} \\ &\quad \times \langle n l m_l | \mathbf{d}_{-\mu} | \varepsilon l' m_{l'} \rangle, \end{aligned} \quad (3.47)$$

avec $\langle n l m_l | \mathbf{d}_{-\mu} | \varepsilon l' m_{l'} \rangle$ qui représente l'élément de matrice de l'opérateur dipôle électrique \mathbf{d} dont les composantes sont reliées aux harmoniques sphériques selon $d_{\mu} = \sqrt{4\pi/3} r Y_1^{\mu}(\hat{\mathbf{r}})$. De plus, $D_{\mu\lambda}^{(1)}(\hat{\mathbf{k}}_f \rightarrow \hat{\mathbf{p}}) \equiv D_{\mu\lambda}^{(1)}(\varphi, \theta, 0)$ est un élément de la matrice de rotation de Wigner.

En insérant (3.47) dans (3.46) et en appliquant successivement la relation d'orthogonalité des matrices de rotation :

$$\int d\hat{\mathbf{k}}_f D_{\mu\lambda}^{(1)} D_{\mu'\lambda}^{(1)} = \frac{4\pi}{3} \delta_{\mu\mu'}, \quad (3.48)$$

et le théorème de Wigner-Eckart :

$$\langle n l m_l | \mathbf{d}_{-\mu} | \varepsilon l' m_{l'} \rangle = \frac{(-1)^{l+l'+\mu}}{\sqrt{2l'+1}} \langle l m_l 1 \mu | l' m_{l'} \rangle \langle n l || \mathbf{d} || \varepsilon l' \rangle, \quad (3.49)$$

on obtient :

$$\begin{aligned} \sigma^{\text{RR}}(n l m_l) &= \frac{\alpha}{2\pi} \frac{\omega^3}{c^3} \frac{m_e c}{p} 4\pi \left(\frac{8\pi}{3} \right) \sum_{\mu} \sum_{l'_1 l'_2} i^{l'_1-l'_2} e^{i(\sigma_{l'_1}-\sigma_{l'_2})} (-1)^{-l'_1-l'_2} \\ &\quad \times \langle l m_l 1 \mu | l'_1 0 \rangle \langle l m_l 1 \mu | l'_2 0 \rangle \langle n l || \mathbf{d} || \varepsilon l'_1 \rangle \langle n l || \mathbf{d} || \varepsilon l'_2 \rangle, \end{aligned} \quad (3.50)$$

avec $\alpha = e^2/\hbar c$ qui représente la constante de structure fine. D'autre part, l'élément de matrice réduit de l'opérateur dipôle électrique a pour expression [3] :

$$\begin{aligned} \langle n l || \mathbf{d} || \varepsilon l' \rangle &= (-1)^l \begin{pmatrix} l & 1 & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \sqrt{(2l+1)(2l'+1)} \\ &\times \int_0^\infty P_{nl}(r) r F_{kl'}(r) dr. \end{aligned} \quad (3.51)$$

Tenant compte du fait que le symbol $3j$ présent dans l'équation (3.51) est nul si $l+l'+1$ est impair, on en déduit que l' ne peut prendre que deux valeurs possibles, soit $l' = l \pm 1$. Ce coefficient vaut :

$$\begin{pmatrix} l & 1 & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{l_{>}} (-1)^{l_{>}}}{\sqrt{(2l+1)(2l'+1)}} \quad \text{avec } l_{>} = \max(l, l'). \quad (3.52)$$

Il convient de poser

$$\mathcal{R}_{nl}^{\varepsilon l'} = \left[\frac{Z^2}{n^2} \int_0^\infty P_{nl}(r) r F_{kl'}(r) dr \right]^2. \quad (3.53)$$

La substitution de l'équation (3.51) dans (3.50) permet d'exprimer la section efficace partielle de recombinaison radiative dans un sous-niveau magnétique de l'ion hydrogénoïde, et ceci dans le cadre de l'approximation dipolaire non-relativiste :

$$\begin{aligned} \sigma^{\text{RR}}(n l m_l) &= \frac{\alpha}{2\pi} \frac{\omega^3}{c^3} \frac{m_e c}{p} 4\pi \left(\frac{8\pi}{3} \right) \frac{n^2}{Z^2} \left[\langle l 1 m_l - m_l | l - 1 0 \rangle^2 l \mathcal{R}_{nl}^{\varepsilon l-1} \right. \\ &+ \langle l 1 m_l - m_l | l + 1 0 \rangle^2 (l+1) \mathcal{R}_{nl}^{\varepsilon l+1} + 2 \cos(\sigma_{l+1} - \sigma_{l-1}) \sqrt{l(l+1)} \\ &\left. \times \langle l 1 m_l - m_l | l + 1 0 \rangle \langle l 1 m_l - m_l | l - 1 0 \rangle \sqrt{\mathcal{R}_{nl}^{\varepsilon l+1} \mathcal{R}_{nl}^{\varepsilon l-1}} \right]. \end{aligned} \quad (3.54)$$

Cette expression peut aussi être exprimée en unité de (πa_0^2) , après réarrangement du facteur qui figure à droite de l'égalité, comme :

$$\begin{aligned} \sigma^{\text{RR}}(n l m_l) &= \frac{16}{3\sqrt{2}\alpha^2} \left(\frac{\hbar\omega}{m_e c^2} \right)^3 \left(\frac{m_e c^2}{\varepsilon} \right)^{1/2} \frac{n^2}{Z^2} \left[\langle l 1 m_l - m_l | l - 1 0 \rangle^2 l \mathcal{R}_{nl}^{\varepsilon l-1} \right. \\ &+ \langle l 1 m_l - m_l | l + 1 0 \rangle^2 (l+1) \mathcal{R}_{nl}^{\varepsilon l+1} + 2 \cos(\sigma_{l+1} - \sigma_{l-1}) \sqrt{l(l+1)} \\ &\left. \times \langle l 1 m_l - m_l | l + 1 0 \rangle \langle l 1 m_l - m_l | l - 1 0 \rangle \sqrt{\mathcal{R}_{nl}^{\varepsilon l+1} \mathcal{R}_{nl}^{\varepsilon l-1}} \right]. \end{aligned} \quad (3.55)$$

En sommant sur le nombre quantique magnétique m_l de l'état lié final on obtient la section efficace totale de recombinaison radiative dans l'état nl de l'ion recombiné hydrogéoïde, soit :

$$\sigma^{\text{RR}}(nl) = \frac{16}{3\sqrt{2}\alpha^2} \left(\frac{\hbar\omega}{m_e c^2} \right)^3 \left(\frac{m_e c^2}{\varepsilon} \right)^{1/2} \frac{n^2}{Z^2} \left[l \mathcal{R}_{nl}^{\varepsilon l-1} + (l+1) \mathcal{R}_{nl}^{\varepsilon l+1} \right]. \quad (3.56)$$

Notons que cette dernière expression est bien connue en littérature [71, 73].

En introduisant le paramètre $\eta = Z/k$ et en faisant un changement de variable pour les fonctions radiales de l'état lié et du continuum tel que :

$$\begin{aligned} s &= Zr \\ \mathcal{P}_{nl}(s) &= Z^{-1/2} P_{nl}(r) \\ \mathcal{F}_{\eta l'}(s) &= Z^{+1/2} F_{kl'}(r), \end{aligned} \quad (3.57)$$

la quantité définie dans l'équation (3.53) devient :

$$\mathcal{R}_{nl}^{\eta l'} = \left[\frac{1}{n^2} \int_0^\infty P_{nl}(s) s F_{\eta l'}(s) ds \right]^2. \quad (3.58)$$

Avec ce changement de variable, et en utilisant la relation de conservation de l'énergie totale du système

$$\hbar\omega = \varepsilon - \varepsilon_n = \frac{p^2}{2m} \left[1 + \frac{\eta^2}{n^2} \right] = \frac{Z^2}{2} \left[\frac{1}{\eta^2} + \frac{1}{n^2} \right], \quad (3.59)$$

la section efficace partielle de recombinaison radiative (3.55) prend la forme (en unité de πa_0^2) :

$$\begin{aligned} \sigma^{\text{RR}}(nl m_l) &= 2.591 \times 10^{-7} \left(\frac{1}{\eta^2} + \frac{1}{n^2} \right)^3 n^4 \eta^2 \left[\langle l 1 m_l - m_l | l - 1 0 \rangle^2 l \mathcal{R}_{nl}^{\eta l-1} \right. \\ &\quad + \langle l 1 m_l - m_l | l + 1 0 \rangle^2 (l+1) \mathcal{R}_{nl}^{\eta l+1} + 2 \cos(\sigma_{l+1} - \sigma_{l-1}) \sqrt{l(l+1)} \\ &\quad \left. \times \langle l 1 m_l - m_l | l + 1 0 \rangle \langle l 1 m_l - m_l | l - 1 0 \rangle \sqrt{\mathcal{R}_{nl}^{\eta l+1} \mathcal{R}_{nl}^{\eta l-1}} \right]. \end{aligned} \quad (3.60)$$

La quantité importante à calculer nécessaire pour l'évaluation de (3.60) réside dans l'élément de matrice radial

$$R(n, l; \eta, l') = \frac{1}{n^2} \int_0^\infty P_{nl}(s) s F_{\eta l'}(s) ds.$$

A cet effet, nous suivons la procédure de Burgess [70] qui utilise des relations de récurrence nous permettant de calculer avec facilité tous les éléments de matrice dipolaires pour un n donné et un η donné. Pour cela, nous commençons par calculer les éléments relatifs au moment angulaire orbital ayant la valeur maximale $l = n - 1$, ensuite avec l'ordre inférieur suivant $l = n - 2$. Ceci permet de fournir les quantités de base pour toutes les autres valeurs inférieures de l .

La quantité commune est [4]

$$R(n, n - 1; 0, n) = \sqrt{\frac{\pi}{2(2n - 1)!}} 4 (4n)^n e^{-2n}. \quad (3.61)$$

Pour des valeurs finies de η , nous avons pour les deux premières valeurs supérieures de l

$$\underline{l = n - 1, l' = l + 1}$$

$$R(n, n - 1; \eta, n) = \sqrt{\frac{\prod_{s=1}^n (1 + s^2/\eta^2)}{1 - e^{-2\pi\eta}}} \frac{e^{2n-2\eta \arctan(n/\eta)}}{(1 + n^2/\eta^2)^{n+2}} R(n, n - 1; 0, n), \quad (3.62)$$

$$\underline{l = n - 1, l' = l - 1}$$

$$R(n, n - 1; \eta, n - 2) = \frac{1}{2n} \sqrt{\frac{1 + n^2/\eta^2}{1 + (n - 1)^2/\eta^2}} R(n, n - 1; \eta, n). \quad (3.63)$$

$$\underline{l = n - 2, l' = l + 1}$$

$$R(n, n - 2; \eta, n - 1) = \frac{1}{2} \sqrt{(2n - 1)(1 + n^2/\eta^2)} R(n, n - 1; \eta, n), \quad (3.64)$$

$$\underline{l = n - 2, l' = l - 1}$$

$$R(n, n - 2; \eta, n - 3) = \frac{4 + (n - 1)(1 + n^2/\eta^2)}{2n} \sqrt{\frac{2n - 1}{1 + (n - 2)^2/\eta^2}} R(n, n - 1; \eta, n - 2). \quad (3.65)$$

Les équations (3.62)-(3.65) constituent tous les éléments de matrice dipolaires possibles pour les deux premières valeurs supérieures du moment orbital l d'une couche n , et vont nous servir à calculer les éléments relatifs aux autres valeurs inférieures de l . Ceci est possible à l'aide des relations de récurrence suivantes [4] :

$$\begin{aligned}
& 2n\sqrt{\left[n^2 - (l-1)^2\right] \left[1 + l^2/\eta^2\right]} R(n, l-2; \eta, l-1) \\
&= \left[4n^2 - 4l^2 + l(2l-1)(1 + n^2/\eta^2)\right] R(n, l-1; \eta, l) \\
&\quad - 2n\sqrt{\left[n^2 - l^2\right] \left[1 + (l+1)^2/\eta^2\right]} R(n, l; \eta, l+1)
\end{aligned} \tag{3.66}$$

et

$$\begin{aligned}
& 2n\sqrt{\left[n^2 - l^2\right] \left[1 + (l-1)^2/\eta^2\right]} R(n, l-1; \eta, l-2) \\
&= \left[4n^2 - 4l^2 + l(2l+1)(1 + n^2/\eta^2)\right] R(n, l; \eta, l-1) \\
&\quad - 2n\sqrt{\left[n^2 - (l+1)^2\right] \left[1 + l^2/\eta^2\right]} R(n, l+1; \eta, l).
\end{aligned} \tag{3.67}$$

A l'aide des équations (3.66) et (3.67) on peut continuer avec $l = n - 3$ ainsi de suite jusqu'à $l = 0$. Bien sûr, les éléments de matrice avec $l \geq n$ n'existent pas et donc sont égales à zéro. La puissance de cette méthode réside dans le fait que les fonctions hypergéométriques ne sont pas évaluées et donc il sera plus facile d'établir un programme de calcul stable permettant de considérer tous les états jusqu'à $n = 20$ avec tous les moments orbitaux l correspondants.

Chapitre 4

Intensité et polarisation linéaire des raies Lyman- α

4.1 Introduction

Lors des collisions entre un faisceau directif d'électrons et un système d'ions fortement chargés, un électron peut être capturé (recombiné) dans un état lié de l'ion avec l'émission simultanée d'un photon de recombinaison. Si en plus, l'électron est capturé dans un niveau excité ayant un moment angulaire $j \geq 1$, un peuplement inégal des sous-niveaux magnétiques se produit à l'intérieur de ce niveau. Lors de l'émission spontanée, ce système émet alors un rayonnement polarisé et dont l'intensité est caractérisée par une distribution angulaire anisotrope. En admettant que les spins des électrons incidents sont orientés aléatoirement, l'inégalité de population des sous-niveaux magnétiques ne résulte que de l'anisotropie géométrique imposée au processus de recombinaison radiative par la direction privilégiée définie par le faisceau incident d'électrons.

En raison de la symétrie de révolution du système autour de la direction du faisceau d'électrons, les sections efficaces de recombinaison radiative dans des sous-niveaux magnétiques m_j et $-m_j$ sont identiques. Donc, la sélectivité de peuplement des sous-niveaux ne concerne que ceux de différents $|m_j|$. Cet alignement des sous-niveaux conduit à une polarisation de type linéaire de la raie subséquentement émise. Le degré

de polarisation linéaire dépend de l'énergie des électrons incidents ainsi que du type de la transition radiative impliquée.

Notons que si le faisceau d'électrons est initialement polarisé longitudinalement, le processus de recombinaison radiative des ions perd la propriété d'invariance par rapport à toute réflexion dans le plan normal à la direction du faisceau d'électrons. Ceci implique que la recombinaison radiative dans les sous-niveaux magnétiques m_j et $-m_j$ de l'ion recombiné n'est plus nécessairement équiprobable.

La polarisation se produit lorsque les composantes de radiation émises avec le vecteur du champ électrique parallèle et perpendiculaire au plan méridien, c'est à dire le plan formé par la direction du faisceau d'électrons et celle de détection de la radiation, ont des intensités différentes I_{\parallel} et I_{\perp} , respectivement. Le degré de polarisation linéaire $P_l(\theta)$ de la radiation émise dans un angle θ par rapport au faisceau incident est défini par le rapport :

$$P_l(\theta) = \frac{I_{\parallel}(\theta) - I_{\perp}(\theta)}{I_{\parallel}(\theta) + I_{\perp}(\theta)}. \quad (4.1)$$

Dans le cas des ions fortement chargés, une source idéal pour l'étude de la polarisation du rayonnement X est basée sur le dispositif Electron Beam Ion Trap (EBIT). Historiquement, le premier prototype EBIT est relié aux noms de MortanLevine et RossMarrs [74, 75]. Leur but était de développer un instrument basé sur les principes d'un ancien appareil appelé EBIS (Electron Beam Ion Source) proposé par E. D. Donets et collaborateurs en 1969 [76], mais avec quelques améliorations fondamentales permettant à un état de charge très élevé d'être formé. Dans celui ci, les atomes piégés dans un espace dense d'électrons sont continuellement bombardés par un faisceau d'électrons et par conséquent sont ionisés dans des états de charge très élevés suite a ces collisions directionnelles. La radiation émise par ces ions excités est observée dans la direction perpendiculaire et plusieurs raies spectrales et continuums sont observés à l'aide de spectromètres. Les paramètres physiques dans (EBIT) tel que la densité des électrons, l'énergie de bombardement et le temps de confinement sont très bien contrôlés. Pour cela, il a attiré plusieurs chercheurs et est actuellement répandu dans plusieurs pays [77]. Le dispositif (EBIT) initialement développé

à Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL) [74, 75] était activement utilisé dans les mesures des sections efficaces des collisions électron-ion [74, 78, 79, 80] ainsi que dans diverses expériences de physique atomique incluant la spectroscopie X des ions fortement chargés [81, 82].

Depuis sa conception, EBIT été utilisé afin de produire et d'étudier les ions fortement chargés jusqu'à l'état de charge U^{82+} . Une autre version de EBIT appelé Super-EBIT est réalisé ensuite afin de supporter des énergies des électrons plus élevées et donc suffisantes pour créer des états de charge plus élevés jusqu'à U^{92+} [83, 84]. Dans le tableau (4.1) nous donnons quelques paramètres opérationnels dans EBIT et Super-EBIT.

La composante principale d'EBIT est donc le faisceau d'électrons qui remplit trois fonctions (voir figure (4.1)) :

- Création d'ions fortement chargés en arrachant des électrons aux atomes suite aux collisions ionisantes ;
- Confiner ces ions en fournissant un potentiel piégeant dans la direction radiale ;
- Exciter des transitions radiatives dans les ions de telle manière qu'ils peuvent être étudiés spectroscopiquement.

TABLE 4.1 – Quelques paramètres opérationnels dans EBIT et Super-EBIT.

Paramètres	EBIT	Super-EBIT
Energie des électrons incidents	0.5-30 keV	10.0-210 keV
Rayon du faisceau d'électrons	35 μ m	35 μ m
Etat maximum d'ionisation	Neon-like U^{82+}	Noyau U^{92+}

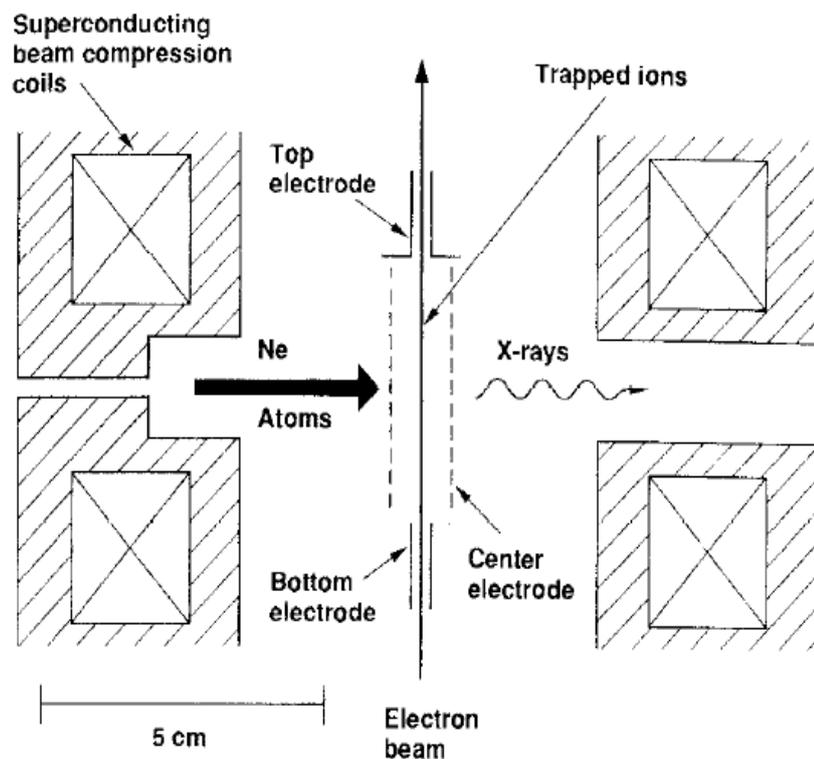


FIGURE 4.1 – Schéma illustrant le dispositif Super-EBIT développé à Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL). Un faisceau intense d'électrons est comprimé par le champ magnétique induit par une paire de bobines supraconductrices [85].

4.2 Expression du degré de polarisation linéaire : formalisme de la matrice densité

Le formalisme de la matrice densité est un outil approprié pour décrire la distribution angulaire et la polarisation d'une raie émise spontanément suite à la recombinaison radiative dans un état excité de l'ion recombinaison [40, 41, 69]. Dans ce formalisme, les processus de recombinaison radiative dans un état excité et d'émission radiative spontanée sont traités comme étant deux événements indépendants. Cette hypothèse est valable si on suppose que le temps de relaxation du niveau supérieur excité est dû exclusivement à sa durée de vie radiative, c'est-à-dire, le niveau supérieur a suffisamment le temps pour décliner radiativement avant la prochaine collision.

4.2.1 Matrice densité au premier ordre de la théorie des perturbations

Dans la théorie de la matrice densité, l'état d'un système physique est décrit en terme des opérateurs densité (ou statistiques) [86]. Ces opérateurs peuvent représenter, par exemple, un ensemble de particules qui sont soit dans un état quantique pur, soit dans un mélange statistique de différents états avec un certain degré de cohérence. Ensuite, l'idée de base de la théorie de la matrice densité est d'accompagner un tel ensemble durant le processus considéré à partir de l'état initial jusqu'à l'état final décrits par les opérateurs ρ_i et ρ_f , respectivement.

Considérons la recombinaison radiative d'un électron dans un état excité d'un ion initialement nu. Soit ρ_i l'opérateur densité qui caractérise l'état excité hydrogénoïde de l'ion recombinaison immédiatement après la collision, il contient tous les détails sur la recombinaison radiative. Soit j_i le moment angulaire total de l'ion hydrogénoïde excité et m_i sa projection suivant la direction des électrons incidents qui est prise comme axe de quantification. Un système d'ions qui a été excité de manière isotrope est peuplé statistiquement entre les différents sous-niveaux magnétiques, le

rayonnement émis dans la désexcitation d'un niveau est isotrope et non polarisé. Par contre, il est bien connu que le rayonnement émis d'un niveau excité par un processus axialement symétrique est partiellement et linéairement polarisé.

Soit j_f le moment angulaire final de l'ion après la désexcitation spontanée et m_f sa projection le long de l'axe de quantification. Soit $|\mathbf{k}\lambda\rangle$ la fonction d'onde décrivant l'état du photon émis, \mathbf{k} désigne la direction du photon et λ son hélicité ($\lambda = \pm 1$). La notion d'état d'hélicité a été introduite par Jacob et Wick [87], elle représente la projection du moment angulaire total du photon sur sa direction de propagation. Or puisque la composante du moment angulaire orbital du photon sur sa direction de propagation est nulle, l'hélicité représente aussi la projection du spin du photon le long de \mathbf{k} . Le spin du photon étant identifié à 1, λ ne peut prendre que la valeur $+1$ ou -1 , $\lambda = 0$ ne peut exister à cause de la nature transverse des ondes électromagnétiques.

Les éléments de la matrice densité ρ_f qui décrivent le système total d'ions et photons émis s'écrivent sous la forme :

$$\langle n_f j_f m_f, \mathbf{k} \lambda | \rho_f | n_f j_f m'_f, \mathbf{k} \lambda' \rangle . \quad (4.2)$$

La matrice densité de polarisation du photon ρ^{ph} est la seule à nous intéresser puisque seuls les photons émis sont analysés. Elle est obtenue en prenant les éléments de matrice de l'opérateur densité total ρ_f qui sont diagonaux suivant le nombre quantique magnétique m_f des ions inobservés et en sommant ces éléments sur toutes les valeurs de m_f [86] :

$$\begin{aligned} \rho_{\lambda\lambda'}^{\text{ph}} &= \langle \mathbf{k}\lambda | \rho^{\text{ph}} | \mathbf{k} \lambda' \rangle \\ &= \sum_{m_f} \langle n_f j_f m_f, \mathbf{k} \lambda | \rho_f | n_f j_f m_f, \mathbf{k} \lambda' \rangle . \end{aligned} \quad (4.3)$$

Si V désigne l'opérateur décrivant la relaxation des ions excités par émission spontanée, nous avons :

$$\rho_f = V \rho_i V^+ . \quad (4.4)$$

En appliquant doublement la relation de fermeture à (4.3) tout en y insérant (4.4), on aura :

$$\rho_{\lambda\lambda'}^{\text{ph}} = \sum_{m_f m_i m_i'} \langle n_f j_f m_f, \mathbf{k} \lambda | V | n_i j_i m_i, 0 \rangle \langle n_i j_i m_i | \rho_i | n_i j_i m_i' \rangle \langle n_i j_i m_i', 0 | V^+ | n_f j_f m_f, \mathbf{k} \lambda' \rangle, \quad (4.5)$$

où $|n_i j_i m_i, 0\rangle$ est le produit de l'état initial de l'ion $|n_i j_i m_i\rangle$ et l'état du vide électromagnétique. Du fait de la symétrie axiale du processus de recombinaison radiative et du choix de l'axe de quantification colinéaire à cet axe de symétrie, les ions excités sont alors dans une superposition incohérente des états $|n_i j_i m_i\rangle$ ce qui implique que la matrice ρ_i est diagonale dans la base $|n_i j_i m_i\rangle$. Par conséquent, l'élément de matrice $\langle n_i j_i m_i | \rho_i | n_i j_i m_i \rangle$ représente la population $N(n_i j_i m_i)$ du sous-niveau magnétique $|n_i j_i m_i\rangle$.

En introduisant la notation

$$A_{fi}(\mathbf{k} \lambda) = \langle n_f j_f m_f, \mathbf{k} \lambda | V | n_i j_i m_i, 0 \rangle \quad (4.6)$$

qui représente la probabilité qu'un photon polarisé d'hélicité λ se propageant suivant \mathbf{k} soit émis pendant que l'ion subit la transition $|n_i j_i m_i\rangle \rightarrow |n_f j_f m_f\rangle$, l'équation (4.5) peut s'écrire comme :

$$\rho_{\lambda\lambda'}^{\text{ph}} = \sum_{m_f m_i} N(n_i j_i m_i) A_{fi}(\mathbf{k} \lambda) A_{fi}^*(\mathbf{k} \lambda'). \quad (4.7)$$

Comme l'axe de quantification est pris suivant la direction des électrons incidents, il faut effectuer une rotation permettant de passer du repère d'observation du photon défini par \mathbf{k} au repère défini par l'axe Oz. L'orientation de \mathbf{k} est spécifiée par l'angle polaire θ et l'angle azimutal φ . Si j dénote le moment angulaire du photon et m sa projection par rapport à l'axe de quantification, en utilisant l'élément de matrice de rotation $D_{\lambda m}^{(j)}(\hat{\mathbf{k}}) \equiv D_{\lambda m}^{(j)}(\varphi, \theta, 0) \equiv d_{\lambda m}^{(j)}(\theta) e^{im\varphi}$, l'amplitude de probabilité définie dans la direction de quantification sera donnée par [88] :

$$A_{fi}(\mathbf{k} \lambda) = \sum_{j m} \left(\frac{2j+1}{4\pi} \right)^{1/2} A(j) D_{\lambda m}^{(j)}(\hat{\mathbf{k}}) (-1)^m \langle n_f j_f m_f | Q_{-m}^j | n_i j_i m_i \rangle, \quad (4.8)$$

où Q_{-m}^j indique l'opérateur moment multipolaire électrique ou magnétique de l'ion et $A(j)$ est un facteur multiplicatif dépendant du type de la radiation, qui se simplifie

lors du calcul de la polarisation.

En appliquant le théorème de Wigner-Eckart, l'élément de matrice de Q_{-m}^j dans l'équation (4.8) s'écrit :

$$\begin{aligned} \langle n_f j_f m_f | Q_{-m}^j | n_i j_i m_i \rangle &= (-1)^{j_f - m_f} \begin{pmatrix} j_f & j & j_i \\ -m_f & -m & m_i \end{pmatrix} \\ &\times \langle n_f j_f || Q^j || n_i j_i \rangle, \end{aligned} \quad (4.9)$$

où $\begin{pmatrix} j_f & j & j_i \\ -m_f & -m & m_i \end{pmatrix}$ désigne le symbole $3j$ et $\langle n_f j_f || Q^j || n_i j_i \rangle$ est un élément de matrice réduit.

Le système d'équations (4.8) et (4.9) injecté successivement dans (4.7) permet d'écrire la matrice densité du photon comme :

$$\begin{aligned} \rho_{\lambda\lambda'}^{\text{ph}} &= \sum_{m_i m_f} N(n_i j_i m_i) \sum_{j j' m m'} \frac{[(2j+1)(2j'+1)]^{1/2}}{4\pi} D_{\lambda m}^{(j)}(\hat{\mathbf{k}}) D_{\lambda' m'}^{(j')}(\hat{\mathbf{k}}) \\ &\times (-1)^{m+m'} A(j) A^*(j') \langle n_f j_f || Q^j || n_i j_i \rangle \langle n_f j_f || Q^{j'} || n_i j_i \rangle^* \\ &\times (-1)^{2j_f - 2m_f} \begin{pmatrix} j_f & j & j_i \\ -m_f & -m & m_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_f & j' & j_i \\ -m_f & -m' & m_i \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.10)$$

On peut noter que $\rho_{\lambda\lambda'}^{\text{ph}}$ est nul si $m \neq m'$ compte tenu des règles de sélection sur les deux symboles $3j$. On peut appliquer dans (4.10) la relation de composition des matrices de rotation [89] :

$$\begin{aligned} D_{\lambda m}^{(j)}(\hat{\mathbf{k}}) D_{\lambda' m'}^{(j')}(\hat{\mathbf{k}}) &= (-1)^{\lambda' - m} \sum_{J M} [4\pi (2J+1)]^{1/2} \begin{pmatrix} j & j' & J \\ \lambda & -\lambda' & M \end{pmatrix} \\ &\times \begin{pmatrix} j & j' & J \\ m & -m & M \end{pmatrix} Y_J^{-M}(\hat{\mathbf{k}}). \end{aligned} \quad (4.11)$$

Si on considère le symbole $3j \begin{pmatrix} j & j' & J \\ m & -m & M \end{pmatrix}$ présent dans l'équation (1.11), les

éléments de la matrice densité de polarisation du photon s'annulent si le nombre quantique M est non nul, ce qui était d'ailleurs prévisible du fait de la symétrie axiale. En effet, les états excités étant axialement symétriques par rapport à la direction du faisceau incident d'électrons, le rayonnement émis doit être axialement symétrique par rapport à cette direction et donc $\rho_{\lambda\lambda'}^{\text{ph}}$ ne doit pas dépendre de l'angle azimuthal φ , celui ci étant contenu dans les harmoniques sphériques $Y_J^{-M}(\hat{\mathbf{k}})$. Précisons que si les différents sous-niveaux magnétiques ont été excités de manière cohérente, alors M serait différent de zéro et la dépendance angulaire du rayonnement émis serait une fonction de l'angle φ .

En utilisant la relation fondamentale des symboles $6j$ en fonction des $3j$:

$$\begin{aligned} & \sum_{m_f m} \begin{pmatrix} j_f & j & j_i \\ -m_f & -m & m_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_f & j' & j_i \\ -m_f & -m & m_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j & j' & J \\ m & -m & 0 \end{pmatrix} \\ & \times (-1)^{-m+2j_f-2m_f} = (-1)^{j'-j+2j_i-j_f-m_i} \begin{pmatrix} J & j_i & j_i \\ 0 & -m_i & m_i \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} j & j_i & j_i \\ j_f & j & j' \end{matrix} \right\} \end{aligned} \quad (4.12)$$

on obtient l'expression de $\rho_{\lambda\lambda'}^{\text{ph}}$ suivante :

$$\begin{aligned} \rho_{\lambda\lambda'}^{\text{ph}} &= \sum_{m_i} N(n_i j_i m_i) \sum_{j j' J} (-1)^{\lambda'} \left[\frac{(2j+1)(2j'+1)}{4\pi} \right]^{1/2} A(j) A^*(j') \\ & \times (-1)^{j'-j+2j_i-j_f-m_i} \begin{pmatrix} j & j' & J \\ \lambda & -\lambda' & M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J & j_i & j_i \\ 0 & -m_i & m_i \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} J & j_i & j_i \\ j_f & j & j' \end{matrix} \right\} \\ & \times \sqrt{2J+1} Y_J^{-M}(\theta) \langle n_f j_f || Q^j || n_i j_i \rangle \langle n_f j_f || Q^{j'} || n_i j_i \rangle^* . \end{aligned} \quad (4.13)$$

Il n'est pas inutile de remarquer que :

$$\sum_{m_i} N(n_i j_i m_i) (-1)^{-m_i} \begin{pmatrix} J & j_i & j_i \\ 0 & -m_i & m_i \end{pmatrix} = 0 \quad (4.14)$$

quel que soit J impair en raison des propriétés de symétrie des symboles $3j$ et

en tenant compte du fait que les états excités $N(n_i j_i m_i)$ et $N(n_i j_i - m_i)$ sont également peuplés. Seuls donc subsistent au niveau de la sommation sur J dans $\rho_{\lambda\lambda'}^{\text{ph}}$ les termes avec J pair. De plus comme on s'intéresse à des transitions dipolaires et quadrupolaires pures la sommation dans (4.13) sur j et j' se réduit à $\delta_{jj'}$. Souvent si le rayonnement provient d'une transition permise par dipôle électrique, on ne retiendra que celui-ci : le quadrupôle magnétique, s'il est aussi permis par les règles de sélection, est négligeable. De même, si le rayonnement émerge d'une transition permise par quadrupôle électrique et par dipôle magnétique, on ne tient compte que du dipôle magnétique.

On obtient finalement comme expression pour les éléments de la matrice densité de polarisation des photons à une constante multiplicative près :

$$\begin{aligned} \rho_{\lambda\lambda'}^{\text{ph}} &= |\langle n_f j_f || Q^j || n_i j_i \rangle|^2 (-1)^{\lambda'} \sum_{m_i} N(n_i j_i m_i) (-1)^{2j_i - j_f - m_i} \sum_{J \text{ pair}} \\ &\times \begin{pmatrix} j & j & J \\ \lambda & -\lambda' & \lambda' - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J & j_i & j_i \\ 0 & -m_i & m_i \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} J & j_i & j_i \\ j_f & j & j \end{matrix} \right\} \\ &\times \sqrt{2J+1} Y_J^{(\lambda-\lambda')}(\theta). \end{aligned} \quad (4.15)$$

J devant être pair et sachant que :

$$\begin{pmatrix} j & j & J \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j & j & J \\ -1 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.16)$$

on a $\rho_{11}^{\text{ph}} = \rho_{-1-1}^{\text{ph}}$. Donc les probabilités de trouver un photon du rayonnement détecté dans les états d'hélicité $\lambda = 1$ et $\lambda = -1$ sont égales. L'expression de ρ_{11}^{ph} est :

$$\begin{aligned} \rho_{11}^{\text{ph}} &= -|\langle n_f j_f || Q^j || n_i j_i \rangle|^2 \sum_{m_i} N(n_i j_i m_i) (-1)^{1-m_i-j_f} \sum_{J \text{ pair}} \begin{pmatrix} j & j & J \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} \\ &\times \begin{pmatrix} J & j_i & j_i \\ 0 & -m_i & m_i \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} J & j_i & j_i \\ j_f & j & j \end{matrix} \right\} \sqrt{2J+1} Y_J^0(\theta). \end{aligned} \quad (4.17)$$

De même, sachant que :

$$\begin{pmatrix} j & j & J \\ 1 & 1 & -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j & j & J \\ -1 & -1 & 2 \end{pmatrix}, \quad (4.18)$$

J étant pair et $Y_j^2(\theta, 0) = Y_j^{-2}(\theta, 0)$, on a $\rho_{1-1}^{\text{ph}} = \rho_{-11}^{\text{ph}}$. L'expression de ρ_{1-1}^{ph} est :

$$\begin{aligned} \rho_{1-1}^{\text{ph}} &= - |\langle n_f j_f || Q^j || n_i j_i \rangle|^2 \sum_{m_i} N(n_i j_i m_i) (-1)^{1-m_i-j_f} \sum_{J_{\text{pair}}} \begin{pmatrix} j & j & J \\ 1 & 1 & -2 \end{pmatrix} \\ &\times \begin{pmatrix} J & j_i & j_i \\ 0 & -m_i & m_i \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} J & j_i & j_i \\ j_f & j & j \end{matrix} \right\} \sqrt{2J+1} Y_j^2(\theta). \end{aligned} \quad (4.19)$$

Afin de décrire l'état de polarisation du photon, il est plus commode d'expliciter sa matrice densité en fonction des paramètres de Stokes [10, 90] :

$$\rho^{\text{ph}} = \frac{I}{2} \begin{pmatrix} 1 + \eta_2 & -\eta_3 + i\eta_1 \\ -\eta_3 - i\eta_1 & 1 - \eta_2 \end{pmatrix} \quad (4.20)$$

où I est l'intensité totale du faisceau de photons, elle est reliée à la somme des éléments diagonaux de ρ^{ph} par la condition de normalisation :

$$I = \text{Tr} \rho^{\text{ph}} = \langle 1 | \rho^{\text{ph}} | 1 \rangle + \langle -1 | \rho^{\text{ph}} | -1 \rangle. \quad (4.21)$$

Considérons un repère xyz avec l'axe z colinéaire à la quantité de mouvement des électrons incidents \mathbf{p} et les axes x et y arbitraires. Le vecteur de polarisation du rayonnement émis est situé sur le plan orthogonal au vecteur d'onde \mathbf{k} . Désignons par $I(\alpha)$ l'intensité transmise par un polariseur dont l'axe de transmission est orienté suivant un angle α par rapport à l'axe x. Alors η_3 représente la polarisation linéaire suivant les axes x et y :

$$\eta_3 = \frac{I(0^\circ) - I(90^\circ)}{I} \quad (4.22)$$

et η_1 représente la polarisation linéaire suivant les directions formant un angle de 45° avec les axes x et y respectivement :

$$\eta_1 = \frac{I(45^\circ) - I(135^\circ)}{I} \quad (4.23)$$

η_2 est le degré de polarisation circulaire :

$$\eta_2 = \frac{I_+ - I_-}{I} \quad (4.24)$$

où I_+ et I_- sont les intensités du rayonnement transmises par des filtres qui ne transmettent que les rayonnements polarisés circulairement droite et gauche.

Le degré de polarisation P du rayonnement émis est défini par :

$$P = \sqrt{\eta_1^2 + \eta_2^2 + \eta_3^2} \quad (4.25)$$

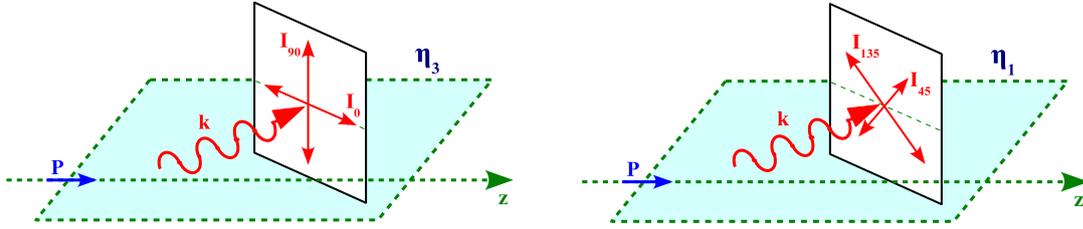


FIGURE 4.2 – Les paramètres de Stokes η_3 et η_1 définis dans les équations (4.22) et (4.23), respectivement, représentés dans le plan perpendiculaire au vecteur d'onde \mathbf{k} .

Pour un faisceau de photons non polarisés, les trois paramètres de Stokes η_1 , η_2 et η_3 sont nuls et $P = 0$; la matrice densité correspondante prend la forme suivante :

$$\rho^{\text{ph}} = \frac{I}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.26)$$

et si le faisceau de photons émis est tel que $P = 1$, on dit qu'il est dans un état pur de polarisation [90].

On peut maintenant déduire les relations entre les paramètres de Stokes et les éléments de la matrice densité

$$\rho^{\text{ph}} = \begin{pmatrix} \rho_{11}^{\text{ph}} & \rho_{1-1}^{\text{ph}} \\ \rho_{-11}^{\text{ph}} & \rho_{-1-1}^{\text{ph}} \end{pmatrix}. \quad (4.27)$$

Par identification à (4.20), on a :

$$I\eta_2 = \rho_{11}^{\text{ph}} - \rho_{-1-1}^{\text{ph}} = 0$$

donc $\eta_2 = 0$, ce qui signifie que le degré de polarisation circulaire est nul. En d'autre terme, le rayonnement émis est composé de photons dans les deux états d'hélicité avec une intensité égale. D'autre part,

$$I\eta_1 = -i(\rho_{1-1}^{\text{ph}} - \rho_{-11}^{\text{ph}}) = 0$$

le paramètre η_1 est donc également nul. Il ne subsiste que

$$I\eta_3 = -\rho_{1-1}^{\text{ph}} - \rho_{-11}^{\text{ph}} = -2\rho_{1-1}^{\text{ph}}$$

soit

$$\eta_3 = -\frac{\rho_{1-1}^{\text{ph}}}{\rho_{11}^{\text{ph}}}. \quad (4.28)$$

En substituant (4.17) et (4.19) dans (4.28), le degré de polarisation linéaire de la radiation émise dans la transition $n_i j_i \rightarrow n_f j_f$ s'exprime en fonction des populations des sous-niveaux magnétiques supérieurs par :

$$P(n_i j_i \rightarrow n_f j_f; \theta) = \pm \eta_3 = \pm \frac{A}{B} \quad (4.29)$$

avec :

$$A = \sum_{m_i, J_{\text{pair}} \geq 2} N(n_i j_i m_i) (-1)^{1-m_i-j_f} \begin{pmatrix} j & j & J \\ 1 & 1 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J & j_i & j_i \\ 0 & -m_i & m_i \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} J & j_i & j_i \\ j_f & j & j \end{Bmatrix} \sqrt{2J+1} Y_J^2(\theta, 0)$$

et

$$B = \sum_{m_i, J_{\text{pair}}} N(n_i j_i m_i) (-1)^{-m_i-j_f} \begin{pmatrix} j & j & J \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J & j_i & j_i \\ 0 & -m_i & m_i \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} J & j_i & j_i \\ j_f & j & j \end{Bmatrix} \sqrt{2J+1} Y_J^0(\theta, 0)$$

où θ est l'angle entre la direction de l'émission radiative et l'axe de quantification qui est la direction des électrons incidents. De plus, dans l'équation (4.29) le signe + s'applique pour les transitions à caractère électrique Ej , alors que le signe - s'applique pour les transitions à caractère magnétique Mj .

A cause des restrictions $J \geq 2$ et $J \leq 2j_i$ imposées par les symboles $3j$ présents dans le coefficient A , l'équation (4.29) s'annule pour $j_i \leq 1/2$. Ceci est évident du fait que la polarisation linéaire d'un rayonnement n'existe que s'il y a inégalité dans les populations des sous-niveaux magnétiques du niveau supérieur.

4.2.2 Degré de polarisation linéaire des raies associées à des transitions dipolaires

Le degré de polarisation linéaire des raies associées à des transitions dipolaires électriques ou magnétiques s'obtient à partir de (4.29) en y mettant $j = 1$ et en remplaçant les expressions explicites des harmoniques sphériques :

$$P(n_i j_i \rightarrow n_f j_f; \theta) = \pm \frac{A'}{B'} \quad (4.30)$$

avec :

$$A' = \sum_{m_i} N(n_i j_i m_i) (-1)^{1-m_i-j_f} \begin{pmatrix} 2 & j_i & j_i \\ 0 & -m_i & m_i \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ j_i & j_i & j_f \end{Bmatrix} \frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{2}} \sin^2 \theta$$

et

$$B' = N(n_i j_i) \frac{(-1)^{2j_i}}{3(2j_i + 1)} - \sum_{m_i} N(n_i j_i m_i) (-1)^{-m_i-j_f} \begin{pmatrix} 2 & j_i & j_i \\ 0 & -m_i & m_i \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ j_i & j_i & j_f \end{Bmatrix} \frac{\sqrt{5}}{2\sqrt{6}} (3 \cos^2 \theta - 1).$$

4.3 Application à la raie Lyman- α_1 de l'ion Fe^{25+}

Le spectre de rayonnement X associé aux transitions à partir des niveaux $n = 2$ vers le niveau fondamental $n = 1$ des ions hydrogénoïdes consiste en trois prin-

principales raies désignées conventionnellement par : Ly- α_1 ($2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$), Ly- α_2 ($2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$) associées à des transitions dipolaires électriques ainsi que la raie M1 ($2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$) associée à une transition dipolaire magnétique (voir figure (4.3)). Les raies Ly- α_2 et M1 ne sont pas polarisées puisqu'elles correspondent à des transitions dont le niveau supérieur possède un moment angulaire total $j_i = 1/2$, seule la raie Ly- α_1 peut donc être polarisée.

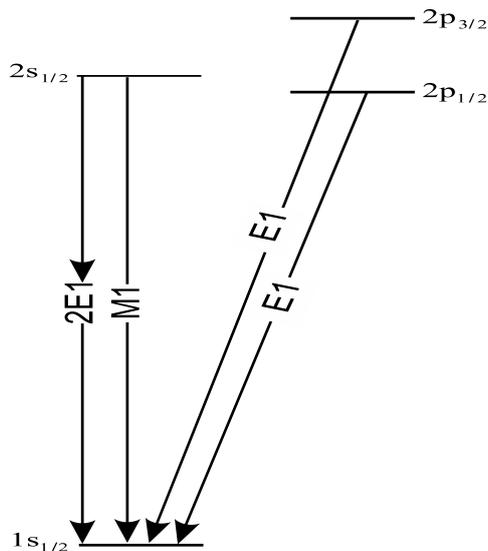


FIGURE 4.3 – Différents modes de désexcitation radiative des niveaux $n = 2$ de l'ion Fe^{25+} .

Le degré de polarisation linéaire de la raie Ly- α_1 s'obtient comme :

$$P_{\text{Ly}\alpha_1}(\theta) = \frac{3(N_{1/2} - N_{3/2}) \sin^2 \theta}{3N_{3/2}(1 + \cos^2 \theta) + N_{1/2}(5 - 3 \cos^2 \theta)} \quad (4.31)$$

après avoir remplacé j_i et j_f dans la formule (4.30) par leurs valeurs $3/2$ et $1/2$, respectivement, et après avoir utilisé les égalités suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{ccc} 1 & 1 & 2 \\ 3/2 & 3/2 & 1/2 \end{array} \right\} = -\frac{1}{5}$$

et

$$\begin{pmatrix} 2 & 3/2 & 3/2 \\ 0 & -m_i & m_i \end{pmatrix} = (-1)^{1-m_i} \frac{3m_i^2 - 2}{\sqrt{30}}.$$

Au niveau de l'équation (1.31), $N_{1/2}$ et $N_{3/2}$ correspondent aux populations des sous-niveaux magnétiques $m_i = 1/2$ et $m_i = 3/2$ du niveau supérieur $j_i = 3/2$ de la raie Ly- α_1 , respectivement.

On peut montrer que le degré de polarisation atteint sa valeur maximale lorsque l'observation s'opère suivant une direction perpendiculaire à la direction des électrons. L'expression de $P_{\text{Ly}\alpha_1}(\theta)$ se réduit pour $\theta = \pi/2$ à :

$$P_{\text{Ly}\alpha_1}(\theta = 90^\circ) = \frac{3(N_{1/2} - N_{3/2})}{5N_{1/2} + 3N_{3/2}}. \quad (4.32)$$

4.4 Rapport des intensités des raies Ly- α

En plus de la polarisation linéaire du rayonnement émis lors de l'émission spontanée d'un état excité suite aux collisions avec un faisceau unidirectionnel d'électrons non polarisés, son intensité peut avoir une distribution angulaire anisotrope. Pour la raie Ly- α_1 , l'intensité correspondante $I_{\text{Ly}\alpha_1}(\theta)$ émise dans une direction faisant un angle θ par rapport à celle des électrons incidents est reliée aux intensités $I_{\parallel}(\theta = 90^\circ)$ et $I_{\perp}(\theta = 90^\circ)$ par :

$$I_{\text{Ly}\alpha_1}(\theta) = I_{\parallel} \sin^2 \theta + I_{\perp} (1 + \cos^2 \theta). \quad (4.33)$$

Elle peut aussi s'écrire en faisant intervenir le degré de polarisation linéaire de la raie Ly- α_1 pour l'angle $\theta = 90^\circ$ définie dans l'équation (4.32), comme :

$$I_{\text{Ly}\alpha_1}(\theta) = I_{\text{Ly}\alpha_1}(90^\circ) (1 - P_{\text{Ly}\alpha_1} \cos^2 \theta). \quad (4.34)$$

Soit $\langle I_{\text{Ly}\alpha_1} \rangle$ l'intensité moyenne de la radiation Ly- α_1 définie par :

$$\langle I_{\text{Ly}\alpha_1} \rangle = \frac{1}{2} \int_0^\pi I_{\text{Ly}\alpha_1}(\theta) \sin \theta d\theta. \quad (4.35)$$

Après substitution de l'équation (4.34) dans (4.35), il est facile d'obtenir :

$$\langle I_{Ly\alpha_1} \rangle = I_{Ly\alpha_1}(90^\circ) \left(1 - \frac{P_{Ly\alpha_1}}{3} \right). \quad (4.36)$$

L'utilisation de (4.36) dans (4.34) permet alors d'exprimer l'intensité de la raie Ly- α_1 émise dans un angle θ en fonction de son intensité moyenne sous la forme :

$$I_{Ly\alpha_1}(\theta) = \langle I_{Ly\alpha_1} \rangle \frac{1 - P_{Ly\alpha_1} \cos^2 \theta}{1 - P_{Ly\alpha_1}/3}. \quad (4.37)$$

En ce qui concerne la raie Ly- α_2 , elle n'est pas polarisée et donc a une distribution angulaire isotrope, c-à-d, $I_{Ly\alpha_2}(\theta) = I_{Ly\alpha_2}$. D'autre part, d'après l'analyse expérimentale des spectres d'émission des ions hydrogénoïdes, les raies Ly- α_2 et M1 sont superposées. Pour l'ion Fe²⁵⁺, par exemple, les raies Ly- α_2 et M1 sont séparées seulement par 0.14 mÅ et donc ne peuvent pas être spectralement résolues [47]. Par conséquent, il est nécessaire de considérer la contribution de la raie M1 dans le calcul du rapport des intensités $I_{Ly\alpha_1}/I_{Ly\alpha_2}$. Similairement à Ly- α_2 , la raie M1 n'est pas polarisée et isotrope. Pour une observation s'opérant suivant une direction perpendiculaire à la direction des électrons incidents, le rapport d'intensité de la raie Ly- α_1 et des raies combinées Ly- α_2 (+M1) est donné par :

$$\frac{I_{Ly\alpha_1}(90^\circ)}{I_{Ly\alpha_2(+M1)}} = \frac{\langle I_{Ly\alpha_1} \rangle}{I_{Ly\alpha_2(+M1)}} \frac{3}{3 - P_{Ly\alpha_1}}. \quad (4.38)$$

4.5 Modèle de population des sous-niveaux magnétiques

Il est important de connaître de manière précise les populations théoriques des sous-niveaux magnétiques des différents niveaux excités des ions hydrogénoïdes, en particulier celles du niveau $n = 2$, pour discuter la polarisation de la raie Ly- α_1 ainsi que le rapport des intensités des raies Ly- α .

En général, les raies X émises par des ions fortement chargés X^{z+} suite aux collisions avec des électrons libres peuvent être produites par une variété de processus atomiques. En plus de la contribution majeure de l'excitation collisionnelle de X^{z+} , la recombinaison à deux et à trois corps de $X^{(z+1)+}$ ainsi que l'ionisation de

couches internes des ions $X^{(z-1)+}$ doivent être considérées. Cependant, pour les ions hydrogénoïdes, la recombinaison diélectronique ne peut pas se produire et les processus responsables de la formation des raies peuvent donc se limiter à l'excitation collisionnelle et à la recombinaison radiative tant que la densité électronique n'est pas trop élevée. Dans ces conditions de densités relativement basses, l'ionisation des ions héliumoïdes et la recombinaison à trois corps jouent un rôle négligeable dans la population des niveaux excités des ions hydrogénoïdes. De plus, l'excitation collisionnelle se produit essentiellement à partir du niveau fondamental $n = 1$.

Nous allons donc considérer l'excitation collisionnelle et la recombinaison radiative dans le peuplement des niveaux $n = 2$ des ions Fe^{25+} directement et par cascades radiatives à partir des niveaux supérieurs $n \geq 3$. Ces cascades qui résultent soit de l'excitation collisionnelle soit de la recombinaison radiative vers ou dans des niveaux supérieurs, respectivement, suivies de désexcitations radiatives, peuvent contribuer fortement aux populations des niveaux $n = 2$.

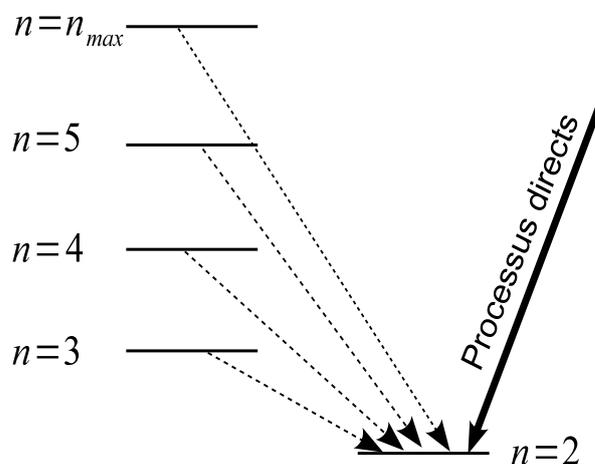


FIGURE 4.4 – Illustration du peuplement des trois niveaux $n = 2$ des ions Fe^{25+} (représentés comme étant dégénérés) par processus directs et par cascades radiatives issues des niveaux supérieurs $n \geq 3$.

Le but de notre travail est d'étudier la polarisation linéaire de la raie $\text{Ly-}\alpha_1$ ainsi que le rapport des intensités des raies $\text{Ly-}\alpha_1$ et $\text{Ly-}\alpha_2(+\text{M1})$ relatifs à l'ion Fe^{25+} .

Pour cet ion, les probabilités de déclin radiatif à partir de tous les niveaux excités sont suffisamment grandes (supérieures à $3.6 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$) de telle sorte qu'on peut négliger leurs désexcitations collisionnelles pour des densités électroniques inférieures à $\sim 10^{16} \text{ cm}^{-3}$.

Nous avons calculé les populations des différents sous-niveaux magnétiques de $n = 2$ de l'ion Fe^{25+} dans le cadre du modèle collisionnel-radiatif. Ces populations s'obtiennent en résolvant un système d'équations d'équilibre statistique, dans lequel chaque équation exprime la population d'un sous-niveau magnétique $|2 j_i m_i\rangle$ donné de la configuration excitée $n = 2$ de l'ion en fonction des populations des autres sous-niveaux qui font peupler ce même sous-niveau par des processus soit collisionnels ou radiatifs. Dans ces équations, les transitions radiatives entre sous-niveaux magnétiques d'un seul et même niveau sont négligées car les probabilités associées sont extrêmement faibles. Ce genre de transition, en vertu des règles de sélection, ne peut être que dipolaire magnétique ou quadropolaire électrique puisque les sous-niveaux possèdent la même parité.

Dans un plasma, l'ensemble des transitions élémentaires qui peuvent se produire nécessite d'être pris en compte pour décrire les populations des niveaux excités des ions. L'évolution temporelle de la population de chaque niveau de chaque ion est gouvernée par la somme des processus de peuplement et de dépeuplement à partir de ou vers les autres niveaux ou ions :

$$\frac{dN_{Z,i}}{dt} = \left(\sum_{Z' j \neq i} C_{Z'j,Zi} N_{Z'j} \right) - \left(\sum_{Z' j \neq i} C_{Zi,Z'j} N_{Zi} \right), \quad (4.39)$$

où les $C_{Z'j,Zi}$ sont les taux de transition du niveau j de l'ion Z' vers le niveau i de l'ion Z . S'il y a état stationnaire du plasma, les peuplement et dépeuplement s'équilibrent pour chaque état atomique i : $dN_{Z,i}/dt = 0$.

En appliquant le théorème de Wigner-Eckart, les probabilités de transition radiative spontanée entre sous-niveaux magnétiques de niveaux distincts peuvent être ramenées aux probabilités de transition entre niveaux correspondants :

$$A(n_i j_i m_i \rightarrow n_f j_f m_f) = \langle j_f m_f j (m_i - m_f) | j_i m_i \rangle^2 A(n_i j_i \rightarrow n_f j_f). \quad (4.40)$$

Si on somme les composantes de probabilités de transition sur les états inférieurs, on peut facilement vérifier que

$$\sum_{m_f} A(n_i j_i m_i \rightarrow n_f j_f m_f) = A(n_i j_i \rightarrow n_f j_f).$$

Le taux de désexcitation par émission spontanée d'un sous-niveau particulier vers un niveau ne dépend pas de ce sous-niveau initial ; il est égal au taux de désexcitation total du niveau.

Si on admet que la population de l'état supérieur $n_i j_i m_i$ est indépendante du signe de m_i , alors on peut montrer que la quantité $\sum_{m_i} N(n_i j_i m_i) \times A(n_i j_i m_i \rightarrow n_k j_k m_k)$ ne dépend pas du signe de m_k et de ce fait $N(n_k j_k m_k) = N(n_k j_k - m_k)$: il y a conservation de l'alignement lors d'une cascade radiative. On définit aussi le rapport de branchement pour la transition radiative $n_i j_i m_i \rightarrow n_f j_f m_f$ par l'expression :

$$B(n_i j_i m_i \rightarrow n_f j_f m_f) = \frac{A(n_i j_i m_i \rightarrow n_f j_f m_f)}{\sum_{n_k j_k} A(n_i j_i \rightarrow n_k j_k)}. \quad (4.41)$$

Il faut tout de même mentionner que les probabilités de transition radiative sont des quantités très importantes qui permettent de déduire des caractéristiques atomiques telles que les durées de vie des états excités et les intensités des raies spectrales. Par exemple, l'intensité moyenne d'une raie émise lors de la transition d'un ion d'un état excité initial i d'énergie E_i vers un état final f d'énergie E_f est donnée par :

$$\langle I_{if} \rangle = N_i A(n_i j_i \rightarrow n_f j_f) \hbar \omega \quad (4.42)$$

où $A(n_i j_i \rightarrow n_f j_f)$ est la probabilité de la transition radiative $i \rightarrow f$, N_i est la population des ions dans l'état initial supérieur i et $\omega = (E_i - E_f)/\hbar$ est la fréquence de la transition.

Dans l'étude actuelle, on s'intéresse particulièrement aux raies émises suite aux transitions radiatives entre les niveaux $n = 2 \rightarrow n = 1$ de l'ion Fe^{25+} . A cet effet, et puisque nous avons à faire à un faisceau monoénergétique et unidirectionnel d'électrons ayant une densité assez faible, on suppose que l'excitation collisionnelle

des ions hydrogéoïdes se produit essentiellement à partir du niveau fondamental. Dans ce cas, les populations des différents sous-niveaux magnétiques de la couche $n = 2$ de Fe^{25+} sont alors déterminées par excitation électronique et recombinaison radiative vers le niveau $n = 2$. Ceci étant, nous pouvons alors écrire les équations qui régissent les différentes populations des niveaux excités $2p$ comme suit :

$$\begin{aligned}
N(2p_{3/2} m_i) A(2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}) &= n_e N_{\text{Fe}^{26+}} \sigma_{\text{eff}}^{\text{RR}}(2p_{3/2} m_i) \\
&\quad + n_e N_{\text{Fe}^{25+}} \sigma_{\text{eff}}^{\text{IE}}(1s_{1/2} \rightarrow 2p_{3/2} m_i), \\
N(2p_{1/2}) A(2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}) &= n_e N_{\text{Fe}^{26+}} \sigma_{\text{eff}}^{\text{RR}}(2p_{1/2}) \\
&\quad + n_e N_{\text{Fe}^{25+}} \sigma_{\text{eff}}^{\text{IE}}(1s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}), \quad (4.43)
\end{aligned}$$

et l'équation qui régit la population du niveau $2s$:

$$\begin{aligned}
N(2s_{1/2}) (A(\text{M1}) + A(\text{2E1})) &= n_e N_{\text{Fe}^{26+}} \sigma_{\text{eff}}^{\text{RR}}(2s_{1/2}) \\
&\quad + n_e N_{\text{Fe}^{25+}} \sigma_{\text{eff}}^{\text{IE}}(1s_{1/2} \rightarrow 2s_{1/2}), \quad (4.44)
\end{aligned}$$

où A représente la probabilité de transition radiative, n_e correspond à la densité électronique du faisceau incident, $N_{\text{Fe}^{26+}}$ et $N_{\text{Fe}^{25+}}$ sont, respectivement, les densités des ions nus et hydrogéoïdes de Fe, et $\sigma_{\text{eff}}^{\text{IE}}$ et $\sigma_{\text{eff}}^{\text{RR}}$ représentent les sections efficaces effectives partielles associées aux processus d'excitation et de recombinaison radiative, respectivement, dans lesquelles nous avons tenu compte des effets de cascades venant des niveaux supérieurs $n \geq 3$. Notons que la transition radiative $2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ peut se produire non seulement par transition dipolaire magnétique (M1) mais aussi par émission à deux photons (2E1) avec une probabilité qui est égale, dans le cas de Fe^{25+} , à la valeur de $2.49 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ [48].

Dans le cas des états $2p_{3/2}$, les sections efficaces effectives partielles s'expriment comme :

$$\begin{aligned}
\sigma_{\text{eff}}^{\text{P}}(2p_{3/2} m_i) &= \sigma^{\text{P}}(2p_{3/2} m_i) + \sum_{n=3}^{n_{\text{max}}} \sum_{l_j} B(n l j \rightarrow 2p_{3/2}) \\
&\quad \times \sum_{m_j} \langle 3/2 m_i 1 (m_j - m_i) | j m_j \rangle^2 \sigma_{\text{eff}}^{\text{P}}(n l j m_j), \quad (4.45)
\end{aligned}$$

où l'indice supérieur "P" est relatif à l'excitation collisionnelle ou à la recombinaison radiative et $B(nlj \rightarrow 2p_{3/2})$ désigne le rapport de branchement pour la transition radiative du niveau cascasant nlj ($n \geq 3$) vers le niveau $2p_{3/2}$. Dans l'équation (4.45), le premier terme à droite de l'égalité correspond aux sections efficaces directes et le second terme donne la contribution des cascades radiatives. D'autre part, les corrections aux cascades à partir des niveaux $n+1 \leq n \leq n_{\max}$ doivent aussi être prises en compte dans la section efficace $\sigma_{\text{eff}}^{\text{P}}(nljm_j)$. De plus, on assume que tous les niveaux cascadants déclinent radiativement vers les niveaux excités inférieurs par transition dipolaire électrique. Les transitions interdites M1, E2 et M2 peuvent se produire essentiellement vers le niveau fondamental. Notons aussi que dans les équations (4.43) et (4.44), nous avons utilisé les sections efficaces d'excitation et de recombinaison radiative au lieu des coefficients des taux correspondants à ces processus. En effet, comme le faisceau incident d'électrons est considéré monoénergétique dans cette étude, le coefficient de taux d'un processus est donné par le produit de la vitesse de l'électron par la section efficace : $C = v\sigma$, la vitesse v se simplifie dans les expressions du degré de polarisation et du rapport d'intensité.

En considérant l'équilibre d'ionisation pour une énergie des électrons incidents supérieure au seuil d'ionisation du niveau fondamental $1s$, le rapport d'abondance des ions nus Fe^{26+} par rapport aux ions hydrogénéoïdes Fe^{25+} , $\rho = N_{\text{Fe}^{26+}}/N_{\text{Fe}^{25+}}$, est déterminé par :

$$\rho = \frac{\sigma^{\text{II}}}{\sigma_{\text{tot}}^{\text{RR}}}, \quad (4.46)$$

où σ^{II} est la section efficace d'ionisation des ions hydrogénéoïdes à partir du niveau fondamental $1s_{1/2}$ et $\sigma_{\text{tot}}^{\text{RR}}$ est la section efficace totale de recombinaison radiative des ions nus obtenue en sommant sur tous les niveaux hydrogénéoïdes recombinaisonnés y compris le niveau fondamental $1s_{1/2}$. Les processus d'échange de charge dans les collisions ion-ion et ion-atome sont ignorés dans notre étude.

Rappelons que la raie Ly- α_1 émise par les ions hydrogénéoïdes correspond à la transition $2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$. C'est une transition dipolaire électrique, E1, entièrement permise. La probabilité de transition est proportionnelle à Z^4 où Z est la charge

nucléaire de l'ion [3]. Dans le cas des ions Fe^{25+} sa valeur est $2.83 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$. En utilisant la première équation du système (4.43), le degré de polarisation linéaire (4.32) s'exprime ainsi :

$$P_{\text{Ly}\alpha_1} = \frac{3 (\sigma_{\text{eff}}^c(2p_{3/2} 1/2) - \sigma_{\text{eff}}^c(2p_{3/2} 3/2))}{5 \sigma_{\text{eff}}^c(2p_{3/2} 1/2) + 3 \sigma_{\text{eff}}^c(2p_{3/2} 3/2)}, \quad (4.47)$$

avec

$$\sigma_{\text{eff}}^c(2p_{3/2} m_i) = \sigma_{\text{eff}}^{\text{IE}}(2p_{3/2} m_i) + \rho \sigma_{\text{eff}}^{\text{RR}}(2p_{3/2} m_i).$$

Il serait intéressant aussi de mentionner que suite aux lois de conservation du moment angulaire et de la parité, la raie $\text{Ly}-\alpha_1$ peut se produire dans les ions hydrogénoïdes soit par transition dipolaire électrique E1 ou quadrupolaire magnétique M2. Cependant, pour les ions hydrogénoïdes jusqu'aux éléments lourds, l'interaction magnétique est beaucoup plus faible que celle électrique malgré le fait que la probabilité de transition pour le mode M2 est proportionnelle à Z^8 et donc croit rapidement avec l'augmentation de la charge nucléaire de l'ion comparée à la transition par mode E1 qui est proportionnelle à Z^4 . Par exemple, même pour l'ion hydrogénoïde U^{91+} , la probabilité de transition par dipôle électrique est de $3.92 \times 10^{16} \text{ s}^{-1}$ alors que celle par quadrupôle magnétique est de $2.82 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$ et donc contribue de moins de 1% à la probabilité totale de la transition radiative $2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ [69].

Nous pouvons exprimer aussi le rapport de l'intensité moyenne de la raie $\text{Ly}-\alpha_1$ sur l'intensité (isotrope) de la raie combinée $\text{Ly}-\alpha_2(+\text{M1})$ à l'aide de la définition (4.42), ce qui permet d'écrire :

$$\begin{aligned} & \frac{\langle I_{\text{Ly}\alpha_1} \rangle}{I_{\text{Ly}\alpha_2(+\text{M1})}} \\ &= \frac{\sigma_{\text{eff}}^{\text{IE}}(2p_{3/2}) + \rho \sigma_{\text{eff}}^{\text{RR}}(2p_{3/2})}{\sigma_{\text{eff}}^{\text{IE}}(2p_{1/2}) + B_{\text{M1}} \sigma_{\text{eff}}^{\text{IE}}(2s_{1/2}) + \rho \left[\sigma_{\text{eff}}^{\text{RR}}(2p_{1/2}) + B_{\text{M1}} \sigma_{\text{eff}}^{\text{RR}}(2s_{1/2}) \right]}, \quad (4.48) \end{aligned}$$

où

$$B_{\text{M1}} = \frac{A(\text{M1})}{A(\text{M1}) + A(2\text{E1})} \quad (4.49)$$

représente le rapport de branchement du déclin $2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ par transition M1. Mentionnons que dans l'équation (4.48) les populations des niveaux $2p_{3/2}$, $2p_{1/2}$ et $2s_{1/2}$ sont déduites du système d'équations (4.43) et (4.44).

Chapitre 5

Recombinaison radiative : Résultats et discussions

Dans notre travail, nous nous intéressons au calcul de la polarisation linéaire de la raie Ly- α_1 ainsi que le rapport des intensités des raies Ly- α_1 et Ly- α_2 (+M1) pour l'ion émetteur Fe²⁵⁺. Pour cela, il y a lieu de déterminer les populations des différents sous-niveaux magnétiques de 2p_{3/2} et celles des niveaux 2p_{1/2} et 2s_{1/2} qui interviennent dans les équations (4.43) et (4.44). Dans le présent chapitre, nous considérons la recombinaison radiative comme seul processus de peuplement des niveaux excités. Le processus d'excitation collisionnelle sera pris en compte dans le prochain chapitre.

Nous allons dans les sous-sections qui vont suivre présenter les résultats que nous avons obtenus pour les sections efficaces partielles de recombinaison radiative dans la théorie relativiste exacte tout en faisant une comparaison avec les résultats obtenus par d'autres auteurs. Nous donnons également nos sections efficaces partielles de recombinaison radiative calculées dans l'approximation dipolaire non-relativiste. Afin d'estimer le domaine de validité de cette approximation, nous présentons une comparaison entre les sections relativistes et non-relativistes pour différents ions ayant un numéro atomique compris entre $Z = 10$ (néon) et $Z = 92$ (uranium). Nous effectuons également une comparaison entre les deux types de résultats concernant les degrés de polarisation linéaire de la raie Ly- α_1 et ceci pour plusieurs valeurs de

l'énergie de l'électron incident exprimées en unités de seuil d'ionisation.

5.1 Sections efficaces partielles de recombinaison radiative

5.1.1 Résultats du traitement relativiste exact

Le calcul relativiste exact des sections efficaces de recombinaison radiative dans des sous-niveaux magnétiques des ions hydrogénoïdes recombinaison, données dans l'équation (3.30), nécessite l'évaluation des éléments de matrice réduits associés aux opérateurs multipolaires électrique et magnétique du photon relatifs à la transition de l'électron de l'état libre à l'état lié. Ces éléments de matrice libre-lié peuvent être exprimés, en vertu de l'équation (3.26), en fonction des intégrales radiales, des coefficients de Clebsch-Gordan et des symboles $9j$. Nous avons calculé les intégrales radiales définies dans l'équation (3.24) à l'aide du code DIRAC développé par Fritzsche et collaborateurs [91] et conçu pour l'étude des propriétés et du comportement dynamique des ions hydrogénoïdes. Effectivement, grâce à ce code on a pu générer les fonctions d'onde relativistes exactes décrivant l'électron dans l'état initial du continuum ainsi que dans l'état lié hydrogénoïde final. Le calcul des coefficients angulaires de l'algèbre de Racah a été réalisé en utilisant le code RACAH [92].

Dans les tableaux (5.1) et (5.2), nous présentons nos résultats des sections efficaces de recombinaison radiative dans les différents sous-niveaux magnétiques des états excités $n = 2$ et $n = 3$ de l'ion Fe^{25+} , et ceci pour des énergies des électrons incidents dans les domaines $1 \leq \varepsilon \leq 6$ keV et $7 \leq \varepsilon \leq 50$ keV, respectivement. Afin de vérifier partiellement l'exactitude de nos résultats, nous les comparons dans le tableau (5.3) avec ceux présentés par Ichihara et Eichler [65] concernant les sections efficaces de recombinaison radiative dans les états nlj (sommées sur les m_j) de l'ion Fe^{25+} avec $n \leq 3$. Ces deux auteurs ont obtenus leurs résultats dans un formalisme relativiste exact en utilisant deux codes indépendants KONT et RADIAL pour générer leurs fonctions d'onde électroniques. En examinant le tableau (5.3),

nous remarquons qu'il y a un accord parfait entre nos résultats désignés (BI) et ceux obtenus par Ichihara et Eichler désignés (IE).

Dans le but d'étudier l'effet des ordres multipolaires supérieurs dans le développement de l'interaction électron-photon, nous avons également reporté dans les tableaux (5.1) et (5.2) les sections efficaces partielles de recombinaison radiative calculées dans l'approximation dipolaire électrique obtenues en gardant juste la contribution du multipôle électrique $\mathbf{A}_L(e)$ avec $L = 1$ (premières lignes), et dans la théorie relativiste exacte en considérant tous les multipôles électriques et magnétiques (deuxièmes lignes). En faisant une comparaison entre les deux ensembles de résultats, on constate, comme prévu, que la contribution des termes supérieurs autres que E1 dans les sections efficaces de recombinaison radiative est insignifiante pour les faibles énergies électroniques mais elle peut devenir importante pour des énergies plus élevées. En effet, on constate que les différences entre les deux calculs ne dépassent pas 4% pour $n = 2$ et 7% pour $n = 3$ dans le domaine d'énergie $1 \leq \varepsilon \leq 7$ keV. Par ailleurs, pour la plus grande énergie considérée, à savoir 50 keV, et pour les sous-niveaux magnétiques de $n = 2$, la contribution majeure des multipôles supérieurs intervient pour $2p_{3/2} m = 1/2$ où la section efficace de recombinaison radiative est augmentée de $\sim 45\%$. Pour les autres sous-niveaux magnétiques de $n = 2$, l'inclusion des multipôles supérieurs fait augmenter les sections efficaces de $\sim 15\%$ pour $2s_{1/2} m = 1/2$ et $2p_{3/2} m = 3/2$, et de 31% pour $2p_{1/2} m = 1/2$. Il est utile de mentionner que l'inclusion des multipôles supérieurs tend à augmenter l'alignement du niveau $2p_{3/2}$ puisque le rapport des sections efficaces $\sigma^{\text{RR}}(2p_{3/2} m = 1/2)/\sigma^{\text{RR}}(2p_{3/2} m = 3/2)$ est augmenté d'un facteur de 1.26 à $\varepsilon = 50$ keV. En ce qui concerne les sous-niveaux magnétiques de $n = 3$, l'augmentation des sections efficaces due aux multipôles supérieurs peut atteindre les 67% pour $3d_{5/2} m = 1/2$. Notons que $\sigma^{\text{RR}}(3d_{5/2} m = 5/2)$ est strictement nul dans l'approximation dipolaire électrique et est négligeable lorsque les termes multipolaires supérieurs sont inclus. Ceci s'applique aussi pour toutes les sections efficaces de recombinaison radiative σ^{RR} avec $m \geq 5/2$.

Vu l'importance des transitions radiatives dans le peuplement des états excités,

TABLE 5.1 – Sections efficaces partielles (en barns) pour la recombinaison radiative des ions nus Fe^{26+} dans différents sous-niveaux magnétiques des états excités $n=2$ de Fe^{25+} , pour des énergies des électrons incidents comprises entre 1 et 6 keV. Les résultats de la première et de la deuxième ligne correspondent aux sections efficaces directes calculées dans l’approximation dipolaire électrique et dans la théorie relativiste exacte, respectivement. Les résultats dans la troisième ligne représentent les sections efficaces effectives incluant les contributions des cascades radiatives venant des niveaux supérieurs $n=3-6$. $x[y]$ désigne $x \times 10^y$.

Niveau excité	ε (keV)			
	1	2	3	6
$2s_{1/2} m=1/2$	1.08[+2]	5.04[+1]	3.13[+1]	1.28[+1]
	1.08[+2]	5.05[+1]	3.14[+1]	1.30[+1]
	1.30[+2]	5.82[+1]	3.53[+1]	1.40[+1]
$2p_{1/2} m=1/2$	7.17[+1]	2.60[+1]	1.33[+1]	3.55
	7.26[+1]	2.65[+1]	1.36[+1]	3.70
	1.26[+2]	4.23[+1]	2.13[+1]	5.99
$2p_{3/2} m=1/2$	1.15[+2]	3.99[+1]	1.96[+1]	4.78
	1.16[+2]	4.05[+1]	2.00[+1]	4.99
	1.91[+2]	6.12[+1]	2.95[+1]	7.62
$2p_{3/2} m=3/2$	2.30[+1]	9.84	5.63	1.86
	2.36[+1]	1.01[+1]	5.80	1.93
	5.65[+1]	2.17[+1]	1.21[+1]	4.10

Suite du tableau (5.1) mais avec les sous-niveaux magnétiques des états excités $n=3$.

Niveau excité	ε (keV)			
	1	2	3	6
$3s_{1/2} m=1/2$	3.56[+1]	1.63[+1]	1.00[+1]	3.98
	3.56[+1]	1.64[+1]	1.00[+1]	4.03
	3.86[+1]	1.74[+1]	1.06[+1]	4.17
$3p_{1/2} m=1/2$	2.71[+1]	9.77	4.94	1.30
	2.73[+1]	9.88	5.02	1.34
	3.59[+1]	1.26[+1]	6.40	1.78
$3p_{3/2} m=1/2$	4.47[+1]	1.52[+1]	7.34	1.75
	4.49[+1]	1.53[+1]	7.46	1.82
	5.67[+1]	1.89[+1]	9.14	2.31
$3p_{3/2} m=3/2$	8.14	3.64	2.11	6.99[-1]
	8.25	3.70	2.16	7.19[-1]
	1.40[+1]	5.86	3.35	1.14
$3d_{3/2} m=1/2$	1.70[+1]	4.00	1.49	2.16[-1]
	1.73[+1]	4.10	1.55	2.32[-1]
	2.32[+1]	4.94	1.78	2.53[-1]
$3d_{3/2} m=3/2$	1.70	4.72[-1]	1.94[-1]	3.29[-2]
	1.74	4.88[-1]	2.02[-1]	3.51[-2]
	2.84	6.56[-1]	2.53[-1]	4.13[-2]
$3d_{5/2} m=1/2$	2.08[+1]	4.71	1.71	2.38[-1]
	2.11[+1]	4.84	1.78	2.57[-1]
	2.88[+1]	5.91	2.07	2.83[-1]
$3d_{5/2} m=3/2$	6.78	1.85	7.50[-1]	1.23[-1]
	6.91	1.89	7.73[-1]	1.29[-1]
	9.53	2.28	8.84[-1]	1.41[-1]
$3d_{5/2} m=5/2$	0.00	0.00	0.00	0.00
	1.63[-2]	6.12[-3]	3.07[-3]	7.29[-4]
	2.04[-2]	4.05[-2]	1.55[-2]	3.18[-3]

TABLE 5.2 – Même légende que celle du tableau (5.1) mais avec des énergies de l'électron incident situées au dessus du seuil d'excitation de la transition $n = 1 \rightarrow n = 2$, dans le domaine 7 – 50 keV.

Niveau excité	ε (keV)				
	7	10	15	25	50
$2s_{1/2} m = 1/2$	1.03[+1]	6.07	3.17	1.29	3.26[-1]
	1.05[+1]	6.23	3.30	1.38	3.78[-1]
	1.12[+1]	6.60	3.45	1.43	3.87[-1]
$2p_{1/2} m = 1/2$	2.57	1.17	4.43[-1]	1.18[-1]	1.68[-2]
	2.69	1.24	4.85[-1]	1.37[-1]	2.20[-2]
	4.45	2.20	9.61[-1]	3.28[-1]	7.28[-2]
$2p_{3/2} m = 1/2$	3.38	1.44	5.10[-1]	1.24[-1]	1.54[-2]
	3.55	1.55	5.70[-1]	1.49[-1]	2.23[-2]
	5.60	2.61	1.09	3.56[-1]	7.68[-2]
$2p_{3/2} m = 3/2$	1.41	7.07[-1]	2.96[-1]	8.69[-2]	1.33[-2]
	1.47	7.40[-1]	3.14[-1]	9.42[-2]	1.53[-2]
	3.19	1.71	8.09[-1]	2.96[-1]	6.95[-2]

Suite du tableau (5.2) mais avec les sous-niveaux magnétiques des états excités $n=3$.

Niveau excité	ε (keV)				
	7	10	15	25	50
$3s_{1/2} m=1/2$	3.19	1.86	9.63[-1]	3.88[-1]	9.73[-2]
	3.24	1.91	1.00	4.16[-1]	1.13[-1]
	3.34	1.95	1.02	4.21[-1]	1.14[-1]
$3p_{1/2} m=1/2$	9.37[-1]	4.22[-1]	1.59[-1]	4.22[-2]	5.94[-3]
	9.74[-1]	4.46[-1]	1.73[-1]	4.84[-2]	7.74[-3]
	1.31	6.33[-1]	2.67[-1]	8.63[-2]	1.78[-2]
$3p_{3/2} m=1/2$	1.23	5.23[-1]	1.83[-1]	4.42[-2]	5.48[-3]
	1.29	5.58[-1]	2.03[-1]	5.29[-2]	7.84[-3]
	1.68	7.62[-1]	3.04[-1]	9.34[-2]	1.86[-2]
$3p_{3/2} m=3/2$	5.28[-1]	2.62[-1]	1.08[-1]	3.16[-2]	4.79[-3]
	5.45[-1]	2.73[-1]	1.14[-1]	3.40[-2]	5.47[-3]
	8.83[-1]	4.63[-1]	2.12[-1]	7.40[-2]	1.62[-2]
$3d_{3/2} m=1/2$	1.35[-1]	4.34[-2]	1.10[-2]	1.72[-3]	1.15[-4]
	1.47[-1]	4.85[-2]	1.29[-2]	2.23[-3]	1.88[-4]
	1.59[-1]	5.18[-2]	1.37[-2]	2.40[-3]	2.12[-4]
$3d_{3/2} m=3/2$	2.12[-2]	7.29[-3]	1.98[-3]	3.45[-4]	2.78[-5]
	2.28[-2]	8.03[-3]	2.27[-3]	4.24[-4]	3.96[-5]
	2.68[-2]	9.46[-3]	2.75[-3]	5.53[-4]	6.23[-5]
$3d_{5/2} m=1/2$	1.48[-1]	4.65[-2]	1.15[-2]	1.75[-3]	1.14[-4]
	1.61[-1]	5.24[-2]	1.37[-2]	2.33[-3]	1.91[-4]
	1.76[-1]	5.66[-2]	1.47[-2]	2.52[-3]	2.18[-4]
$3d_{5/2} m=3/2$	7.87[-2]	2.64[-2]	6.92[-3]	1.13[-3]	7.94[-5]
	8.34[-2]	2.86[-2]	7.81[-3]	1.38[-3]	1.17[-4]
	9.03[-2]	3.08[-2]	8.44[-3]	1.53[-3]	1.41[-4]
$3d_{5/2} m=5/2$	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
	5.05[-4]	2.02[-4]	6.44[-5]	1.34[-5]	1.39[-6]
	2.25[-3]	1.00[-3]	3.95[-4]	1.17[-4]	2.14[-5]

TABLE 5.3 – Comparaison de nos résultats (désignées BI) des sections efficaces de recombinaison radiative (en barns) dans les états nl avec $n = 2$ et $n = 3$ de l'ion Fe^{25+} , avec ceux obtenus par Ichihara et Eichler [65] (désignés IE), pour deux valeurs de l'énergie cinétique de l'électron incident de 1 et 20 keV.

Niveau excité	ε (keV)			
	1		20	
	BI	IE	BI	IE
$2s_{1/2}$	1.08[+2]	1.08[+2]	2.04[+0]	2.04[+0]
$2p_{1/2}$	7.26[+1]	7.26[+1]	2.40[-1]	2.40[-1]
$2p_{3/2}$	6.98[+1]	6.98[+1]	2.16[-1]	2.16[-1]
$3s_{1/2}$	3.56[+1]	3.56[+1]	6.15[-1]	6.16[-1]
$3p_{1/2}$	2.73[+1]	2.73[+1]	8.53[-2]	8.53[-2]
$3p_{3/2}$	2.65[+1]	2.66[+1]	7.73[-2]	7.74[-2]
$3d_{3/2}$	9.51[+0]	9.51[+0]	2.87[-3]	2.87[-3]
$3d_{5/2}$	9.34[+0]	9.35[+0]	2.70[-3]	2.71[-3]

on a aussi reporté dans les tableaux (5.1) et (5.2) (troisièmes lignes) les sections efficaces effectives (c.f. Eq (4.45)) de recombinaison radiative dans les sous-niveaux magnétiques de $n = 2$ et $n = 3$, en incluant les contributions des cascades radiatives issues des 172 sous-niveaux magnétiques avec $3 \leq n \leq 6$ dans le cas $n = 2$ et des 154 sous-niveaux magnétiques avec $4 \leq n \leq 6$ dans le cas $n = 3$. Il convient de mentionner que nous avons obtenu ces résultats en utilisant les sections efficaces directes de recombinaison radiative calculées dans la théorie relativiste exacte. De plus, toutes les probabilités de transitions radiatives issues de tous les sous-niveaux magnétiques excités considérés dans Fe^{25+} ont été calculées en utilisant le code FAC (Flexible Atomic Code) développé par Gu [93] (voir Annexe B). Notre restriction des sous-niveaux cascadants à $n_{\text{max}} = 6$ peut être justifiée dans la mesure où les sections efficaces directes de recombinaison radiative décroissent rapidement en fonction de n en suivant un comportement selon n^{-3} [61]. Par conséquent, la contribution des cascades à partir de $n \geq 7$ devrait être très petite et donc peut être négligée.

Comme il peut être remarqué par comparaison des deuxièmes et troisièmes lignes des tableaux (5.1) et (5.2), la contribution des cascades dans le niveau $2s_{1/2}$ décroît à mesure que l'énergie de l'électron augmente et la plus grande différence qui existe entre les deux résultats ne dépasse pas 20% dans le domaine d'énergie considéré. Dans le cas des niveaux $2p_{1/2}$ et $2p_{3/2}$ la contribution des cascades est plus importante, beaucoup plus pour $2p_{3/2}$ que pour $2p_{1/2}$. Pour l'énergie $\varepsilon = 50$ keV, la contribution des cascades à la section efficace de recombinaison radiative dans $2p_{3/2}$ atteint 300%! On remarque aussi d'après les résultats des tableaux (5.1) et (5.2) que les cascades apportent une contribution plus importante pour le sous-niveau magnétique $2p_{3/2} m = 3/2$ que pour l'autre $m = 1/2$. Il en résulte ainsi une diminution de l'alignement du niveau $2p_{3/2}$, qui tend à s'amplifier avec l'énergie de l'électron ε .

Dans le tableau (5.4), nous présentons les valeurs obtenues pour le coefficient de l'alignement direct et effectif du niveau $2p_{3/2}$ pour différentes énergies de l'électron incident. Ce coefficient est défini par :

TABLE 5.4 – Valeurs obtenues pour le coefficient d’alignement direct \mathcal{A}_2^d et effectif \mathcal{A}_2^e du niveau $2p_{3/2}$ de Fe^{25+} , pour diverses valeurs de l’énergie de l’électron incident de 1 à 50 keV.

ε (keV)	\mathcal{A}_2^d	\mathcal{A}_2^e	$\mathcal{A}_2^d/\mathcal{A}_2^e$
1	-0.66	-0.54	1.22
5	-0.47	-0.33	1.42
10	-0.35	-0.21	1.67
20	-0.25	-0.11	2.27
50	-0.19	-0.05	3.80

$$\mathcal{A}_2 = \frac{\sigma^{\text{RR}}(2p_{3/2} m = 3/2) - \sigma^{\text{RR}}(2p_{3/2} m = 1/2)}{\sigma^{\text{RR}}(2p_{3/2} m = 3/2) + \sigma^{\text{RR}}(2p_{3/2} m = 1/2)}. \quad (5.1)$$

Nous remarquons, d’après les résultats du tableau (5.4), que le coefficient d’alignement est négatif pour toutes les énergies considérées de l’électron incident, ce qui signifie qu’il y a une population prédominante des sous-niveaux avec $|m = 1/2|$ du niveau $2p_{3/2}$. De plus, en comparant les valeurs de la deuxième et la troisième colonne du tableau (5.4), on voit clairement que les cascades radiatives issues des niveaux excités supérieurs ont pour effet de réduire considérablement le coefficient d’alignement. Cette réduction est d’autant plus importante que l’énergie de l’électron incident croît. En effet, le rapport $\mathcal{A}_2^d/\mathcal{A}_2^e$ augmente de 1.22 à 3.80 dans le domaine d’énergie considéré, soit de 1 à 50 keV.

Finalement, nous comparons dans le tableau (5.5) nos valeurs des sections efficaces de recombinaison radiative dans les différents sous-niveaux magnétiques de $n = 2$ et dans l’état $3p$ avec celles déduites des résultats de Scofield [31], pour deux énergies de l’électron incident de 5 et 10 keV. Notons que Scofield a aussi uti-

lisé un traitement purement relativiste tenant compte de tous les multipôles. Cette comparaison est effectuée aussi bien pour les sections efficaces directes (premières lignes) que celles effectives (deuxièmes lignes). Par ailleurs, les calculs des sections effectives élaborés par Scofield ont été effectués en considérant tous les sous-niveaux magnétiques supérieurs avec $n \leq 5$. A partir du tableau (5.5) il apparaît un bon accord entre nos résultats des sections efficaces directes et ceux de Scofield, les différences n'excèdent pas les 3.2% et 3.7% pour les sous-niveaux magnétiques de $n = 2$ et $n = 3$, respectivement. Pour les sections efficaces effectives l'accord est meilleur que 5.5% pour les sous-niveaux magnétiques de $n = 2$ mais la différence tend à augmenter pour $n = 3$ qui atteint les 19.6%.

TABLE 5.5 – Comparaison de nos résultats des sections efficaces partielles directes (premières lignes) et effectives (deuxièmes lignes) de recombinaison radiative (en barns) avec ceux obtenus par Scofield [31], pour deux valeurs de l'énergie cinétique de l'électron incident de 5 et 10 keV.

Niveau excité	ε (keV)			
	5		10	
	Nous	[31]	Nous	[31]
$2s_{1/2} m=1/2$	16.5	16.8	6.23	6.32
	18.0	18.0	6.60	6.59
$2p_{1/2} m=1/2$	5.32	5.49	1.24	1.28
	8.44	8.81	2.20	2.32
$2p_{3/2} m=1/2$	7.36	7.59	1.55	1.60
	11.0	11.4	2.61	2.72
$2p_{3/2} m=3/2$	2.63	2.71	0.74	0.76
	5.51	5.76	1.71	1.80
$3p_{1/2} m=1/2$	1.94	1.97	0.45	0.45
	2.53	2.29	0.63	0.55
$3p_{3/2} m=1/2$	2.69	2.75	0.56	0.57
	3.37	3.13	0.76	0.67
$3p_{3/2} m=3/2$	0.98	1.00	0.27	0.28
	1.54	1.28	0.46	0.37

5.1.2 Résultats de l'approximation dipolaire non-relativiste

Le calcul relativiste des sections efficaces de recombinaison radiative nécessite un temps relativement considérable, qui n'est pas toujours justifié pour des applications aux plasmas. Souvent, il serait utile d'utiliser une approche non-relativiste afin d'estimer ces sections efficaces d'autant plus qu'elles peuvent être évaluées de façon analytique pour les systèmes hydrogéoïdes [4, 56, 70]. A cet effet, nous avons calculé les sections efficaces partielles de recombinaison radiative dans l'approximation dipolaire non-relativiste en utilisant l'équation (3.60) établie dans le troisième chapitre.

Dans le tableau (5.6), nous présentons nos résultats des sections efficaces de recombinaison radiative dans les sous-niveaux magnétiques de $n = 2$ d'ions hydrogéoïdes, et ceci pour différentes énergies de l'électron incident variant de 1 à 50 keV et pour différents numéros atomiques Z de l'ion recombinant entre 10 (néon) et 92 (uranium). Afin de mieux cerner le domaine de validité de l'approximation dipolaire non-relativiste (DN) nous montrons également, dans le tableau (5.6), les résultats que nous avons obtenu par le traitement relativiste exact (RE).

D'après les résultats du tableau (5.6) nous remarquons que, pour le sous-niveau magnétique $2s_{1/2} m = 1/2$, les différences entre les sections efficaces partielles calculées dans l'approximation dipolaire non-relativiste et celles obtenues par le traitement relativiste exact n'excèdent pas les 5%, et ceci pour toutes les valeurs du numéro atomique Z dans le domaine d'énergie considéré. Pour le sous-niveau magnétique $2p_{3/2} m = 3/2$, les deux résultats sont en bon accord pour les ions avec Z petit et moyen, Ne^{9+} , Ti^{21+} et Mo^{41+} , mais la différence entre eux devient supérieure à 10% à partir de $Z = 54$. Cette différence atteint quand même 41.5% à 20 keV pour l'ion lourd U^{91+} . Cependant, pour les autres sous-niveaux magnétiques, les différences sont importantes pour toutes les valeurs de Z considérées et augmentent avec l'énergie pour un Z donné, beaucoup plus pour $2p_{1/2} m = 1/2$ dont l'écart atteint les 60.2% que pour $2p_{3/2} m = 1/2$ avec 27.1% pour $Z = 92$ à 50 keV. D'autre part, pour les plus grandes valeurs de Z considérées, le désaccord entre l'approximation

TABLE 5.6 – Comparaison des sections efficaces partielles de recombinaison radiative (en barns) obtenues dans l’approximation dipolaire non-relativiste (DN) avec celles calculées dans la théorie relativiste exacte (RE) pour les sous-niveaux magnétiques $2s_{1/2} m = 1/2$ et $2p_{1/2} m = 1/2$. Cette comparaison est faite pour différents numéros atomiques $10 \leq Z \leq 92$ de l’ion recombinant, et pour différentes énergies de l’électron incident comprises entre 1 et 50 keV. $x[y]$ désigne $x \times 10^y$.

$\varepsilon(\text{keV})$	$2s_{1/2} m = 1/2$		$2p_{1/2} m = 1/2$	
	DN	RE	DN	RE
$Z = 10$				
1	1.09[+1]	1.09[+1]	2.64[+0]	2.67[+0]
5	8.04[−1]	5.34[+1]	5.03[−2]	3.11[+1]
20	5.05[−2]	4.99[−2]	8.40[−4]	9.22[−4]
50	6.74[−3]	6.55[−3]	4.54[−5]	5.54[−5]
$Z = 22$				
1	7.49[+1]	7.52[+1]	4.32[+1]	4.49[+1]
5	1.04[+1]	1.05[+1]	2.46[+0]	2.63[+0]
20	1.14[+0]	1.13[+0]	8.47[−2]	9.75[−2]
50	1.99[−1]	1.94[−1]	6.27[−3]	8.08[−3]
$Z = 42$				
1	2.90[+2]	2.92[+2]	2.29[+2]	2.54[+2]
5	5.27[+1]	5.34[+1]	2.68[+1]	3.11[+1]
20	9.14[+0]	9.30[+0]	2.01[+0]	2.60[+0]
50	2.19[+0]	2.21[+0]	2.29[−1]	3.39[−1]
$Z = 54$				
1	4.83[+2]	4.88[+2]	4.03[+2]	4.75[+2]
5	9.17[+1]	9.32[+1]	5.64[+1]	7.00[+1]
20	1.81[+1]	1.86[+1]	5.68[+0]	7.99[+0]
50	4.94[+0]	5.08[+0]	7.88[−1]	1.30[+0]
$Z = 92$				
1	1.41[+3]	1.39[+3]	1.25[+3]	1.97[+3]
5	2.78[+2]	2.77[+2]	2.18[+2]	3.64[+2]
20	6.46[+1]	6.60[+1]	3.54[+1]	7.04[+1]
50	2.20[+1]	2.31[+1]	7.56[+0]	1.90[+1]

Même légende que dans le tableau (5.6) mais avec les sous-niveaux magnétiques de l'état $2p_{3/2}$.

$\varepsilon(\text{keV})$	$2p_{3/2} m = 1/2$		$2p_{3/2} m = 3/2$	
	DN	RE	DN	RE
$Z = 10$				
1	3.70[+0]	3.72[+0]	1.57[+0]	1.57[+0]
5	5.76[-2]	5.89[-2]	4.30[-2]	4.31[-2]
20	8.76[-4]	9.53[-4]	8.05[-4]	8.13[-4]
50	4.63[-5]	5.66[-5]	4.47[-5]	4.59[-5]
$Z = 22$				
1	7.02[+1]	7.11[+1]	1.62[+1]	1.60[+1]
5	3.44[+0]	3.53[+0]	1.48[+0]	1.48[+0]
20	9.90[-2]	1.07[-1]	7.04[-2]	7.11[-2]
50	6.76[-3]	8.18[-3]	5.78[-3]	5.93[-3]
$Z = 42$				
1	3.88[+2]	4.01[+2]	6.97[+1]	6.51[+1]
5	4.26[+1]	4.49[+1]	1.09[+1]	1.03[+1]
20	2.78[+0]	3.08[+0]	1.25[+0]	1.23[+0]
50	2.79[-1]	3.40[-1]	1.78[-1]	1.81[-1]
$Z = 54$				
1	6.89[+2]	7.24[+2]	1.18[+2]	1.06[+2]
5	9.25[+1]	9.95[+1]	2.03[+1]	1.83[+1]
20	8.34[+0]	9.47[+0]	3.01[+0]	2.86[+0]
50	1.03[+0]	1.28[+0]	5.47[-1]	5.46[-1]
$Z = 92$				
1	2.15[+3]	2.39[+3]	3.50[+2]	3.03[+2]
5	3.70[+2]	4.26[+2]	6.67[+1]	5.00[+1]
20	5.71[+1]	7.10[+1]	1.38[+1]	9.75[+0]
50	1.13[+1]	1.55[+1]	3.83[+0]	2.97[+0]

dipolaire non-relativiste et la théorie relativiste exacte est important et ceci même pour les plus faibles énergies. Par exemple, pour les deux charges $Z = 54$ et $Z = 92$ à l'énergie $\varepsilon = 1$ keV, la différence entre les deux résultats est estimée à plus de 15% et 36%, respectivement, pour $2p_{1/2} m = 1/2$. Ceci montre que pour les ions fortement chargés le traitement relativiste est nécessaire quelque soit l'énergie considérée de l'électron incident, du moins dans le domaine du keV.

5.1.3 Comportement de la polarisation de la raie Ly- α_1 le long de la séquence isoélectronique

Il a été montré par Reed et Chen [28] que la polarisation de la radiation émise lors de l'excitation collisionnelle d'ions par un faisceau directif d'électrons est indépendante du numéro atomique Z de l'ion considéré dans le cadre d'un traitement non-relativiste. Mais lorsque les effets relativistes sont pris en compte, cette polarisation manifeste une certaine dépendance en Z . Nous allons donc dans cette sous-section étudier le comportement de la polarisation linéaire de la raie Ly- α_1 émise par différents ions hydrogénoïdes suite au processus de recombinaison radiative en fonction de l'énergie de l'électron incident, et ceci aussi bien dans le cas relativiste que celui non-relativiste.

A partir des sections efficaces de recombinaison radiative calculées dans la théorie relativiste exacte et dans l'approche dipolaire non-relativiste, nous présentons dans le tableau (5.7) les valeurs du degré de polarisation linéaire de la raie Ly- α_1 pour différents ions hydrogénoïdes de numéro atomique appartenant au domaine $10 \leq Z \leq 92$. Ces valeurs sont données pour des énergies de l'électron incident exprimées en unité du seuil d'ionisation de l'ion considéré, $X = \varepsilon/E_1$ où E_1 est l'énergie d'ionisation du niveau fondamental $1s_{1/2}$.

Nous remarquons, d'après les résultats obtenus, que dans le cas non-relativiste les valeurs du degré de polarisation linéaire $P_{Ly\alpha_1}$ sont approximativement les mêmes pour tous les ions considérés quelque soit l'énergie, soit 2, 4 et 5 fois le seuil d'ionisation. Cependant, la situation est bien différente lorsque les effets relativistes sont

TABLE 5.7 – Degré de polarisation linéaire (en %) de la raie Ly- α_1 de quelques ions hydrogénéoïdes. $X = \varepsilon/E_I$ est l'énergie de l'électron incident exprimée en unité du seuil d'ionisation E_I .

X	Ion						
	Ne ⁹⁺	Ar ¹⁷⁺	Ti ²¹⁺	Fe ²⁵⁺	Mo ⁴¹⁺	Xe ⁵³⁺	U ⁹¹⁺
Non-Relativiste							
2	16.20	16.18	16.15	16.12	15.97	15.80	14.84
4	9.82	9.80	9.79	9.76	9.65	9.53	8.82
5	8.22	8.19	8.17	8.16	8.07	7.94	7.33
Relativiste							
2	16.56	17.28	17.77	18.36	21.37	24.10	34.64
4	10.53	11.98	12.92	14.00	18.97	23.02	37.70
5	9.09	10.89	12.06	13.38	19.12	23.76	39.96

pris en compte. Pour une énergie réduite X donnée, le degré de polarisation $P_{Ly\alpha_1}$ augmente avec le numéro atomique Z et, par exemple, passe de 9.09% à 39.96% pour $X = 5$ lorsque Z croit de 10 à 92.

Dans les figures 5.1(a)-5.1(d), nous traçons la polarisation linéaire $P_{Ly\alpha_1}$ en fonction de l'énergie de l'électron incident exprimé en unité du seuil d'ionisation pour les quatre ions hydrogénéoïdes Ne⁹⁺, Ti²¹⁺, Mo⁴¹⁺ et Xe⁵³⁺. Pour l'ion léger Ne⁹⁺, les courbes représentant la polarisation $P_{Ly\alpha_1}$ dans les cas relativiste et non-relativiste sont très proches l'une de l'autre pour toutes les valeurs d'énergie $1 \leq X \lesssim 4$. A

$X = 6$, les effets relativistes font augmenter $P_{Ly\alpha_1}$ de 12.3%. La polarisation calculée dans l'approximation non-relativiste est de 23% au seuil d'ionisation ($X = 1$) et décroît rapidement de façon monotone quand l'énergie de l'électron incident augmente et atteint 7.1% à $X = 6$. Les résultats relativistes se trouvent légèrement au dessus de ceux non-relativistes et diminuent aussi avec l'énergie.

Le comportement de la polarisation $P_{Ly\alpha_1}$ pour les autres ions hydrogénoïdes de numéro atomique plus élevé $Z = 22, 42, 54$ est similaire à celui de Ne^{9+} . Cependant, la différence entre les résultats relativistes et non-relativistes tend à augmenter d'une part lorsque la charge nucléaire Z de l'ion augmente et d'autre part lorsque l'énergie augmente pour un Z donné. Pour le titane ($Z = 22$) les courbes relativistes et non-relativistes sont assez proches jusqu'à $X = 2$. A partir de $Z = 42$, la différence entre ces courbes est largement apparente même au seuil d'ionisation $X = 1$. Pour l'ion Xe^{53+} , par exemple, l'écart entre la polarisation relativiste et non-relativiste est de 17.9% pour $X = 1$ et les courbes correspondantes sont davantage séparées lorsque l'énergie augmente. En effet, l'écart atteint les 73.1% pour $X = 6$.

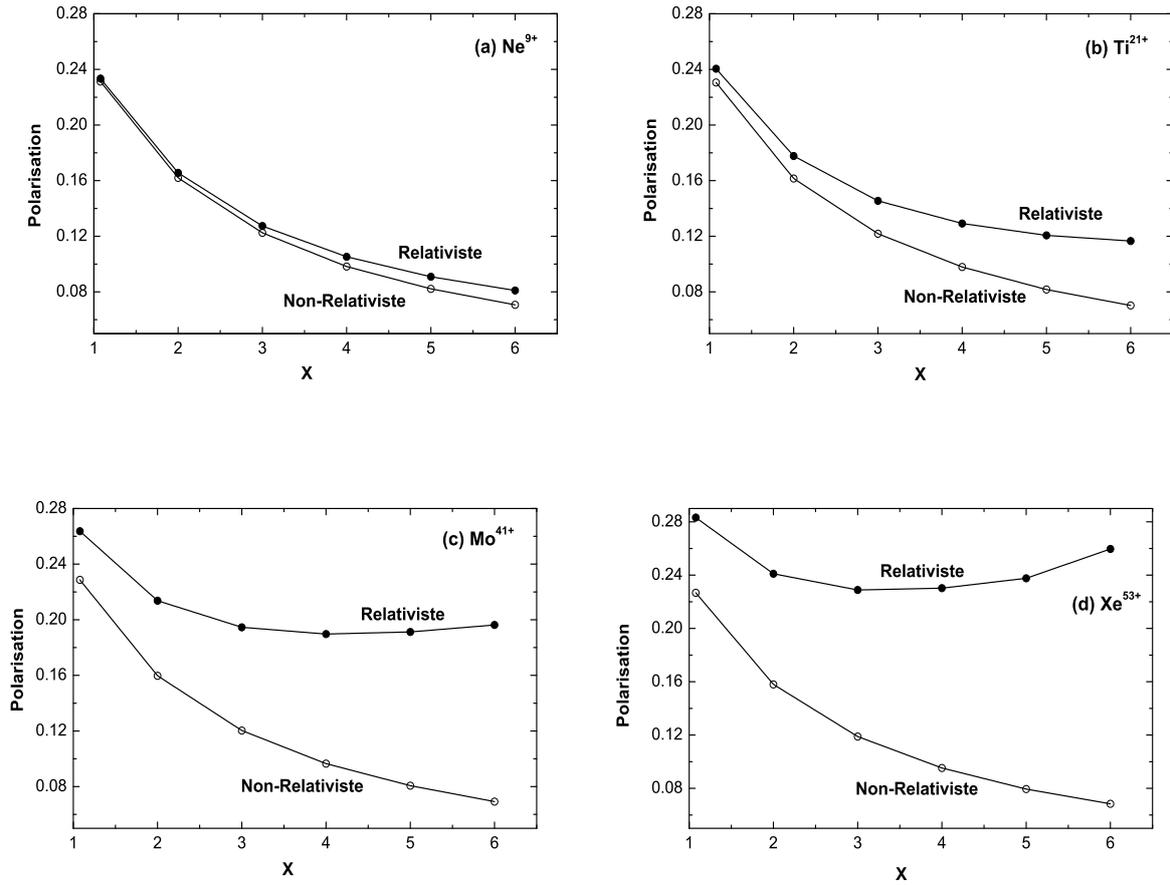


FIGURE 5.1 – Polarisation linéaire de la raie Ly- α_1 de quelques ions hydrogénoïdes en fonction de l'énergie de l'électron incident exprimée en unité du seuil d'ionisation, $X = \varepsilon/E_1$. Les cercles pleins et vides correspondent aux valeurs obtenues dans le cas relativiste et non-relativiste, respectivement.

Chapitre 6

Effets de la RR sur les propriétés des raies Ly- α

Nous avons déjà mentionné, dans le quatrième chapitre, que pour des ions émetteurs hydrogénoïdes les processus de formation des raies peuvent être limités à l'excitation collisionnelle (IE) et à la recombinaison radiative (RR) tant que la densité électronique n'est pas trop élevée. De plus, on admet que le processus d'excitation se produit essentiellement à partir du niveau fondamental $1s_{1/2}$.

Contrairement au processus d'excitation, il n'y a pas de seuil d'énergie pour que la recombinaison radiative puisse se produire. Cependant, la contribution de la recombinaison radiative à l'émission des raies Ly- α nécessite la présence des ions nus Fe^{26+} , qui à son tour nécessite une énergie cinétique assez élevée des électrons incidents, supérieure en principe au seuil d'ionisation du niveau $1s_{1/2}$. Etant intéressé dans ce travail par un large domaine d'énergie allant de 1 jusqu'à 50 keV, nous avons considéré trois différentes régions, au dessus du seuil d'ionisation du niveau fondamental $1s$ ($\sim 9.3-50$ keV), en dessous du seuil d'excitation du niveau $2p$ ($1- \sim 7$ keV) où ici les raies sont émises suite au processus de recombinaison radiative seulement (voir Annexe A), et finalement entre les deux limites précédentes ($\sim 7- \sim 9.3$ keV). Dans EBIT, il est possible d'explorer ces trois régions d'énergie, en d'autres termes de permettre à la recombinaison radiative de contribuer à l'émission des raies Ly- α pour des énergies inférieures à la limite d'ionisation des ions hydrogénoïdes

Fe²⁵⁺. Pour cela, l'énergie du faisceau d'électrons est choisie, dans un premier temps, suffisamment supérieure à 9.3 keV afin de produire une concentration appréciable des ions nus Fe²⁶⁺ dans le piège, ensuite réduite à une valeur inférieure au seuil d'ionisation 9.3 keV. Dans ce cas, les calculs sur le degré de polarisation linéaire de la raie Ly- α_1 et le rapport d'intensité $I_{\text{Ly}\alpha_1}/I_{\text{Ly}\alpha_2(+M1)}$ ont été effectués pour des valeurs arbitraires du rapport d'abondance ionique Fe²⁶⁺/Fe²⁵⁺ entre 0.1 et 100.

Nous commençons par donner les résultats des sections efficaces partielles d'excitation, puis nous allons évaluer la contribution du processus de recombinaison radiative sur la polarisation et le rapport des intensités des raies Ly- α de Fe²⁵⁺ et étudier comment varie cette contribution en fonction du numéro atomique Z de l'ion considéré.

6.1 Sections efficaces partielles d'excitation collisionnelle

Nous avons calculé les sections efficaces partielles d'excitation de Fe²⁵⁺ à partir de son niveau fondamental $1s_{1/2}$ vers tous les sous-niveaux magnétiques avec $2 \leq n \leq 5$ en utilisant le code FAC [93]. Les valeurs de ces sections efficaces sont obtenues dans l'approximation quasi-relativiste Distorted-Wave (DW) qui s'avère être exacte pour les ions fortement chargés [94] pourvu qu'ils ne soient pas très lourds. Dans le tableau (6.1), nous reportons les sections efficaces d'excitation directe (premières lignes) et effective (deuxièmes lignes) pour les différents sous-niveaux magnétiques de $n = 2$ et $n = 3$ avec des énergies de l'électron incident allant de 7 keV, qui est juste au dessus du seuil d'excitation, jusqu'à 50 keV. Dans le calcul des sections efficaces effectives, on a tenu compte des cascades radiatives provenant de tous les sous-niveaux magnétiques des niveaux supérieurs avec $3 \leq n \leq 5$ s'agissant des états $2l$ et avec $n = 4$ et 5 s'agissant des états $3l$. Notons que les cascades radiatives commencent à intervenir pour une énergie supérieure à 8.24 keV pour $n = 2$ et 8.69 keV pour $n = 3$ (voir Annexe A). Cela revient à considérer les sections efficaces d'excitation directes de 100 sous-niveaux magnétiques au total.

Contrairement à la recombinaison radiative, la contribution des cascades à la section efficace de chaque sous-niveau magnétique des états $2p$ décroît avec l'énergie. On note que les sections efficaces pour l'excitation des différents sous-niveaux de $n = 2$ sont supérieures à celles pour la recombinaison radiative par un facteur qui varie de 6-32 à 28-460 pour les énergies de 10 et 50 keV, respectivement. On remarque aussi d'après les résultats du tableau (6.1) que l'excitation collisionnelle, similairement à la recombinaison radiative, induit un peuplement préférentiel du sous-niveau $2p_{3/2} m = 1/2$ par rapport à $m = 3/2$ dans le domaine d'énergie considéré, soit de 7 à 50 keV. Le rapport des sections efficaces $\sigma_{\text{eff}}^p(2p_{3/2} m = 1/2)/\sigma_{\text{eff}}^p(2p_{3/2} m = 3/2)$ décroît de 3.42 à 1.35 pour l'excitation ($p \equiv \text{IE}$) et de 1.76 à 1.11 pour la recombinaison radiative ($p \equiv \text{RR}$) quand l'énergie de l'électron incident croît de 7 à 50 keV.

6.2 Polarisation et rapport d'intensité des raies Ly-

α

En utilisant les résultats des sections efficaces des sous-niveaux magnétiques de $n = 2$ données dans les tableaux (5.1), (5.2) et (6.1), nous avons calculé le degré de polarisation linéaire de la raie Ly- α_1 et le rapport d'intensité des raies Ly- α_1 sur Ly- α_2 (+M1) de l'ion Fe^{25+} , et ceci dans les trois différents domaines d'énergie cités précédemment. Nous avons évalué ainsi le rapport de branchement B_{M1} associé à la raie M1, qui figure dans l'équation (4.48), égale à la valeur 0.128. Pour cela, nous avons utilisé la valeur de la probabilité de transition radiative $2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ par voie M1 égale à $A_{M1} = 3.66 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ obtenue au moyen du code FAC. D'autre part, pour la probabilité de transition par voie 2E1, nous avons utilisé le résultat $A_{2E1} = 2.49 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ trouvé dans [48].

TABLE 6.1 – Sections efficaces partielles (en barns) pour l’excitation collisionnelle de l’ion Fe^{25+} à partir du niveau fondamental $1s_{1/2}$ vers les différents sous-niveaux magnétiques de $n = 2$, pour des énergies de l’électron incident dans le domaine 7 – 50 keV. Les sections efficaces d’excitation directe ont été calculées avec le code FAC [93] (premières lignes). Les sections efficaces d’excitation effective incluant les cascades radiatives sont également données (deuxièmes lignes).

Etat excité	ε (keV)						
	7	10	15	20	25	35	50
$2s_{1/2} m=1/2$	44.9	32.5	22.6	17.5	14.3	10.7	7.87
		38.1	27.1	21.5	18.1	14.0	10.7
$2p_{1/2} m=1/2$	63.0	53.2	47.0	43.0	40.0	35.2	30.3
		58.1	50.2	45.6	42.1	36.9	31.6
$2p_{3/2} m=1/2$	94.0	77.9	65.3	56.9	50.8	42.1	34.1
		84.0	69.2	59.9	53.2	43.9	35.4
$2p_{3/2} m=3/2$	27.5	24.9	25.9	26.7	26.9	26.5	25.0
		29.0	28.7	29.1	29.0	28.1	26.3

Suite du tableau (6.1) mais avec les sous-niveaux magnétiques des états excités $n = 3$.

Etat excité	ε (keV)					
	10	15	20	25	35	50
$3s_{1/2} m = 1/2$	6.62	4.47	3.42	2.80	2.08	1.54
	7.24	4.96	3.86	3.20	2.44	1.84
$3p_{1/2} m = 1/2$	9.71	8.03	7.25	6.71	5.90	5.08
	10.4	8.47	7.60	7.00	6.13	5.25
$3p_{3/2} m = 1/2$	14.83	11.64	9.98	8.84	7.29	5.87
	15.71	12.18	10.4	9.17	7.53	6.04
$3p_{3/2} m = 3/2$	4.17	4.14	4.32	4.41	4.39	4.19
	4.78	4.56	4.66	4.69	4.61	4.37
$3d_{3/2} m = 1/2$	1.23	0.71	0.53	0.42	0.29	0.19
	1.30	0.73	0.54	0.43	0.30	0.20
$3d_{3/2} m = 3/2$	0.21	0.18	0.22	0.23	0.21	0.18
	0.23	0.19	0.23	0.24	0.22	0.19
$3d_{5/2} m = 1/2$	1.45	0.77	0.50	0.37	0.24	0.15
	1.54	0.80	0.53	0.39	0.25	0.16
$3d_{5/2} m = 3/2$	0.59	0.56	0.52	0.46	0.35	0.24
	0.63	0.58	0.54	0.47	0.36	0.25
$3d_{5/2} m = 5/2$	0.08	0.10	0.14	0.16	0.17	0.16
	0.09	0.11	0.15	0.17	0.18	0.17

6.2.1 Energies inférieures au seuil d'excitation $n = 1 \rightarrow 2$

Sur les figures (6.1) et (6.2), nous avons tracé les variations du degré de polarisation linéaire de la raie Ly- α_1 et du rapport d'intensité des raies Ly- α_1 sur Ly- α_2 (+M1), respectivement, en fonction de l'énergie cinétique de l'électron incident dans le domaine 1–6 keV. Dans ce domaine d'énergie, qui se situe en dessous du seuil d'excitation de la transition $n = 1 \rightarrow 2$, on admet que la recombinaison radiative est le seul processus de peuplement des niveaux excités de Fe²⁵⁺. Les résultats présentés dans la figure (6.1) d'une part tiennent compte seulement de la contribution directe de la recombinaison radiative (courbe discontinue), et d'autre part incluent les contributions des cascades radiatives provenant de tous les sous-niveaux magnétiques avec $3 \leq n \leq 6$ (courbe continue). Comme on peut le remarquer sur la figure (6.1), les cascades radiatives ont pour effet de réduire significativement le degré de polarisation de la raie Ly- α_1 . Cette réduction est de 16% à 1 keV et de 30% à 6 keV. Il est intéressant de mentionner aussi que la polarisation linéaire de la raie Ly- α_1 est réduite de 35.9% à 25.6% à 1 keV et de 20.9% à 18.4% à 6 keV si l'alignement de tous les niveaux cascadants est négligé. En d'autres termes, si l'on suppose que les cascades peuplent les sous-niveaux supérieurs $m = 1/2$ et $m = 3/2$ de la raie Ly- α_1 de façon équiprobable.

Les résultats de la figure (6.2) sont présentés avec et sans la contribution de la raie M1 qui se superpose avec la raie Ly- α_2 . D'autre part, afin d'examiner l'effet de l'anisotropie lié à l'émission de la raie Ly- α_1 , et pour les deux rapports d'intensités Ly- α_1 /Ly- α_2 et Ly- α_1 /Ly- α_2 (+M1), les courbes continues correspondent à l'intensité de Ly- α_1 à 90° par rapport à la direction des électrons incidents et les courbes discontinues correspondent à l'intensité moyenne de Ly- α_1 obtenue en posant $P_{\text{Ly}\alpha_1} = 0$ dans l'équation (4.38). Dans tous ces calculs, on a tenu compte des effets des cascades radiatives issues de tous les sous-niveaux magnétiques avec $n = 3 - 6$. D'abord, nous remarquons d'après les résultats de la figure (6.2) que la contribution de la raie M1 peut être relativement importante malgré la valeur relativement petite du rapport de branchement $B_{\text{M1}} = 0.128$. Ceci est dû au fait que les sections efficaces effectives de recombinaison radiative dans le niveau $2s_{1/2}$

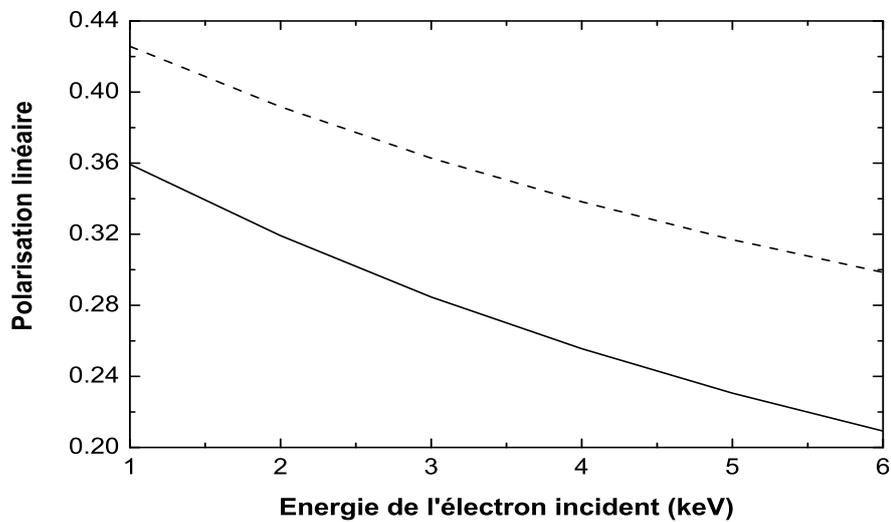


FIGURE 6.1 – Degré de polarisation de la raie $\text{Ly-}\alpha_1$ de Fe^{25+} en fonction de l'énergie de l'électron incident dans le domaine 1 – 6 keV situé en dessous du seuil d'excitation $1s_{1/2} \rightarrow 2p_{3/2}$. La courbe discontinue correspond aux calculs tenant compte de la recombinaison radiative directe dans le niveau supérieur $2p_{3/2}$ tandis que la courbe continue correspond aux calculs incluant les cascades radiatives de tous les sous-niveaux magnétiques avec le nombre quantique principal $3 \leq n \leq 6$.

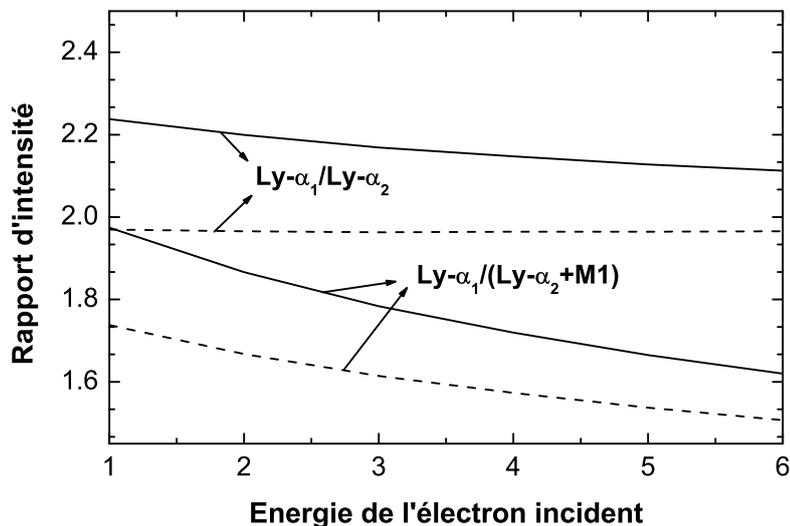


FIGURE 6.2 – Rapport d'intensité de la raie $\text{Ly-}\alpha_1$ sur la raie $\text{Ly-}\alpha_2$ de Fe^{25+} en fonction de l'énergie de l'électron incident dans le domaine 1 – 6 keV. Les résultats sont présentés avec et sans la contribution de la raie M1 à l'intensité de $\text{Ly-}\alpha_2$. Pour les deux résultats la courbe continue correspond à l'intensité de $\text{Ly-}\alpha_1$ à 90° par rapport à la direction des électrons incidents et la courbe discontinue correspond à son intensité moyenne.

sont supérieures à celles dans le niveau $2p_{1/2}$ par un facteur de 2.4, quoique les cascades apportent une contribution beaucoup plus importante pour $2p_{1/2}$. Nos calculs indiquent que la raie M1 contribue de 12% à l'intensité de la raie combinée Ly- α_2 (+M1) à 1 keV et de 23% à 6 keV. Notons aussi que l'effet de l'anisotropie dans l'émission de la raie Ly- α_1 peut être important ; l'intensité de Ly- α_1 à $\theta = 90^\circ$ est augmentée de $\sim 7.5 - 14\%$ comparée à son intensité moyenne. La négligence de l'anisotropie de l'émission conduit à une sous-estimation du rapport d'intensité Ly- α_1 /Ly- α_2 (+M1) de 12% à 1 keV. Quand l'énergie cinétique de l'électron incident croît, l'effet de l'anisotropie décroît à cause de la diminution du degré de polarisation linéaire $P_{Ly\alpha_1}$.

6.2.2 Energies supérieures au seuil d'excitation $n = 1 \rightarrow 2$

Pour des énergies des électrons incidents supérieures mais assez proches du seuil d'excitation de la transition $n = 1 \rightarrow 2$ de sorte que l'ionisation collisionnelle ne peut pas se produire, il y a lieu de considérer les deux processus de formation des raies Ly- α : la recombinaison radiative de Fe $^{26+}$ et l'excitation collisionnelle de Fe $^{25+}$ à partir du niveau $1s_{1/2}$ (cf. Eqs. (4.47) et (4.48)). Dans ce cas, le rapport des densités des ions nus et hydrogénoïdes de Fe est choisi comme un paramètre variable. Nous étudions alors la polarisation et les intensités des raies Ly- α en fonction de ce paramètre.

Les figures (6.3) et (6.4) montrent, respectivement, le degré de polarisation linéaire $P_{Ly\alpha_1}$ et le rapport d'intensité Ly- α_1 /Ly- α_2 (+M1) en fonction du rapport d'abondance $\rho = N_{Fe^{26+}}/N_{Fe^{25+}}$, et ceci pour deux énergies de l'électron incident de 7 et 8 keV. Dans ces calculs, les effets des cascades radiatives sont pris en compte dans la recombinaison radiative. Notons que ces effets n'interviennent pas dans l'excitation collisionnelle du fait que les niveaux $n \geq 3$ sont énergétiquement inaccessibles par excitation. En effet, le seuil d'énergie pour la transition $n = 1 \rightarrow 3$ se localise légèrement au dessus de 8.2 keV (voir Annexe A). De plus, dans la figure (6.4) les courbes continues et discontinues correspondent, respectivement, aux rapports d'intensité obtenus à 90° pour l'intensité de la raie Ly- α_1 et pour l'intensité moyenne de Ly- α_1 .

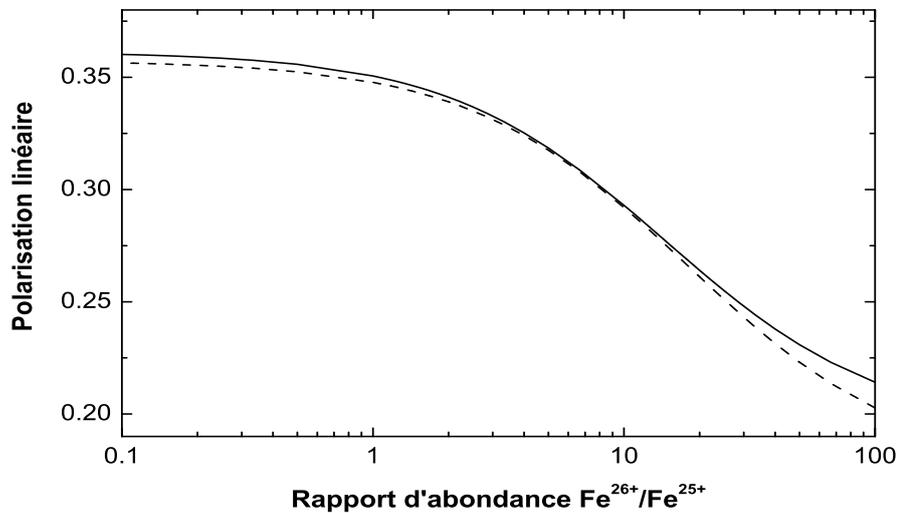


FIGURE 6.3 – Degré de polarisation de la raie Ly- α_1 en fonction du rapport d'abondance $\text{Fe}^{26+}/\text{Fe}^{25+}$ calculé pour deux valeurs de l'énergie de l'électron incident, 7 keV (courbe solide) et 8 keV (courbe discontinue), situées toutes les deux en dessous du seuil d'ionisation du niveau fondamental $1s_{1/2}$ de Fe^{25+} . Les deux processus d'excitation collisionnelle de Fe^{25+} et de recombinaison radiative de Fe^{26+} sont considérés.

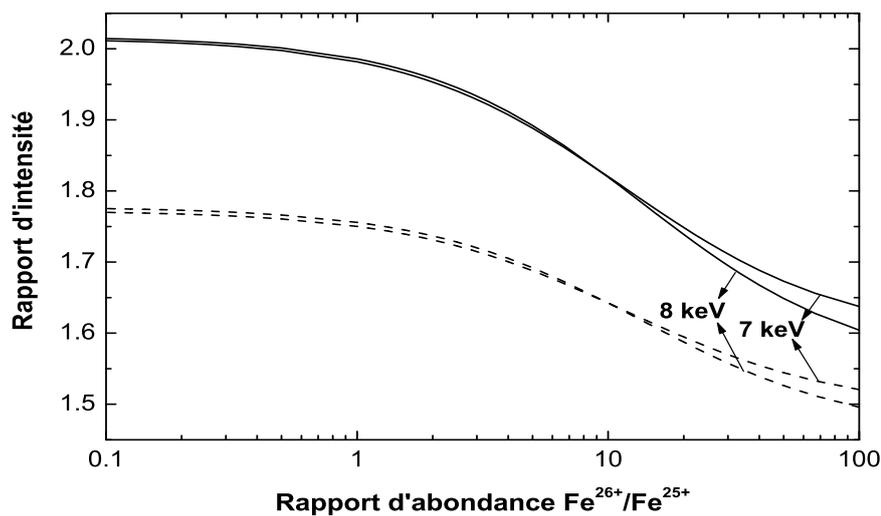


FIGURE 6.4 – Rapport d'intensité de la raie Ly- α_1 sur la raie combinée (Ly- α_2 +M1) de Fe^{25+} en fonction du rapport d'abondance $\text{Fe}^{26+}/\text{Fe}^{25+}$, calculé pour deux valeurs de l'énergie de l'électron incident, 7 et 8 keV. Les courbes solide et discontinue correspondent à l'intensité à 90° et l'intensité moyenne de la raie Ly- α_1 , respectivement.

A partir de la figure (6.3), on voit que la contribution de la recombinaison radiative, qui évidemment augmente avec l'augmentation du paramètre ρ , peut avoir un effet de dépolarisation important sur la raie Ly- α_1 . Pour la valeur de $\rho = 10$ et pour l'énergie de l'électron incident de 7 keV, par exemple, la contribution de la recombinaison radiative à l'intensité moyenne de Ly- α_1 est estimée à 42%, et le degré de polarisation $P_{\text{Ly}\alpha_1}$ est réduit de 36.1% à 29% lorsqu'on inclut la contribution de la recombinaison radiative. Cependant, pour $\rho < 1$ où la recombinaison radiative contribue de moins de 7% à l'intensité moyenne de Ly- α_1 , l'effet de la dépolarisation dû à la recombinaison radiative est négligeable. On remarque aussi, d'après la figure (6.4), que la contribution de la recombinaison radiative tend à diminuer le rapport d'intensité Ly- α_1 /Ly- α_2 (+M1). Cette diminution est due au fait que la recombinaison radiative apporte une contribution beaucoup plus importante pour l'intensité de la raie M1 que pour les intensités des raies Ly- α_1 ou Ly- α_2 , et peut être importante si la densité des ions nus de Fe est appréciable par rapport à celle des ions hydrogénoïdes.

6.2.3 Energies supérieures au seuil d'ionisation

Pour des énergies des électrons incidents supérieures au seuil d'ionisation du niveau fondamental $1s_{1/2}$ de Fe $^{25+}$, soit ~ 9.28 keV, nous pouvons estimer l'abondance relative des ions nus et hydrogénoïdes de Fe dans les conditions stationnaires d'équilibre d'ionisation. Les résultats du rapport d'abondance $\rho = N_{\text{Fe}^{26+}}/N_{\text{Fe}^{25+}}$ utilisés dans nos calculs (cf. Eq. (4.46)) sont présentés dans le tableau (6.2) pour différentes énergies cinétiques de l'électron incident. Afin d'obtenir ces résultats, les sections efficaces d'ionisation σ^{II} ont été calculées dans l'approximation relativiste Distorted-Wave en utilisant le code FAC [93]. Pour les sections efficaces totales de recombinaison radiative $\sigma_{\text{tot}}^{\text{RR}}$, reportées aussi dans le tableau (6.2), elles ont été évaluées en considérant la sommation sur tous les niveaux recombinaison jusqu'à $n = 10$. Pour $1 \leq n \leq 6$, nous avons effectué une sommation exacte sur toutes les sections efficaces exactes de recombinaison radiative, tandis que pour $7 \leq n \leq 10$ les sections efficaces ont été déduites en appliquant la loi d'échelle en n^{-3} [61, 95]. Dans le

but de vérifier l'exactitude de nos calculs nous donnons aussi, dans le tableau (6.2), les sections efficaces totales de recombinaison radiative $\sigma_{\text{tot}}^{\text{RR}}$ interpolées à partir des calculs de Trzhaskovskaya et al [96] basés sur la théorie relativiste exacte avec la sommation sur tous les niveaux recombinaison jusqu'à $n = 20$. Nous avons aussi effectué une comparaison entre nos résultats de $\sigma_{\text{tot}}^{\text{RR}}$ avec ceux de Kim et Pratt [61] pour les deux énergies électroniques de 10 et 50 keV. Nous trouvons que l'accord entre les deux résultats est meilleur que 1.2%. D'autre part, en examinant les résultats du tableau (6.2), on remarque que la contribution majeure à la section efficace totale $\sigma_{\text{tot}}^{\text{RR}}$ provient de la section efficace de recombinaison radiative dans le niveau fondamental $1s_{1/2}$ qui varie de 72% jusqu'à 80% dans le domaine d'énergie 10-50 keV. On constate évidemment, d'après ces résultats, que plus l'énergie de l'électron augmente au dessus du seuil d'ionisation plus l'abondance des ions nus augmente. L'énergie électronique pour laquelle l'abondance des ions Fe^{26+} dépasse celle des ions Fe^{25+} est ~ 12 keV.

Dans les figures (6.5) et (6.6), nous avons représenté le degré de polarisation $P_{\text{Ly}\alpha_1}$ et le rapport d'intensité $\text{Ly-}\alpha_1/\text{Ly-}\alpha_2 (+\text{M1})$, respectivement, en fonction de l'énergie de l'électron incident qui varie de 10 jusqu'à 50 keV. Nous présentons dans ces figures aussi bien les résultats obtenus en négligeant la contribution de la recombinaison radiative dans la population des sous-niveaux de $n = 2$ que ceux obtenus en considérant la recombinaison radiative et l'excitation collisionnelle comme processus de peuplement. La figure (6.6) montre aussi une comparaison entre le rapport d'intensité calculé avec et sans la contribution de l'effet de l'anisotropie de l'émission de la raie $\text{Ly-}\alpha_1$. Tous ces résultats ont été obtenus en tenant compte des cascades radiatives dans les deux processus de recombinaison radiative et d'excitation collisionnelle. Nous avons estimé, d'après nos calculs, que les cascades radiatives ont pour effet de diminuer la polarisation $P_{\text{Ly}\alpha_1}$ de $\sim 5\%$ pour des énergies supérieures à 10 keV.

A partir des figures (6.5) et (6.6), il est clair que l'inclusion du processus de recombinaison radiative dans la population des sous-niveaux de $n = 2$ a un effet très petit sur le degré de polarisation linéaire de la raie $\text{Ly-}\alpha_1$ ainsi que sur le rap-

TABLE 6.2 – Valeurs du rapport d’abondance $\rho = N_{\text{Fe}^{26+}}/N_{\text{Fe}^{25+}}$ des ions nus par rapport aux ions hydrogénoïdes de Fe pour des énergies de l’électron incident juste au dessus du seuil d’ionisation de Fe^{25+} jusqu’à 50 keV. Une comparaison entre nos résultats des sections efficaces totales de recombinaison radiative (en barns) avec ceux interpolés à partir des données de Trzhaskovskaya et al [96] est aussi donnée. Nous donnons également les sections efficaces d’ionisation à partir de l’état fondamental de Fe^{25+} (en barns) obtenues par le code FAC [93].

ε (keV)	Nos calculs				[96]
	$\sigma^{\text{RR}}(1s_{1/2})$	$\sigma_{\text{tot}}^{\text{RR}}$	σ^{II}	ρ	$\sigma_{\text{tot}}^{\text{RR}}$
10	87.4	120.4	35.5	0.29	122.
11	76.0	103.7	72.4	0.70	105.
12	66.8	90.3	100.1	1.11	91.6
15	47.4	62.8	150.6	2.40	63.9
20	29.8	38.7	183.0	4.73	39.5
25	20.4	26.1	208.4	7.94	26.9
30	14.8	18.8	203.4	10.8	19.3
35	11.2	14.1	191.2	13.5	14.6
40	8.77	11.0	183.7	16.7	11.5
45	7.02	8.77	175.5	20.0	9.38
50	5.74	7.14	167.2	23.4	7.55

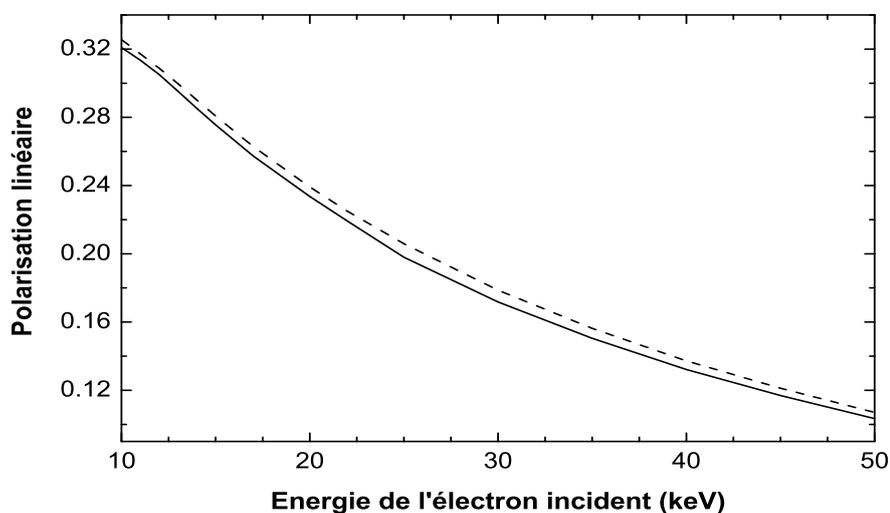


FIGURE 6.5 – Degré de polarisation de la raie $\text{Ly-}\alpha_1$ de Fe^{25+} en fonction de l'énergie de l'électron incident dans le domaine 10 – 50 keV. Les résultats sont présentés pour les processus de formation de la raie incluant l'excitation collisionnelle et la recombinaison radiative (courbe solide) et incluant seulement l'excitation collisionnelle (courbe discontinue).

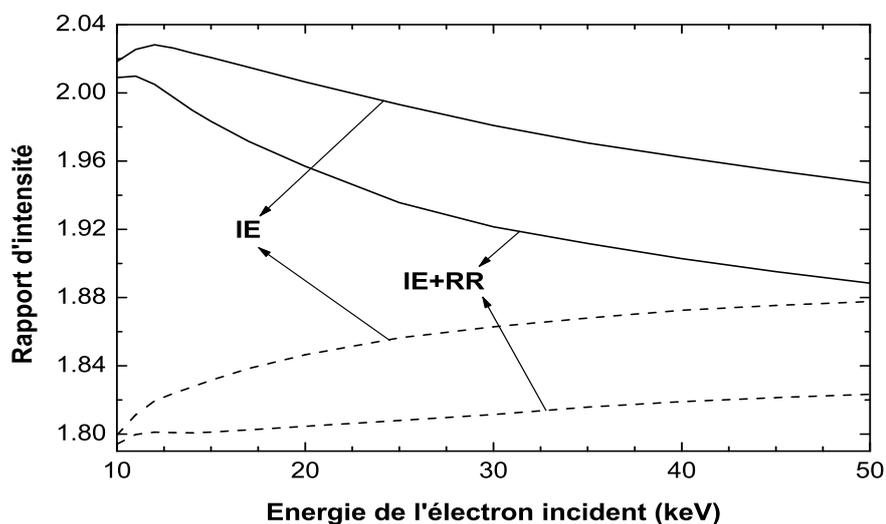


FIGURE 6.6 – Rapport d'intensité de la raie $\text{Ly-}\alpha_1$ sur la raie combinée ($\text{Ly-}\alpha_2 + \text{M1}$) de Fe^{25+} en fonction de l'énergie de l'électron incident dans le domaine 10 – 50 keV, calculé tenant compte de la contribution de la recombinaison radiative et en négligeant cette contribution. La courbe continue correspond à l'intensité de $\text{Ly-}\alpha_1$ à 90° par rapport à la direction des électrons incidents et la courbe discontinue correspond à son intensité moyenne.

port d'intensité des raies Ly- α_1 et Ly- α_2 (+M1). La plus grande contribution de la recombinaison radiative sur le degré de polarisation $P_{Ly\alpha_1}$ qui se produit autour de l'énergie 25 keV est seulement de 0.8% en valeur absolue. Pour le rapport d'intensité $I_{Ly\alpha_1}(90^\circ)/I_{Ly\alpha_2(+M1)}$, on trouve qu'il est diminué de moins de 3% lors de l'inclusion de la recombinaison radiative. Précisément, la contribution de la recombinaison radiative fait augmenter l'intensité $I_{Ly\alpha_1}(90^\circ)$ par 2.9-5.7%, et l'intensité $I_{Ly\alpha_2(+M1)}$ par 4.0-8.4% quand l'énergie cinétique varie de 12 à 50 keV. Nous avons aussi déterminé l'influence de l'inclusion du processus de recombinaison radiative sur le rapport d'intensité dans le cas où la fraction des ions nus Fe²⁶⁺ peut être supérieure à la valeur donnée dans l'équilibre stationnaire d'ionisation. Pour l'énergie de 10 keV, par exemple, nos calculs montrent que le rapport $I_{Ly\alpha_1}(90^\circ)/I_{Ly\alpha_2(+M1)}$ est réduit de 2.01 à 1.91 quand le rapport d'abondance croît de 0.29 (sa valeur dans l'équilibre d'ionisation) à 5.

D'autre part, l'intensité de la raie Ly- α_1 à 90° par rapport à la direction de l'électron incident diffère de son intensité moyenne de 12% à 10 keV et de 3.6% à 50 keV. Notons aussi que dans le domaine d'énergie considéré 10-50 keV la contribution de la raie M1 est relativement faible, son intensité relative (comparée à l'intensité totale de la raie combinée Ly- α_2 (+M1)) varie lentement de 8% pour 10 keV à 7% pour 50 keV.

6.3 Comportement le long de la séquence isoélectronique de H

Jusqu'à présent, nous avons investigué l'effet du processus de recombinaison radiative sur la polarisation et le rapport d'intensité des raies Ly- α qui résultent de l'excitation collisionnelle des ions de fer Fe²⁵⁺. Le formalisme général présenté dans ce travail peut, évidemment, être utilisé pour l'analyse des raies émises par d'autres ions appartenant à la séquence isoélectronique de l'hydrogène. Nous allons, par conséquent, étudier les propriétés d'émission des raies Ly- $\alpha_{1,2}$ émises par plusieurs ions hydrogénoïdes dont les numéros atomiques sont compris entre $Z = 10$

et $Z = 54$. Nous nous sommes restreint aux ions faiblement et moyennement lourds du fait que le code FAC donnerait des résultats peu fiables pour les sections efficaces partielles d'excitation collisionnelle pour des ions lourds avec $Z > 54$. Dans ces calculs, nous n'avons pas tenu compte des cascades radiatives à partir des niveaux supérieurs $n \geq 3$ aussi bien pour l'excitation collisionnelle que pour la recombinaison radiative.

Pour calculer le rapport de branchement B_{M1} qui figure dans l'équation (4.48), nous avons utilisé les probabilités de la transition $2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ qui peut se produire par dipôle magnétique ou par émission de deux photons, soit A_{M1} et A_{2E1} respectivement, données dans [3]. Ces probabilités de transition sont reportées dans le tableau (6.3) pour les différents ions hydrogénoïdes considérés. Notons que les probabilités de transition A_{M1} et A_{2E1} augmentent avec le numéro atomique Z de l'ion selon Z^{10} pour A_{M1} et Z^6 pour A_{2E1} , ce qui conduit au fait que pour l'ion avec $Z = 42$ (Mo^{41+}) la probabilité A_{M1} devient plus grande que la probabilité A_{2E1} .

Le tableau (6.4) montre nos résultats du degré de polarisation linéaire $P_{Ly\alpha_1}$ et du rapport d'intensité $I_{Ly\alpha_1}/I_{Ly\alpha_2(+M1)}$ calculés pour cinq ions hydrogénoïdes, Ne^{9+} , Ar^{17+} , Fe^{25+} , Mo^{41+} et Xe^{53+} . Nous avons considéré une seule énergie de l'électron incident exprimée en unité du seuil d'ionisation, $\varepsilon = 1.078 \times E_I$, où E_I est l'énergie d'ionisation de l'ion considéré à partir de son niveau fondamental $1s_{1/2}$. Cette énergie correspond à la valeur 10 keV pour l'ion Fe^{25+} . Les valeurs du rapport d'abondance des ions nus par rapport aux ions hydrogénoïdes ρ évaluées dans l'équilibre d'ionisation sont également données dans le tableau (6.4). Nous comparons, comme d'habitude, nos calculs théoriques de $P_{Ly\alpha_1}$ et $I_{Ly\alpha_1}/I_{Ly\alpha_2(+M1)}$ qui incluent la contribution de la recombinaison radiative dans le peuplement des états excités (colonnes "IE+RR") avec ceux qui tiennent compte seulement de l'excitation collisionnelle (colonnes "IE").

TABLE 6.3 – Valeurs des probabilités de transition radiative (en s^{-1}) M1 et 2E1 originaires de la transition $2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ pour différents ions de numéro atomique dans le domaine $10 \leq Z \leq 54$. Les valeurs du rapport de branchement B_{M1} sont aussi données. $x[y]$ désigne $x \times 10^y$.

Z	A_{M1}	A_{2E1}	B_{M1}
10	2.51[+4]	8.20[+6]	3.05[-3]
18	9.08[+6]	2.77[+8]	3.17[-2]
22	6.81[+7]	9.18[+8]	6.91[-2]
26	3.66[+8]	2.49[+9]	1.28[-1]
42	4.73[+10]	4.27[+10]	5.26[-1]
54	6.27[+11]	1.86[+11]	7.71[-1]

TABLE 6.4 – L'effet du process de la recombinaison radiative sur le degré de polarisation $P_{Ly\alpha_1}$ et le rapport d'intensité $I_{Ly\alpha_1}/I_{Ly\alpha_2(+M1)}$ pour différents ions hydrogéoïdes, calculé à une même énergie de l'électron incident qui est $\varepsilon = 1.078 \times E_I$, E_I étant l'énergie d'ionisation du niveau fondamental $1s_{1/2}$ de l'ion hydrogéoïde correspondant. Les valeurs du rapport d'abondance ρ calculées dans l'équilibre d'ionisation sont aussi données.

Ion	ε (keV)	ρ	$P_{Ly\alpha_1}$ (%)		$I_{Ly\alpha_1}/I_{Ly\alpha_2(+M1)}$	
			IE	IE+RR	IE	IE+RR
Ne ⁹⁺	1.47	1.38[+1]	34.4	34.3	2.24	2.23
Ar ¹⁷⁺	4.77	1.31	34.3	34.2	2.18	2.16
Fe ²⁵⁺	10.0	2.93[-1]	34.2	34.1	2.02	2.00
Mo ⁴¹⁺	26.5	4.33[-2]	33.9	33.8	1.57	1.54
Xe ⁵³⁺	44.5	1.55[-2]	33.5	33.4	1.35	1.32

Comme on peut le constater à partir du tableau (6.4), la contribution de la recombinaison radiative à la polarisation linéaire et au rapport d'intensité des raies Ly- α demeure faible pour tous les ions considérés malgré le changement considérable du rapport d'abondance ρ , par trois ordres de grandeur, en passant du néon Ne⁹⁺ au xénon Xe⁵³⁺. Ce comportement peut être compris en tenant compte du fait que les sections efficaces d'excitation et d'ionisation collisionnelles décroissent comme $(1/Z)^4$ en fonction du numéro atomique Z . Les sections efficaces de recombinaison radiative, quand à elles, restent approximativement les mêmes et donc sont pratiquement indépendantes de Z (voir tableau (6.5)). Ceci conduit, par conséquent, à une dépendance similaire en fonction du numéro atomique Z des termes σ^{IE} et $\rho\sigma^{\text{RR}}$ qui figurent dans l'équation (4.48) du rapport d'intensité $I_{\text{Ly}\alpha_1}/I_{\text{Ly}\alpha_2(+\text{M1})}$. On en conclut que la contribution relative du processus de la recombinaison radiative reste constante le long de la séquence isoélectronique de l'hydrogène.

TABLE 6.5 – Sections efficaces (en barn) : d’ionisation σ^{II} à partir du niveau fondamental $1s_{1/2}$, de recombinaison radiative totale $\sigma_{\text{tot}}^{\text{RR}}$, d’excitation collisionnelle (IE) et de recombinaison radiative (RR) dans les sous-niveaux magnétiques des niveaux $n = 2$ pour différents ions hydrogénoïdes de numéros atomiques compris entre 10 et 54. Ces sections sont calculées à une même énergie de l’électron incident qui est $\varepsilon = 1.078 \times E_I$. $x[y]$ désigne $x \times 10^y$.

Ion	σ^{II}	$\sigma_{\text{tot}}^{\text{RR}}$	$\sigma(2s_{1/2} m = 1/2)$	
			IE	RR
Ne ⁹⁺	1.679[+3]	121.87	1.518[+3]	6.264
Ar ¹⁷⁺	1.589[+2]	121.30	1.434[+2]	6.249
Fe ²⁵⁺	3.609[+1]	120.46	3.253[+1]	6.227
Mo ⁴¹⁺	5.100	117.70	4.592	6.154
Xe ⁵³⁺	1.781	114.68	1.614	6.075

Ion	$\sigma(2p_{1/2} m = 1/2)$		$\sigma(2p_{3/2} m = 1/2)$		$\sigma(2p_{3/2} m = 3/2)$	
	IE	RR	IE	RR	IE	RR
Ne ⁹⁺	2.422[+3]	1.149	3.657[+3]	1.519	1.162[+3]	7.525[−1]
Ar ¹⁷⁺	2.310[+2]	1.185	3.447[+2]	1.532	1.100[+2]	7.478[−1]
Fe ²⁵⁺	5.317[+1]	1.243	7.789[+1]	1.554	2.491[+1]	7.405[−1]
Mo ⁴¹⁺	7.845	1.435	1.082[+1]	1.616	3.513	7.168[−1]
Xe ⁵³⁺	2.881	1.661	3.712	1.676	1.229	6.890[−1]

Conclusions

Au cours de ce travail, nous avons étudié théoriquement et de manière détaillée la polarisation linéaire et le rapport d'intensité des raies Ly- α émises par les ions hydrogénoïdes de fer Fe²⁵⁺ suite aux collisions avec un faisceau unidirectionnel et monoénergétique d'électrons. Cette étude a été effectuée dans un large domaine d'énergie des électrons projectiles variant de 1 jusqu'à 50 keV et pour des densités électroniques inférieures à $\sim 10^{16}\text{cm}^{-3}$ pour lesquelles le modèle coronal peut être appliqué avec confiance.

En plus de la contribution usuelle de l'excitation des ions Fe²⁵⁺ par impact d'électrons, qui intervient aux énergies supérieures à ~ 7 keV, nous avons introduit la recombinaison radiative des ions nus Fe²⁶⁺ comme processus additionnel de peuplement des états excités. Par ailleurs, les effets des cascades radiatives issues des niveaux avec $3 \leq n \leq 6$ pour la recombinaison radiative et ceux avec $3 \leq n \leq 5$ pour l'excitation collisionnelle ont été pris en compte dans nos calculs. Après avoir établi une expression originale de la section efficace de recombinaison radiative dans un sous-niveau magnétique spécifique des ions hydrogénoïdes, nous avons obtenu les valeurs numériques de ces sections efficaces en utilisant les fonctions d'onde relativistes exactes pour décrire les électrons dans l'état initial libre et dans l'état final lié. D'autre part, ces sections efficaces ont été déterminées en tenant compte de tous les multipôles électromagnétiques dans le développement de l'interaction électron-photon. Les sections efficaces partielles d'excitation par impact d'électrons ont été calculées dans l'approximation distorted-wave relativiste au moyen du code FAC.

Dans cette étude, nous avons considéré trois différents domaines de l'énergie des électrons incidents. Dans le premier domaine, 1 – 6.9 keV, situé en dessous du seuil

d'excitation de la transition $n = 1 \rightarrow n = 2$ de l'ion Fe^{25+} , seule la recombinaison radiative contribue au peuplement des états excités. Nous avons, ainsi, montré d'une part que les cascades radiatives qui suivent la recombinaison radiative ont un effet dépolarisant sur la raie $\text{Ly-}\alpha_1$, et d'autre part que la raie M1 fournit une contribution importante à l'intensité apparente de la raie $\text{Ly-}\alpha_2$ dans tout ce premier domaine. Nous avons trouvé que le rapport d'intensité $I_{\text{Ly}\alpha_1}/I_{\text{Ly}\alpha_2(+\text{M1})}$ diminue de ~ 2.0 à ~ 1.6 lorsque l'énergie des électrons augmente de 1 à 6 keV. Dans les deux autres domaines considérés, 7 – 10 et 10 – 50 keV, les deux processus d'excitation et de recombinaison radiative sont pris en compte dans le peuplement des états excités. Nos résultats ont montré que l'inclusion du processus de la recombinaison radiative a pour effet de diminuer légèrement le rapport d'intensité des raies $\text{Ly-}\alpha_1/\text{Ly-}\alpha_2(+\text{M1})$ et le degré de polarisation linéaire de la raie $\text{Ly-}\alpha_1$ sous les conditions de l'équilibre d'ionisation à des énergies supérieures à 9.3 keV. Cependant, nous avons trouvé que l'effet de la recombinaison radiative peut devenir significatif pour des énergies dans le domaine $\sim 7 - 10$ keV loin de l'équilibre d'ionisation pourvu qu'il existe initialement une large proportion d'ions nus Fe^{26+} . Ceci peut être réalisé dans les expériences EBIT en produisant dans un premier temps une grande quantité d'ions nus et ensuite en réduisant l'énergie du faisceau d'électrons à des énergies inférieures à l'énergie d'ionisation des ions hydrogénoïdes. Pour l'énergie de 8 keV, par exemple, nos calculs ont indiqué que lorsque le rapport d'abondance ionique $\text{Fe}^{26+}/\text{Fe}^{25+}$ croît de 0 à 4, il y a diminution du rapport d'intensité $I_{\text{Ly}\alpha_1}/I_{\text{Ly}\alpha_2(+\text{M1})}$ de 2.01 à 1.90 et du degré de polarisation linéaire $P_{\text{Ly}\alpha_1}$ de 35.7% à 32.4%.

Nous avons aussi étudié l'effet de la recombinaison radiative sur le rapport d'intensité des raies $\text{Ly-}\alpha$ émises par d'autres ions hydrogénoïdes de numéro atomique compris entre 10 et 54 en vue d'observer son comportement le long de la séquence isoélectronique de H. Nous avons noté que cet effet demeure faible pour les différents ions hydrogénoïdes considérés.

Les résultats fournis dans cette analyse théorique du rapport d'intensité des raies $\text{Ly-}\alpha_1/\text{Ly-}\alpha_2(+\text{M1})$ des ions Fe^{25+} sont susceptibles de présenter un grand intérêt pour les expérimentateurs qui travaillent sur les sources EBIT, en les aidant à mieux

interpréter leurs mesures expérimentales. Ceci est particulièrement utile si l'espace de confinement des ions est opérationnel à des énergies éloignées de l'équilibre d'ionisation, où l'abondance des ions nus recombinaison peut être relativement élevée. Nos résultats peuvent aussi trouver des applications dans les diagnostics des plasmas astrophysiques photoionisés de faible température électronique, dans lesquels il est bien connu que le processus de la recombinaison radiative constitue le processus dominant pour la production des raies d'émission. Dans ce contexte de plasmas photoionisés, il serait intéressant dans l'avenir d'étudier, à partir des sections efficaces d'excitation collisionnelle et de recombinaison radiative reportées dans cette thèse, comment la présence, parmi les électrons thermiques Maxwelliens, d'une composante d'électrons directs d'énergies dans le domaine du keV peut affecter le rapport d'intensité des raies Ly- α_1 /Ly- α_2 (+M1).

Nous comptons également dans un futur proche étendre ce présent travail aux raies d'émission des ions de la série isoélectronique de l'hélium. Il s'agira d'étudier l'effet de la recombinaison radiative sur les intensités relatives des quatre raies w (raie de résonance $1s2p^1P_1 \rightarrow 1s^2^1S_0$), x (raie quadrupolaire magnétique $1s2p^3P_2 \rightarrow 1s^2^1S_0$), y (raie d'intercombinaison $1s2p^3P_1 \rightarrow 1s^2^1S_0$), et z (raie interdite $1s2s^3S_1 \rightarrow 1s^2^1S_0$).

Bibliographie

- [1] H. Wiedemann, Particle Accelerator Physics, *Berlin : Springer* (1993).
- [2] M. Reiser, Theory and Design of Charged Particle Beams, *New York : Wiley* (1994).
- [3] H.F. Beyer, V.P. Shevelko, Introduction to the Physics of Highly Charged Ions, *Institute of Physics Publishing. Bristol and Philadelphia. IOP* (2003).
- [4] J. Eichler, Th. Stöhlker, *Phys. Rep.* 439 (2007) 1.
- [5] J.P. Mohr, G. Plunien, G. Soff, *Phys. Rep.* 293 (1998) 227.
- [6] H.F. Beyer, G. Menzel, D. Liesen, A. Gallus, F. Bosch, R. Deslattes, P. Indelicato, Th. Stöhlker, O. Klepper, R. Moshhammer, F. Nolden, H. Eickhoff, B. Franske, M. Steck, *Z. Phys. D* 35 (1995) 169.
- [7] Th. Stöhlker, H.P. Mokler, F. Bosch, W.R. Dunford, O. Klepper, C. Kozhuharov, T. Ludziejewski, B. Franzke, F. Nolden, F. Reich, P. Rymusa, Z. Stachura, M. Steck, P. Swiat, A. Warczak, *Phys. Rev. Lett.* 85 (2000) 3109.
- [8] T. Beier, *Phys. Rep. Lett.* 339 (2000) 79.
- [9] V.A. Yerokhin, V.M. Shabaev, *Phys. Rev. A* (2001) 062507.
- [10] M.K. Inal, J. Dubau, *J. Phys. B : At. Mol. Phys.* 20 (1987) 4221.
- [11] M.K. Inal, J. Dubau, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* 22 (1989) 3329.
- [12] M.K. Inal, J. Dubau, *Phys. Rev. A* 47 (1993) 4794.
- [13] M.H. Chen, J.H. Scofield, *Phys. Rev. A* 52 (1995) 2057.
- [14] H.L. Zhang, D.H. Sampson, M.K. Inal, *Phys. Rev. A* 63 (2001) 052713.

-
- [15] S.W. Rachedi, M.K. Inal, J. Dubau, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* 38 (2005) 547.
- [16] R. Bensaid, M.K. Inal, J. Dubau, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* 39 (2006) 4131.
- [17] Z. Bedrane, M.K. Inal, S. Fritzsche, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* 42 (2009) 055701.
- [18] E. Haug, *Solar Phys.* 71 (1981) 77.
- [19] J.C. Kieffer , J.P. Matte, M. Chaker, Y. Beaudoin, T.W. Johnston, C.Y. Chien, S. Coe, G. Mourou, J. Dubau, M.K. Inal, *Phys. Rev. E* 48 (1993) 4648.
- [20] T. Fujimoto, S.A. Kazantsev, *Plasma Phys. Control. Fusion.* 39 (1997)1267.
- [21] J. weinheimer, I. Ahmad, O. Herzog, H-J. Kunze, G. Bertschinger, W. Biel, G. Borchert, M. Bitter, *Rev. Sci. Instrum.* 72 (2001) 2566.
- [22] J.R. Henderson, P. Beiersdorfer, C.L. Bennett, S. Chantrenne, D.A. Knapp, R.E. Marrs, M.B. Schneider, K.L. Wong , G.A. Doschek, J.F. Seely, C.M. Brown, R.E. LaVilla, J. Dubau, M.A. Levine, *Phys. Rev. Lett.* 65 (1990) 705.
- [23] P. Beiersdorfer, G. Brown, S. Utter, P. Neill, K.J. Reed, A.J. Smith, R.S. Thoe. *Phys. Rev. A* 60 (1999) 4156.
- [24] K. Akita, K. Tanaka, T. Watanabe, *Solar Phys.* 86 (1983) 101.
- [25] J.C. Kieffer , J.P. Matte, H. Pépin, M. Chaker, Y. Beaudoin, T.W. Johnston, C.Y. Chien, S. Coe, G. Mourou, J. Dubau, *Phys. Rev. Lett.* 68 (1992) 480.
- [26] F. Walden, H-J. Kunze, A. Petoyan, A. Urnov, J. Dubau, *Phys. Rev. E* 59 (1999) 3562.
- [27] Y. Itikawa, R. Srivastava, K. Sakimoto, *Phys. Rev. A* 44 (1991) 7195.
- [28] K.J. Reed, M.H. Chen, *Phys. Rev. A* 48 (1993) 3644.
- [29] P. Beiersdorfer, D.A. Vogel, K.J. Reed, V. Decaux, J.H. Scofield, K. Widmann, G. Hölzer, E. Förster, O. Wehrhan, D.W. Savin, L. Schweikhard, *Phys. Rev. A* 53 (1996) 3974.

-
- [30] P. Beiersdorfer, J. Crespo López-Urrutia, V. Decaux, K. Widmann, P. Neill, *Rev. Sci. Instrum.* 68 (1997) 1073.
- [31] J.H. Scofield, *Phys. Rev. A* 44 (1991) 139.
- [32] A.S. Shlyaptseva, R.C. Mancini, P. Neill, P. Beiersdorfer, *Rev. Sci. Instrum.* 68 (1997) 1095.
- [33] A.S. Shlyaptseva, R.C. Mancini, P. Neill, P. Beiersdorfer, J. Crespo López-Urrutia, K. Widmann, *Phys. Rev. A* (1998) 888.
- [34] N. Nakamura, D. Kato, N. Miura, T. Nakahara, S. Ohtani, *Phys. Rev. A* 63 (2001) 024501.
- [35] D.L. Robbins, P. Beiersdorfer, A.Ya. Faenov, T.A. Pikuz, D.B. Thorn, H. Chen, K.J. Reed, A.J. Smith, K.R. Boyce, G.V. Brown, R.L. Kelley, C.A. Kilbourne, F.S. Porter, *Phys. Rev. A* 74 (2006) 022713.
- [36] H.L. Zhang, D.H. Sampson, R.E.H. Clark, *Phys. Rev. A* 41 (1990) 198.
- [37] L. Blanchet, M. Cornille, J. Dubau, P. Faucher, J. Lion, S. Volonté, *Astron. Astrophys.* 152 (1985) 417.
- [38] J. Eichler, A. Ichihara, T. Shirai, *Phys. Rev. A* 58 (1998) 2128.
- [39] A. Surzhykov, S. Fritzsche, Th. Stöhlker, *Phys. Lett. A* 289 (2001) 213.
- [40] A. Surzhykov, S. Fritzsche, Th. Stöhlker, S. Tachenov, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* 35 (2002) 3713.
- [41] A. Surzhykov, S. Fritzsche, Th. Stöhlker, S. Tachenov, *Phys. Rev. A* 68 (2003) 022710.
- [42] S. Fritzsche, A. Surzhykov, Th. Stöhlker, *Phys. Rev. A* 72 (2005) 012704.
- [43] A. Surzhykov, U.D. Jentschura, Th. Stöhlker, S. Fritzsche, *Phys. Rev. A* 73 (2006) 032716 ; 74 (2006) 052710.
- [44] A.N. Parmar, J.L. Culhane, C.G. Rapley, E. Antonucci, A.H. Gabriel, M. Loulergue, *Mon. Not. R. Astr. Soc.* 197 (1981) 29.
- [45] K. Tanaka, N. Nitta, K. Akita, T. Watanabe, *Solar Phys.* 86 (1983) 91.
- [46] M.A. Bautista, L. Titarchuk, *Astrophys. J.* 511 (1999) 105.

-
- [47] K.L. Wong, P. Beiersdorfer, K.J. Reed, A.L. Osterheld, in : P. Beiersdorfer, T. Fujimoto (Eds.), *Proceedings of the 3rd US-Japan Workshop on Plasma Polarization Spectroscopy, University of California Lawrence Livermore National Laboratory Report UCRL-ID-146907*, (2001) 311.
- [48] F.A. Parpia, W.R. Johnson, *Phys. Rev. A* 26 (1982) 1142.
- [49] L.I. Schiff, Quantum Mechanics, *McGraw-Hill Book Company, New York* (1968).
- [50] J. Eichler, W.E. Meyerhof, Relativistic Atomic Collisions, *Academic Press, San Diego* (1995).
- [51] W. Greiner, B. Müller and J. Rafelski, Quantum Electrodynamics of Strong Fields, *Springer-Verlag Berlin Heidelberg* (1985).
- [52] M.E. Rose, Elementary Theory of Angular Momentum, *Wiley, New York* (1957).
- [53] H.F. Beyer, D. Liesen, F. Bosch, K.D. Finlayson, M. Jung, O. Klepper, R. Moshhammer, K. Beckert, H. Eickhoff, B. Franzke, F. Nolden, P. Spädtke, M. Steck, G. Menzel, R.D. Deslattes, *Phys. Lett. A* 184 (1994) 435.
- [54] H.A. Kramers, *Philos. Mag.* 46 (1923) 836.
- [55] W. Gordan, *Ann. Phys. (Leipzig)* 2 (1929) 1031.
- [56] M. Stobbe, *Ann. Phys. (Leipzig)* 7 (1930) 661.
- [57] F. Sauter, *Ann. Physik* 9 (1931) 217 ;
F. Sauter, *ibid.* 11 (1931) 454.
- [58] M. Gavrila. *Phys. Rev.* 113 (1959) 514.
- [59] B.C.H. Nagel, *Ark. Fysik* 18 (1960) 1.
- [60] R.H. Pratt, A. Ron, H.K. Tseng, *Rev. Mod. Phys.* 45 (1973) 273.
- [61] Y.S. Kim and R.H. Pratt, *Phys. Rev. A* 27 (1983) 2913.
- [62] D.E. Osterbrock : Astrophysics of Gaseous Nebulae and Active Galactic Nuclei, *University Science, Mill Valley, CA* (1989).
- [63] A. Ichihara, T. Shirai and J. Eichler, *Phys. Rev. A* 49 (1994) 1875.

-
- [64] J. Eichler, A. Ichihara and T. Shirai, *Phys. Rev. A* 51 (1995) 3025.
- [65] A. Ichihara and J. Eichler, *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 74 (2000) 1.
- [66] A. Ichihara and J. Eichler, *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 79 (2001) 187.
- [67] R.H. Pratt, R. Levee, R. Pexton and W. Aron, *Phys. Rev. A* 134 (1964) 898.
- [68] W.R. Allign and W.R. Johnson, *Phys. Rev. A* 139 (1965) 1050.
- [69] A. Surzhykov, S. Fritzsche, A. Gumberidze and Th. Stöhlker, *Phys. Rev. Lett.* 88 (2002) 153001.
- [70] A. Burgess, *Mem. Roy. Ast. Soc.* 69 (1964) 1.
- [71] Y. Hahn and D.W. Rule, *J. Phys. B : At. Mol. Phys.*, 10 (1977) 2689.
- [72] E. Zerrad and Y. Hahn, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 59 (1998) 637.
- [73] D. McLaughlin and Y. Hahn, *Phys. Rev. A* 43 (1991) 1313.
- [74] R.E. Marrs *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* 60 (1988) 1715.
- [75] M.A. Levine, R.E. Marrs, J.R. Henderson, D.A. Knapp et M.B. Schneider, *Phys. Scr. T* 22 (1988) 157.
- [76] E.D. Donets, V.I. Ilushchenko et V.A. Alpert, Première Conférence sur les Sources d'Ions, *Saclay, France* (1969) 625.
- [77] F.J. Kurrel *et al.*, *Phys. Scr. T* 73 (1997) 371.
- [78] D.A. Knapp *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* 62 (1989) 2104.
- [79] P. Beiersdorfer *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* 65 (1990) 1995.
- [80] K. Wong *et al.*, *Z. Phys. D* 21 (1991) S197.
- [81] T. Cowan *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* 66 (1991) 1150.
- [82] P. Beiersdorfer *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* 67 (1991) 2272.
- [83] D.A. Knapp *et al.*, *Nucl. Instr. and Meth. A* 334 (1993) 305.
- [84] R.E. Marrs, *Rev. Sci. Instrum.*, 67 (1996) 941.
- [85] R.E. Marrs, S.R. Elliott, D.A. Knapp, *Phys. Rev. Lett.* 72 (1994) 4082.

-
- [86] U. Fano, *Rev. Mod. Phys.* 29 (1957) 74.
- [87] M. Jacob and G.C. Wick, *Ann. Phys.* 7 (1959) 404.
- [88] V.B. Berestetskii, E.M. Lifshitz and L.P. Pitaevskii, *Quantum Electrodynamics, Oxford : Pergamon* (1982).
- [89] A.R. Edmonds, *Angular Momentum in Quantum Mechanics, Princeton University Press, Princeton* (1957).
- [90] K. Blum, *Density Matrix Theory and applications, 2^{ed} Plenum, New York* (1996).
- [91] A. Surzhykov, P. Koval, S. Fritzsche, *Comput. Phys. Commun.* 165 (2005) 139.
- [92] S. Fritzsche, *Comput. Phys. Commun.* 103 (1997) 51.
S. Fritzsche, *Comput. Phys. Commun.* 141 (2001) 163.
- [93] M.F. Gu, *Astrophys. J.* 582 (2003) 1241.
- [94] D.H. Sampson, H.L. Zhang, C.J. Fontes, *Phys. Rep.* 477 (2009) 111.
- [95] A. Surzhykov, S. Fritzsche, W.D. Sepp, Th. Stöhlker, A. Orsic Muthig, *Nucl. Instr. and Meth. B*, 235 (2005) 276.
- [96] M.B. Trzhaskovskaya, V.K. Nikulin, R.E.H. Clark, *At. Data Nucl. Data Tables* 94 (2008) 71.

Annexe A

Niveaux d'énergie de l'ion Fe^{25+}

TABLE A.1 – Energies (en keV) des différents niveaux de l'ion Fe^{25+} ayant un nombre quantique principal jusqu'à $n = 6$, calculées par rapport au niveau fondamental $1s_{1/2}$. Ces valeurs sont obtenues à l'aide du code FAC développé par Gu.

Numéro	Niveau	Energie (keV)	Numéro	Niveau	Energie (keV)
0	$1s_{1/2}$	0.000	18	$5d_{3/2}$	8.909
1	$2p_{1/2}$	6.952	19	$5p_{3/2}$	8.909
2	$2s_{1/2}$	6.953	20	$5d_{5/2}$	8.909
3	$2p_{3/2}$	6.973	21	$5f_{5/2}$	8.909
4	$3p_{1/2}$	8.246	22	$5f_{7/2}$	8.910
5	$3s_{1/2}$	8.247	23	$5g_{7/2}$	8.910
6	$3d_{3/2}$	8.253	24	$5g_{9/2}$	8.910
7	$3p_{3/2}$	8.253	25	$6s_{1/2}$	9.021
8	$3d_{5/2}$	8.255	26	$6p_{1/2}$	9.021
9	$4p_{1/2}$	8.699	27	$6p_{3/2}$	9.022
10	$4s_{1/2}$	8.699	28	$6d_{3/2}$	9.022
11	$4d_{3/2}$	8.701	29	$6d_{5/2}$	9.022
12	$4p_{3/2}$	8.701	30	$6f_{5/2}$	9.022
13	$4d_{5/2}$	8.702	31	$6f_{7/2}$	9.022
14	$4f_{5/2}$	8.702	32	$6g_{7/2}$	9.022
15	$4f_{7/2}$	8.703	33	$6g_{9/2}$	9.022
16	$5p_{1/2}$	8.908	34	$6h_{9/2}$	9.022
17	$5s_{1/2}$	8.908	35	$6h_{11/2}$	9.022

Annexe B

Probabilités de transition radiative dans Fe^{25+}

TABLE B.1 – Probabilités de transition radiative $A(\text{s}^{-1})$ à partir de chacun des niveaux nl avec $2 \leq n \leq 6$ (désignés par leur numéros selon le tableau A.1) vers des niveaux inférieurs dans l'ion Fe^{25+} , calculées par le code FAC développé par Gu. Seules les probabilités radiatives correspondant à un rapport de branchement supérieur à 0.001 ont été listées.

Transition	$A(\text{s}^{-1})$	Transition	$A(\text{s}^{-1})$
35 \rightarrow 24	7.522[+11]	29 \rightarrow 3	2.361[+12]
34 \rightarrow 23	7.361[+11]	29 \rightarrow 7	8.621[+11]
34 \rightarrow 24	1.668[+10]	29 \rightarrow 12	3.944[+11]
33 \rightarrow 15	6.285[+11]	29 \rightarrow 19	2.045[+11]
33 \rightarrow 22	5.057[+11]	29 \rightarrow 22	1.731[+10]
33 \rightarrow 8	2.611[+09]	29 \rightarrow 0	3.364[+10]
32 \rightarrow 14	6.076[+11]	28 \rightarrow 1	2.019[+12]
32 \rightarrow 15	2.230[+10]	28 \rightarrow 3	3.868[+11]
32 \rightarrow 21	4.880[+11]	28 \rightarrow 4	7.260[+11]
32 \rightarrow 22	1.805[+10]	28 \rightarrow 7	1.430[+11]
32 \rightarrow 6	2.356[+09]	28 \rightarrow 9	3.285[+11]
31 \rightarrow 8	9.839[+11]	28 \rightarrow 16	1.682[+11]
31 \rightarrow 13	5.896[+11]	27 \rightarrow 0	8.978[+12]
31 \rightarrow 20	3.305[+11]	27 \rightarrow 2	1.310[+12]
31 \rightarrow 24	5.114[+09]	27 \rightarrow 5	4.334[+11]
30 \rightarrow 3	8.122[+09]	27 \rightarrow 8	3.328[+10]
30 \rightarrow 6	9.247[+11]	27 \rightarrow 10	2.002[+11]
30 \rightarrow 8	6.486[+10]	27 \rightarrow 13	3.991[+10]
30 \rightarrow 11	5.521[+11]	27 \rightarrow 17	1.076[+11]
30 \rightarrow 13	3.916[+10]	27 \rightarrow 20	4.067[+10]
30 \rightarrow 18	3.083[+11]	26 \rightarrow 0	8.873[+12]
30 \rightarrow 20	2.208[+10]	26 \rightarrow 2	1.323[+12]
30 \rightarrow 23	5.305[+09]	26 \rightarrow 5	4.431[+11]
30 \rightarrow 1	6.362[+09]	26 \rightarrow 10	2.066[+11]
30 \rightarrow 3	1.795[+09]	26 \rightarrow 17	1.126[+11]

Transition	$A(\text{s}^{-1})$	Transition	$A(\text{s}^{-1})$
25 \rightarrow 3	2.431[+11]	15 \rightarrow 8	6.303[+12]
25 \rightarrow 4	7.847[+10]	15 \rightarrow 3	1.894[+10]
25 \rightarrow 7	1.664[+11]	14 \rightarrow 6	5.908[+12]
25 \rightarrow 9	5.533[+10]	14 \rightarrow 8	4.185[+11]
25 \rightarrow 12	1.172[+11]	13 \rightarrow 24	9.453[+12]
25 \rightarrow 16	4.142[+10]	13 \rightarrow 7	3.214[+12]
25 \rightarrow 19	8.808[+10]	12 \rightarrow 0	3.104[+13]
24 \rightarrow 15	1.945[+12]	12 \rightarrow 2	4.411[+12]
23 \rightarrow 14	2.079[+12]	12 \rightarrow 5	1.372[+12]
22 \rightarrow 8	1.182[+12]	11 \rightarrow 1	8.055[+12]
22 \rightarrow 13	1.954[+12]	11 \rightarrow 3	1.556[+12]
21 \rightarrow 6	1.375[+11]	11 \rightarrow 4	2.678[+12]
21 \rightarrow 8	1.104[+12]	11 \rightarrow 7	5.378[+11]
20 \rightarrow 3	4.323[+12]	10 \rightarrow 1	4.006[+11]
20 \rightarrow 12	6.772[+11]	10 \rightarrow 3	8.552[+11]
20 \rightarrow 7	1.553[+12]	10 \rightarrow 4	2.845[+11]
19 \rightarrow 0	1.565[+13]	10 \rightarrow 7	6.076[+11]
19 \rightarrow 2	2.264[+12]	9 \rightarrow 0	3.081[+13]
18 \rightarrow 1	3.694[+12]	9 \rightarrow 2	4.496[+12]
18 \rightarrow 3	7.0956[+11]	9 \rightarrow 5	1.430[+12]
18 \rightarrow 4	1.306[+12]	8 \rightarrow 3	2.953[+13]
18 \rightarrow 7	2.586[+11]	7 \rightarrow 0	7.608[+13]
18 \rightarrow 9	5.597[+11]	7 \rightarrow 2	1.014[+13]
18 \rightarrow 12	1.138[+11]	6 \rightarrow 1	2.498[+13]
17 \rightarrow 1	2.001[+11]	6 \rightarrow 3	4.896[+12]
17 \rightarrow 3	4.266[+11]	5 \rightarrow 1	9.813[+11]
17 \rightarrow 4	1.400[+11]	5 \rightarrow 3	2.106[+12]
17 \rightarrow 7	2.974[+11]	4 \rightarrow 0	7.592[+13]
17 \rightarrow 9	9.980[+10]	4 \rightarrow 2	1.050[+13]
17 \rightarrow 12	2.125[+11]	3 \rightarrow 0	2.835[+14]
16 \rightarrow 0	1.549[+13]	2 \rightarrow 0	3.663[+08]
16 \rightarrow 2	2.295[+12]	1 \rightarrow 0	2.871[+14]



Contents lists available at ScienceDirect

Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B

journal homepage: www.elsevier.com/locate/nimb

Effects of the radiative recombination on the intensity and polarization of the Ly- α emission of hydrogen-like ions

L. Bettadj^a, M.K. Inal^{a,*}, A. Surzhykov^{b,c}, S. Fritzsche^{c,d}

^a Département de Physique, Université A. Belkaid, B.P. 119, 13000 Tlemcen, Algeria

^b Physikalisches Institut, Universität Heidelberg, D-69120 Heidelberg, Germany

^c GSI Helmholtzzentrum für Schwerionenforschung, D-64291 Darmstadt, Germany

^d Department of Physics, P.O. Box 3000, Fin-90014 University of Oulu, Finland

ARTICLE INFO

Article history:

Received 26 May 2010

Received in revised form 16 August 2010

Available online xxx

Keywords:

Radiative recombination

Electron impact excitation

Magnetic sublevels cross-sections

H-like ions

X-ray polarization

Line ratio

ABSTRACT

The intensity ratio of the Ly- α_1 ($2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$) to Ly- α_2 ($2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$) photon emission is analyzed for hydrogen-like Fe²⁵⁺ ions if their excitation arises in a plasma not only from the electron impact but also due to the radiative recombination (RR) of initially bare Fe²⁶⁺ ions. Under such conditions, the intensity ratio and the (degree of) linear polarization of the Ly- α_1 line are explored for collisions with an electron beam over a wide range of kinetic energies up to 50 keV. Apart from the direct population of the $2p_{1/2,3/2}$ levels via the RR of bare ions, the contributions from radiative cascades and higher multipoles are taken into account by applying a fully relativistic theory for the motion of the electrons and the electron-photon coupling. Our calculations show an overall small effect of the RR upon the degree of the Ly- α_1 polarization as well as the Ly- α_1 /Ly- α_2 intensity ratio under usual plasma conditions. However, the effects from the RR of initially bare ions may become significant at electron beam energies ~ 7 – 10 keV, for plasma conditions far away from ionization equilibrium with a relatively large proportion of bare Fe ions, as it may be realized in electron-beam ion trap experiments.

© 2010 Elsevier B.V. All rights reserved.

1. Introduction

The X-ray line emission of multiple and highly charged ions in a plasma often arises because of a whole variety of excitation processes. Apart from the (usually) dominant electron impact excitation, two- and three-body recombination processes of the next higher charge state(s) or the inner-shell ionization of ions of the next lower charge state, together with cascade processes, can also populate excited levels and leads to subsequent X-ray emission. For initially bare ions, however, no dielectronic recombination process occurs and this enables one to focus upon the radiative recombination (RR) as the main corrections to the impact excitation (IE) for the formation of X-ray hydrogen-like lines, at least as long as the electron density in the plasma is not too high. For the same reasons also, the characteristic radiation from hydrogen-like ions has been utilized in the diagnostics of various astrophysical and laboratory plasmas.

Several theoretical case studies have been carried out in the past to better understand the role of the different excitation processes upon the X-ray emission from plasmas [1–4]. More often than not these excitation processes hereby leads to a (linear) polarization and anisotropic angular distribution of the emitted

photons [5–11] if directional electrons are present in the plasma. Previous calculations by Reed and Chen [12] have shown, for example, that the degree of polarization of the Ly- α_1 line produced by direct IE with a monoenergetic electron beam is indeed significant and amounts to about 34% at an impact energy of two times the excitation threshold and still about 17% at five times the threshold, in contrast to the Ly- α_2 line which is always unpolarized and isotropic (due to the two magnetic sublevels $m_j = \pm 1/2$) as long as no external fields or polarization is introduced into the plasma. Measurements of the polarization of the Ly- α_1 line have been performed by Nakamura et al. at the electron beam ion trap (EBIT) [13] for Ti²¹⁺ as well as by Robbins et al. [14] for Ar¹⁷⁺ and Fe²⁵⁺ at various electron beam energies. In particular, these EBIT results were found to be substantially smaller than the theoretical predictions based on only the IE process and the relativistic distorted-wave code of Zhang et al. [15,16].

In general, most differential properties of characteristic radiation of multiple and highly charged ions are affected by the alignment (or polarization) that is caused and often quite different for different excitation processes. Therefore, the aim of the present paper is to analyze for Fe²⁵⁺ ions the contributions of the RR upon the intensities of Ly- α emission. Iron has been chosen because it is one of the most abundant elements in the Universe, and the Ly- α lines of Fe²⁵⁺ have been observed in the X-ray spectra of a variety of astrophysical plasmas [17–19]. In addition, Fe²⁵⁺ is one

* Corresponding author. Tel.: +213 43 20 8052.

E-mail address: m_inal@mail.univ-tlemcen.dz (M.K. Inal).

of the three hydrogen-like ions (besides Ar^{17+} and Ti^{21+}) whose the $\text{Ly} - \alpha$ line intensities have been measured in previous EBIT experiments [13,14,20]. When compared with theoretical calculations based on the relativistic convergent close-coupling (RCCC) method [21], these experimental data have revealed important information on the relativistic and quantum electrodynamics (QED) contributions to the electron–electron interaction. For the Fe^{25+} ions, the radiative lifetime of the metastable $2s_{1/2}$ level is 0.35 ns [22] and, thus, short enough so that collisional de-excitation can be omitted for electron densities below $\sim 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Such conditions are realized, for example, in EBITs, tokamak plasmas as well as in solar and stellar flares in which energetic electron beams are generated.

In this work, in more detail, we explore how the intensity and polarization of the $\text{Ly} - \alpha$ emission of hydrogen-like ions is affected in a plasma by the radiative recombination of bare ions when compared with the electron-impact excitation.

In the next section, we first recall the basic formulas from the relativistic theory of RR into initially bare ions and discuss a general expression for the corresponding cross-section to a specific magnetic sublevel of the hydrogen-like ion. Here, we also provide all formulas as required for calculating the polarization of the $\text{Ly} - \alpha_1$ line and the $\text{Ly} - \alpha_1/\text{Ly} - \alpha_2$ intensity ratio. In Section 3, we then present our calculations for the RR and IE cross-sections. Numerical results are shown for the $\text{Ly} - \alpha_1/\text{Ly} - \alpha_2$ ratio of Fe^{25+} . Especially, we discuss the effect of the RR process on this ratio. Finally a brief summary and some concluding remarks are given in Section 4. Natural units ($\hbar = m_e = c = 1$) are used throughout the paper.

2. Theoretical background

2.1. Derivation of the partial cross-section for radiative recombination

The radiative recombination of multiple charged and bare ions was considered in a number of papers, both within the non-relativistic and relativistic theory, see e.g. [23–29]. The starting point for the theoretical analysis is usually the transition matrix element that describes the capture of a free electron with momentum \mathbf{p} and spin z -component m_s by a bare ion without nuclear spin to form the hydrogen-like bound state b and that is accompanied by the simultaneous emission of a photon with wave vector \mathbf{k} and helicity λ ($\lambda = \pm 1$). In the relativistic formalism, this transition matrix element can be written as [23]

$$\langle n_b \kappa_b m_b, \mathbf{k} \lambda | T | \mathbf{p} m_s \rangle = -e \sqrt{\frac{2\pi}{L^3 \omega}} \langle n_b \kappa_b m_b | \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{u}}_{\lambda}^* e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} | \mathbf{p} m_s \rangle, \quad (1)$$

where the final state b of the bound electron is specified by the three quantum numbers (n_b, κ_b, m_b) with n_b being the principal quantum number, κ_b the relativistic Dirac angular quantum number which represents both the ‘orbital’ l_b and total j_b angular momenta ($\kappa_b = (l_b - j_b)(2j_b + 1)$), and m_b the (magnetic) projection of j_b along the z -axis. In Eq. (1), moreover, T is the electron–photon interaction operator, e the electron charge, L^3 the volume of the cube within which the photon field has been quantized, $\omega (= k)$ the photon energy, and where $\boldsymbol{\alpha}$ represents the set of Dirac matrices, and $\hat{\mathbf{u}}_{\lambda}$ a unit vector in the direction of photon polarization.

Indeed, the matrix element (1) is the ‘building block’ of the relativistic theory from which all the properties of the RR of bare ions can be calculated quite easily. For example, the partial RR cross-section for the capture of unpolarized electrons to form a hydrogen-like ion in the magnetic sublevel $|n_b \kappa_b m_b\rangle$ can be obtained as

$$\sigma^{\text{RR}}(n_b \kappa_b m_b) = \frac{(2\pi)^4 L^3 \omega^2}{p^2 (2\pi)^3} \times \frac{1}{2} \sum_{m_s \lambda} \int |\langle n_b \kappa_b m_b, \mathbf{k} \lambda | T | \mathbf{p} m_s \rangle|^2 d\hat{\mathbf{k}}, \quad (2)$$

if the emitted RR photons are not observed. As seen from Eq. (2), this partial cross-section is obtained by averaging over the spin projections m_s of the incident electron and by a summation (integration) over λ and all directions \mathbf{k} of the outgoing photon. For the further evaluation of this cross-section, it is convenient to choose the z -axis along the direction $\hat{\mathbf{p}}$ of the incident electron. Inserting Eq. (1) into Eq. (2), and by expanding the initial state wavefunction $|\mathbf{p} m_s\rangle$ into spherical partial waves $|\varepsilon \kappa m_s\rangle$ [23], we find

$$\sigma^{\text{RR}}(n_b \kappa_b m_b) = \frac{8\pi^3 \alpha \omega}{p^2} \sum_{m_s \lambda} \int \left| \sum_{\kappa} i^l e^{i\delta_{\kappa}} \sqrt{2l+1} \left\langle l 0 \frac{1}{2} m_s | j m_s \right\rangle \right. \\ \left. \times \langle n_b \kappa_b m_b | \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{u}}_{\lambda}^* e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} | \varepsilon \kappa m_s \rangle \right|^2 d\hat{\mathbf{k}}, \quad (3)$$

where ε is taken as the kinetic energy of the incident electron related to the momentum by $\varepsilon = \sqrt{1+p^2} - 1$, and $\alpha (= e^2)$ is the fine-structure constant. In this expression, the quantum numbers (κ, l, j) of the initial continuum state have a similar meaning as for the bound state, while δ_{κ} is the relativistic Coulomb phase shift and $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j m \rangle$ denotes a Clebsch–Gordan coefficient.

We further proceed by expanding the transition matrix element in Eq. (3) in terms of the matrix elements of the electric $Q_{LM}^{(E)}$ and magnetic $Q_{LM}^{(M)}$ multipole moment operators [30]. Making use of the Wigner–Eckart theorem, we can write this expansion in the form

$$\langle n_b \kappa_b m_b | \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{u}}_{\lambda}^* e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} | \varepsilon \kappa m_s \rangle = \frac{(-1)^{j_b - j}}{\sqrt{2j+1}} \sum_{LM} \sqrt{2\pi(2L+1)} \\ \times \frac{(-i\omega)^L}{(2L+1)!!} \left(\frac{L+1}{L}\right) D_{M\lambda}^{(L)}(\varphi, \theta, 0) \langle j_b m_b LM | j m_s \rangle \\ \times \left[\langle n_b \kappa_b | Q_L^{(E)} | \varepsilon \kappa \rangle + i\lambda \langle n_b \kappa_b | Q_L^{(M)} | \varepsilon \kappa \rangle \right], \quad (4)$$

where $D_{M\lambda}^{(L)}(\varphi, \theta, 0)$ denotes an element of the Wigner rotation matrix which carries the z -axis of the coordinate system into the photon direction $\hat{\mathbf{k}}$ as defined by the polar θ and azimuthal φ angles. In Eq. (4), moreover, $\langle n_b \kappa_b | Q_L^{(E)} | \varepsilon \kappa \rangle$ and $\langle n_b \kappa_b | Q_L^{(M)} | \varepsilon \kappa \rangle$ are the reduced matrix elements of the electric and magnetic multipole operators. It is worth mentioning that, for every L , one of these two reduced matrix elements must vanish simply because of parity conservation since $(l_b + l + L)$ must be even and odd for the electric and magnetic multipoles, respectively. Furthermore, the multipole operators in Eq. (4) are normalized in such a way that they have the familiar form $Q_{1M}^{(E)} = e r Y_{1M}(\hat{\mathbf{r}})$ of the electric-dipole operator within the nonrelativistic long-wavelength limit.

Substituting expression (4) into Eq. (3), we can perform the integration over all angles of \mathbf{k} by making use of the orthogonality properties of the D -matrix elements to obtain the partial RR cross-section in the form

$$\sigma^{\text{RR}}(n_b \kappa_b m_b) = \frac{32\pi^4 \alpha}{p^2} \sum_{m_s \lambda} \sum_{LM} \frac{\omega^{2L+1}}{[(2L+1)!!]^2} \left(\frac{L+1}{L}\right) \sum_{\kappa \kappa'} i^{l-l'} e^{i(\delta_{\kappa} - \delta_{\kappa'})} (-1)^{2j_b - j - j'} \left[\frac{(2l+1)(2l'+1)}{(2j+1)(2j'+1)} \right]^{1/2} \\ \left\langle l 0 \frac{1}{2} m_s | j m_s \right\rangle \left\langle l' 0 \frac{1}{2} m_s | j' m_s \right\rangle \\ \times \langle j_b m_b LM | j m_s \rangle \langle j_b m_b LM | j' m_s \rangle \left[\langle n_b \kappa_b | Q_L^{(E)} | \varepsilon \kappa \rangle + i\lambda \langle n_b \kappa_b | Q_L^{(M)} | \varepsilon \kappa \rangle \right] \left[\langle n_b \kappa_b | Q_L^{(E)} | \varepsilon \kappa' \rangle^* - i\lambda \langle n_b \kappa_b | Q_L^{(M)} | \varepsilon \kappa' \rangle^* \right]. \quad (5)$$

Of course, by summing over the final magnetic quantum number m_b , one obtains from (5) the well-known total RR cross-section

$$\begin{aligned} \sigma^{\text{RR}}(n_b \kappa_b) &= \sum_{m_b} \sigma^{\text{RR}}(n_b \kappa_b m_b) \\ &= \frac{64\pi^4 \alpha}{p^2} \sum_L \frac{\omega^{2L+1}}{[(2L+1)!!]^2} \left(\frac{L+1}{L} \right) \\ &\quad \times \sum_{\kappa} \left(\left| \langle n_b \kappa_b \parallel Q_L^{(E)} \parallel \varepsilon \kappa \rangle \right|^2 + \left| \langle n_b \kappa_b \parallel Q_L^{(M)} \parallel \varepsilon \kappa \rangle \right|^2 \right). \end{aligned} \quad (6)$$

This cross-section has been derived and discussed at several places in the literature [23,27].

2.2. Intensity ratio of the Ly – α_1 to Ly – α_2 lines

Line radiation emitted in the spontaneous decay of an excited level, formed in collisions with an unpolarized electron beam, can be linearly polarized and can have an anisotropic angular distribution. For the Ly – α_1 line, the intensity $I_{\text{Ly}\alpha_1}(\vartheta)$ emitted at the angle ϑ with respect to the electron beam direction is related to the mean (4π -averaged) intensity $\langle I_{\text{Ly}\alpha_1} \rangle$ by [31]

$$I_{\text{Ly}\alpha_1}(\vartheta) = \langle I_{\text{Ly}\alpha_1} \rangle \frac{1 - P_{\text{Ly}\alpha_1} \cos^2 \vartheta}{1 - P_{\text{Ly}\alpha_1}/3}, \quad (7)$$

where $P_{\text{Ly}\alpha_1}$ is the degree of linear polarization of the line Ly – α_1 for the emission angle $\vartheta = 90^\circ$. If the populations of the $2p_{3/2}$ magnetic sublevels $m_b = 1/2$ and $m_b = 3/2$ are denoted by $N_{1/2}$ and $N_{3/2}$, respectively, the degree of linear polarization $P_{\text{Ly}\alpha_1}$ can be expressed as [5]

$$P_{\text{Ly}\alpha_1} = \frac{3(N_{1/2} - N_{3/2})}{5N_{1/2} + 3N_{3/2}}. \quad (8)$$

With regard to the line Ly – α_2 , it is always unpolarized and has an isotropic angular distribution, $I_{\text{Ly}\alpha_2}(\vartheta) = I_{\text{Ly}\alpha_2}$, because of the $j = 1/2$ total angular momentum of the upper level. This is independent of whether this line is blended with the magnetic-dipole (M1) transition $2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$. For the here considered Fe^{25+} ion, for example, the Ly – α_2 and M1 lines are separated by only 0.14 mÅ and cannot be resolved spectroscopically [14,20]. It is thus necessary to include the contribution from the M1 line in calculating the Ly – α_1 to Ly – α_2 intensity ratio.

If observed perpendicularly to the electron beam, the intensity ratio of the Ly – α_1 and the (combined) Ly – α_2 (+ M1) lines can be expressed as

$$\frac{I_{\text{Ly}\alpha_1}(90^\circ)}{I_{\text{Ly}\alpha_2(+M1)}} = \frac{\langle I_{\text{Ly}\alpha_1} \rangle}{I_{\text{Ly}\alpha_2(+M1)}} \frac{3}{3 - P_{\text{Ly}\alpha_1}}. \quad (9)$$

In the present study, we shall explore this ratio for a monoenergetic and unidirectional electron beam at an electron density that is low enough so that the impact excitation (IE) and ionization of the hydrogen-like ions occur almost entirely from the $1s_{1/2}$ ground level. For the combined IE and RR processes, then, the ratio of the mean intensity of Ly – α_1 to the (isotropic) intensity of Ly – α_2 (+M1) lines can be expressed in terms of the corresponding IE and RR cross-sections for the $n_b = 2$ upper levels as

$$\begin{aligned} &\frac{\langle I_{\text{Ly}\alpha_1} \rangle}{I_{\text{Ly}\alpha_2(+M1)}} \\ &= \frac{\sigma_{\text{eff}}^{\text{IE}}(2p_{3/2}) + \rho \sigma_{\text{eff}}^{\text{RR}}(2p_{3/2})}{\sigma_{\text{eff}}^{\text{IE}}(2p_{1/2}) + B_{\text{M1}} \sigma_{\text{eff}}^{\text{IE}}(2s_{1/2}) + \rho \left[\sigma_{\text{eff}}^{\text{RR}}(2p_{1/2}) + B_{\text{M1}} \sigma_{\text{eff}}^{\text{RR}}(2s_{1/2}) \right]}, \end{aligned} \quad (10)$$

and where $\sigma_{\text{eff}}^{\text{IE}}$ and $\sigma_{\text{eff}}^{\text{RR}}$ denote the *effective* cross-sections that include the effects of radiative cascades from higher $n_b \geq 3$ levels.

Furthermore, $\rho = N_b/N_H$ is the ratio of the bare and hydrogen-like charge state densities, and B_{M1} denotes the branching ratio for the $2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ decay due to the magnetic-dipole transition. In addition, the same decay of the $2s_{1/2}$ level can proceed also via a two-photon transition which is dominant at low and medium nuclear charges Z of the ions [22].

In the steady state of the ionization dynamics of the ions, involving incident electrons with kinetic energy larger than the $1s$ ionization threshold, the abundance ratio ρ is determined by the equation

$$\rho = \frac{\sigma^{\text{II}}}{\sigma_{\text{tot}}^{\text{RR}}}, \quad (11)$$

where σ^{II} is the electron impact ionization cross-section of the H-like ion from its $1s_{1/2}$ ground level and $\sigma_{\text{tot}}^{\text{RR}} = \sum_{n_b \kappa_b} \sigma^{\text{RR}}(n_b \kappa_b)$ is the total RR cross-section summed over the ground as well as all excited H-like recombined levels. A possible charge exchange recombination due to ion–ion and ion–atom collisions is ignored in our study. The polarization degree $P_{\text{Ly}\alpha_1}$ from Eq. (9) can be determined from Eq. (8) by replacing the N_{m_b} population ($m_b = 1/2$ and $3/2$) by the combination of the effective cross-sections ($\sigma_{\text{eff}}^{\text{IE}}(2p_{3/2} m_b) + \rho \sigma_{\text{eff}}^{\text{RR}}(2p_{3/2} m_b)$). These magnetic-sublevel cross-sections for both RR and IE can be expressed as

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{eff}}^{\text{P}}(2p_{3/2} m_b) &= \sigma^{\text{P}}(2p_{3/2} m_b) + \sum_{n'_b=3}^{n_{\text{max}}} \sum_{\kappa'_b} B(n'_b \kappa'_b \rightarrow 2p_{3/2}) \\ &\quad \times \sum_{m'_b} \left\langle \frac{3}{2} m_b 1 (m'_b - m_b) j'_b m'_b \right\rangle^2 \sigma_{\text{eff}}^{\text{P}}(n'_b \kappa'_b m'_b), \end{aligned} \quad (12)$$

where the superscript ‘P’ refers to either the IE or RR process, and $B(n'_b \kappa'_b \rightarrow 2p_{3/2})$ denotes the branching ratio for the radiative transition from some cascading level $n'_b \kappa'_b$ ($n'_b \geq 3$) to the $2p_{3/2}$ level. In Eq. (12), the first term on the right-hand side is the direct part of the cross-section, while the second term gives the cascade contribution. Note that all corrections for cascades from sublevels with $n'_b + 1 \leq n_b \leq n_{\text{max}}$ to sublevel $n'_b \kappa'_b m'_b$ should be included also in the $\sigma_{\text{eff}}^{\text{P}}(n'_b \kappa'_b m'_b)$ cross-section. All the cascading levels are assumed to decay radiatively to lower-lying levels by electric-dipole transitions. Forbidden M1, E2, and M2 transitions are typically significant, if at all, only for the decay to the ground level.

3. Numerical results and discussion

3.1. Radiative recombination and excitation cross-sections data

Exact relativistic calculations of the partial cross-sections for RR of initially bare ions into the hydrogen-like magnetic sublevels $n_b \kappa_b m_b$ requires the evaluation of the free-bound reduced matrix elements of the electric and magnetic multipole operators, according to Eq. (5). These matrix elements can be expressed in terms of radial matrix elements, Clebsch–Gordan coefficients and 9- j symbols [25,29]. The evaluation of the radial matrix elements have been carried out by using the computer-algebraic package DIRAC [32], which represents a toolbox of Maple procedures designed for studying the properties and dynamical behavior of hydrogen-like ions.

In Tables 1 and 2, we list our results of the partial cross-sections for RR into the excited $n_b = 2$ and $n_b = 3$ sublevels of Fe^{25+} for several electron kinetic energies in the two ranges $1 \leq \varepsilon \leq 6$ keV and $7 \leq \varepsilon \leq 50$ keV, respectively. The accuracy of the computations was partially checked by comparison with the exact relativistic results of Ichihara and Eichler [33] for the RR cross-sections to the Fe^{25+} levels with $n_b \leq 3$ (summed over m_b) for which an excellent agreement was found. An agreement better than 3.2% was also

Table 1

Partial cross-sections (in barns) for the radiative recombination from Fe^{26+} bare ion to the $n_b = 2$ and $n_b = 3$ magnetic sublevels of Fe^{25+} for various incident electron kinetic energies between 1 and 6 keV. The first and second rows refer to the direct RR cross-sections as obtained in the electric-dipole approximation and by taking into account all radiation multipoles, respectively. The third row for the $n_b = 2$ sublevels refer to effective RR cross-sections which include cascade contributions from the $n_b = 3-6$ sublevels. $x[y]$ denotes $x \times 10^y$.

Excited sublevel	ε (keV)			
	1	2	3	6
$2s_{1/2} m_b = 1/2$	1.08[+2]	5.04[+1]	3.13[+1]	1.28[+1]
	1.08[+2]	5.05[+1]	3.14[+1]	1.30[+1]
	1.30[+2]	5.82[+1]	3.53[+1]	1.40[+1]
$2p_{1/2} m_b = 1/2$	7.17[+1]	2.60[+1]	1.33[+1]	3.55
	7.26[+1]	2.65[+1]	1.36[+1]	3.70
	1.26[+2]	4.23[+1]	2.13[+1]	5.99
$2p_{3/2} m_b = 1/2$	1.15[+2]	3.99[+1]	1.96[+1]	4.78
	1.16[+2]	4.05[+1]	2.00[+1]	4.99
	1.91[+2]	6.12[+1]	2.95[+1]	7.62
$2p_{3/2} m_b = 3/2$	2.30[+1]	9.84	5.63	1.86
	2.36[+1]	1.01[+1]	5.80	1.93
	5.65[+1]	2.17[+1]	1.21[+1]	4.10
$3s_{1/2} m_b = 1/2$	3.56[+1]	1.63[+1]	1.00[+1]	3.98
	3.56[+1]	1.64[+1]	1.00[+1]	4.03
$3p_{1/2} m_b = 1/2$	2.71[+1]	9.77	4.94	1.30
	2.73[+1]	9.88	5.02	1.34
$3p_{3/2} m_b = 1/2$	4.47[+1]	1.52[+1]	7.34	1.75
	4.49[+1]	1.53[+1]	7.46	1.82
$3p_{3/2} m_b = 3/2$	8.14	3.64	2.11	6.99[−1]
	8.25	3.70	2.16	7.19[−1]
$3d_{3/2} m_b = 1/2$	1.70[+1]	4.00	1.49	2.16[−1]
	1.73[+1]	4.10	1.55	2.32[−1]
$3d_{3/2} m_b = 3/2$	1.70	4.72[−1]	1.94[−1]	3.29[−2]
	1.74	4.88[−1]	2.02[−1]	3.51[−2]
$3d_{5/2} m_b = 1/2$	2.08[+1]	4.71	1.71	2.38[−1]
	2.11[+1]	4.84	1.78	2.57[−1]
$3d_{5/2} m_b = 3/2$	6.78	1.85	7.50[−1]	1.23[−1]
	6.91	1.89	7.73[−1]	1.29[−1]
$3d_{5/2} m_b = 5/2$	0.00	0.00	0.00	0.00
	1.63[−2]	6.12[−3]	3.07[−3]	7.29[−4]

found with the results of Scofield [34] for the partial RR cross-sections.

To show the effects of the higher multipoles in the expansion of the electron–photon interaction, Tables 1 and 2 display the RR cross-sections calculated within both, the electric-dipole approximation (first row) and the exact relativistic theory involving all multipoles L (second row). While the two calculations agree quite well in most of the cases, let us note here only that the inclusion of the higher multipoles tends to enhance the alignment of the $2p_{3/2}$ level so that the cross-section ratio $\sigma^{\text{RR}}(2p_{3/2} m_b = 1/2)/\sigma^{\text{RR}}(2p_{3/2} m_b = 3/2)$ is increased by a factor of 1.26 at $\varepsilon = 50\text{keV}$.

To understand the (radiative) cascade contributions following the RR into the $n_b \geq 3$ magnetic sublevels, we show in Tables 1 and 2 as third entries (row) for the $n_b = 2$ sublevels also the effective RR cross-sections. These cross-sections include the cascade decay of all the 172 sublevels with $3 \leq n_b \leq 6$, based on the fully relativistic RR cross-sections for these sublevels. Moreover, all the required radiative transition probabilities in Fe^{25+} were calculated with the FAC code developed by Gu [35]. The restriction to the sublevels with $n_b \leq 6$ is justified since the direct RR cross-sections are known to scale as n_b^{-3} [36,37]. From the comparison of the second and third rows in Tables 1 and 2, it is seen that the contribution of cascades into the $2s_{1/2}$ level decreases with increasing

Table 2

Same as Table 1, but for several incident electron kinetic energies above the $n_b = 1 \rightarrow n_b = 2$ excitation threshold, in the 7–50 keV range.

Excited sublevel	ε (keV)				
	7	10	15	25	50
$2s_{1/2} m_b = 1/2$	1.03[+1]	6.07	3.17	1.29	3.26[−1]
	1.05[+1]	6.23	3.30	1.38	3.78[−1]
	1.12[+1]	6.60	3.45	1.43	3.87[−1]
$2p_{1/2} m_b = 1/2$	2.57	1.17	4.43[−1]	1.18[−1]	1.68[−2]
	2.69	1.24	4.85[−1]	1.37[−1]	2.20[−2]
	4.45	2.20	9.61[−1]	3.28[−1]	7.28[−2]
$2p_{3/2} m_b = 1/2$	3.38	1.44	5.10[−1]	1.24[−1]	1.54[−2]
	3.55	1.55	5.70[−1]	1.49[−1]	2.23[−2]
	5.60	2.61	1.09	3.56[−1]	7.68[−2]
$2p_{3/2} m_b = 3/2$	1.41	7.07[−1]	2.96[−1]	8.69[−2]	1.33[−2]
	1.47	7.40[−1]	3.14[−1]	9.42[−2]	1.53[−2]
	3.19	1.71	8.09[−1]	2.96[−1]	6.95[−2]
$3s_{1/2} m_b = 1/2$	3.19	1.86	9.63[−1]	3.88[−1]	9.73[−2]
	3.24	1.91	1.00	4.16[−1]	1.13[−1]
$3p_{1/2} m_b = 1/2$	9.37[−1]	4.22[−1]	1.59[−1]	4.22[−2]	5.94[−3]
	9.74[−1]	4.46[−1]	1.73[−1]	4.84[−2]	7.74[−3]
$3p_{3/2} m_b = 1/2$	1.23	5.23[−1]	1.83[−1]	4.42[−2]	5.48[−3]
	1.29	5.58[−1]	2.03[−1]	5.29[−2]	7.84[−3]
$3p_{3/2} m_b = 3/2$	5.28[−1]	2.62[−1]	1.08[−1]	3.16[−2]	4.79[−3]
	5.45[−1]	2.73[−1]	1.14[−1]	3.40[−2]	5.47[−3]
$3d_{3/2} m_b = 1/2$	1.35[−1]	4.34[−2]	1.10[−2]	1.72[−3]	1.15[−4]
	1.47[−1]	4.85[−2]	1.29[−2]	2.23[−3]	1.88[−4]
$3d_{3/2} m_b = 3/2$	2.12[−2]	7.29[−3]	1.98[−3]	3.45[−4]	2.78[−5]
	2.28[−2]	8.03[−3]	2.27[−3]	4.24[−4]	3.96[−5]
$3d_{5/2} m_b = 1/2$	1.48[−1]	4.65[−2]	1.15[−2]	1.75[−3]	1.14[−4]
	1.61[−1]	5.24[−2]	1.37[−2]	2.33[−3]	1.91[−4]
$3d_{5/2} m_b = 3/2$	7.87[−2]	2.64[−2]	6.92[−3]	1.13[−3]	7.94[−5]
	8.34[−2]	2.86[−2]	7.81[−3]	1.38[−3]	1.17[−4]
$3d_{5/2} m_b = 5/2$	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
	5.05[−4]	2.02[−4]	6.44[−5]	1.34[−5]	1.39[−6]

electron energy and is found to be less than $\sim 20\%$ over the whole range of energies. In general, cascades from the higher levels affect the $2p_{3/2}$ level more than the $2p_{1/2}$ level. At $\varepsilon = 50$ keV, the cascade contribution to the RR cross-section into $2p_{3/2}$ level amounts to about 300%. The cascades also lead to a reduction of the alignment of the $2p_{3/2}$ level which increases with increasing ε .

We consider the Ly- α emission of hydrogen-like Fe^{25+} in a plasma under unidirectional electron impact excitation (IE), and accompanied by the radiative recombination of initially bare ions. Apart from the effective RR cross-sections, we therefore have to compute also the partial cross-sections for the IE of Fe^{25+} ion from its $1s_{1/2}$ ground level to the $n_b = 2$ sublevels using again the FAC code [35]. This code is based on the relativistic distorted-wave method which is known to be accurate for highly charged ions. Table 3 reports separately the direct (first row) and effective (second row) IE cross-sections for each $n_b = 2$ sublevel at various incident electron energies from 7 keV, i.e. just above threshold, up to 50 keV. In the computations of the effective cross-sections, we have taken into account the radiative cascade contributions from the 100 higher excited sublevels with $n_b = 3-5$, which may occur above the 8.2 keV threshold energy. In contrast to the RR process, the (cascade) contribution to the cross-section of each 2p sublevel decreases with energy. The effective cross-sections for IE to the $n_b = 2$ sublevels are larger than the corresponding cross-sections for RR by a factor 6–32 at $\varepsilon = 10$ keV and 28–460 at $\varepsilon = 50$ keV. As seen from Table 3, IE dominantly populates the $2p_{3/2} m_b = 1/2$ sublevel relative to $m_b = 3/2$ sublevel within the 7–50 keV energy range. We find that the cross-section ratio $\sigma_{\text{eff}}^{\text{p}}(2p_{3/2} m_b = 1/2)/\sigma_{\text{eff}}^{\text{p}}(2p_{3/2} m_b = 3/2)$

Table 3

Partial cross-sections (in barns) for the impact excitation of Fe^{25+} ion from the ground level $1s_{1/2}$ to the magnetic sublevels of each $n_b = 2$ level for various incident electron energies in the range 7–50 keV. The values in first row refer to the direct cross-sections while those in second row for $\varepsilon \geq 10$ keV refer to the effective cross-sections including radiative cascades from higher sublevels with $3 \leq n_b \leq 5$.

Excited sublevel	ε (keV)					
	7	10	15	25	35	50
$2s_{1/2} m_b = 1/2$	44.9	32.5	22.6	14.3	10.7	7.87
		38.1	27.1	18.1	14.0	10.7
$2p_{1/2} m_b = 1/2$	63.0	53.2	47.0	40.0	35.2	30.3
		58.1	50.2	42.1	36.9	31.6
$2p_{3/2} m_b = 1/2$	94.0	77.9	65.3	50.8	42.1	34.1
		84.0	69.2	53.2	43.9	35.4
$2p_{3/2} m_b = 3/2$	27.5	24.9	25.9	26.9	26.5	25.0
		29.0	28.7	29.0	28.1	26.3

decreases from 3.42 to 1.35 for $P \equiv \text{IE}$ and from 1.76 to 1.11 for $P \equiv \text{RR}$ as ε increases from 7 to 50 keV. We finally note that the cascade effects lead to a reduction of the alignment of the $2p_{3/2}$ level more important for the RR than the IE process.

3.2. Line intensity ratio

Making use of the cross-sections from Tables 1–3, we calculated the degree of polarization of the $\text{Ly} - \alpha_1$ line as well as the intensity ratio of the $\text{Ly} - \alpha_1$ to $\text{Ly} - \alpha_2(+\text{M1})$ lines of Fe^{25+} . The branching ratio B_{M1} that occurs in Eq. (10) was obtained as 0.128.

3.2.1. Electron energies below the $n_b = 1 \rightarrow 2$ excitation threshold

For all kinetic energies of the electrons below the $n_b = 1 \rightarrow 2$ excitation threshold, only the RR leads to the population of the $n_b = 2$ excited levels. For these energies in the range 1–6 keV, Figs. 1 and 2 display the calculated polarization degree of the $\text{Ly} - \alpha_1$ line and the intensity ratio of the $\text{Ly} - \alpha_1$ to $\text{Ly} - \alpha_2(+\text{M1})$ lines as function of the kinetic energy of the incident electrons. Beside of the direct RR contribution (dashed curve), the solid curve of Fig. 1 also includes the radiative cascade contributions from the sublevels with $3 \leq n_b \leq 6$. Obviously, the cascade effects result in a significant decrease of the polarization degree of $\text{Ly} - \alpha_1$. This decrease is about 16% at $\varepsilon = 1$ keV and even 30% at $\varepsilon = 6$ keV.

Our calculations indicate that the decrease of the $\text{Ly} - \alpha_1 / \text{Ly} - \alpha_2(+\text{M1})$ intensity ratio as ε increases (cf. Fig. 2) is mainly

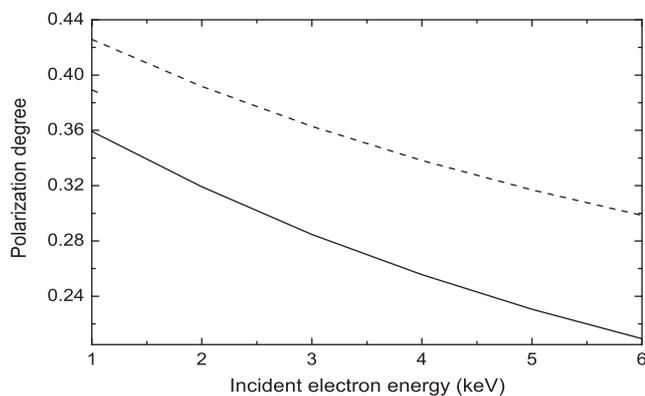


Fig. 1. Degree of polarization of the Fe^{25+} $\text{Ly} - \alpha_1$ line plotted as a function of incident electron energy in the range 1–6 keV, that is below the threshold for $1s_{1/2} \rightarrow 2p_{3/2}$ excitation. The dashed curve corresponds to calculations with only the radiative recombination directly into the upper line level $2p_{3/2}$, while the solid curve also includes the radiative cascades from higher magnetic sublevels with principal quantum number $3 \leq n_b \leq 6$.

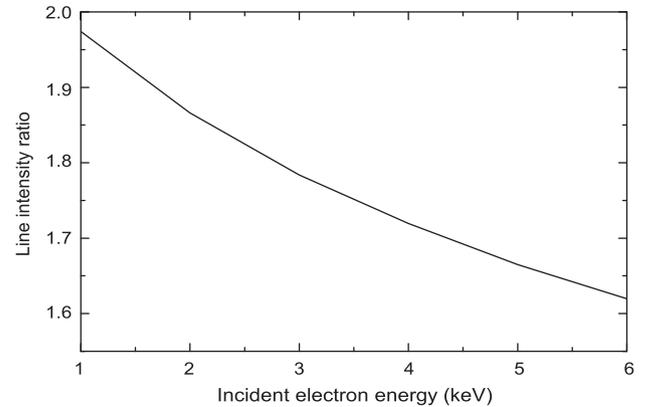


Fig. 2. Intensity ratio of the Fe^{25+} $\text{Ly} - \alpha_1$ line to the $\text{Ly} - \alpha_2(+\text{M1})$ line as a function of incident electron energy in the range 1–6 keV.

due to the contribution of the M1 line to the apparent intensity of $\text{Ly} - \alpha_2$. This contribution increases from 12% at $\varepsilon = 1$ keV to 23% at $\varepsilon = 6$ keV.

3.2.2. Electron energies above the $n_b = 1 \rightarrow 2$ excitation threshold

For electron energies above but close enough to the $n_b = 1 \rightarrow 2$ excitation threshold so that the impact ionization of H-like ions cannot occur, we can assume the (relative) population of the bare and H-like ions as a free parameter and investigate the polarization and intensities of the Lyman α lines as function of this parameter. Figs. 3 and 4 show the polarization degree of $\text{Ly} - \alpha_1$ and the $\text{Ly} - \alpha_1 / \text{Ly} - \alpha_2(+\text{M1})$ intensity ratio as a function of the abundance ratio $\rho = N_{\text{Fe}^{26+}} / N_{\text{Fe}^{25+}}$ at 7 and 8 keV kinetic energies, just above the $\text{Fe}^{25+} n_b = 1 \rightarrow 2$ excitation threshold energy. At these energies, radiative cascades may occur for the RR but cannot contribute to the IE because the $n_b = 1 \rightarrow 3$ excitation threshold is 8.2 keV.

As seen from Fig. 3, the contribution of the RR process, which evidently increases as the parameter ρ is increased, can have a significant depolarization effect on the $\text{Ly} - \alpha_1$ line. At $\rho = 10$ and $\varepsilon = 8$ keV, for example, the contribution to the $\text{Ly} - \alpha_1$ intensity due to RR amounts to 36%, and $P_{\text{Ly}\alpha_1}$ is reduced from 35.7% to 29.2% when including the RR contribution. For $\rho < 1$, in contrast, RR contributes by less than 5% to the $\text{Ly} - \alpha_1$ intensity and, hence, the depolarization effect of RR is very small in this case. From Fig. 4, it is seen that the contribution of RR tends to decrease the $\text{Ly} - \alpha_1 / \text{Ly} - \alpha_2(+\text{M1})$ intensity ratio. This decrease is due to the fact that RR makes a contribution to the M1 line intensity more important than to the $\text{Ly} - \alpha_1$ and $\text{Ly} - \alpha_2$ intensities.

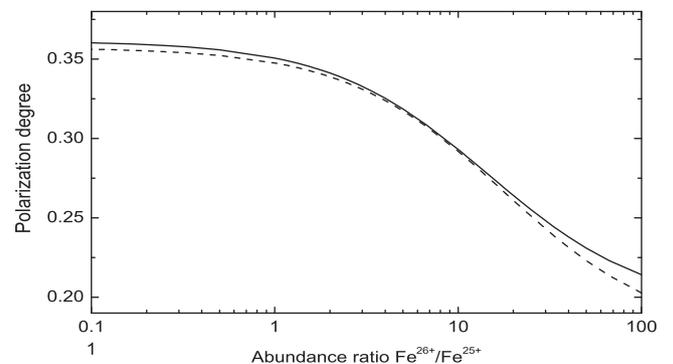


Fig. 3. Polarization degree of the $\text{Ly} - \alpha_1$ line as a function of abundance ratio $\rho = N_{\text{Fe}^{26+}} / N_{\text{Fe}^{25+}}$, calculated for incident electron energies of 7 keV (solid curve) and 8 keV (dashed curve) below the 9.278-keV ionization potential of Fe^{25+} . Both, the IE of hydrogen-like Fe^{25+} and RR of bare Fe^{26+} ions are taken into account.

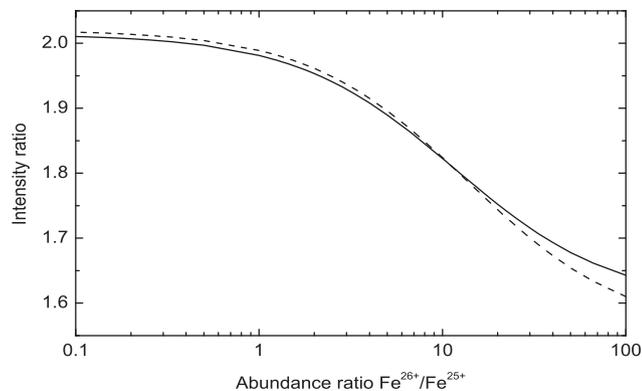


Fig. 4. Intensity ratio of the Ly – α_1 to Ly – $\alpha_2(+M1)$ lines as a function of abundance ratio $\rho = N_{\text{Fe}^{26+}}/N_{\text{Fe}^{25+}}$, calculated for incident electron energies of 7 keV (solid curve) and 8 keV (dashed curve).

3.2.3. Electron energies above the 1s ionization threshold

For electron energies exceeding the 1s ionization threshold, one can determine the abundance ratio $\rho = N_{\text{Fe}^{26+}}/N_{\text{Fe}^{25+}}$ by assuming a steady-state ionization balance (cf. Eq. (11)). The results of ρ are presented in Table 4 for several values of ε . In order to obtain these results, the ionization cross-sections σ^{II} were computed in the relativistic distorted-wave approximation using the FAC code [35]. On the other hand, the total RR cross-sections $\sigma_{\text{tot}}^{\text{RR}}$, which are also reported in Table 4, were evaluated by considering the summation over the recombined levels up to $n_b = 10$. For $1 \leq n_b \leq 6$, we have performed an exact summation of all exact RR cross-sections, but for $7 \leq n_b \leq 10$ the RR cross-sections were deduced by applying the n_b^{-3} scaling law [36,37]. For comparison purposes, we include in Table 4 the $\sigma_{\text{tot}}^{\text{RR}}$ values interpolated from the more elaborate calculations of Trzhaskovskaya et al. [38] who also used the exact relativistic theory but extended the summation over the recombined levels up to $n_b = 20$.

In Figs. 5 and 6, we plot the polarization degree $P_{\text{Ly}\alpha_1}$ and intensity ratio Ly – α_1 /Ly – $\alpha_2(+M1)$ as a function of the incident electron energy from 10 keV, that is slightly above the Fe²⁵⁺ ionization potential, to 50 keV. In both figures, we present the results that neglect the contribution of RR to the $n_b = 2$ sublevel populations as well as the results in which both IE and RR contributions have been included. All these results have been obtained by taking into account the radiative cascades that follow both IE and RR. We find that the cascade effects decrease the $P_{\text{Ly}\alpha_1}$ polarization by less than 5% for all energies above 10 keV.

As seen from Figs. 5 and 6, the incorporation of the RR process into the population of the $n_b = 2$ sublevels has little effect on the

Table 4

The bare to H-like abundance ratio $\rho = N_{\text{Fe}^{26+}}/N_{\text{Fe}^{25+}}$ at the ionization balance for various electron kinetic energies from just above the Fe²⁵⁺ ionization threshold to 50 keV. A comparison of our total RR cross-sections (in barns) with the interpolated results from Trzhaskovskaya et al. [38] is also given.

ε (keV)	Present		[38]
	$\sigma_{\text{tot}}^{\text{RR}}$	ρ	$\sigma_{\text{tot}}^{\text{RR}}$
10	120.	0.29	122.
11	104.	0.70	105.
12	90.3	1.11	91.6
15	62.8	2.40	63.9
20	38.7	4.73	39.5
25	26.1	7.97	26.9
30	18.8	10.8	19.3
35	14.1	13.5	14.6
40	11.0	16.7	11.5
45	8.77	20.0	9.09
50	7.14	23.4	7.55

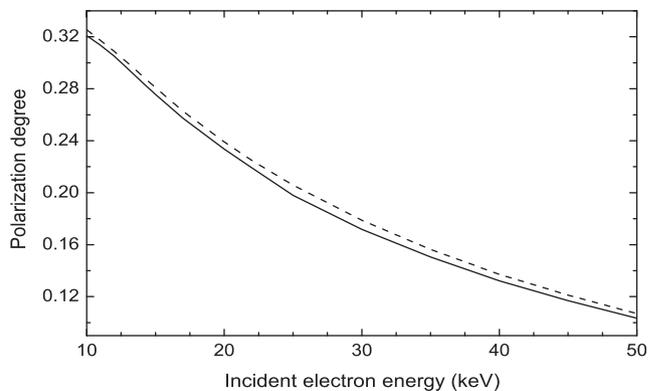


Fig. 5. Polarization degree of the Ly – α_1 line as a function of incident electron energy in the range 10–50 keV. The results are shown if the Ly – α_1 arises due to the IE of Fe²⁵⁺ and RR of Fe²⁶⁺ ions (solid curve) and by including only the IE process (dashed curve).

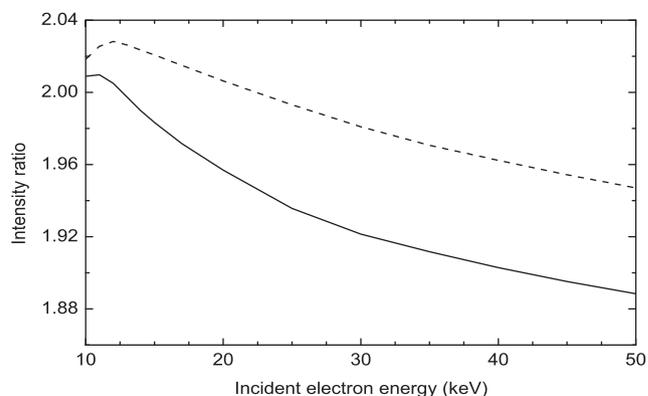


Fig. 6. Intensity ratio of the Ly – α_1 to Ly – $\alpha_2(+M1)$ lines as a function of incident electron energy in the range 10–50 keV. The ratio is calculated at the ionization-recombination balance by including the contribution from RR (solid curve), and neglecting this contribution (dashed curve).

degree of polarization of the Ly – α_1 line as well as the intensity ratio of Ly – α_1 to Ly – $\alpha_2(+M1)$ lines. The maximum decrease of $P_{\text{Ly}\alpha_1}$ by 0.8% in absolute value due to the RR occurs at about $\varepsilon = 25$ keV. For the intensity ratio Ly – α_1 /Ly – $\alpha_2(+M1)$, a decrease of less than 3% is found. In the energy range 12–50 keV where the abundance of Fe²⁶⁺ ions exceeds that of Fe²⁵⁺ ions, our calculations show that the RR contribution increases by 2.9–5.7% the $I_{\text{Ly}\alpha_1}(90^\circ)$ intensity and by 4.0–8.4% the $I_{\text{Ly}\alpha_2(+M1)}$ intensity. We have also determined the influence of the RR contribution on the intensity ratio in the case where the fraction of bare iron would be greater than the value at ionization balance. At $\varepsilon = 10$ keV, for example, our calculations show that the Ly – α_1 /Ly – $\alpha_2(+M1)$ ratio is reduced from 2.01 to 1.91 as ρ increases from 0.29 (its ionization-balance value) to 5.

3.3. Trend along the H isoelectronic sequence

Until now, we have investigated the effect of the radiative recombination on the polarization as well as intensity ratio of the Ly – α lines following excitation of Fe²⁵⁺ ions. The general formalism presented in this work can be utilized, of course, for an analysis of characteristic radiation from other ions along the hydrogen isoelectronic sequence. As an example, we consider here the properties of the Lyman – $\alpha_{1,2}$ emission from hydrogen-like ions with nuclear charges in the range from $Z = 10$ to $Z = 54$. We

Table 5

The effect of the RR process on the polarization degree $P_{Ly\alpha_1}$ and intensity ratio $I_{Ly\alpha_1}/I_{Ly\alpha_2(+M1)}$ for several H-like ions at one incident electron energy, $\varepsilon = 1.078 \times E_i$, where E_i is the ionization threshold of the corresponding H-like ion. Also given are the bare to H-like abundance ratio ρ at the ionization balance and the branching ratio B_{M1} .

Ion	ε (keV)	ρ	B_{M1}	$P_{Ly\alpha_1}$ (%)		$I_{Ly\alpha_1}/I_{Ly\alpha_2(+M1)}$	
				IE	IE + RR	IE	IE + RR
Ne ⁹⁺	1.47	1.38[+1]	3.05[−3]	34.4	34.3	2.24	2.23
Ar ¹⁷⁺	4.77	1.31	3.17[−2]	34.3	34.2	2.18	2.16
Fe ²⁵⁺	10.0	2.93[−1]	1.28[−1]	34.2	34.1	2.02	2.00
Mo ⁴¹⁺	26.5	4.33[−2]	7.71[−1]	33.9	33.8	1.57	1.54
Xe ⁵³⁺	44.5	1.55[−2]	9.81[−1]	33.5	33.4	1.35	1.32

restrict ourselves to the low- and medium- Z domain since the FAC code is known to be inefficient for the computation of impact-excitation cross-sections for very heavy ions with $Z > 54$. For both the IE and RR processes, the contributions of radiative cascades from the $n \geq 3$ levels have been omitted in the intensity-ratio calculations. The inclusion of these small contributions require a very large amount of radiative-transition probability and cross-section data, which is outside the scope of the present paper.

Table 5 shows our results for the polarization degree $P_{Ly\alpha_1}$ and intensity ratio $I_{Ly\alpha_1}/I_{Ly\alpha_2(+M1)}$ calculated for the five H-like ions Ne⁹⁺, Ar¹⁷⁺, Fe²⁵⁺, Mo⁴¹⁺, and Xe⁵³⁺ at the same incident-electron energy in threshold units, $\varepsilon = 1.078 \times E_i$, E_i being the ionization threshold of the corresponding H-like ion. Calculations have been performed at the ionization–recombination balance. The values of the abundance ratio ρ of bare to hydrogen-like ions at such a balance are also presented in the table together with the branching ratios B_{M1} . Similarly to before, we compare theoretical calculations which include contributions from the radiative recombination process (columns labeled “IE + RR”) with those that account for the electron-impact excitation process alone (columns labeled “IE”). As seen from Table 5, in the near-threshold region the contribution of the RR process to the intensity ratios and polarization parameters remains very weak for all the considered ions, although the abundance ratio ρ changes by three orders of magnitude from Ne to Xe. One can understand this behavior by noting that both excitation and ionization cross-sections σ^{IE} and σ^{II} decrease approximately as $(1/Z)^4$ with increasing Z , while radiative recombination cross-sections σ^{RR} are nearly independent of Z . This leads finally to a similar Z -dependence of σ^{IE} and $\rho\sigma^{RR}$, which implies that the relative contribution of RR remains almost constant along the isoelectronic sequence.

4. Summary and conclusions

Detailed calculations of the intensity ratio of the $Ly - \alpha_1$ to $Ly - \alpha_2(+M1)$ line emission of H-like Fe²⁵⁺ ions following collisions with a monoenergetic beam of electrons have been performed and are presented for a wide range of beam energies from 1 to 50 keV. In these computations, both the usual IE from the $1s_{1/2}$ ground level as well as the RR into bare Fe²⁶⁺ ions were included. An impact excitation of the $n = 2$ levels becomes possible for beam energies larger than ~ 7 keV. In addition, the effects of radiative cascades that follow the RR into levels with $3 \leq n \leq 6$ and the IE to levels with $3 \leq n \leq 5$ have been taken into account. The intensity ratio has been determined for an observation direction perpendicular to the electron beam by including the anisotropy of the $Ly - \alpha_1$ line emission. All calculations of the cross-sections for RR into the H-like magnetic sublevels were performed using the exact relativistic wavefunctions for both, the initial free and final bound electrons and by incorporating all multipoles of the radiation field.

Our results show that the inclusion of the RR process has the effect to decrease slightly the $Ly - \alpha_1/Ly - \alpha_2(+M1)$ intensity ratio and the $Ly - \alpha_1$ polarization degree under the conditions of steady-state ionization balance involving electron energies above 9.3 keV. However, the effect of RR may become more significant in the kinetic energy range between ~ 7 –10 keV for plasma conditions far away from ionization equilibrium, i.e. for a relatively large proportion of bare Fe ions. This could be achieved in EBIT experiments by first producing bare ions and then tuning the beam energy below the ionization potential of hydrogen-like ions [39,40]. At an electron energy of 8 keV, for example, we found for the increase of the Fe²⁶⁺/Fe²⁵⁺ abundance ratio from 0 to 4, there is decrease of the $Ly - \alpha_1/Ly - \alpha_2(+M1)$ intensity ratio from 2.01 to 1.90 and of the $Ly - \alpha_1$ polarization from 35.7% to 32.4%. In the energy region 1–6.90 keV, where the formation of the $n = 2$ levels of Fe²⁵⁺ arises solely from the RR of bare ions, the $Ly - \alpha_1/Ly - \alpha_2(+M1)$ intensity ratio is found to vary from ~ 2.0 to ~ 1.6 .

The present theoretical analysis of the $Ly - \alpha_1/Ly - \alpha_2(+M1)$ intensity ratio of Fe²⁵⁺ ions are important for the interpretation of EBIT experiments and, especially, if these ions traps are operated away from the ionization balance. In this case, the fractional abundance of the bare recombining ion can be relatively large. Our results may also be used for the diagnostics of low-temperature astrophysical photoionized plasmas for which RR is known to contribute dominantly to the line emission. With the RR and IE cross-sections data reported in this work it may be of interest to study in the future also how the presence of a directed electron beam with kinetic energies in the keV range affects the $Ly - \alpha_1/Ly - \alpha_2(+M1)$ intensity ratio.

Acknowledgements

One of the authors (M.K.I.) gratefully acknowledges the cordial hospitality of the Institute of Physics of Heidelberg University during his research stay in September 2009. He would also like to thank Dr. P. Beiersdorfer for useful discussions during the XXV IC-PEAC. A.S. acknowledges support from the Helmholtz Gemeinschaft and GSI (Nachwuchsgruppe VH-NG-421).

References

- [1] V.L. Jacobs, V. Decaux, P. Beiersdorfer, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer 58 (1997) 645.
- [2] H.L. Zhang, D.H. Sampson, M.K. Inal, Phys. Rev. A 63 (2001) 052713.
- [3] P. Beiersdorfer, Annu. Rev. Astron. Astrophys. 41 (2003) 343.
- [4] P. Hakel, R.C. Mancini, J. Abdallah, M.E. Sherrill, H.L. Zhang, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 42 (2009) 085701.
- [5] M.K. Inal, J. Dubau, J. Phys. B: At. Mol. Phys. 20 (1987) 4221.
- [6] E. Takács et al., Phys. Rev. A 54 (1996) 1342.
- [7] P. Beiersdorfer, J. Crespo López-Urrutia, V. Decaux, K. Widmann, P. Neill, Rev. Sci. Instrum. 68 (1997) 1073.
- [8] P. Beiersdorfer, G. Brown, S. Utter, P. Neill, K.J. Reed, A.J. Smith, R.S. Thoe, Phys. Rev. A 60 (1999) 4156.
- [9] A. Surzhykov, S. Fritzsche, Th. Stöhlker, Phys. Lett. A 289 (2001) 213.
- [10] D.L. Robbins, A.Ya. Faenov, T.A. Pikuz, H. Chen, P. Beiersdorfer, M.J. May, J. Dunn, K.J. Reed, A.J. Smith, Phys. Rev. A 70 (2004) 022715.
- [11] Z. Bedrane, M.K. Inal, S. Fritzsche, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 42 (2009) 055701.
- [12] K.J. Reed, M.H. Chen, Phys. Rev. A 48 (1993) 3644.
- [13] N. Nakamura, D. Kato, N. Miura, T. Nakahara, S. Ohtani, Phys. Rev. A 63 (2001) 024501.
- [14] D.L. Robbins, P. Beiersdorfer, A.Ya. Faenov, T.A. Pikuz, D.B. Thorn, H. Chen, K.J. Reed, A.J. Smith, K.R. Boyce, G.V. Brown, R.L. Kelley, C.A. Kilbourne, F.S. Porter, Phys. Rev. A 74 (2006) 022713.
- [15] H.L. Zhang, D.H. Sampson, R.E.H. Clark, Phys. Rev. A 41 (1990) 198.
- [16] D.H. Sampson, H.L. Zhang, C.J. Fontes, Phys. Rep. 477 (2009) 111.
- [17] A.N. Parmar, J.L. Culhane, C.G. Rapley, E. Antonucci, A.H. Gabriel, M. Louergue, Mon. Not. R. Astron. Soc. 197 (1981) 29P.
- [18] K. Tanaka, N. Nitta, K. Akita, T. Watanabe, Solar Phys. 86 (1983) 91.
- [19] M.A. Bautista, L. Titarchuk, Astrophys. J. 511 (1999) 105.
- [20] K.L. Wong, P. Beiersdorfer, K.J. Reed, A.L. Osterheld, in: P. Beiersdorfer, T. Fujimoto (Eds.), Proceedings of the Third US–Japan Workshop on Plasma

- Polarization Spectroscopy, University of California Lawrence Livermore National Laboratory Report UCRL-ID-146907, 2001, p. 311.
- [21] C.J. Bostock, D.V. Fursa, I. Bray, *Phys. Rev. A* 80 (2009) 052708.
- [22] F.A. Parpia, W.R. Johnson, *Phys. Rev. A* 26 (1982) 1142.
- [23] J. Eichler, W. Meyerhof, *Relativistic Atomic Collisions*, Academic Press, San Diego, 1995.
- [24] Y. Hahn, *Rep. Prog. Phys.* 60 (1997) 691.
- [25] J. Eichler, A. Ichihara, T. Shirai, *Phys. Rev. A* 58 (1998) 2128.
- [26] A. Surzhykov, S. Fritzsche, Th. Stöhlker, S. Tachenov, *Phys. Rev. A* 68 (2003) 022710.
- [27] S. Fritzsche, A. Surzhykov, Th. Stöhlker, *Phys. Rev. A* 72 (2005) 012704.
- [28] A. Surzhykov, U.D. Jentschura, Th. Stöhlker, S. Fritzsche, *Phys. Rev. A* 73 (2006) 032716. 74 (2006) 052710.
- [29] J. Eichler, Th. Stöhlker, *Phys. Rep.* 439 (2007) 1.
- [30] K. Alder, R.M. Steffen, in: W.D. Hamilton (Ed.), *The Electromagnetic Interaction in Nuclear Spectroscopy*, North Holland, Amsterdam, 1975, p. 1.
- [31] I.C. Percival, M.J. Seaton, *Phil. Trans. R. Soc. Lond., Ser. A* 251 (1958) 113.
- [32] A. Surzhykov, P. Koval, S. Fritzsche, *Comput. Phys. Commun.* 165 (2005) 139.
- [33] A. Ichihara, J. Eichler, *At. Data Nucl. Data Tables* 74 (2000) 1.
- [34] J.H. Scofield, *Phys. Rev. A* 44 (1991) 139.
- [35] M.F. Gu, *Astrophys. J.* 582 (2003) 1241.
- [36] Y.S. Kim, R.H. Pratt, *Phys. Rev. A* 27 (1983) 2913.
- [37] A. Surzhykov, S. Fritzsche, W.-D. Sepp, Th. Stöhlker, A. Oršič Muthig, *Nucl. Instr. Meth. B* 235 (2005) 276.
- [38] M.B. Trzhaskovskaya, V.K. Nikulin, R.E.H. Clark, *At. Data Nucl. Data Tables* 94 (2008) 71.
- [39] P. Beiersdorfer, in: T.A. Carlson, M.O. Krause, S.T. Manson (Eds.), *X-ray and Inner-Shell Processes*, in: AIP Conf. Proc. No 215, New York, 1990, p. 648.
- [40] R.E. Marrs, *Comments At. Mol. Phys.* 27 (1991) 57.

Résumé

Le calcul de la polarisation linéaire et du rapport d'intensité des raies Lyman- α émises par les ions hydrogénoïdes Fe^{25+} a été effectué, par suite de collisions avec un faisceau unidirectionnel d'électrons d'énergie variant de 1 à 50 keV. Nous avons considéré les deux processus d'excitation collisionnelle et de recombinaison radiative dans le peuplement des états excités 2s et 2p. Nos résultats ont montré que l'effet de l'inclusion du processus de la recombinaison radiative sur les propriétés des raies Lyman- α est faible sous les conditions de l'équilibre d'ionisation. Cet effet peut, cependant, être significatif à des énergies situées en dessous ou au voisinage du seuil d'ionisation des ions Fe^{25+} dans le domaine 7-10 keV pourvu que la proportion des ions nus Fe^{26+} soit relativement importante

Abstract

The linear polarization and the intensity ratio of the Lyman- α lines emitted by hydrogen-like Fe^{25+} ions were calculated, when colliding with a monoenergetic beam of electrons over a range of kinetic energies from 1 to 50 keV. We have considered the two processes of impact excitation and radiative recombination in the population of 2s and 2p excited levels. Our results have shown that the radiative recombination have little effect on the properties of the Lyman- α lines under the usual plasma conditions. However, such effect may become significant at electron energies 7-10 keV, for plasma conditions far away from ionization equilibrium with a relatively large proportion of bare Fe^{26+} ions

الملخص

حسب كل من الاستقطاب الخطي و نسبة شدة خطوط Lyman- α الناتجة عن أيونات الحديد الأحادية الإلكترون Fe^{25+} عند اصطدامها بالإلكترونات أحادية الاتجاه و الطاقة ذات قيم تنتمي للمجال 1-50 keV. اعتبرنا كلا من l'excitation collisionnelle و la recombinaison radiative في تركيب مستويات 2s و 2p. أظهرت النتائج التي توصلنا إليها أن la recombinaison radiative ليس لها تأثير على خصائص خطوط Lyman- α تحت شروط التوازن. هذا التأثير يمكن أن يكون معتبرا إذا كانت نسبة الأيونات Fe^{26+} معتبرة مقارنة مع الأيونات Fe^{25+} خاصة في المجال 7-10 keV.