Chapitre IV

Elargissement des raies

IV-I Introduction

Sous l'influence des perturbations créées par les électrons libres, les ions et les atomes neutres environnants la particule émettrice, le profil de la raie émise supposé symétrique peut être élargi et déplacé. La figure IV-1 présente la différence entre les profils théorique et expérimental d'une raie en fonction de la longueur d'onde. Δ représente le déplacement de la raie et δ sa largeur totale à mi-hauteur ($\delta_{1/2}$ représentera sa demi largeur à mi-hauteur).



Figure IV -1 : Déplacement et élargissement d'une raie.

La forme du profil a une forte influence sur le transfert radiatif de la raie. Nous présentons dans la suite de ce travail les différents processus d'élargissement, les grandeurs Δ et δ étant exprimées en mètre. Deux types d'élargissement sont pris en compte : l'effet Doppler et les élargissements de pression. Dans notre étude, nous ne tenons pas compte de l'élargissement naturel, celui-ci étant considéré comme négligeable devant les autres phénomènes d'élargissement.

IV -2-Types d'élargissement

IV-2-1 Elargissement Doppler

L'effet Doppler est dû à la vitesse relative des atomes émetteurs par rapport à un observateur. Si le rayonnement est émis à une longueur d'onde λ_0 , (longueur d'onde au Centre de la raie), l'observateur le reçoit avec une longueur d'onde déplacée de la quantité $\Delta\lambda$ telle que :

$$\Delta \lambda = \lambda - \lambda_0 = \frac{V_s}{c} \lambda_0 \tag{IV-3}$$

 V_s et c représentent les vitesses de l'atome émetteur et de la lumière.

La fonction de distribution des longueurs d'onde est obtenue à partir de la distribution Maxwellienne des vitesses et le profil de la raie est caractérisé par une gaussienne [21]:

$$P_D(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\Delta\lambda_D} \exp\left(-\left(\frac{\Delta\lambda}{\Delta\lambda_D}\right)^2\right)$$
(IV-4)

Avec

$$\Delta \lambda_D = \lambda_0 \left(\frac{2k_B T}{mc^2}\right)^{1/2} \tag{IV-5}$$

où *T* est la température du plasma, *m* la masse de l'atome émetteur et $\Delta \lambda_D$ est la largeur Doppler. Cette largeur est reliée à la demi-largeur à mi-hauteur Doppler telle que:

$$\delta_{1/2}^d = \sqrt{\ln 2} . \Delta \lambda_D \tag{IV-6}$$

IV-2-2 Elargissement de pression

L'élargissement de pression, dont le profil est Lorentzien, est dû à l'interaction d'un atome émetteur avec les particules environnantes appelées perturbateurs (atomes, ions ou électrons). Cette interaction provoque un élargissement et un déplacement de la raie ainsi que l'apparition de raies interdites (chevauchement des raies). L'interprétation de l'élargissement de pression se base sur deux théories distinctes selon la nature et la densité des perturbateurs :l'approximation des impacts et l'approximation quasi-statique [22].

Dans le cas où les perturbateurs sont des électrons, on considère que le temps entre deux collisions est plus grand que la durée des collisions. L'effet moyen des collisions est par conséquent très faible et l'approximation des impacts peut être utilisée [23]. Cette approche fut tout d'abord étudiée par Lorentz assimilant l'atome à un oscillateur, puis par Weisskopf introduisant une approche ondulatoire dans laquelle intervient une modification de la phase de l'onde associée au cours de la collision de deux atomes.

Dans le cas où les perturbateurs sont des ions, le temps entre deux chocs devient court, les densités deviennent importantes et les énergies faibles (la durée des collisions augmente), l'approximation des impacts n'est plus applicable. La vitesse des ions étant beaucoup plus faible que celle des électrons, la perturbation est considérée comme constante dans le temps et l'approximation quasi-statique [24] doit être utilisée.

Dans notre étude, nous avons pris en considération trois types d'élargissements de pression qui sont les plus présents dans le plasma : l'élargissement de Van der Waals, l'élargissement de résonance et l'élargissement Stark.

44

IV-2-2-1 Elargissement de Van der Waals

L'élargissement de Van der Waals existe lorsque l'atome émetteur est perturbé par un atome neutre de nature différente ou par un atome identique dont le niveau supérieur de la raie n'est pas couplé au niveau fondamental. Le potentiel d'interaction est de la forme r^{-6} . L'élargissement $\delta_{1/2}^{V}$ (demi-largeur à mi-hauteur) et le déplacement Δ_{V} sont donnés dans l'approximation des impacts [22] par :

$$\delta_{1/2}^{V} = 4,08C_{6}^{2/5} \left(\overline{V_{0}}\right)^{3/5} N_{0} \frac{\lambda_{0}^{2}}{2\pi c}$$
(IV-7)

$$\Delta_{V} = 2.94 C_{6}^{2/5} \left(\overline{V_{0}}\right)^{3/5} N_{0} \frac{\lambda_{0}^{2}}{2\pi c}$$
(IV-8)

Où N_0 est la densité des perturbateurs neutres, $\overline{V_0}$ la vitesse relative moyenne des deux Particules et $C_6(m^6/s)$ la constante d'élargissement donnée par la relation suivante [25]

$$C_6 = C_j - C_i$$
 Avec $C_{j(i)} = 6,124 .10^{-11} \alpha_p r_{j(i)}^2$ (IV-9)

 C_j et $C_i(m^6/s)$ sont respectivement les constantes d'élargissement de Van der Waals relatives au niveau haut (j) et au niveau bas (i) de la transition $(j \rightarrow i)$, α_p est la polarisabilité de l'atome perturbateur et r_j , r_i sont respectivement les rayons moyen de l'atome émetteur dans les niveaux (j) et (i) donnés par l'expression suivante [26] :

$$\overline{r_i^2} = \frac{1}{2Z^2} a_0^2 (n_i^*)^2 \left(5(n_i^*)^2 + 1 - 3l_i(l_i + 1) \right)$$
(IV-10)

Avec a_0 est le rayon de Bohr, l_i le nombre quantique orbital et n_i^* le nombre quantique

Chapitre IV

effectif qui vaut :

$$n_i^* = z \left(\frac{E_H}{E_{\infty} - E_n}\right)^{\frac{1}{2}}$$
 (IV-11)

 E_{∞} et E_n sont respectivement l'énergie d'ionisation et l'énergie de l'état (n) de l'atome,

 E_{H} est l'énergie de Rydberg, *z* est la charge de l'atome émetteur. Dans le cas de l'approximation quasi-statique, l'interaction de Van Der Waals conduit au profil de Holtzmark [27] de la forme :

$$P(\lambda) = \frac{1}{2} \frac{\Delta \lambda_0^{1/2}}{(\lambda - \lambda_0)^{3/2}} \exp\left(-\frac{\pi \Delta \lambda_0}{4(\lambda - \lambda_0)}\right) \quad \text{avec} \quad \Delta \lambda_0 = C_6 \left(\frac{4\pi N_0}{3}\right)^2 \frac{\lambda_0^2}{2\pi c} \tag{IV-12}$$

L'élargissement $\delta^{\scriptscriptstyle V}_{\scriptscriptstyle 1\!/\!2}$ et le déplacement $\Delta_{\scriptscriptstyle V}$ sont alors donnés par :

$$\delta_{1/2}^{V} = 0.411\pi^{3}C_{6}N_{0}^{2}\frac{\lambda_{0}^{2}}{2\pi c}$$
(IV-13)

$$\Delta_{V} = \frac{8}{27} \pi^{3} C_{6} N_{0}^{2} \frac{\lambda_{0}^{2}}{2\pi c}$$
(IV-14)

IV-2-2-2 Elargissement de résonance

Ce type d'élargissement est dû à l'interaction de l'atome émetteur avec un atome identique lorsque le niveau supérieur de la raie émise est couplé au niveau fondamental. Il fait intervenir un potentiel d'interaction en r^{-3} . Selon la théorie des impacts résolue à l'ordre 4, la demi largeur à mi-hauteur s'exprime de la manière suivante [22] :

$$\delta_{1/2}^{r} = 2,739\pi \left(\frac{g_{f}}{g_{r}}\right)^{1/2} N_{0} \left(\frac{e^{2}}{4\pi\varepsilon_{0}}\right) \frac{f_{r}}{m_{e}} \left(\frac{\lambda_{0}^{2}}{2\pi c}\right) \lambda_{0}$$
(IV-15)

L'interaction de résonance ne produit aucun déplacement du centre de la raie : $\Delta_r = 0$

 g_{f} , g_{r} : poids statistique du niveau fondamental et du niveau de résonance

 N_0 : Densité du niveau fondamental

 f_r : Force d'oscillateur du niveau résonnant

Le profil de la raie émise dans ce cas est Lorentzien :

$$P^{L}(\lambda) = \frac{1}{\pi} \cdot \frac{\delta_{1/2}^{r}}{(\delta_{1/2}^{r}) + (\lambda - \lambda_{0})^{2}}$$
(IV-16)

IV-2-2-3 Elargissement Stark

L'interaction entre une particule chargée et l'atome émetteur induit un élargissement de type Stark qui résulte de la levée de dégénérescence des niveaux d'énergie des atomes sous l'influence du champ électrique crée par les particules chargées environnantes. Le profil de la raie émise est supposé Lorentzien

L'élargissement a été calculé en utilisant l'approximation des impacts pour les électrons et l'approximation quasi-statique pour les ions. La demi largeur à mi-hauteur $\delta_{1/2}^s$ et le déplacement de la raie Δ_s sont donnés dans l'approximation des impacts par les relations suivantes [21]:

- Pour les neutres:

$$\delta_{1/2}^{s} = \left(11.37C_{4}^{2/3}V_{e}^{1/3} + 6.5.10^{-14} |B_{b} - B_{h}|\right) N_{e} \left(\frac{\lambda_{0}^{2}}{2\pi c}\right)$$
(IV-17)

Avec

$$B_{h(b)} = \left(\frac{4}{15} (2L+1)C_{L2L}\right)^{1/2} \cdot \frac{\overline{r}_{h(b)}^2}{a_0}$$
(IV-18)

Les valeurs de CL2L et (2L+1)CL2L sont données dans le tableau suivant :

L	0	1	2	3	$\succ \succ 1$
CL2L	0	$\frac{4}{5}$	$\frac{4}{35}$	$\frac{8}{105}$	
(2L+1)CL2L	0	$\frac{4}{5}$	$\frac{4}{7}$	$\frac{8}{15}$	$\frac{1}{2}$

- Pour les ions :

$$\delta_{1/2}^{s} = \left(\frac{200.8}{631}C_{4}^{\frac{2}{5}}Z_{e}^{\frac{4}{5}} + 4,969.10^{-11}(Z(B_{b} - B_{h}))^{\frac{2}{3}}\right)\frac{1}{T^{\frac{1}{2}}}N_{e}\left(\frac{\lambda_{0}^{2}}{2\pi c}\right) \qquad (\text{IV-19})$$

Déplacement de la rai :

$$\Delta_s = 9,94C_4^{2/3}V^{1/3}N_e \frac{\lambda_0^2}{2\pi c}$$
(IV-20)

Avec *z* la charge de l'ion, V_e la vitesse moyenne de l'électron et $C_4(m^4/s)$ la constante d'élargissement Stark donnée par la formule suivante [21] :

$$C_4 = C_h - C_b$$
 avec $C_{h(b)} = 7,8.10^{-11} \sum_n f_{nh(b)} \lambda_{nh(b)}^2$ (IV-21)

où λ_{nh} et f_{nh} sont respectivement la longueur d'onde de la transition et la force d'oscillateur de la transition $n \to h(b)$.

Pour tenir compte de l'effet des ions sur la demi largeur à mi-hauteur, Griem [28] introduit des termes correctifs calculés dans l'approximation quasi-statique :

$$\delta_{1/2}^{s,tot} = \delta_{1/2}^{s} (1 + 1,75.A.(1 - \alpha.R))$$
(IV-22)

avec α a un coefficient qui prend la valeur 0,75 pour les neutres et 1,2 pour les ions. *A* et *R* sont donnés par les expressions suivantes :

$$A = \left(\frac{4}{3}\pi \sum_{j} N_{z_{j}^{+}}\right) \left(\frac{C_{4}}{\pi c} \frac{1}{\delta_{1/2}^{s}}\right)^{\frac{3}{4}} \left(\lambda \frac{\sum_{j} Z_{z_{j}^{+}} N_{z_{j}^{+}}}{\sum_{j} N_{z_{j}^{+}}}\right)^{\frac{3}{2}}$$
(IV-23)

$$R = \left(\frac{3}{4\pi \sum_{j} N_{z_{j}^{+}}}\right)^{1/3} \cdot \left(\frac{e^{2}}{\varepsilon_{0} K_{B} T} \left(\sum_{j} Z_{z_{j}^{+}}^{2} N_{z_{j}^{+}} + N_{E}\right)\right)^{1/2}$$
(IV-24)

IV-3 Profil global d'une raie élargie

Comme nous venant de voir, chaque type d'élargissement donne lieu à un profil particulier. La convolution des élargissements dus aux effets de pression donnés par une fonction lorentzienne et de l'élargissement Doppler décrit par une fonction gaussienne, conduit à un profil de Voigt :

$$P_{V}(\lambda) = \frac{\delta_{L}}{\pi^{3/2} \Delta \lambda_{D}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp\left(-\left(\frac{y}{\Delta \lambda_{D}}\right)^{2}\right)}{\delta_{L}^{2} + \left(y - (\lambda - \lambda_{0})\right)^{2}} dy$$
(IV-25)

avec

où δ_L , est la largeur totale à mi-hauteur de l'ensemble des élargissements de type lorentzienne et $\Delta \lambda_D$ la largeur Doppler définie en (IV-5).

IV-4 Epaisseur optique

L'épaisseur optique τ_{ji} d'une raie suivant un trajet dans un plasma, est en fonction des sections efficaces moyennes d'absorption photonique $\overline{\sigma}_{ji}(\lambda)$ entre le niveau haut *j* et le niveau bas *i*, et de la densité moyenne des atomes du niveau bas \overline{N}_i et de l'épaisseur du plasma R_p :

$$\tau_{ji}(\lambda) = \overline{\sigma}_{ji}(\lambda) \cdot \overline{N}_i \cdot R_p \tag{IV-26}$$

Avec la relation donnée par Ladenburg [21] :

$$\overline{\sigma}_{ji}(\lambda)d\lambda = \sigma_{ji}P(\lambda)d\lambda \tag{IV-27}$$

 $\sigma_{ji} = \frac{e^2}{4\varepsilon_0 m_e c^2} \lambda_{ji}^2 f_{ji} \qquad \text{et} \qquad \int_0^\infty P(\lambda) d\lambda = 1 \qquad (\text{IV-28})$

Nous pouvons écrire l'épaisseur optique au centre d'une raie dans le cas d'un plasma homogène et isotrope sous la forme [8] :

$$\tau_0 = \tau(\lambda_0) = K_{\lambda_0}(T) R_P = \sigma_{ji}(\lambda_0) \overline{N}_i P(\lambda_0) R_P$$
(IV-29)

Dans le cas où l'épaisseur optique est nulle ou quasi-nulle pour une transition donnée, le milieu est dit transparent à cette longueur d'onde.

Ou

IV-5 Facteur de fuite

Le facteur de fuite est défini comme le rapport entre le flux réel de rayonnement sortant d'un plasma et celui qui serait émis sans absorption. Avec τ_0 l'épaisseur optique monochromatique et $P(\lambda)$ le profil de la raie ($P(\lambda_0)$) étant la valeur de ce profil au centre de la raie), le facteur de fuite Λ_r est donné par la relation suivante [21] :

$$\Lambda_{r} = \int_{0}^{\infty} P(\lambda) \exp\left(-\tau_{0} \frac{P(\lambda)}{P(\lambda_{0})}\right) d\lambda$$
 (IV-30)

Dans un milieu homogène et isotherme, le facteur de fuite dépend seulement de l'épaisseur optique au centre de la raie lorsque le profil de la raie est de type Lorentzien ou Gaussien.Pour le cas d'un profil de Voigt, Λ_r dépend à la fois de τ_0 et du rapport α des élargissements Lorentzien ($\delta^v + \delta^r + \delta^s$) et Gaussien (δ^d) Drawin [21] a montré que l'introduction de ce facteur dans la méthode de calcul du coefficient d'émission nette diminuait fortement le temps de calcul. En contre partie, l'utilisation de ce concept suppose que le chevauchement des raies est négligeable, ce qui nous amène à une sous estimation du rayonnement net émis par le plasma dont les valeurs sont toutefois acceptables compte tenu de la précision générale de la méthode.

IV-5-1 Cas d'un profil Gaussien

Le facteur de fuite est calculé, dans le cas d'une raie élargie par effet Doppler dont le profil est Gaussien, par les formules suivantes [22] :

$$\tau_0^G \prec 0,01 \qquad \qquad \Lambda_r^G = 1 \qquad (\text{IV-31})$$

$$0,01 \prec \tau_0^G \prec 100 \qquad \Lambda_r^G \left(\Delta \lambda_D, \tau_0^G \right) = \frac{1}{\sqrt{\pi} \Delta \lambda_D} \int \exp \left[-\left(\frac{\Delta \lambda}{\Delta \lambda_D} \right)^2 \right] \exp \left[-\tau_0^G \exp \left(-\left(\frac{\Delta \lambda}{\Delta \lambda_D} \right)^2 \right) \right] d\lambda \qquad (\text{IV-32})$$

$$\tau_{0}^{G} \succ 100 \qquad \qquad \Lambda_{r}^{G} \left(\tau_{0}^{G}\right) = \frac{1 + \frac{\tau_{0}^{G}}{2 + \left(\tau_{0}^{G}\right)^{2}}}{1 + \tau_{0}^{G} \left(\pi \ln\left(1 + \tau_{0}^{G}\right)\right)^{\frac{1}{2}}} \qquad (\text{IV-33})$$

IV-5-2 Cas d'un profil Lorentzien

Le facteur de fuite est calculé dans le cas d'une raie élargie selon un profil Lorentzien, par les formules suivantes [22] :

$$\tau_0^L \prec 0.01 \qquad \qquad \Lambda_r^L = 1 \tag{IV-34}$$

$$0.01 \prec \tau_0^L \prec 100 \qquad \qquad \Lambda_r^L \left(\delta_L, \tau_0^L \right) = \frac{2}{\pi} \int \frac{\delta_L}{\delta_L^2 + 4(\Delta \lambda)^2} \exp \left[-\tau_0^G \frac{\delta_L^2}{\delta_L^2 + 4(\Delta \lambda)^2} \right] d\lambda \qquad (\text{IV-35})$$

$$\tau_{0}^{L} \succ 100 \qquad \qquad \Lambda_{r}^{G} \left(\tau_{0}^{G} \right) = \frac{1 + \frac{\tau_{0}^{L}}{2 + \left(\tau_{0}^{L} \right)^{2}}}{1 + \left(\pi \tau_{0}^{L} \right)^{1/2}} \qquad \qquad (\text{IV-36})$$

IV-5-3 Cas d'un profil Voigt

Le facteur de fuite est calculé dans le cas d'un profil de Voigt, pour des valeurs de α allant de 10^{-4} à 100 et des épaisseurs optiques τ_{ji}^{V} comprises entre 10^{-1} et 10^{6} , par les Relations suivantes [22] :

$$\alpha \prec 10^{-4} \qquad \qquad \Lambda_r^V \cong \Lambda_r^G \tag{IV-37}$$

$$10^{-4} \prec \alpha \prec 100 \qquad \Lambda_r^V = \frac{\alpha}{\pi\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp(-b^2)}{\alpha^2 + (b-x)^2} db \right) \exp\left(-\tau_0^V \frac{\left(\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp(-b^2)}{\alpha^2 + (b-x)^2} db \right)}{\left(\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp(-b^2)}{\alpha^2 + b^2} db \right)} \right) dx \qquad (IV-38)$$

$$\alpha \succ 100 \qquad \qquad \Lambda_r^V \cong \Lambda_r^L \tag{IV-39}$$

avec
$$\alpha = \frac{\delta_L}{2\Delta\lambda_D}$$
 et $b = \frac{y}{\Delta\lambda_D}$