



REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE ABOU-BEKR BELKAID - TLEMCCEN

MEMOIRE

Présenté à :

FACULTE DES SCIENCES – DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

MASTER EN PHYSIQUE

Spécialité : Physique des plasmas

Par :

M^{elle} Chentouf Bochra

Sur le thème

Utilisation du code Flexible Atomic Code (FAC) pour le calcul de données atomiques

Soutenu publiquement le 13/06/2024 à Tlemcen devant le jury composé de :

Mme BENKHENAFU Malika	MCB	Université de Tlemcen	Présidente
Mme BETTADJ Latifa	MCA	Université de Tlemcen	Encadrante
Mr INAL Mokhtar Kemal	Prof	Université de Tlemcen	Examineur

Année Universitaire : 2023 ~ 2024

Dédicaces

Chère Famille,

Je vous écris aujourd'hui avec un cœur rempli de gratitude et d'émotion. En cette occasion spéciale, je tiens à vous dédier cette victoire, fruit de notre soutien mutuel et de notre amour indéfectible.

À mes chers parents, votre amour inconditionnel et vos sacrifices ont été ma source d'inspiration. Vous m'avez appris la valeur du travail acharné et de la persévérance, et je ne saurais jamais assez-vous remercier pour tout ce que vous avez fait pour moi.

À mes frères, vous êtes mes compagnons de vie et mes meilleurs amis. Votre soutien constant et vos encouragements ont été un véritable moteur dans cette aventure.

À toute ma famille, proche et éloignée, vous êtes précieux. Chaque mot d'encouragement et chaque geste de soutien ont renforcé ma détermination à atteindre mes objectifs.

Ensemble, vous avez été ma source de force et de motivation. Cette réussite est le reflet de notre unité et de notre amour familial.

Avec toute ma gratitude et mon amour,

Chentouf Bochra

Remerciements

*Je remercie tout d'abord « Allah » de m'avoir donné le courage
d'entamer et de finir ce mémoire dans de bonnes conditions*

*Je tiens avant tout à exprimer ma profonde gratitude envers mon encadreur
Madame BETTADJ Latifa. Votre accompagnement, votre expertise et votre
soutien indéfectible ont joué un rôle essentiel dans l'aboutissement de ce travail.
Merci pour l'acuité de vos critiques et pour vos conseils éclairés.*

*Je tiens à remercier avec grande gratitude Madame M. BENKHENAFUO, MCB
à l'Université de Tlemcen, pour m'avoir fait l'honneur de présider le jury de ce
mémoire.*

*Je tiens également à présenter mes remerciements à Monsieur M.K. INAL,
Professeur à l'Université de Tlemcen, d'avoir accepté d'être examinateur et
membre de ce jury.*

*Je remercie également et chaleureusement mes camarades et mes collègues pour
leurs discussions enrichissantes, leur esprit de collaboration et leur soutien
constant, qui ont rendu cette expérience d'autant plus gratifiante.*

*Cette réussite n'aurait pas été possible sans l'appui de chacun d'entre vous. Je
vous remercie sincèrement d'avoir cru en moi et de m'avoir aidée à franchir cette
étape majeure de ma formation.*

Avec ma plus profonde reconnaissance,

Chentouf Bochra

Table des Matières

Introduction Générale

Chapitre I : Raies d'émission et Spectre électromagnétique des ions fortement chargés

I-1. Introduction	6
I-2. Lumière et rayonnement	6
<i>I-2.1. Spectre électromagnétique</i>	7
I-3. Formation des raies	8
<i>I-3.1. Interaction électron-ion</i>	10
<i>I-3.2. Absorption et émission de la lumière</i>	12
<i>I-3.3. Emission spontanée et émission stimulée (induite)</i>	13
I-4. Type de transitions et règles de sélection	14
I-5. Notation adoptée pour les ions	15

Chapitre II : Données atomiques et processus atomiques conduisant à la formation des raies X

II-1. Introduction	18
II-2. Processus atomiques décrivant l'évolution d'un plasma	18
<i>II-2.1. Processus collisionnels</i>	19
<i>II-2.2. Processus radiatifs</i>	20
II-3. Données atomiques	21

<i>II-3.1. Niveaux d'énergie</i>	21
<i>II-3.2. Probabilité de transition radiative</i>	24
<i>II-3.3. Durée de vie des états excités</i>	26
<i>II-3.4. Section efficace de collision</i>	27

Chapitre III : Utilisation du code Flexible Atomic Code (FAC)

pour le calcul des données atomiques

III-1. Introduction	31
III-2. Code FAC	31
III-3. Niveaux d'énergie pour un système poly-électroniques	32
III-4. Modèle du potentiel central local	34
III-5. Mode de couplage des moments angulaires	36
III-6. Calcul des quantités de structure atomique par le code FAC	37
<i>III-6.1. Niveaux d'énergie</i>	37
<i>III-6.2. Probabilités de transition radiative</i>	42
Conclusion générale	50
Références bibliographiques	53

Introduction Générale

Un plasma est un gaz ionisé, désigné comme étant le quatrième état de la matière, et constitué d'électrons, d'ions, d'atomes et de molécules. Donc, ce milieu constitue une assemblée de particules différentes en interaction, et à cause de l'influence des forces coulombiennes de longues portées, toutes les particules chargées dans un plasma interagissent simultanément les unes avec les autres jusqu'à atteindre un certain degré d'ionisation. Principalement, les électrons libres jouent un rôle majeur dans un plasma du fait que la masse des électrons est ≈ 2000 fois plus faible que celle des ions, et donc sont dotés de vitesses largement supérieures à celles des particules lourdes. Par conséquent, les collisions entre électrons et particules massives sont les plus efficaces dans un large domaine de température.

Les plasmas chauds rencontrés en astrophysique ou produits en laboratoire sont des systèmes complexes, formés parfois de différents éléments atomiques avec des degrés de charges divers. En outre, chacun de ces ions multichargés se trouve dans des états d'excitation extrêmement variés et d'ionisation selon les conditions thermodynamiques du plasma. Pour caractériser de tels systèmes, les physiciens cherchent notamment à observer et à reproduire leurs propriétés spectrales, c'est-à-dire leur capacité à émettre et à absorber la lumière suite à des transitions électroniques entre états atomiques. L'analyse spectroscopique du rayonnement émis sur l'ensemble du spectre électromagnétique est interprétée au moyen de modèles théoriques qui décrivent les différents mécanismes de production et d'émission du rayonnement. L'étude de celui-ci permet de déterminer la nature des atomes (ions), leurs répartitions et leurs niveaux d'énergie. De plus, les intensités relatives de certaines raies émises par les ions du plasma fournissent de précieux renseignements sur les conditions physiques (densité et température électronique, état d'ionisation...) qui règnent dans le plasma rayonnant. C'est particulièrement vrai pour les plasmas astrophysiques pour lesquels le rayonnement émis constitue la seule information qui nous parvient.

Le diagnostic des spectres des raies émises par les ions et les atomes dans un plasma nécessite entre autres la connaissance des données atomiques relatives aux processus atomiques élémentaires ainsi que la distribution des états de charge. Ceci demande une compréhension suffisante de la physique atomique sous-jacente à l'émission de rayonnement en particulier les raies X, essentielle pour toute interprétation spectroscopique fiable. Les données atomiques précises en relation avec ces processus incluant les énergies de transition, les sections efficaces, les taux de coefficients, les probabilités de transition radiative, etc., sont nécessaires. De plus, ces données sont indispensables pour un modèle collisionnel-radiatif utilisant la cinétique des populations nécessitant la solution d'un système complexe des

équations de taux décrivant la population et la dépopulation des niveaux par tous les processus pertinents comme l'ionisation, la recombinaison, l'excitation collisionnelle et la désexcitation, etc.

Le calcul de la structure atomique des ions à un seul électron : ions hydrogénéoïdes, nécessite la résolution de l'équation non-relativiste de Schrödinger, ou de Dirac en régime relativiste, pour chacun de ces états. Cependant, dès lors qu'un ion possède plus d'un électron, une solution analytique est inenvisageable et l'on doit avoir recours à des solutions numériques, issues de modèles théoriques et d'approximations. La puissance des ordinateurs ne cessant de s'accroître, des codes de physique atomique de plus en plus sophistiqués voient le jour pour fournir des données atomiques de plus en plus précises. Actuellement il existe des programmes traitant les structures atomiques d'une façon complètement relativiste ou avec des approximations non relativistes. Parmi eux nous pouvons citer le code d'Interaction des Configurations non relativistes CIV3 [1], le code Superstructure [2], le programme largement utilisé de Cowan [3] et le programme de Multi-Configurations de Hartree-Fock (MCHF) [4] ou celui de Dirac-Fock (MCDF) [5], ainsi que les codes RATIP [6] qui permet de calculer des données atomiques pour les ions fortement chargés nécessaires pour l'étude des processus de photoionisation et de recombinaison radiative, et le code FAC [7], etc. Cependant le calcul de structure atomique pose toujours un problème de convergence pour les hauts nombres quantiques n . Les effets relativistes et le problème d'interaction de configurations nécessitent aussi une étude détaillée.

Dans le travail du présent mémoire, nous nous sommes intéressés au calcul de données atomiques telles que les niveaux d'énergie et les probabilités de transition radiative des ions hydrogénéoïdes et héliumoïdes en utilisant le code Flexible Atomic Code (FAC). Nous avons choisi ce code à cause de la simplicité de son interface.

Le travail développé dans ce mémoire a été réparti en trois chapitres :

- Dans le premier chapitre, nous donnons des généralités sur les raies d'émission et le spectre électromagnétique ainsi que les mécanismes de formation des raies discrètes.
- Dans le deuxième chapitre, nous présentons un bilan des processus atomiques pertinents conduisant à la formation des raies X, et les données atomiques nécessaires à l'étude des ions fortement chargés.

- Nous consacrons ensuite le troisième chapitre à la présentation de quelques données atomiques obtenues par l'utilisation du code FAC. Pour cela, nous commençons par présenter la méthode utilisée pour le calcul des énergies des niveaux. Nous donnons ensuite les scripts conçus pour calculer les énergies des niveaux fondamentaux et excités des ions hydrogénoïdes Ne^{9+} et héliumoïdes Ne^{8+} . Nous présentons également le script pour obtenir les probabilités de transition radiative entre les différents niveaux nl avec $1 \leq n \leq 6$ pour les ions Ne^{9+} . Pour vérifier l'exactitude de nos résultats, nous comparons quelques valeurs obtenues avec celles disponibles en littérature.
- Finalement, nous achevons ce travail par une conclusion générale.

Chapitre I
Raies D'émission et
Spectre Electromagnétique des Ions
Fortement Chargés

I-1. Introduction

Les ions fortement chargés jouent un rôle important dans plusieurs processus collisionnels et radiatifs se produisant dans les plasmas astrophysiques et de laboratoires. Ils sont un sujet d'investigations détaillées dans un domaine de la physique atomique appelé physique des ions fortement chargés. Le spectre de rayonnement des ions fortement chargés contient des informations importantes sur les paramètres d'un plasma tel que les densités électronique et ionique et la température, la distribution des états de charge, la polarisation des raies X. Ceci constitue un outil de diagnostic efficace pour les études des sources de plasmas astrophysiques et de laboratoires. Plusieurs propriétés radiatives et collisionnelles des ions fortement chargés sont utilisées avec succès dans plusieurs applications pratiques : en fusion thermonucléaire, dans les lasers opérants dans les régions spectrales des raies ultraviolets et X. On déduit donc que le rayonnement émis est une source d'informations du système étudié. On va donner dans la suite de ce chapitre quelques notions sur les rayonnements et leurs sources.

I-2. Lumière et rayonnement

La lumière est une caractéristique fondamentale qui a attiré plusieurs philosophes depuis les anciens temps. Pour les pythagoriciens, la lumière provenait d'un certain corps et attire la vision en pénétrant l'œil. Socrate et Plato ont inversé cette idée en admettant que l'œil recherche des objets en envoyant des rayons lumineux. C'était au début du 19^{ème} siècle qu'il a été convenu que la lumière était un phénomène ondulatoire similairement aux ondes sonores. En 1887, Michelson et Morley avaient établi que la vitesse de la lumière est indépendante du mouvement de la terre. Cette observation fondamentale était utilisée après par Einstein pour développer sa théorie de la lumière.

L'interaction avec la lumière est un outil important pour l'étude des ions et des atomes. La radiation est le moyen par lequel l'énergie est transmise à travers l'espace à partir d'un point vers un autre sans nécessiter une connexion ou un lien entre ces deux positions. A noter que les termes lumière, rayonnement, onde caractérisent le même phénomène et sont utilisés comme synonymes.

I-2.1. Spectre électromagnétique

La lumière blanche est un mélange de plusieurs couleurs. En 1672, ceci a été démontré par Isaac Newton qui a séparé les couleurs de la lumière blanche par un prisme et les a rejoints par un autre prisme. Les couleurs sont spécifiées par des longueurs d'onde. Dans certaines expériences, différentes couleurs peuvent être engendrées par des processus en dépendance avec la longueur d'onde telle la réfraction ou la diffraction de la lumière formant la base des spectrographes.

Une illustration du domaine large des longueurs d'onde du rayonnement électromagnétique est donnée dans la figure I.1 montrant un domaine couvrant 20 ordres de grandeur en fréquence et longueur d'onde. Le rayonnement allant des ondes radio passant par les lumières infrarouges et visibles aux rayons X et gamma. Un nombre d'objets ayant des dimensions similaires aux radiations du spectre est aussi inclus dans la figure I.1 [8].

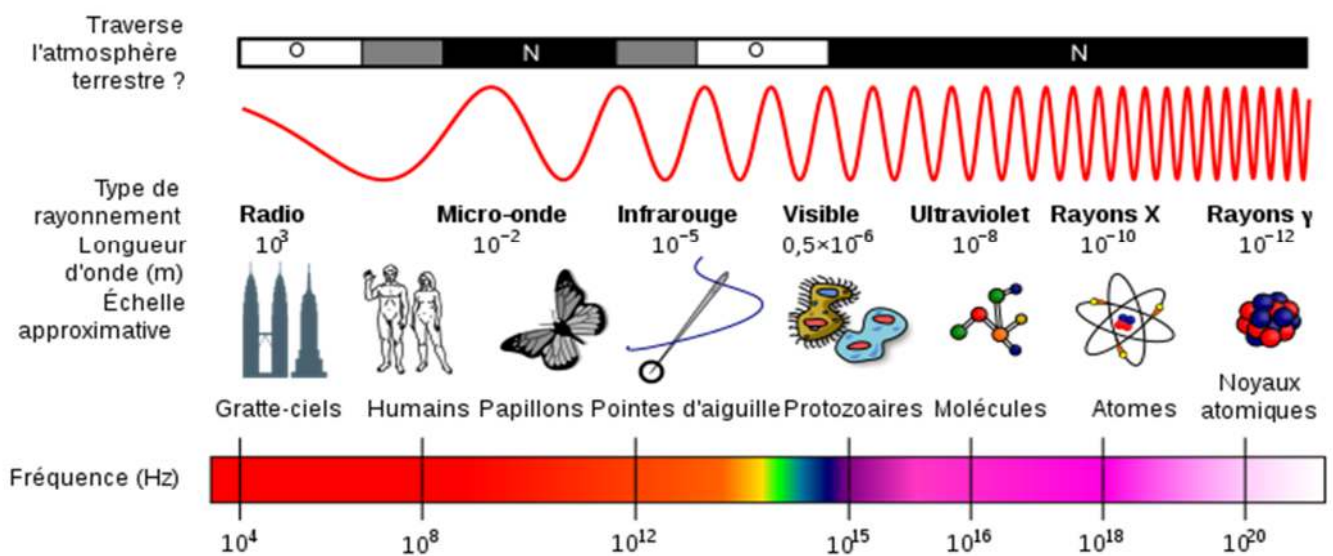


Figure I.1. : Spectre électromagnétique allant des ondes radio aux ondes gamma. Différents objets appartenant à l'échelle des fréquences et des longueurs d'onde associées sont aussi présentés.

Le spectre de rayonnement des ions fortement chargés est associé aux régions des courtes longueurs d'onde qui sont données dans le tableau I.1

Tableau I.1. : Terminologie adoptée pour le domaine des courtes longueurs d'onde dans le spectre électromagnétique. [8].

Nom	Longueur d'onde (nm)
Ultraviolet sous vide (UVS)	30-200
Ultraviolets cosmiques (Schumann)	100-200
Ultraviolets extrêmes (UVE)	10-100
XUV	2-30
Rayons X mous	0.1-4
Rayons X durs	0.01-0.1
Rayonnement gamma	≤ 0.01

D'après le principe de la dualité onde-corpuscule, la radiation émise transporte l'énergie d'un photon E reliée à la fréquence ν et la longueur d'onde λ par la relation :

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}, \quad (I.1)$$

où $h = 6.626\ 075\ 5\ 10^{-34} J \cdot s$ représente la constante de Planck et $c = 299\ 792\ 458\ ms^{-1}$ la vitesse de la lumière dans le vide.

I-3. Formation des raies

Une raie spectrale est une ligne sombre ou lumineuse dans un spectre électromagnétique. Les raies spectrales sont le résultat de l'interaction entre un système quantique (atomes, ions et molécules) et le rayonnement électromagnétique. La formation et l'apparition des raies sont dues à plusieurs processus, soit collisionnels tel que l'interaction d'un électron avec un atome ou un ion, ou radiatifs comme l'interaction de photons avec un atome ou un ion.

L'étude de la manière dans laquelle la matière peut émettre ou absorber une radiation est connue en physique par le domaine "Spectroscopie". Les investigations spectroscopiques des spectres atomiques d'émission ou d'absorption nous permettent d'avoir des informations détaillées sur la source de lumière et ses propriétés.

La lumière peut exciter un atome, en le portant sur un niveau élevé, elle peut aussi l'ioniser en lui apportant l'énergie suffisante pour que l'électron échappe à l'attraction du noyau. Des collisions entre les atomes et d'autres particules telles que des électrons ou d'autres atomes, peuvent avoir le même effet, l'énergie fournie à l'atome pour l'exciter ou l'ioniser est prélevée sur l'énergie cinétique de la particule qui entre en collision [9].

Dans un système quantique, l'énergie ne peut pas prendre des valeurs arbitraires : seuls certains niveaux énergétiques bien précis sont possibles. On dit que l'énergie du système est quantifiée. Les changements d'état correspondent donc eux aussi à des valeurs bien précises d'énergie marquant la différence d'énergie entre le niveau final et le niveau d'origine. Si l'énergie du système diminue d'une quantité ΔE , un quantum de rayonnement électromagnétique, appelé photon, sera émis à la fréquence ν donnée par la relation de Planck-Einstein : $\Delta E = h\nu$. Inversement, si le système absorbe un photon de fréquence ν , son énergie augmente d'une quantité $h\nu$. Comme l'énergie du système est quantifiée, il en est de même pour la fréquence des photons émis ou absorbés par le système. Ceci explique que le spectre d'un système quantique est constitué d'un ensemble de raies discrètes associées à des transitions entre niveaux discrets (transition lié-lié) plutôt que d'un spectre continu où toutes les fréquences sont présentes en quantité variable.

Un gaz chaud se refroidit en émettant des photons, le spectre observé est donc constitué d'un ensemble de raies lumineuses sur un fond sombre. On parle alors de **raies d'émission** (voir figure I.2). Inversement, si le gaz est froid mais éclairé par une source continue, le gaz absorbe des photons et le spectre est constitué par un ensemble de raies sombres sur un fond lumineux : on parle alors de **raies d'absorption**.

Les raies d'absorption et d'émission sont fortement spécifiques à chaque substance, et peuvent être employées pour identifier facilement la composition chimique de n'importe quel milieu capable de laisser passer la lumière (généralement, il s'agit de gaz). Elles dépendent également des conditions physiques du gaz, ainsi elles sont largement utilisées pour déterminer la composition chimique des étoiles et d'autres corps célestes qui ne peuvent pas être analysés par d'autres moyens, aussi bien que leurs états physiques.

D'autres mécanismes que l'interaction atome-photon peuvent produire des raies spectrales. Selon l'interaction physique (avec des particules simples, des molécules, etc.) la fréquence des photons impliqués change considérablement, et on peut observer des raies dans tout le spectre électromagnétique : des ondes radio aux rayons gamma.

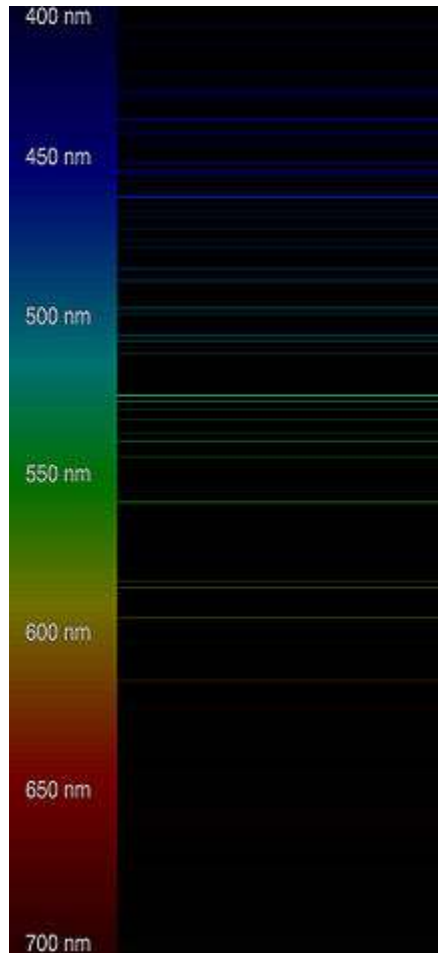


Figure I.2 : Raies spectrales d'émission du césium [10].

I-3.1. Interaction électron-atome (ion)

Dans un atome cible, chaque électron est lié au noyau avec une certaine énergie de liaison $E_{L(e^-)}$. L'électron incident possède une énergie cinétique E_c .

Lorsqu'un électron incident arrive sur un atome de la cible, la probabilité pour qu'il heurte un électron du cortège électronique n'est pas négligeable.

Si $E_c \geq E_{L(e^-)}$, un électron de la cible pourrait être expulsé du cortège électronique de l'atome-cible, celui-ci s'ionise. Dès lors, l'atome devient instable : un réarrangement électronique se produit s'il s'agit d'un électron des couches internes. On distingue deux cas :

- S'il s'agit d'un électron périphérique très externe, son énergie de liaison est la plus faible du cortège électronique, et donc cet électron expulsé est remplacé par un électron libre de la matière, émettant un rayonnement faible, en tous cas pas dans le domaine des fréquences X.
- Si l'électron incident a une énergie cinétique assez forte, il pourra expulser un électron des niveaux internes de l'atome K ($n = 1$) ou L ($n = 2$) (énergies de liaison plus élevées), par exemple. Dès lors, l'atome devient instable, la lacune électronique en K ou L est comblée par un électron d'une couche n plus externe. Ceci conduit à l'émission d'un photon de fluorescence dont la fréquence correspond à la différence de niveaux énergétiques selon :

$$E_n - E_{K/L} = h \nu_{n \rightarrow K/L}. \quad (I.2)$$

Les fréquences ainsi émises correspondent aux fréquences du rayonnement X. Les niveaux de départ et d'arrivée étant parfaitement définis (quantifiés), il en résulte que les rayonnements émis sont caractéristiques de l'atome cible. On parle alors de raies caractéristiques (voir figure I.3). Dans la figure, ci-dessous, l'indice K spécifie la couche d'arrivée. L'indice α, β, \dots indique si l'électron de remplacement vient de la couche immédiatement supérieure ou des couches suivantes.

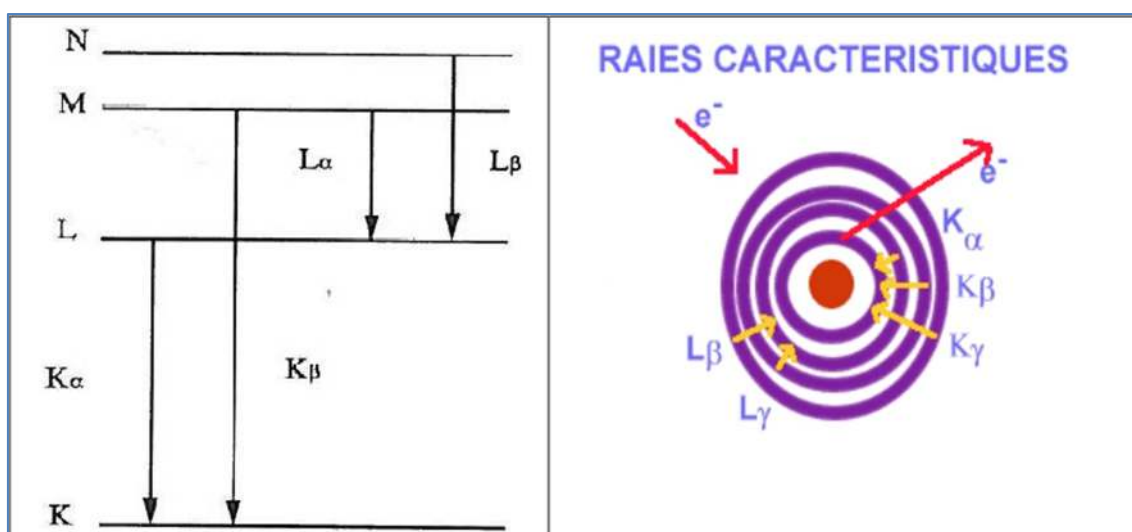


Figure I.3 : Formation des raies par transition électronique

I-3.2. Absorption et émission de la lumière

L'énergie d'un atome peut changer via des transitions électroniques. Concrètement, cela concerne (au moins) un de ses électrons qui effectue une transition d'un état d'énergie à un autre. Dans le cadre de l'interaction lumière/matière, ces transitions font intervenir des particules lumineuses, les photons. On distingue deux cas d'interaction :

❖ Absorption :

Un électron est dans un état d'énergie E_1 . Si un photon lui apporte exactement l'énergie $\Delta E = E_2 - E_1$ correspondant à la différence d'énergie avec un état d'énergie E_2 , alors le photon est absorbé par l'atome, et l'électron effectue une transition $E_1 \rightarrow E_2$ (voir figure I.4). La transition ne peut se faire « qu'en un coup », c'est à dire qu'avec un seul photon en même temps.

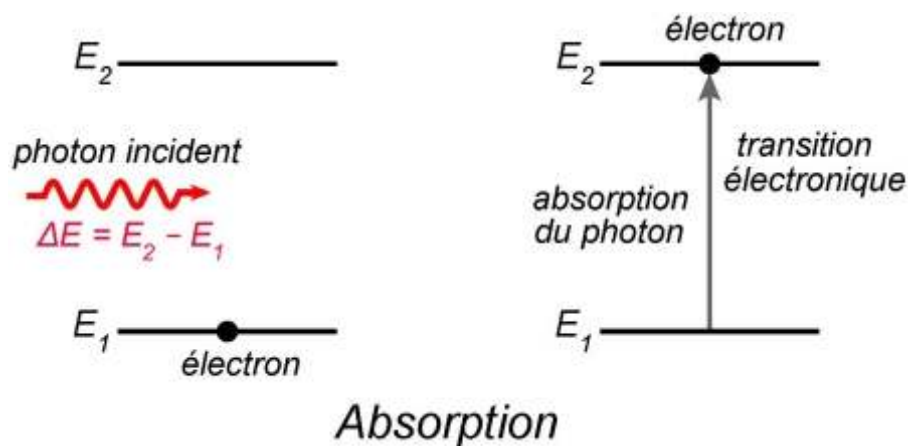


Figure I.4 : Absorption de la lumière

Si l'énergie du photon est suffisante, il peut ioniser l'atome, en amenant l'électron dans le continuum des états non liés. Une part de l'énergie du photon sert ainsi à ioniser l'atome, l'énergie restante est emportée par l'électron sous forme d'énergie cinétique.

❖ Emission :

L'émission atomique consiste à exciter un ou plusieurs électrons pour que ceux-ci passent à un niveau d'énergie supérieur. Une fois l'électron excité, il retombera plus tard à un niveau d'énergie initial ou inférieur. Cette retombée du niveau d'énergie a pour conséquence d'émettre un photon et donc d'émettre de la lumière [11].

I-3.3. Emission spontanée et émission stimulée (induite)

Un atome est capable d'émettre ce qu'il absorbe, en quelque sorte. Pour cela on a deux types d'émission soit spontanée ou stimulée.

- ❖ **Emission spontanée** : Désigne le phénomène par lequel un système quantique placé dans un état excité retombe nécessairement dans un état de plus basse énergie, par émission d'un photon.

Considérons, par exemple, un atome d'hydrogène dont l'électron se trouve dans un état excité E_2 . Naturellement, l'atome ne peut pas occuper un niveau excité pour une longue durée, donc au bout d'un certain temps (très court), cet électron peut passer spontanément à l'état d'énergie inférieur E_1 et ceci s'accompagne avec l'émission d'un photon d'énergie : $E_2 - E_1 = h \nu_{21}$.

Ce photon est émis dans une direction quelconque, c-à-d., la direction et la phase du photon émis **sont aléatoires**.

Si l'on note n_2 la population atomique dans l'état 2 d'énergie E_2 , alors l'évolution de la population n_2 est décrite par l'équation :

$$\frac{dn_2}{dt} = -A_{21}n_2, \quad (I.3)$$

où le signe (-) traduit la diminution de la population de l'état 2 par émission spontanée. Ce procédé a également pour effet d'augmenter (signe +) la population n_1 de l'état 1 d'énergie E_1 qui sera décrite par :

$$\frac{dn_1}{dt} = +A_{21}n_2. \quad (I.4)$$

Dans les équations (I.3) et (I.4), A_{21} désigne le coefficient d'Einstein pour l'émission spontanée du niveau 2 vers le niveau 1.

- ❖ **Emission stimulée** : Processus de désexcitation d'un électron favorisé en illuminant l'atome d'une lumière ayant une longueur d'onde correspondant à l'énergie de transition entre les deux états électroniques.

Si maintenant un photon ayant l'énergie $h\nu = E_2 - E_1$ rencontre l'atome ou l'ion dans l'état excité E_2 ; l'interaction entre ce photon et l'atome ou l'ion provoque la désexcitation de l'électron vers l'état d'énergie inférieure E_1 et

l'émission d'un photon de même énergie $E_2 - E_1$ dans la même direction que le photon incident et en phase avec lui (voir figure I.5). Donc, avec le processus d'émission stimulé (ou induite), nous obtenons deux photons identiques autrement dit ce processus conduit à une amplification du rayonnement [12].

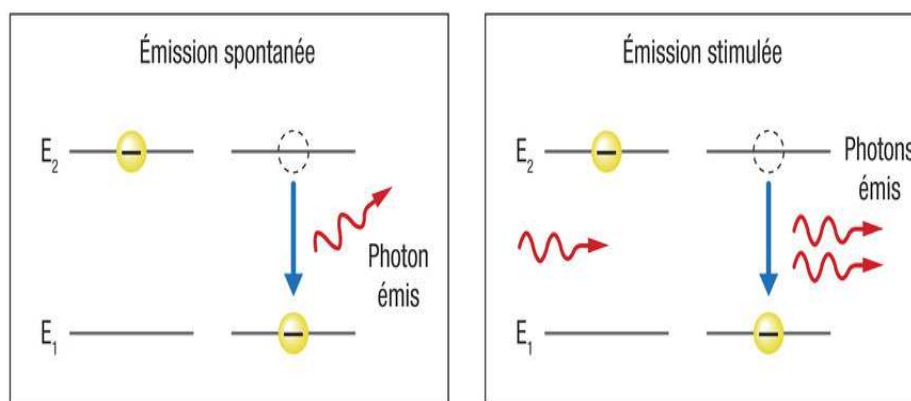


Figure I.5 : Émission spontanée et émission stimulée

I-4. Type de transition et règles de sélection

En accord avec les postulats de Bohr, un atome ou un ion subissant une transition d'un état stationnaire supérieur d'énergie E_2 vers un état inférieur d'énergie E_1 émet un photon. La conservation de l'énergie implique que ce rayonnement a pour énergie $h\nu = E_2 - E_1$.

Les propriétés de la radiation émise telles que son intensité, sa multiplicité et sa polarisation sont définies par des règles appelées « règles de sélection » reliant les nombres quantiques caractérisant les états associés à chacun des niveaux impliquant la transition.

Les règles de sélection sont formulées à partir des principes de base de la mécanique quantique, elles décrivent un changement dans les nombres quantiques de l'atome ou l'ion et reflétant les lois de conservation de l'énergie et du moment cinétique du système total « atome + photon ».

Un électron lié qui effectue une transition est souvent appelé « électron optique », il peut appartenir aux couches internes ou externes de l'atome. Des règles de sélection exactes et approximatives peuvent être obtenues. Les règles exactes résultent des lois de conservation et des propriétés des parties angulaires des opérateurs décrivant les éléments de matrice pour les

interactions électrique et magnétique. Les règles de sélection exactes sont indépendantes des schémas de couplage des moments angulaires et relient les nombres quantiques : la parité, le moment angulaire total J et sa projection M sur l'axe de quantification (Z).

Les règles de sélection reflétant un changement, du moment angulaire total ΔJ , de sa projection ΔM et de la parité ΔP se résument par :

$$\Delta J = 0, \pm 1, \dots, \pm k \quad J + J' \geq k$$

$$\Delta M = 0, \pm 1, \dots, \pm k$$

$$\Delta P = \begin{cases} (-1)^k & \text{pour les transitions de type électrique } E_k \\ (-1)^{k+1} & \text{pour les transitions de type magnétique } M_k \end{cases}$$

où k est la multiplicité de la transition, J est le moment angulaire total de l'état initial de l'atome et J' est celui de son état final. Pour les transitions dipolaires, on a $k=1$ et $k=2$ pour les transitions quadrupolaires, et ainsi de suite. Les règles données, ci-dessus, traduisent la conservation du moment angulaire total du système « atome+photon » : $J = J' + k$.

Si nous considérons les transitions radiatives dipolaires électriques E1, d'après ces règles de sélection, nous remarquons que ce type de transition ne se produit qu'entre états de parités opposées. Les transitions dipolaires magnétiques M1 se produisent entre états de même parité.

I-5. Notation adoptée pour les ions

Un atome neutre est désigné par le symbole de l'élément chimique dans le tableau périodique. Pour les ions positifs (ou négatifs) le nombre d'électrons manquants (s'ajoutants) est indiqué comme exposant. Par exemple, un atome neutre de néon est désigné par le symbole Ne, un atome de néon trois fois ionisé comme Ne^{3+} et un atome de néon négatif est désigné par Ne^- . En général, les ions positifs sont désignés par le symbole X^{q+} , $q = Z - N$, où Z est la charge nucléaire et N est le nombre total des électrons dans l'atome ou l'ion. Par exemple, l'atome de fer qui a perdu 25 électrons s'écrit comme Fe^{25+} (ion hydrogénoïde).

Les ions avec le même nombre d'électrons mais avec des charges nucléaires différentes appartiennent à une séquence iso-électronique de l'atome correspondant à ce nombre d'électron. Si $N = 1$, on aura les ions hydrogénoïdes, Si $N = 2$, on aura des ions héliumoïdes. Par exemple, les ions Na^+ , Mg^{2+} , Al^{3+} possèdent $N = 10$ électrons et appartiennent à la séquence isoélectronique du néon Ne et sont appelés ions néonoïdes.

Si le nombre des électrons dans un ion positif X^{q+} est beaucoup moins inférieur que sa charge nucléaire, $N \ll Z$, l'ion est appelé ion fortement chargé, ou hautement ionisé. La caractéristique principale des ions fortement chargés est le champ coulombien du noyau à longue portée qui prévaut toutes les interactions de ces ions avec les photons et les particules atomiques : électrons, atomes, molécules et ions.

Chapitre II

Données Atomiques et

Processus Atomiques Conduisant à la

Formation des Raies X

II-1. Introduction

Nos connaissances des objets cosmiques présents dans l'univers sont principalement obtenues à partir des mesures des spectres d'émission de ces objets.

A la fin du 20^{ème} siècle, des milliers d'objets émettant des raies X ont été détectés à travers l'univers. Dans le domaine des raies X, les radiations les plus intenses proviennent des étoiles binaires, des noyaux galactiques et des objets interstellaires. Les raies X émergents des plasmas chauds présents dans l'univers ou ceux produits en laboratoire sont dues essentiellement à des ions fortement chargés présents reflétant l'existence de phénomènes énergétiques.

En effet, les plasmas présents dans l'univers ou ceux produits en laboratoires sont caractérisés par deux propriétés principales. Ils contiennent des particules chargées (électrons, ions) mais sont électriquement neutres et le mouvement des particules présents est corrélé. Du fait de la présence de forces coulombiennes de longue portée, toutes les particules chargées dans un plasma interagissent simultanément les unes avec les autres, via des collisions atomiques dont les plus importantes sont entre électrons, atomes et ions.

Les ions et les atomes ont une structure atomique et donc peuvent être excités vers des états électroniques supérieurs ou ionisés, déclinés vers des états inférieurs émettant des photons. Tous ces processus élémentaires incluant l'ionisation et la recombinaison ainsi que les processus radiatifs déterminent les paramètres d'un plasma tels que sa température, sa densité électronique, son degré d'ionisation et son spectre d'émission. Les collisions les plus efficaces sont celles entre électrons et ions ou atomes et peuvent être divisées en deux groupes : processus radiatifs associés à l'interaction entre atomes, ions et photons et processus collisionnels décrivant les collisions entre électrons, atomes et ions.

II-2. Processus atomiques décrivant l'évolution d'un plasma

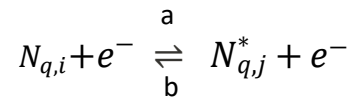
Cette partie énumère les processus importants intervenants dans le bilan détaillé du peuplement/dépeuplement des niveaux atomiques ou ioniques. Ces processus ayant une origine collisionnelle et/ou radiative sont responsables du changement de l'état d'un ion considéré. Chaque processus, décrit ci-dessous, est explicité avec le processus inverse correspondant.

II-2.1. Processus collisionnels

Les processus collisionnels rassemblent toutes les collisions élastiques ou non, entre ions et électrons. Lors d'une collision élastique, seule l'énergie cinétique est échangée entre les particules, ces dernières ne subissant aucune modification de leur état. Ceci implique à fortiori un retour à un équilibre commun. Les collisions inélastiques, elles, éloignent la distribution de l'équilibre. On notera $N_{q,i}$ la densité de population de l'ion de charge ionique q , dans l'état quantique i , l'astérisque $*$ indique qu'il se trouve dans un état excité.

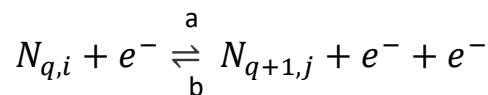
➤ **Excitation et désexcitation collisionnelle :**

Lors d'une collision entre un électron avec un ion de charge ionique q , ce dernier peut passer dans un état excité (a), ou encore peut se désexciter (b). Ces deux processus inverses l'un de l'autre se schématise comme :



➤ **Ionisation collisionnelle et recombinaison à trois corps :**

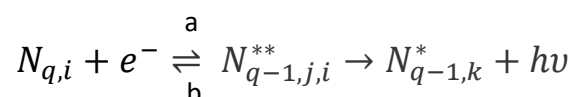
Dans ce processus de collision entre l'électron et l'ion de charge ionique q , un électron lié de cet ion est éjecté dans le continuum (a). Son processus inverse (b) étant la recombinaison à trois corps dans laquelle deux électrons incidents interagissent simultanément avec un ion. Un des électrons est capturé dans un état lié de l'ion et l'autre est diffusé.



Ce processus de recombinaison à trois corps est un mécanisme important dans la distribution de l'état de charge des ions dans les plasmas denses.

➤ **Recombinaison diélectronique et autoionisation :**

La recombinaison diélectronique est un mode indirect de recombinaison qui se produit 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 2^{ème} étape :



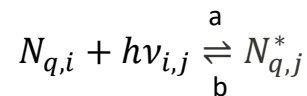
La première étape de la recombinaison diélectronique constitue un processus à double électron appelé capture diélectronique, à travers laquelle un électron libre est capturé et un autre électron lié de l'ion est simultanément excité formant ainsi un état doublement excité **. Dans la 2^{ème} étape, l'ion dans l'état doublement excité émet un photon en se désexcitant vers un état stable. On voit donc que la recombinaison diélectronique ne peut se produire que si l'ion possède au moins un électron lié. En d'autres termes, la recombinaison diélectronique ne peut pas se produire dans des ions initialement nus.

Un processus compétitif à la recombinaison diélectronique pour le déclin de l'ion doublement excité se produit lorsqu'un des électrons tombe vers le niveau fondamental en transférant son énergie à l'autre électron qui est ainsi libéré par l'ion, c'est l'autoionisation (b).

II-2.2. Processus radiatifs

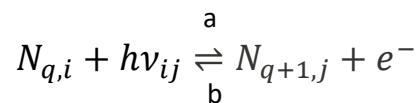
Parmi les processus radiatifs les plus importants, nous citons :

➤ **Emission spontanée et photo-excitation :**



La photo-excitation (a) est un processus d'interaction avec le champ de rayonnement ou encore un processus de réabsorption, ce processus est généralement important pour les populations des niveaux dans les plasmas astrophysiques de faibles densités. Son processus inverse (b) est l'émission spontanée dans laquelle un ion se désexcite en émettant un photon d'énergie égale à celle de la transition. Le coefficient d'émission spontanée, noté A_{ji} , varie en Z^4 lorsqu'il s'agit de transitions dipolaires électriques ce qui permet de déduire que les processus radiatifs domineront pour les ions lourds.

➤ **Recombinaison radiative et photoionisation :**



La recombinaison radiative (RR) schématisée dans (b) est le processus dans lequel un électron libre incident est capturé dans un état lié d'un ion de charge

ionique ($q+1$) pour donner un ion final de charge ionique q . Cette réaction est accompagnée avec l'émission simultanée d'un photon dit photon de recombinaison. La recombinaison radiative se produit préférentiellement vers les niveaux peu excités de l'ion et se propage sous forme de cascades radiatives.

Le processus inverse est la photoionisation (a) dans laquelle un rayonnement électromagnétique ionise un ion de charge q . Ce processus n'est important que dans le cas des flux de photons très grands.

A noter que pour des plasmas contenant des ions de charge nucléaire Z élevé, les processus de RR et de photoionisation représentent des mécanismes importants de conduction du rayonnement X vers l'intérieur de la cible.

II-3. Données atomiques

Dans cette partie, on présentera des données atomiques telles que les énergies des niveaux fondamentaux et excités, les probabilités de transition radiative, les sections efficaces de processus collisionnels. Celles-ci sont nécessaires pour l'étude et l'analyse de quantités caractéristiques des raies d'émission dans le domaine X des ions présents dans un plasma chaud (polarisation et rapport des intensités de raies). Ces quantités servent à leur tour à faire des prédictions sur quelques paramètres du plasma étudié : densité électronique, température et état d'ionisation.

II-3.1. Niveaux d'énergie

Il est bien connu qu'en physique atomique chaque atome ou ion se caractérise par ses propres états quantiques stationnaires auxquels est associé un ensemble d'énergies discrètes ou énergies électroniques de liaison E_k . Si un électron lié effectue une transition d'un niveau supérieur E_1 vers un niveau inférieur E_0 , un photon est émis avec une fréquence angulaire ω et une longueur d'onde λ reliées par la relation :

$$\hbar\omega = \Delta E = E_1 - E_0 \quad \text{avec} \quad \lambda = 2\pi c/\omega, \quad (\text{II. 1})$$

avec, $\hbar = h/2\pi = 1.054\ 571\ 628 \times 10^{-34} J.s$, la constante de Planck réduite et $c = 299\ 792\ 458 m.s^{-1}$ la vitesse de la lumière dans le vide.

L'émission des photons suite aux transitions entre les états liés conduit à la formation de raies spectrales ou spectre discret.

Les énergies de liaison d'un système hydrogénoïde avec un champ de Coulomb central $V(r) = -Ze^2/r$ dépendent seulement du nombre quantique principal n et sont données par la formule de Rydberg avec la correction de la masse réduite :

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2} \text{Ry} \frac{1}{1 + m_e/M} \quad (\text{II. 2})$$

où Ry est l'énergie de Rydberg (1Ry=13.605 eV), m_e et M sont les masses de l'électron et du noyau, respectivement et Z est la charge nucléaire.

L'expression (II. 2), obtenue en considérant les postulats de Bohr coïncident avec les énergies propres obtenues de la solution exacte de l'équation de Schrödinger pour un système à 1 électron. Pour l'atome d'hydrogène ($Z = 1$) dans son état fondamental $n = 1$, l'équation (II.2) donne une énergie d'ionisation $E_1(\text{H}) \approx 13.5984$ eV. La différence de 0.007 eV entre $E_1(\text{H})$ et l'énergie de Rydberg provient de l'influence de la masse nucléaire de l'hydrogène pour lequel le rapport $M_{\text{H}}/m_e \approx 1836.2$.

Dans le cas d'un système à plusieurs électrons, les énergies de liaison ne peuvent pas être données par la formule simple (II.2) à cause des interactions électriques et magnétiques entre les électrons atomiques liés et la détermination des énergies de liaison devient un problème compliqué, même pour un système à 2 électrons tel que l'hélium He et les ions héliumoïdes. Pour des ions à plusieurs électrons, les niveaux d'énergie sont bien décrits par la mécanique quantique et les approches de l'électrodynamique quantique (QED) qui incluent les interactions dans des approximations d'ordres supérieurs.

Les atomes alcalins (Li, Na, ...) représentent une exception car ils possèdent un électron de valence (couche extérieure) dans le cœur atomique sphérique faisant l'approximation d'un système simple à 1 électron. Le cœur atomique d'un ion avec N électrons consiste d'un noyau et des $N - 1$ autres électrons. Les énergies des niveaux des alcalins sont aussi décrites par une formule similaire à l'équation (II.2) mais dépendent du nombre quantique orbital l de l'état, elles sont données par [8] :

$$E_{nl} = -\frac{\text{Ry}}{n_{\text{eff}}^2} \cdot \frac{1}{1 + m_e/M} \quad \text{avec} \quad n_{\text{eff}} = n - \Delta(n, l), \quad (\text{II. 3})$$

où n_{eff} représente le nombre quantique effectif qui généralement n'est pas un entier et $\Delta(n, l)$ est le défaut quantique dépendant des nombres quantiques n et l . Les valeurs $\Delta(n, l)$ sont plus grandes pour les électrons des couches s, et décroissent quand l augmente, et pour une valeur donnée de l , $\Delta(n, l)$ sont indépendantes de n .

Dans les ions à plusieurs électrons désignés par X^{q+} (q électrons ionisés), un électron de charge e dans son orbite sent un certain potentiel effectif $V_{\text{eff}}(r)$ créée par le cœur atomique, c-à-d, par le noyau et les autres électrons. A cause de l'effet d'écrantage de la charge nucléaire par les électrons internes, le potentiel $V_{\text{eff}}(r)$ n'est pas un potentiel purement coulombien mais l'approche à petites et grandes distances :

$$V_{\text{eff}}(r) \approx -\frac{Ze^2}{r} \quad r \rightarrow 0$$

$$V_{\text{eff}}(r) \approx -\frac{(Z - N + 1)e^2}{r} \equiv -\frac{Z_{\text{eff}}e^2}{r} \quad r \rightarrow \infty$$
(II.4)

Où Z représente la charge nucléaire et N le nombre des électrons. La charge nucléaire effective Z_{eff} est définie comme le nombre nette de la charge du noyau :

$$Z_{\text{eff}} = Z - N + 1 = q + 1 \quad (\text{II.5})$$

Dans l'équation précédente, q est le nombre de charge ionique. Pour des atomes neutres, la charge nucléaire effective est égale à l'unité, $Z_{\text{eff}} = 1$, pour les ions hydrogénoïdes, Z_{eff} coïncide avec le nombre de charge nucléaire, $Z_{\text{eff}} = Z$; et pour les ions fortement chargés, on a $Z \gg N$ et donc $Z_{\text{eff}} \approx Z$.

La plupart des caractéristiques atomiques suivent un comportement en Z et cette caractéristique est utile pour plusieurs applications. Dans le tableau (II.1), nous résumons le comportement de quelques caractéristiques des ions fortement chargés en fonction de la charge nucléaire Z .

On remarque, d'après le tableau (II.1), une dépendance importante des quantités atomiques sur la charge nucléaire des ions Z . Par exemple, la taille d'un ion fortement chargé décroît comme $1/Z$ quand Z augmente. Ceci veut dire que la taille de l'ion hydrogénoïde d'uranium ($Z = 92$) est à peu près 100 fois plus petite que celle de l'atome d'hydrogène ($Z = 1$). Les interactions coulombiennes fortes dans les ions fortement chargés sont responsables de la séparation de leurs niveaux d'énergie.

Tableau II.1. Comportement d'échelle approximatif de quelques caractéristiques radiatives et collisionnelles des ions fortement chargés avec la charge nucléaire Z . α représente la constante de structure fine ($\alpha = 0.007\ 29735$).

Rayon atomique	Z^{-1}
Potentiel d'ionisation	Z^2
Energie de transition	Z^2
Interaction électrostatique	Z^{\square}
Interaction spin-orbite	Z^4
Déphasage de Lamb	$\alpha^5 Z^4$
Durée de vie radiative (désexcitation de type E1)	Z^{-4}
Sections efficaces d'excitation et d'ionisation par impact d'électrons	Z^{-4}
Coefficients de taux d'excitation et d'ionisation par impact d'électrons	Z^{-3}

II-3.2. Probabilité de transition radiative

L'intensité d'une transition discrète observée dans un spectre est liée, d'une part, à la population du niveau émettant la raie et d'autre part à une grandeur caractéristique de l'atome et de la transition concernée, à savoir la probabilité de transition. La notion de probabilité de transition n'est pas récente puisqu'elle a été introduite par A. Einstein. Cette grandeur peut être reliée directement à d'autres paramètres, comme la force de raie et la durée de vie radiative de l'état excité.

Les probabilités de transition radiative (par unité de temps) des atomes et des ions sont des caractéristiques atomiques très importantes qui définissent les durées de vie des états excités et les intensités des raies spectrales. L'intensité d'une raie est l'énergie totale émise par

unité de temps et par unité de volume. L'intensité I_{10} d'une raie spectrale qui résulte de la transition atomique d'un état supérieur 1 vers un état inférieur 0, et est donnée par [8] :

$$I_{10} = n_{i1} A_{10} \hbar \omega, \quad (\text{II. 6})$$

où A_{10} est la probabilité de transition radiative par unité de temps, n_{i1} est la densité des ions du niveau 1 et $\omega = (E_1 - E_0)/\hbar$ est la fréquence de transition avec \hbar la constante de Planck réduite. La probabilité de transition radiative de la transition $2p \rightarrow 1s$ dans l'atome d'hydrogène, par exemple, est $A_{10} = 6.26 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$. A noter que les probabilités de transition radiative dépendent de façon critique de la charge nucléaire des ions et du type de la transition (électrique ou magnétique).

Considérons $A_{10}^{(\text{Ek})}$ et $A_{10}^{(\text{Mk})}$ les probabilités de la transition $1 \rightarrow 0$ avec les modes électrique Ek et magnétique Mk, respectivement. En introduisant les quantités (sans dimension) appelées forces d'oscillateur $f_{01}^{(\text{Ek})}$ et $f_{01}^{(\text{Mk})}$ pour les transitions de type électrique et magnétique, nous avons les relations suivantes [8] :

$$\begin{aligned} g_1 A_{10}^{(\text{Ek})} &= g_0 A_0 (\Delta E / \text{Ry})^2 f_{01}^{(\text{Ek})} \\ g_1 A_{10}^{(\text{Mk})} &= \alpha^2 g_0 A_0 (\Delta E / \text{Ry})^2 f_{01}^{(\text{Mk})} \end{aligned} \quad (\text{II. 7})$$

$$A_0 = \alpha^3 \text{Ry} / \hbar \approx 8.033 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$$

Dans le système d'équations (II.7), ΔE représente l'énergie de transition en Ry (1Ry=13.605 eV), g le poids statistique du niveau ($g = 2J + 1$, J étant le moment angulaire du niveau) et α la constante de structure fine ($\alpha = 0.007 29735$).

Les forces de l'oscillateur ont des valeurs positives et négatives dépendant de la direction des transitions : positives pour les transitions des états inférieurs vers des états supérieurs et négatives pour le cas inverse. Pour les deux types de transition Ek et Mk une estimation de l'ordre de grandeur de la force de l'oscillateur donne :

$$f^{(\text{k})} \simeq (2a_0 \omega / c)^{2k-2} \simeq (\alpha \Delta E / \text{Ry})^{2k-2}, \quad (\text{II. 8})$$

a_0 étant le rayon de Bohr ($a_0 = 0.529 \text{ \AA}$).

Pour les ions fortement chargés hydrogénoïdes et héliumoïdes, les formules des probabilités radiatives pour les transitions de type électrique et magnétique entre l'état

fondamental et les états excités peuvent être obtenues de façon analytique. Ces formules sont utiles car elles reflètent la dépendance de ces probabilités sur la charge nucléaire et l'énergie de transition. Les formules présentées ci-dessous ont été obtenues en se basant sur un traitement purement relativiste.

Dans les ions hydrogénoïdes, l'état 2s a la même parité que celle de l'état 1s, donc le déclin radiatif 2s-1s peut se produire via le mode dipôle magnétique M1. Pour les transitions de ce type, la probabilité de transition $A^{(M1)}$ est [8] :

$$A^{(M1)}(2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}) = \frac{\alpha^9 Z^{10} m_e e^4}{972 \hbar^3} \simeq 2.46 \times 10^{-6} Z^{10} [s^{-1}] \quad (\text{II. 9})$$

II-3.3. Durée de vie des états excités

La durée de vie d'un état excité k est le temps durant lequel le nombre de particules diminue e fois ($e \simeq 2.7183$) et ceci dû aux transitions spontanées vers les états inférieurs. La durée de vie τ_k est reliée à la probabilité de transition radiative par :

$$\tau_k = \left[\sum_{i \leq k} A_{ki} \right]^{-1}. \quad (\text{II. 10})$$

Dans l'équation (II.10), $\sum_{i \leq k} A_{ki}$ représente la somme des probabilités de transition de tous les déclins possibles de l'état k vers les états inférieurs i , incluant tous les types de transition. L'équation ci-dessus donne une durée de vie de l'état $n = 2$ dans l'atome d'hydrogène $\tau_k = 2.013 \times 10^{-9}$ s. Pour un état hydrogénoïde arbitraire de nombre quantique principal n , τ_k peut être exprimé par la relation [8] :

$$\tau_n = \frac{3 n^5}{8 A_0 Z_{\text{eff}}^4 [\ln(2n - 1) - 0.365]} \quad n \geq 2 \quad (\text{II. 11})$$

Avec $Z_{\text{eff}} = Z - N + 1$ est la charge effective de l'ion et A_0 est la constante définie dans le système d'équation (II.7). Comme on peut le voir, les durées de vie des états excités croient rapidement avec le nombre quantique n . Pour le niveau excité $n = 2$ de l'atome d'hydrogène, l'équation (II.11) donne $\tau(n = 2) = 2.03 \times 10^{-9}$ s. Pour un état spécifique nl où l est le nombre quantique orbitale ($l \neq 0$), l'expression exacte donne [14] :

$$\tau_{nl} = \frac{3 n^3}{4 A_0 Z_{\text{eff}}^4} (l + 1/2) \quad n \geq 2, \quad l \neq 0. \quad (\text{II. 12})$$

L'équation (II.12) donne la durée de vie de l'état 2p pour l'atome d'hydrogène $\tau(2p) = 1.68 \times 10^{-9}$ s. Des calculs exacts des durées de vie, pour les états excités avec $n < 25$ dans les ions hydrogénoïdes, sont présentés dans [15].

II-3.4. Section efficace de collision

En physique atomique, nucléaire ou physique des particules, la section efficace est une grandeur physique reliée à la probabilité d'interaction d'une particule pour une réaction donnée.

L'idée d'utiliser une surface pour exprimer une telle probabilité d'interaction remonte probablement à la découverte du noyau atomique et de sa petitesse par Ernest Rutherford en 1911 en bombardant une mince feuille d'or avec des rayons alpha, où il y a constat de peu de déviations de ces particules reflétant le fait que la surface utile de l'atome soit toute petite comme si la feuille d'or était composée essentiellement de vide.

Lors des expériences de collision, la mesure de la probabilité qu'une réaction se produise consiste à faire un grand nombre de mesures entre un grand nombre de particules incidentes et un grand nombre de noyaux cibles et de mesurer les particules diffusées par un détecteur. On s'intéresse à la moyenne des valeurs mesurées, la section efficace se définit comme le rapport entre le taux d'interaction et le flux incident.

➤ Signification physique de la section efficace :

Le nombre de particules que l'on détecte est bien sûr proportionnel au nombre de particules incidentes et au nombre de noyaux cibles. La relation de proportionnalité s'exprime par l'intermédiaire d'un coefficient de proportionnalité σ .

La relation entre le taux d'interaction T , qui est le nombre de particules diffusées par unité de temps et la section efficace σ est alors :

$$T = \sigma \Phi N_{cible} = \sigma \Phi S_{cible} S \quad (\text{II.13})$$

Avec, Φ le flux, c'est-à-dire, le nombre de particules incidentes par unité de surface et par unité de temps. N_{cible} est le nombre de particules cibles dans le volume V de la cible correspondant à la surface S couverte par le faisceau. S_{cible} est le nombre de particules par unité de surface : densité surfacique de particules.

❖ **Calcul du nombre de particules (cibles) par unité de volume, n_{cible} , ou par unité de surface, S_{cible} :**

Soit d l'épaisseur, ρ la masse volumique et A la masse atomique du milieu cible de masse M .

N_A étant le nombre d'Avogadro. Le nombre de particules cible par unité de volume n_{cible} s'exprime par :

$$n_{cible} = \frac{N_{cible}}{V} = \frac{n_{mol} N_A}{V} = \frac{\left(\frac{M}{A} N_A\right)}{V} = \rho \frac{N_A}{A}. \quad (\text{II. 14})$$

On peut aussi exprimer le nombre de particules dans la cible :

$$N_{cible} = n_{cible} V = n_{cible} \cdot S \cdot d = (\rho N_A / A) S \cdot d, \quad (\text{II. 15})$$

et le nombre des particules cibles par unité de surface :

$$S_{cible} = \frac{N_{cible}}{S} = \frac{n_{cible} \cdot S \cdot d}{S} = n_{cible} \cdot d = (\rho \cdot d) N_A / A. \quad (\text{II. 16})$$

Dans la discussion de l'interaction des particules projectiles avec la matière, on s'intéresse souvent à la probabilité P qu'une particule interagisse avec un milieu d'épaisseur donné. Celle-ci est donnée par le rapport entre le taux d'interaction T et le taux de particules incidentes ΦS :

$$P = \frac{T}{\Phi S} = \sigma S_{cible} = \sigma N_A (\rho \cdot d) / A \quad (\text{II. 17})$$

On voit que la probabilité d'interaction dépend directement de la quantité $(\rho \cdot d)$ appelée la densité de masse surfacique, qui a comme unité de mesure le g/cm². De plus, on voit apparaître l'unité de mesure de σ : P étant sans dimension, **σ a donc la dimension d'une surface**. On peut imaginer σ comme une surface géométrique : une particule qui frapperait la cible dans cette aire serait diffusée.

Les chocs et les collisions atomiques ont lieu sur des dimensions très faibles comparativement à la surface macroscopique du détecteur. Pour cela, on s'attend à des valeurs petites des sections efficaces. L'unité usuelle utilisée pour la section efficace d'un processus de collision est le barn (b) tel que : $1\text{barn} = 10^{-24} \text{ cm}^2 = 10^{-28} \text{ m}^2$.

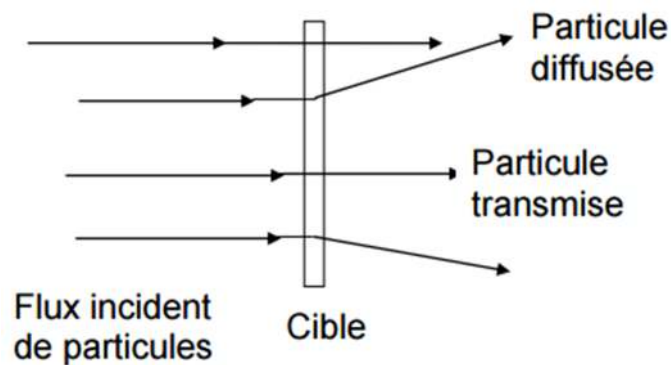


Figure II.1 : Schématisation d'un processus de collision.

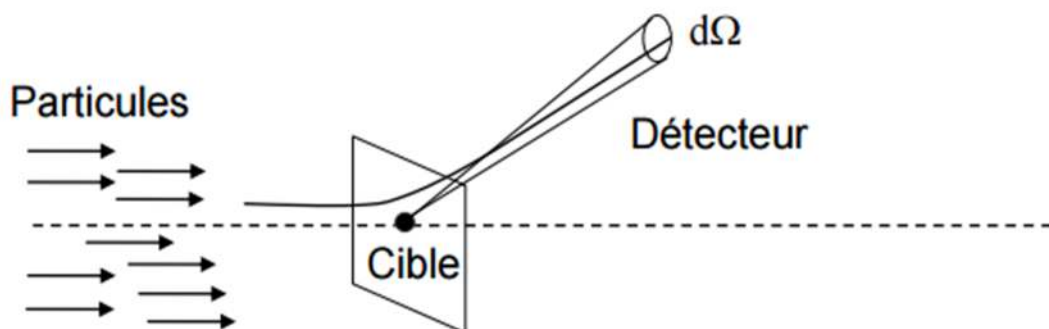


Figure II.2 : Détection des particules dans la direction définie par l'angle solide $d\Omega$.

Chapitre III

Utilisation du Code Flexible Atomic Code (FAC) pour le Calcul de Données Atomiques

III-1. Introduction

Plusieurs problèmes liés à l'étude des plasmas de laboratoire, astrophysiques et de fusion thermonucléaire contrôlée nécessitent la connaissance au préalable de la structure atomique des ions comme les énergies, les probabilités de transition des différents niveaux, les sections efficaces et les coefficients de taux des processus élémentaires. Cependant, le calcul direct de ces données devient impossible pour les atomes ou ions à plusieurs électrons, et aussi pour les grands nombres quantiques. Dans ce cas, on fait recours aux programmes et codes de calcul basés sur des méthodes et des approximations théoriques.

Parmi les codes existants, nous avons choisi de travailler avec le code FAC.

III-2. Code FAC

FAC abréviation de Flexible Atomic Code est un ensemble de programmes développés par M. F. Gu [7] dans le but de générer et calculer plusieurs données en relation avec les processus collisionnels et radiatifs comme : les niveaux d'énergie, les probabilités de transition radiative, les sections efficaces collisionnelles d'excitation et d'ionisation (par impact d'électrons), des données relatives à la photoionisation, recombinaison radiative et recombinaison diélectronique, etc. Ces quantités sont essentielles pour l'interprétation des données et des observations spectroscopiques issues des plasmas astrophysiques et de laboratoires.

Les calculs de la structure atomique dans le code FAC sont basés sur la méthode de l'interaction de configuration relativiste avec une base de fonctions d'onde des particules indépendantes. Ces bases de fonctions sont obtenues à partir d'un modèle de potentiel central local, qui est déterminé d'une façon auto-cohérente pour représenter l'écrantage électronique du potentiel nucléaire. Les effets relativistes sont inclus par l'utilisation de l'hamiltonien relativiste de Dirac.

Le code FAC apporte un modèle atomique détaillé accessible à une communauté large permettant le diagnostic de plasmas astrophysiques et de laboratoires. Son interface flexible est désignée pour être utile et facile même pour les gens qui n'ont pas une compréhension approfondie des théories atomiques. Il est aussi suffisamment puissant pour les utilisateurs qui veulent explorer l'effet du choix de ses algorithmes et des différentes approximations physiques.

III-3. Niveaux d'énergie pour un système poly-électronique

Comme nous l'avons mentionné précédemment, le code FAC utilise dans l'évaluation de plusieurs données atomiques un traitement purement relativiste basé sur l'équation relativiste de Dirac ce qui justifie son application particulièrement pour les ions de grandes valeurs de la charge nucléaire Z .

Les niveaux d'énergie d'un ion de N électrons sont obtenus en diagonalisant l'hamiltonien relativiste H qui a pour expression :

$$H = \sum_{i=1}^N H_D(i) + \sum_{i<j}^N \frac{e^2}{r_{ij}}, \quad (\text{III. 1})$$

où $H_D(i)$ est l'hamiltonien de Dirac mono-électronique : somme de l'opérateur relatif à l'énergie cinétique de l'électron et celui dû au potentiel d'interaction entre l'électron et la charge nucléaire.

Du fait de la présence des termes d'interaction entre les électrons, l'hamiltonien n'est plus séparable, c'est-à-dire qu'il ne peut plus se mettre sous la forme d'une somme d'hamiltoniens mono-électroniques. Dans ce cas, il n'existe pas de solutions mathématiques exactes à ce problème et il est donc nécessaire d'utiliser différentes approximations pour traiter les systèmes à plusieurs électrons.

Les états de base ϕ_ν , connues comme des fonctions d'état de configuration (CSF), sont représentées par des sommes de produit de N fonctions d'onde mono-électronique (fonctions spin-orbite) appelées spineurs de Dirac, $\varphi_{n\kappa m}$ exprimées par [16] :

$$\varphi_{n\kappa m} = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} P_{n\kappa}(r) \chi_{\kappa m}(\theta, \varphi) \\ Q_{n\kappa}(r) \chi_{-\kappa m}(\theta, \varphi) \end{pmatrix}. \quad (\text{III. 2})$$

Dans l'équation (III. 2), $\chi_{\kappa m}$ sont les fonctions angulaires de spin, $P_{n\kappa}(r)$ et $Q_{n\kappa}(r)$ sont les fonctions radiales large et petite, respectivement. De plus, n est le nombre quantique principale, κ est le nombre quantique relativiste de Dirac relié aux nombres quantiques angulaire totale j et orbitale l de l'électron par :

$$\kappa = (l - j)(2j + 1), \quad (\text{III. 3})$$

et m est la projection selon l'axe de quantification du vecteur moment angulaire totale \mathbf{j} .

Les électrons étant des fermions (particules de spin $\frac{1}{2}$), la fonction d'onde d'un système atomique à N électrons doit être antisymétrique sous l'échange de n'importe quelle paire de coordonnées des électrons (coordonnées de position et de spin), ce qui constitue le principe d'exclusion de Pauli. Pour satisfaire à cette condition d'antisymétrie, la fonction d'onde ϕ_ν peut se mettre sous la forme d'un déterminant de rang N , appelé déterminant de Slater exprimé par [11] :

$$\phi_\nu(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, \sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_{\gamma_1}(\vec{r}_1, \sigma_1) & \varphi_{\gamma_1}(\vec{r}_2, \sigma_2) & \dots & \varphi_{\gamma_1}(\vec{r}_N, \sigma_N) \\ \varphi_{\gamma_2}(\vec{r}_1, \sigma_1) & \varphi_{\gamma_2}(\vec{r}_2, \sigma_2) & \dots & \varphi_{\gamma_2}(\vec{r}_N, \sigma_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_{\gamma_N}(\vec{r}_1, \sigma_1) & \varphi_{\gamma_N}(\vec{r}_2, \sigma_2) & \dots & \varphi_{\gamma_N}(\vec{r}_N, \sigma_N) \end{vmatrix} \quad (\text{III. 4})$$

$\varphi_{\gamma_1}(\vec{r}_1, \sigma_1)$, par exemple, désigne la fonction d'onde mono-électronique du premier électron de coordonnées spatiales \vec{r}_1 et de coordonnées de spin σ_1 dans la configuration γ_1 . $\varphi_{\gamma_1}(\vec{r}_N, \sigma_N)$ désigne la fonction d'onde mono-électronique du $N^{\text{ième}}$ électron de coordonnées spatiales \vec{r}_N et de coordonnées de spin σ_N dans la configuration γ_1 , ainsi de suite.

Si deux lignes du déterminant sont identiques (deux électrons caractérisés par le même jeu de nombres quantiques), la fonction d'onde totale est alors identiquement nulle. Ainsi 2 électrons ne peuvent pas avoir tous les nombres quantiques identiques, ce qui est connu sous le nom de règle de Pauli ou principe d'exclusion de Pauli. Le facteur $\frac{1}{\sqrt{N!}}$ est un facteur de normalisation qui permet d'obtenir $|\phi_\nu(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, \sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)|^2 = 1$ à condition de prendre des spin-orbitales mono-électroniques normalisées.

Les fonctions d'onde atomiques approximatives sont données par une combinaison linéaire des fonctions de base ϕ_ν de même symétrie telle que :

$$\psi = \sum_{\nu} b_{\nu} \phi_{\nu}. \quad (\text{III. 5})$$

Les coefficients b_ν sont obtenus en diagonalisant l'hamiltonien total H sur la base des fonctions ψ .

Pour les ions hydrogénéoïdes, la résolution de l'équation de Dirac donne des fonctions d'onde exactes. En revanche, le travail devient compliqué pour les autres types d'ions et des approximations concernant le potentiel d'interaction ainsi que les fonctions spin-orbite sont nécessaires. La première approche généralement adoptée est l'approximation du champ central, qui repose sur le modèle des électrons indépendants. Elle conduit à la méthode de

Hartree-Fock, dont les solutions peuvent servir comme données initiales à la méthode d'interaction de configurations.

Comme nous l'avons signalé dans l'introduction, le code FAC utilise le modèle du champ central dans les calculs de la structure atomique. Il utilise également le mode **JJ** de couplage des moments angulaires. Nous allons expliciter des deux notions dans les parties suivantes.

III-4. Modèle du potentiel central local

Le modèle du champ central consiste à supposer que chaque électron se déplace indépendamment des autres ($N-1$) électrons dans le champ électrostatique généré par ceux-ci ainsi que par le noyau. Cette approximation repose clairement sur le modèle des électrons indépendants: chaque électron i se déplace dans un **champ électrostatique effectif** résultant de l'attraction du noyau et de la répulsion des autres électrons. On suppose que ce champ est moyenné sur les mouvements des ($N-1$) autres électrons en négligeant les effets de corrélation à l'électron i , et qu'il est à **symétrie sphérique**, de sorte que la fonction d'onde, appelée spin-orbitale, d'un électron a la forme (dans le cas non-relativiste) :

$$u_{nlm_l m_s}(\mathbf{q}) = \frac{1}{r} P_{nl}(r) Y_{lm_l}(\theta, \varphi) \chi_{1/2 m_s}(\boldsymbol{\sigma}), \quad (\text{III. 6})$$

\mathbf{q} regroupe les coordonnées spatiales et de spin de l'électron. On s'attend à ce que la partie radiale $P_{nl}(r)$ soit solution d'une équation similaire à celle de l'hydrogène, c'est-à-dire satisfait une équation différentielle de la forme :

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + V(r) \right] P_{nl}(r) = \varepsilon_{nl} P_{nl}(r), \quad (\text{III. 7})$$

ainsi que les conditions d'orthonormalité habituelles :

$$\int_0^\infty P_{nl}(r) P_{n'l}(r) dr = \delta_{nn'}. \quad (\text{III. 8})$$

Dans l'équation (III.6), n est le nombre quantique principale, l et m_l représentent le nombre quantique orbitale et sa projection, respectivement. $1/2$ est la valeur du spin de l'électron et m_s étant sa projection. $Y_{lm_l}(\theta, \varphi)$ sont les harmoniques sphériques et $\chi_{1/2 m_s}(\boldsymbol{\sigma})$ représentent les fonctions de spin de l'électron.

Les solutions devront être recherchées par des méthodes numériques, en imposant les conditions :

$$\begin{aligned} r \rightarrow 0 & : P_{nl}(r) \rightarrow r^{l+1} \\ r \rightarrow \infty & : P_{nl}(r) \rightarrow 0 \end{aligned} \quad (\text{III.9})$$

$V(r)$ est une fonction à optimiser de manière à minimiser l'énergie totale du système atomique. Conformément au principe de Pauli, la fonction d'onde totale ψ est un déterminant de Slater formé sur les spin-orbitales. L'énergie du système est donnée par $E = \langle \psi | H | \psi \rangle$. Si on suppose que $V(r)$ dépend explicitement des orbitales $P_{nl}(r)$, une procédure d'itération auto-consistante est nécessaire. Les conditions limites sur le potentiel $V(r)$ sont :

$$\begin{aligned} r \rightarrow 0 & : V(r) \rightarrow -\frac{Z}{r} \\ r \rightarrow \infty & : V(r) \rightarrow -\frac{Z - (N - 1)}{r} \end{aligned} \quad (\text{III.10})$$

Analysons le comportement asymptotique de ce potentiel effectif. Quand $r \rightarrow \infty$, l'électron est très éloigné du noyau mais également du reste du cortège électronique. Ainsi l'électron "voit" une charge $Z - (N - 1)$ dont la distribution spatiale est approximativement sphérique. Le potentiel électrostatique ressenti par cet électron est donné par la deuxième équation du système (III.10). Par contre, quand $r \rightarrow 0$, l'électron ne ressent que le potentiel créé par le noyau atomique et ce potentiel s'exprime par la première équation du système (III.10).

Pour les distances intermédiaires, il existe de nombreuses méthodes d'estimation basées sur divers modèles, parmi lesquels, le modèle de potentiel paramétrique utilisé dans le code FAC, qui suppose une forme analytique pour $V(r)$ de la forme :

$$V(r) = -\frac{1}{r} [(N - 1)e^{-\alpha_1 r} + \alpha_2 r e^{-\alpha_3 r} + \dots + \alpha_{n-1} r^k e^{-\alpha_n r} + Z - N + 1]. \quad (\text{III.11})$$

Les paramètres α_i sont optimisés de manière à minimiser les énergies de l'état fondamental et de quelques états excités. Cette méthode, ab initio, permet d'obtenir de bons résultats particulièrement pour les ions multichargés.

III-5. Mode de couplage des moments angulaires

L'étude des systèmes poly-électroniques se simplifie considérablement si l'on tient compte des symétries du système total, en particulier de son moment cinétique total. On présentera dans ce qui suit les deux modes de couplage les plus utilisés en physique atomique : les modes LS et JJ .

➤ Couplage LS (Russell Saunders)

Les niveaux d'énergie sont souvent désignés selon le mode de couplage LS . Dans cette description, un état électronique est spécifié par la notation

$$^{2S+1}L_J \quad (\text{III. 12})$$

L et S sont les nombres quantiques associés aux moments angulaires orbitale et de spin de l'ion, respectivement, et J est le nombre quantique associé au moment angulaire totale qui, en accord avec la règle générale de l'addition des vecteurs quantique, est $J=L+S$ et peut prendre les valeurs :

$$|L - S| \leq J \leq L + S. \quad (\text{III. 13})$$

Dans l'expression (III.12), l'exposant $(2S+1)$ montre la multiplicité du terme. Par exemple, les termes avec $S = 0$ forment les niveaux singulets ($2S + 1 = 1$) et ceux avec $S = 1$ forment les niveaux triplets ($2S + 1 = 3$). Les termes associés aux nombres quantiques du moment angulaire orbital L sont désignés par les lettres S, P, D, F, G, H...correspondants aux valeurs $L = 0, 1, 2, 3, 4, 5..$

Le couplage LS est utilisé quand les interactions électrostatiques V_{es} sont plus fortes que les interactions entre le spin d'un électron et son propre mouvement orbital V_{so} . Dans ce schéma, l'interaction électrostatique forte couple les moments l_i et s_i de tous les états contribuant au terme LS avec le moment angulaire totale L et de spin S :

$$L = \sum_i l_i \quad S = \sum_i s_i. \quad (\text{III. 14})$$

La somme des vecteurs L et S donne le vecteur moment angulaire totale $J=L+S$. Le couplage LS est approprié pour les atomes neutres avec une charge nucléaire $Z \lesssim 20$, et pour les ions faiblement chargés dans des états pas trop excités [8].

➤ Couplage JJ

Dans le cas où la charge nucléaire de l'ion Z augmente, $V_{es} \ll V_{so}$ car l'interaction électrostatique varie selon Z alors que l'interaction spin-orbite V_{so} augmente avec Z comme Z^4 (voir tableau II.1). Dans ce cas, il serait préférable d'utiliser le mode de couplage JJ qui est donc favorisé par rapport au mode LS pour les atomes lourds et les ions fortement chargés. En effet, pour les atomes plus lourds, les interactions spin-orbite des électrons individuels sont plus grandes que celles entre spins ou entre moment angulaires orbitaux.

Dans ce mode, les définitions des moments angulaires L et S perdent leurs significations car l'interaction spin-orbite mixe fortement les moments l_i et s_i des différents électrons, et nous utilisons donc le moment angulaire totale de chaque électron j_i . Dans ce mode de couplage JJ , le nombre quantique associé au moment angulaire totale pour chaque électron est :

$$j = l \pm 1/2, \quad (\text{III. 15})$$

du fait que le nombre quantique associé au moment de spin de l'électron est $s = 1/2$.

Les valeurs j sont souvent désignées comme indice à droite en dessous de la lettre associée à la valeur du nombre quantique orbitale l et la configuration totale de l'électron s'écrit pour des ions hydrogénoïdes, par exemple, sous la forme :

$$s_{1/2}, p_{1/2}, p_{3/2}, d_{3/2}, d_{5/2}, f_{5/2}, f_{7/2} \dots \quad (\text{III. 16})$$

III-6. Calcul des quantités de structure atomique par le code FAC

III-6.1. Niveaux d'énergie

Nous commençons par donner les énergies des différents niveaux (fondamental et excités) pour les ions hydrogénoïdes, soit comme exemple l'ion Ne^{9+} , mais avant de lister les résultats obtenus il serait intéressant de fournir le programme utilisé dans le code FAC pour obtenir ces énergies. Nous donnons également une brève explication pour chaque ligne du script utilisé.

Script 1 FAC pour le calcul des énergies de liaison des ions hydrogénoïdes.

```
# Calculation of the energy levels.  
1-SetAtom('Ne')  
2-Config('1*1', group = 'n1')  
3-Config('2*1', group = 'n2')  
4-Config('3*1', group = 'n3')  
5-Config('4*1', group = 'n4')  
6-Config('5*1', group = 'n5')  
7-Config('6*1', group = 'n6')  
8-OptimizeRadial(['n1'])  
9-Structure('Ne9_n6.lev.b', ['n1', 'n2', 'n3', 'n4', 'n5', 'n6'])  
10-MemENTable('Ne9_n6.lev.b')  
11-PrintTable('Ne9_n6.lev.b', 'Ne9_n6.lev', 1)
```

➤ Différentes commandes utilisées dans le script 1.

-- La ligne qui commence par le symbole # est juste un commentaire.

-- **Ligne 1** : Permet de spécifier l'ion considéré en donnant son symbole chimique.

-- **Lignes 2-7** : Permettent de spécifier les configurations électroniques incluses dans les calculs. Dans la commande **Config** : 1*1 veut dire qu'un électron est dans le niveau $n = 1$. 2*1 veut dire qu'un électron est dans le niveau $n = 2$, et c'est pareil pour les autres configurations excitées.

-- **Ligne 8** : Permet de procéder aux calculs des énergies de liaison des différentes configurations précisées dans les commandes **Config**.

--**Ligne 9** : Etablit la matrice hamiltonienne associées aux différentes configurations de $n = 1$ jusqu'à $n = 6$, la diagonalise et sauvegarde les énergies dans le fichier binaire 'Ne9_n6.lev.b'.

--**Ligne 10** : Construit un tableau en mémoire des niveaux d'énergie obtenus.

--**Ligne 11** : Utilise le tableau précédent (ligne 10) pour convertir le fichier binaire en fichier ASCII, .de 'Ne9_n6.lev.b' à 'Ne9_n6.lev'.

Nous listons dans le tableau 3.1 les valeurs des énergies des différents niveaux de l'ion hydrogénoïde Ne^{9+} ayant le nombre quantique principal $1 \leq n \leq 6$, obtenues à partir de l'exécution du script 1.

Tableau 3.1. Energies (en eV) des différents niveaux de l'ion hydrogénoïde Ne^{9+} ayant un nombre quantique principal jusqu'à $n = 6$.

Numéro	Niveau	Energie	Numéro	Niveau	Energie
0	$1s_{1/2}$	0000.00	18	$5d_{3/2}$	1307.76
1	$2p_{1/2}$	1021.50	19	$5p_{3/2}$	1307.76
2	$2s_{1/2}$	1021.52	20	$5f_{5/2}$	1307.77
3	$2p_{3/2}$	1021.95	21	$5d_{5/2}$	1307.77
4	$3p_{1/2}$	1210.83	22	$5f_{7/2}$	1307.77
5	$3s_{1/2}$	1210.83	23	$5g_{7/2}$	1307.77
6	$3d_{3/2}$	1210.96	24	$5g_{9/2}$	1307.78
7	$3p_{3/2}$	1210.96	25	$6s_{1/2}$	1324.378
8	$3d_{5/2}$	1211.01	26	$6p_{1/2}$	1324.378
9	$4p_{1/2}$	1277.07	27	$6p_{3/2}$	1324.394
10	$4s_{1/2}$	1277.08	28	$6d_{3/2}$	1324.394
11	$4d_{3/2}$	1277.13	29	$6d_{5/2}$	1324.400
12	$4p_{3/2}$	1277.13	30	$6f_{5/2}$	1324.400
13	$4f_{5/2}$	1277.15	31	$6f_{7/2}$	1324.403
14	$4d_{5/2}$	1277.15	32	$6g_{7/2}$	1324.403
15	$4f_{7/2}$	1277.16	33	$6g_{9/2}$	1324.405
16	$5p_{1/2}$	1307.73	34	$6h_{9/2}$	1324.405
17	$5s_{1/2}$	1307.73	35	$6h_{11/2}$	1324.406

Pour le cas des ions à plusieurs électrons, on utilise le même script mais les arguments dans la commande **Config** change selon le nombre d'électrons. A titre d'exemple, voici le script permettant de calculer les niveaux d'énergies des ions héliumoïdes de néon Ne^{8+} :

Script 2 FAC pour le calcul des énergies de liaison des ions poly-électroniques :

Cas héliumoïde.

```
# Calculation of the energy levels.  
1-SetAtom('Ne')  
2-Config('1*2', group = 'n1')  
3-Config('1*1 2*1', group = 'n2')  
4-Config('1*1 3*1', group = 'n3')  
5-ConfigEnergy(0)  
6-OptimizeRadial(['n1'])  
7-ConfigEnergy(1)  
8-Structure('Ne8_n3.lev.b', ['n1', 'n2', 'n3'])  
9-MemENTable(' Ne8_n3.lev.b')  
10-PrintTable(' Ne8_n3.lev.b', ' Ne8_n3.lev', 1)
```

Dans le script précédent, Les lignes 5-7 servent pour procéder aux calculs auto-cohérents de Dirac-Fock-Slater afin de dériver le potentiel central local qui représente l'écrantage électronique du potentiel nucléaire.

Nous donnons dans le tableau 3.2 les valeurs des énergies des différents niveaux de l'ion héliumoïde de néon Ne^{8+} ayant le nombre quantique principal $1 \leq n \leq 3$, obtenues à partir de l'exécution du script 2.

Tableau 3.2. Energies (en eV) des différents niveaux de l'ion héliumoïde Ne^{8+} ayant un nombre quantique principal jusqu'à $n = 3$.

Numéro	Niveau	Energie
0	$1s_{1/2}^2$ 1S_0	0.0000
1	$1s_{1/2}^1 2s_{1/2}^1$ 3S_1	903.86
2	$1s_{1/2}^1 2p_{1/2}^1$ 3P_0	913.66
3	$1s_{1/2}^1 2p_{1/2}^1$ 3P_1	913.70
4	$1s_{1/2}^1 2p_{3/2}^1$ 3P_2	913.89
5	$1s_{1/2}^1 2s_{1/2}^1$ 1S_0	914.88
6	$1s_{1/2}^1 2p_{3/2}^1$ 1P_1	921.50
7	$1s_{1/2}^1 3s_{1/2}^1$ 3S_1	1067.9
8	$1s_{1/2}^1 3p_{1/2}^1$ 3P_0	1070.6
9	$1s_{1/2}^1 3p_{1/2}^1$ 3P_1	1070.6
10	$1s_{1/2}^1 3p_{3/2}^1$ 3P_2	1070.7
11	$1s_{1/2}^1 3s_{1/2}^1$ 1S_0	1070.8
12	$1s_{1/2}^1 3d_{3/2}^1$ 3D_1	1072.0
13	$1s_{1/2}^1 3d_{3/2}^1$ 3D_2	1072.0
14	$1s_{1/2}^1 3d_{5/2}^1$ 3D_3	1072.0
15	$1s_{1/2}^1 3d_{5/2}^1$ 1D_2	1072.1
16	$1s_{1/2}^1 3p_{3/2}^1$ 1P_1	1072.7

III-6.2. Probabilités de transition radiative

Nous avons vu que l'intensité d'une raie, associée à une transition entre deux niveaux discrets, observée dans un spectre est liée, d'une part, à la population du niveau émettant la raie et, d'autre part, à une grandeur caractéristique de l'atome et de la transition concernée, à savoir la probabilité de transition radiative. Cette quantité est importante pour estimer aussi la durée de vie d'un état excité et dans les calculs permettant d'introduire les cascades radiatives dans les sections efficaces directes d'un certain processus collisionnel [17].

Dans les ions fortement chargés, plusieurs types de transitions radiatives peuvent intervenir. On sait que les transitions radiatives de type dipolaire électrique E1 sont les plus dominantes, c'est la raison pour laquelle ces transitions sont appelées transitions optiquement permises. Cependant, les transitions de type quadrupolaire électrique E2, dipolaire et quadrupolaire magnétiques M1 et M2 respectivement, appelées transitions optiquement interdites, peuvent dans certains cas jouer un rôle important.

Nous présentons, dans le script 3 les commandes utilisées dans le code FAC permettant d'obtenir les probabilités de transition radiative entre toutes les transitions souhaitées. On peut aussi spécifier le mode (type) de transition E1, E2, M1 et M2. Le script utilisé doit contenir les commandes utilisées dans le script 1 pour calculer avant les énergies des niveaux impliqués pour ensuite procéder aux calculs des probabilités de transition radiative entre ces niveaux.

Script 3 FAC pour le calcul des énergies de liaison des ions hydrogéoïdes ainsi que les probabilités de transition radiative.

```
# Calculation of the energy levels. and radiative transition rates  
SetAtom('Ne')  
Config('1*1', group = 'n1')  
Config('2*1', group = 'n2')  
Config('3*1', group = 'n3')  
Config('4*1', group = 'n4')  
Config('5*1', group = 'n5')  
Config('6*1', group = 'n6')
```

```

OptimizeRadial(['n1'])
Structure('Ne9_n3.lev.b', ['n1', 'n2', 'n3'])
MemENTable(' Ne3_n6.lev.b')
PrintTable(' Ne9_n3.lev.b', ' Ne9_n3.lev', 1)
TransitionTable('Ne9_n2n3.tr.b', ['n2'], ['n3'], -1)
PrintTable(' Ne9_n2n3.tr.b', ' Ne9_n2n3.tr', 1)

```

Les deux commandes qui s'ajoutent par rapport à celles du script 1 sont :

-- **TransitionTable** : Calcule les probabilités de transition radiative entre les niveaux des groupes de configuration n2 et n3 (par exemple), et sauvegarde les résultats dans le fichier binaire 'Ne9_n2n3.tr.b'.

Remarque : La fonction **TransitionTable** accepte un quatrième argument qui spécifie le type de la transition. Un entier indique le mode de celle-ci : **-1** et **-2** pour les transitions de type dipolaire et quadrupolaire électrique E1 et E2, respectivement. **+1** et **+2** pour les transitions de type dipolaire et quadrupolaire magnétique M1 et M2, respectivement.

--**PrintTable** : Convertit le fichier de sortie 'Ne9_n2n3.tr.b' en mode ASCII 'Ne9_n2n3.tr'.

Le tableau 3.3 fournit les valeurs des probabilités de transition radiative entre les différents niveaux de $n = 1$ jusqu'à $n = 6$ pour l'ion hydrogénéoïde Ne^{9+} .obtenues à partir de l'exécution du script 3. Notons que certaines probabilités radiatives n'ont pas été reportées dans le tableau car elles sont relativement faibles contribuant moins de 1% aux taux total du déclin radiatif du niveau concerné.

Tableau 3.3. Probabilités de transition radiative A (en s^{-1}) à partir de chacun des niveaux nl avec $1 \leq n \leq 6$ (désignés par leurs numéros selon le tableau 3.1) vers les niveaux inférieurs dans l'ion hydrogénoïde Ne^{9+} .

Transition	A (s^{-1})	Transition	A (s^{-1})
35→24	1.646[+10]	29→15	2.052[+08]
34→23	1.609[+10]	29→13	1.024[+07]
34→24	3.657[+08]	29→12	8.629[+09]
33→22	1.106[+10]	29→7	1.879[+10]
33→15	1.374[+10]	29→3	5.147[+10]
33→8	8.470[+06]	29→0	1.116[+08]
32→22	3.951[+08]	28→20	3.933[+08]
32→20	1.067[+10]	28→19	7.503[+08]
32→15	4.903[+08]	28→16	3.739[+09]
32→22	1.805[+10]	28→13	2.161[+08]
31→24	1.109[+08]	28→12	1.439[+09]
31→21	7.237[+09]	28→4	1.569[+10]
31→14	1.288[+10]	28→3	8.565[+09]
31→8	2.147[+10]	28→1	4.308[+10]
31→3	2.641[+07]	28→0	1.119[+08]
30→23	1.142[+08]	27→21	8.681[+08]
30→21	4.826[+08]	27→17	2.420[+09]
30→18	6.754[+09]	27→13	3.991[+10]
30→14	8.585[+08]	27→10	4.449[+09]
30→11	1.203[+10]	27→14	4.067[+10]
30→8	1.430[+09]	27→2	2.860[+10]
30→6	2.006[+10]	26→18	9.729[+08]
30→3	5.871[+06]	26→17	2.436[+09]
29→22	3.736[+08]	26→11	9.560[+08]
29→20	1.864[+07]	26→10	4.470[+09]
29→19	4.495[+09]	26→6	7.952[+08]

Transition	A (s⁻¹)	Transition	A (s⁻¹)
26→2	2.866[+10]	19→8	1.355[+09]
25→19	1.809[+09]	19→6	1.499[+08]
25→16	8.964[+08]	19→0	3.426[+11]
25→12	2.417[+09]	18→13	5.081[+08]
25→9	1.198[+09]	18→12	2.480[+09]
25→7	3.421[+09]	18→9	1.237[+10]
25→4	1.695[+09]	18→7	5.658[+09]
25→3	4.966[+09]	18→0	1.842[+08]
25→1	2.458[+09]	17→12	4.355[+09]
24→15	4.256[+10]	17→9	2.157[+09]
24→8	1.161[+07]	17→4	3.027[+09]
23→15	1.520[+09]	17→1	4.309[+09]
23→13	4.105[+10]	16→11	1.913[+09]
23→6	1.045[+07]	16→10	7.393[+09]
22→14	2.586[+10]	16→6	1.521[+09]
22→8	4.545[+10]	16→5	1.643[+10]
22→3	4.131[+07]	15→8	1.379[+11]
21→15	4.825[+08]	14→7	7.041[+10]
21→13	2.407[+07]	14→3	2.064[+11]
21→0	1.838[+08]	14→0	3.255[+08]
20→14	1.724[+09]	13→8	9.194[+09]
20→11	2.414[+10]	13→6	1.289[+11]
20→8	3.028[+09]	12→8	3.147[+09]
20→6	4.246[+10]	12→6	3.481[+08]
20→1	3.218[+07]	12→2	9.671[+10]
19→14	1.706[+09]	12→0	6.816[+11]
19→11	1.887[+08]	11→7	1.174[+10]
19→10	7.347[+09]	11→4	5.868[+10]

Transition	A (s⁻¹)	Transition	A (s⁻¹)
11→3	3.436[+10]	7→0	1.672[+12]
11→1	1.7826[+11]	7→2	2.242[+11]
10→4	6.140[+09]	6→0	5.931[+08]
10→3	1.744[+10]	6→1	5.402[+11]
10→1	8.632[+09]	6→3	1.078[+11]
9→6	3.535[+09]	5→3	4.273[+10]
9→5	3.075[+10]	5→1	2.113[+10]
9→2	9.700[+10]	4→2	2.253[+11]
9→0	6.809[+11]	4→0	1.671[+12]
8→3	6.467[+11]	3→0	6.258[+12]
8→0	5.915[+08]	2→0	2.494[+04]
		1→0	6.270[+12]

A titre de comparaison, nous reportons dans le tableau 3.4 les valeurs des probabilités de transition, de type dipôle électrique E1 et dipôle magnétique M1, entre les états $n = 1$ et $n = 2$ pour quelques ions hydrogéoïdes en fonction de leurs charges nucléaires, obtenues par l'utilisation du code FAC. Celles-ci sont comparées avec les valeurs données dans [8].

En analysant les valeurs du tableau 3.4, on remarque la dépendance des probabilités de transition sur la charge nucléaire Z . De plus, il apparaît que pour le déclin de l'état $2s$, la probabilité de type dipôle magnétique $A^{(M1)}$ augmente plus rapidement avec Z que les probabilités de type dipôle électrique $A^{(E1)}$ pour le déclin $2p-1s$ ($A^{(E1)} \sim Z^4$). En effet, le rapport $A^{(M1)}/A^{(E1)}$ croît rapidement avec Z , et passe de la valeur approchée à 4×10^{-9} pour l'ion hydrogéoïde de néon ($Z = 10$) à $\sim 4 \times 10^{-3}$ pour l'uranium U^{91+} ($Z = 92$).

D'autre part, en comparant les probabilités de transition obtenues par le code FAC et celles données dans [8] pour toutes les valeurs de Z , nous trouvons qu'il y a très bon accord entre les deux ensembles de résultats. Effectivement, l'écart entre les valeurs varie entre 0.3% et 1% en fonction de la valeur de la charge nucléaire Z .

Nous avons aussi calculé, par le code FAC, les niveaux d'énergie de l'état fondamental $1s^22s$ et des états excités de la configuration $1s^2nl$ avec $n = 2, 3$ pour l'ion litiumoïde de l'azote N^{4+} . Nous les avons comparés, dans le tableau (3.5), avec les valeurs données dans [18] obtenues dans l'approximation Many Body Perturbation Theory (MBPT). Il y a un très bon accord entre les deux ensembles de résultats car la différence entre les énergies obtenues par le code FAC et celles obtenues dans l'approximation MBPT ne dépasse pas les 1% (0.9% maximum).

Tableau 3.4. Probabilités de transition radiative A (en s^{-1}) de type dipôle électrique E1 et dipôle magnétique M1, entre les états $n=1$ et $n=2$ pour quelques ions hydrogénoïdes de charge nucléaire Z . Les premières lignes correspondent aux valeurs obtenues par le code FAC tandis que les deuxièmes lignes sont celles fournies dans [8].

Z	$2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$	$2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$	$2p_{3/2} \rightarrow 1s_{1/2}$
	M1	E1	E1
10	2.494[+4]	6.270[+12]	6.258[+12]
	2.510[+4]	6.272[+12]	6.260[+12]
22	6.804[+7]	1.471[+14]	1.458[+14]
	6.815[+7]	1.473[+14]	1.460[+14]
42	4.724[+10]	1.965[+15]	1.900[+15]
	4.730[+10]	1.972[+15]	1.907[+15]
54	6.265[+11]	5.402[+15]	5.104[+15]
	6.274[+11]	5.429[+15]	5.132[+15]
92	1.922[+14]	4.673[+16]	3.887[+16]
	1.947[+14]	4.726[+16]	3.950[+16]

Tableau 3.5. Energies (en eV) de l'ion litiumoïde de l'azote N^{4+} de l'état fondamental $1s^2 2s$ et des états excités des configurations $1s^2 nl$ avec $n = 2, 3$. Deux ensembles de valeurs sont présentés : FAC pour les énergies obtenues par l'utilisation du code FAC et MBPT pour celles données dans [18].

Numéro	Niveau	FAC	MBPT
0	$1s^2 2s$ ($J = 1/2$)	0.0000	0.000
1	$1s^2 2p_{1/2}^{\square}$ ($J = 1/2$)	10.054	9.962
2	$1s^2 2p_{3/2}^{\square}$ ($J = 3/2$)	10.084	9.996
3	$1s^2 3s$ ($J = 1/2$)	56.439	56.564
4	$1s^2 3p_{1/2}^{\square}$ ($J = 1/2$)	59.141	59.227
5	$1s^2 3p_{3/2}^{\square}$ ($J = 3/2$)	59.150	59.237
6	$1s^2 3d_{3/2}^{\square}$ ($J = 3/2$)	59.908	60.065
7	$1s^2 3d_{5/2}^{\square}$ ($J = 5/2$)	59.911	60.068

Conclusion Générale

Conclusion générale

Nous nous sommes intéressés, dans ce mémoire de Master, à calculer des données atomiques importantes et nécessaires pour le diagnostic des raies d'émission particulièrement des plasmas chauds et astrophysiques. Les données atomiques en relation avec les processus conduisant à l'émission du rayonnement sont indispensables telles que les énergies des niveaux fondamentaux et excités, les probabilités de transition radiative, les sections efficaces et les taux de collision des processus collisionnels par impact d'électrons libres. Cependant, le calcul de ces quantités devient une tâche difficile pour les systèmes poly-électroniques, et donc nous sommes obligés d'utiliser des approximations intégrées dans des codes de calcul.

Nous avons utilisé, dans ce travail, le code de calcul Flexible Atomic Code (FAC) disponible dans le web. Nous avons calculé par ce code les niveaux d'énergie des états excités des ions hydrogénoïdes et héliumoïdes de néon Ne^{9+} et Ne^{8+} , respectivement, et de l'ion lithiumoïde de l'azote N^{4+} . Nous avons trouvé un très bon accord entre les résultats obtenus par FAC et d'autres résultats disponibles dans la littérature. Nous avons aussi obtenu les probabilités de transition radiative entre différents niveaux excités de l'ion Ne^{9+} en fournissant également le script utilisé. Notons que ces quantités sont importantes particulièrement dans les calculs des sections efficaces effectives ou coefficients de taux effectifs dans lesquels sont introduits les effets de cascades radiatives à partir des niveaux excités vers des niveaux inférieurs.

Nous estimons, d'après le travail de ce mémoire, que le code FAC s'avère très utile et flexible dans l'élaboration des données atomiques nécessaires aux diagnostics des raies émises par les plasmas astrophysiques. En effet, la polarisation et le rapport des intensités des raies dépendent de ces données et servent à faire des prédictions sur quelques paramètres du plasma étudié : densité électronique, température et état d'ionisation. D'autre part, les données atomiques sont indispensables pour tester et interpréter les mesures expérimentales obtenues dans les expériences dans les sources comme Electron Beam Ion Trap (EBIT), et permettent de mieux tester les diverses

théories et approximations utilisées dans le traitement des collisions entre électrons et ions.

Au cours de ce mémoire, j'ai eu l'opportunité d'élargir mes connaissances et de m'approfondir plus sur les notions de physique atomique et aussi d'améliorer mon niveau de rédaction.

Références
Bibliographiques

Références bibliographiques

- [1] A. Hibbert, *Comp. Phys. Comm.* **9** (1975) 141.
- [2] W. Eissner, M. Jones, H. Nussbaumer, *Comp. Phys. Comm.* **8** (1974) 270.
- [3] R.D. Cowan, *Theory of Atomic Structure and Spectra*, University of California Press, Berkeley, 1981.
- [4] C. Froese Fischer, T. Brage and P. Jonsson, *Computational Atomic Physics: An MCHF Approach*, IOP Publishing, Bristol (2000).
- [5] I.P. Grant, B.J. McKenzie, P.H. Norrington, D.F. Mayers, N.C. Pyper, *Comp.Phys.Comm.***21** (1980) 207.
- [6] S. Fritzsche, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **114-16** (2001) 1155.
- [7] M.F. Gu, *Astrophys.J.* **582** (2003) 1241.
- [8] H.F. Beyer and V.P. Shevelko, *Introduction to the physics of highly charged ions*, Institute of Physics Publishing, Bristol and Philadelphia (2003).
- [9] <http://clea-astro.eu/lunap/EmissAbsorb>.
- [10] fr.wikipedia.org/wiki/Raie_spectrale.
- [11] <http://www.maxicours.com>.
- [12] <http://www.maths-et-physique.net>.
- [13] H.F. Beyer, H-J. Kluge and V.P. Shevelko, *X-Ray Radiation of Highly Charged Ions*, Berlin: Springer (1999).
- [14] S.E. Chang, *Phys. Rev A* **31** (1985) 495.
- [15] K. Omidvar, *At. Data. Nucl. Data Tables* **28** (1983) 1.
- [16] J. Eichler, W.E. Meyerhof, *Relativistic Atomic Collisions*, Academic Press, San Diego (1995).
- [17] A. Bellifa, *Mémoire de Master, Université de Tlemcen* (2019).

[18] J.K. Lepson, P. Beiersdorfer, M.F. Gu, N. Hell, G.V. Brown, *The Astrophysical Journal*, **962** (2024) 130.

Résumé

Le calcul des propriétés atomiques des ions telles que les énergies des niveaux fondamentaux et excités, les probabilités de transition radiative, les sections efficaces de processus collisionnels comme l'excitation et l'ionisation est nécessaire pour l'étude et l'analyse de quantités caractéristiques des raies d'émission dans le domaine X dans les plasmas astrophysiques et de laboratoire (polarisation et rapport des intensités de raies). Ces quantités servent à leur tour à faire des prédictions sur quelques paramètres du plasma étudié : densité électronique, température et état d'ionisation. Nous avons utilisé le code de calcul Flexible Atomic Code (FAC) pour calculer les énergies des ions hydrogénoïdes, héliumoïdes et lithiomoïdes tout en discutant bien sûr les approximations utilisées dans ce code, ainsi que les probabilités de transition radiative entre différents niveaux. Nous avons fait des comparaisons avec d'autres résultats disponibles en littérature et ceci afin de bien cerner l'exactitude des résultats obtenus par FAC.

Mots clés : Collisions atomiques, données atomiques, spectroscopie des raies X, FAC, ions fortement chargés.

Abstract

Calculation of atomic properties of ions such as energies of fundamental and excited levels, radiative transition probabilities, cross sections of collisional processes like excitation and ionization is necessary for the study and analysis of characteristic quantities emission lines in the X domain of astrophysical and laboratory plasmas (polarization and ratio of line intensities). These quantities are in turn used to make predictions on some parameters of the plasma studied: electron density, temperature and ionization state. We used the Flexible Atomic Code (FAC) to calculate the energies of hydrogen-like, helium-like and lithium-like ions while of course discussing the approximations used in this code, as well as the radiative transition probabilities between different levels. We made comparisons with other results available in the literature in order to clearly understand the accuracy of the results obtained by FAC.

Key words: Atomic collisions, atomic data, X-ray spectroscopy, FAC, highly charged ions.

ملخص

يعد حساب الخصائص الذرية للأيونات مثل طاقات المستويات الأساسية والمثارة واحتمالات الانتقال الإشعاعي والمقاطع العرضية للعمليات التصادمية مثل الإثارة والتأين ضرورياً لدراسة وتحليل خطوط انبعاث الكميات المميزة في المجال X للبلازما الفيزيائية الفلكية والمختبرية (الاستقطاب ونسبة شدة الخط). تُستخدم هذه الكميات بدورها للتنبؤ ببعض معالم البلازما التي تمت دراستها: كثافة الإلكترون ودرجة الحرارة وحالة التأين. استخدمنا الكود الذري المرن (FAC) لحساب طاقات الأيونات الشبيهة بالهيدروجين والهليوم والليثيوم، مع مناقشة التقريبات المستخدمة في هذا الكود بالطبع، بالإضافة إلى احتمالات الانتقال الإشعاعي بين المستويات المختلفة. لقد أجرينا مقارنات مع النتائج الأخرى المتوفرة في الأدبيات من أجل فهم دقة النتائج التي حصلت عليها FAC

الكلمات المفتاحية: الاصطدامات الذرية، البيانات الذرية، التحليل الطيفي للأشعة السينية، FAC، أيونات مشحونة للغاية.