



HAL
open science

Propriétés radiatives des plasmas de fusion. Emissivité et opacité dans des structures atomiques complexes

Guillaume Mondet

► **To cite this version:**

Guillaume Mondet. Propriétés radiatives des plasmas de fusion. Emissivité et opacité dans des structures atomiques complexes. Autre [cond-mat.other]. Université Paris Sud - Paris XI, 2013. Français. NNT : 2013PA112353 . tel-00946767

HAL Id: tel-00946767

<https://theses.hal.science/tel-00946767>

Submitted on 14 Feb 2014

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



UNIVERSITE PARIS-SUD
ECOLE DOCTORALE ONDES ET MATIERE

THÈSE DE DOCTORAT

Discipline : PHYSIQUE

soutenue le 20 Décembre 2013
par

Guillaume MONDET

**Propriétés radiatives des plasmas de fusion.
Emissivité et opacité dans des structures atomiques
complexes**

Thèse préparée au Laboratoire Aimé Cotton, UPR 3321

Jury :

Président :	Annie KLISNICK	- ISMO, Université Paris-Sud
Rapporteurs :	Arnaud BULTEL	- CORIA, Université de Rouen
	Ioan SCHNEIDER	- LOMC, Université du Havre
Examineurs :	Annette CALISTI	- PIIM, Aix-Marseille Université
	Rémy GUIRLET	- CEA Cadarache
Invité :	Jean-Christophe PAIN	- CEA, DAM, DIF, Arpajon
Dir. thèse :	Djamel BENREDJEM	- LAC, Université Paris-Sud

Table des matières

Notations et Rappels	5
Introduction générale	7
1 Physique atomique et plasmas de fusion nucléaire	11
1.1 Introduction	11
1.1.1 Principe	12
1.1.2 Critère de Lawson	14
1.2 Les modes de confinement	16
1.2.1 Fusion inertielle	16
a Schéma classique	16
b L'allumage rapide	19
c Z-Machine	21
1.2.2 Fusion magnétique	22
a Tokamak	24
b Les stellarators	28
1.3 Physique atomique	30
1.3.1 Définitions : Configuration, superconfiguration	30
1.3.2 Couplage électronique	33
1.3.3 Intégrales de Slater	33
1.3.4 Transitions dipolaires électriques E1	35
1.4 Physique des plasmas	36
1.4.1 Processus collisionnels	37
a Excitation collisionnelle	37
b Désexcitation collisionnelle	38
c Recombinaison diélectronique et autoionisation	38
d Recombinaison à trois corps et ionisation collisionnelle	39
1.4.2 Processus radiatifs	39
a Emission spontanée	39
b Emission induite et absorption	40
c Photoionisation et recombinaison radiative	41
1.4.3 Equilibre thermodynamique	42
a Equilibre détaillé	42
b Equilibre thermodynamique local	43
c Equilibre coronal	44
1.4.4 Elargissement de raie	45
a Elargissement Doppler	45
b Elargissement naturel	45
c Profil de Voigt	46

d	Elargissement Stark	47
e	Exemple	47
1.5	Conclusion	49
Appendices		51
A Atome hydrogéoïde isolé		53
B Lois de Boltzmann et loi de Saha-Boltzmann		55
2 Emissivité et pertes radiatives en FCI		59
2.1	Introduction	59
2.2	Données atomiques	60
2.2.1	Méthode Hartree-Fock	60
2.2.2	Méthode de Thomas-Fermi	62
2.3	Approche détaillée	64
2.3.1	Profil d'intensité	64
2.3.2	Emissivité	67
a	Emissivité du carbone	68
b	Emissivité de l'or	70
2.4	Méthode statistique	72
2.4.1	Moments statistiques	72
2.4.2	Distributions	73
a	Gaussienne généralisée	73
b	Gaussienne normale inverse	73
2.4.3	Comparaison	74
2.5	Méthode hybride	75
2.5.1	Emissivité totale	76
2.5.2	Application au germanium	76
2.6	Conclusion	78
3 Opacité en FCI		83
3.1	Opacité en FCI	83
3.1.1	Les dopants en FCI	83
3.1.2	Approche détaillée et approche statistique	84
a	Opacité détaillée	84
b	Méthodes statistiques	86
3.2	L'approche hybride SCO-RCG	88
3.2.1	De SCO à SCO-RCG	89
3.2.2	Opacité par l'approche hybride	91
3.2.3	Opacité lié-lié	92
3.2.4	Autres contributions	95
a	Opacité libre-libre	95
b	Opacité lié-libre	96

3.2.5	Opacité totale	97
3.2.6	Opacité intégrée	101
3.3	Conclusions et perspectives	103
Appendices		105
C Code Cowan		107
4	Physique atomique et transport en FCM	111
4.1	Transport des particules dans le plasma	111
4.1.1	Les impuretés	112
4.1.2	Transport des impuretés	113
a	Notations des processus atomiques et modèle	114
b	Equations du transport	116
c	Code ITC	117
4.2	Objectifs de l'étude	119
4.3	Diagnostics des plasmas	119
4.3.1	Température	119
4.3.2	Densité	120
a	Interférométrie	120
b	Réfectométrie	120
4.3.3	Le rayonnement	121
a	Rayonnement détaillé	121
b	Rayonnement X	121
c	Rayonnement global	122
4.4	Expérience	122
4.5	Données de structures et processus atomiques	127
4.5.1	ADAS	127
4.5.2	Code HULLAC	127
a	Les niveaux d'énergie	127
b	Excitation collisionnelle (EC)	128
c	Ionisation collisionnelle	129
d	Photoionisation	129
e	Autoionisation	130
4.6	Simulations et comparaisons HULLAC - ADAS	131
4.6.1	Cadre d'étude	131
4.6.2	Sections efficaces	131
a	Excitation collisionnelle	132
b	Photoionisation	134
c	Ionisation collisionnelle	136
4.6.3	Coefficients de taux	137
a	Excitation collisionnelle	137
b	Recombinaison radiative	140

c	Ionisation collisionnelle	140
4.6.4	Comparaison HULLAC-ADAS	141
a	Excitation collisionnelle	142
b	Recombinaison radiative	144
c	Ionisation collisionnelle	146
4.6.5	Exemple d'itération ITC	147
4.7	Conclusion	149
Appendices		151
D Théorie du transport		153
E Expérience Tore Supra		157
Conclusion générale		163
Remerciements		165
Résumé		167

Notations et Rappels

k_B	Constante de Boltzmann $\simeq 1.381 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$
W_{fus}	Puissance fusion
W_α	Puissance du noyau ^4He fils de la réaction D-T
E_{int}	Energie thermique contenue dans le plasma
ω_c	Pulsation cyclotron
DSMF	Dernière surface magnétique fermée
1 eV	équivalent à une température de 11605 Kelvins
ϕ_{ul}	Profil de la transition du niveau u vers le niveau l
$\psi_q(\nu)$	Profil des composantes stark q associées à une transition $i - j$
N_e	Densité électronique (libre)
N_i	Densité ionique
$I(w)$	Profil d'intensité
$C(t)$	Fonction d'autocorrélation
$\epsilon_Z(\nu)$	Emissivité lié-lié ou émissivité totale de l'ion de charge Z
$\epsilon(\nu)$	Emissivité lié-lié de l'espèce considérée (tous les ions)
$\epsilon_{z,ff}(\nu)$	Emissivité libre-libre
μ_n	Moment statistique d'ordre n
GG	Gaussienne Généralisée
DLA	Detailed Line Accounting
DCA	Detailed Configuration Accounting
NIG	Normale Inverse Gaussian
UTA	Unresolved Transition Array
SOSA	Spin Orbit Split Array
STA	Super Transition Array
$k_Z(\nu)$	Opacité lié-lié de l'ion de charge Z
$k(\nu)$	Opacité lié-lié de l'espèce considérée (tous les ions)
k_{f-f}	Opacité libre-libre
k_{b-f}	Opacité lié-libre

Introduction générale

Au début du 20ème siècle l'énergie fossile suffisait à couvrir les besoins des populations. Au cours du 20ème siècle, les besoins ne firent qu'augmenter. Avec l'arrivée du nucléaire, à la sortie de la seconde guerre mondiale, les centrales à fission apportèrent une solution à ce problème et devinrent l'une des premières sources de production d'énergie. A l'instar du développement naturel de celles-ci et suite aux essais nucléaires sur la fusion en 1952, l'idée d'une centrale à fusion Deutérium-Tritium (D-T) civile pour la production d'énergie émergea.

Les recherches dans ce domaine montrèrent que la condition principale pour obtenir des réactions de fusion nucléaire contrôlée est d'arriver à confiner les atomes à la température minimale pour franchir la barrière coulombienne. De cette donnée, deux modes de confinement virent le jour :

1. le mode de confinement inertiel
2. le mode de confinement magnétique

Dans le premier mode, on utilise des lasers intenses pour comprimer une bille de combustible. L'irradiation par laser se fait soit directement, soit indirectement en irradiant un "four" qui émettra un rayonnement X. C'est ce rayonnement X qui comprimera la capsule contenant le "carburant" (mélange D-T).

Dans le deuxième mode, on confine un plasma au moyen de champs magnétiques. Le chauffage se fait par des ondes. Cette approche de la fusion par confinement magnétique (FCM) commença à être étudiée dès les années 50, suite à la création du tokamak qui est essentiellement constitué de bobines magnétiques formant un tore.

Dans les décennies suivantes, des problèmes inhérents aux déchets radioactifs et au vieillissement des centrales modifièrent les objectifs mondiaux sur la production d'énergie, en même temps que la politique liée à l'environnement (protocole de Kyoto en 1997). La fusion devint ainsi un enjeu majeur car elle permettrait d'atteindre des rendements égaux voire supérieurs à ceux des centrales actuelles et d'envisager des technologies "propres".

La fusion est un domaine qui met en jeu de nombreux aspects de la physique : les plasmas, les accélérateurs de particules, l'optique, la mécanique classique et des fluides, l'électromagnétisme et la physique atomique. Celle-ci est utilisée depuis de nombreuses années pour analyser et diagnostiquer les plasmas grâce à des techniques spectroscopiques. Des travaux récents ont montré que la physique atomique joue un rôle majeur dans l'obtention de l'ignition, autrement dit l'allumage des réactions de fusion, dans les installations expérimentales. En effet, dans le domaine de la fusion par confinement inertiel (FCI), les simulations d'expériences nécessitent de connaître précisément le rayonnement du plasma qui doit comprimer la cible. Celle-ci contient des dopants, c'est à-dire des atomes qui sont utilisés pour absorber le rayonnement X dans la cavité. L'étude des spectres d'absorption est essentielle si

l'on veut modéliser des expériences. Néanmoins, pour des températures élevées, le nombre de transitions atomiques est très grand, ce qui alourdit considérablement les calculs numériques. Il faut donc chercher des algorithmes adaptés à cette situation, notamment en développant des méthodes statistiques pour le traitement des transitions spectrales. Les méthodes statistiques sont rapides mais ne permettent pas toujours de prédire avec une grande précision les spectres. A l'opposé, les méthodes détaillées sont précises mais les temps de calcul correspondant sont parfois prohibitifs. C'est pourquoi des approches hybrides détaillée/statistique ont été développées pour optimiser la précision et le temps de calculs pour des systèmes où le nombre de raies est élevé.

En ce qui concerne la FCM, la physique atomique est utilisée dans l'analyse du transport des particules dans le plasma. Le transport correspond à la migration des atomes dans le plasma en fonction du temps. Il est donc un des aspects principaux de la configuration tokamak pour la fusion contrôlée, car le cœur du plasma doit rester pur, ne pas contenir d'impuretés (C, W, Ar, O , ...), pour que le seuil en température soit atteint. De nombreux travaux théoriques sur le transport, néoclassique ou turbulent, ont été réalisés depuis les années 50. Pourtant les comparaisons de données numériques et expérimentales sont rares. Cependant, de nombreuses équipes travaillant sur les différentes installations expérimentales tentent de mesurer le transport. L'injection d'ondes de chauffage dans le plasma a montré qu'une partie des particules pouvait être éjectée du cœur mais le contrôle du flux n'est pas encore obtenu. Expérimentalement, le transport ne peut se mesurer que de manière indirecte par l'intermédiaire du rayonnement, d'où l'importance de la physique atomique pour son analyse.

La physique atomique permet d'accéder à la structure atomique : niveaux d'énergie, probabilités de transition ... Les calculs mettent en jeu de nombreux phénomènes qui compliquent la résolution des équations. Diverses approximations ont ainsi été faites depuis les années 50 pour simplifier le système d'équations et le rendre soluble. Il faut également prendre en compte l'environnement du système radiatif, ce qui passe par une connaissance des interactions entre les atomes, les électrons libres du plasma et les photons. Ces interactions sont représentées par des sections efficaces qui permettent de calculer la populations des niveaux en fonction des conditions plasma. Néanmoins, le temps de calcul des populations augmente en fonction du nombre de niveaux ce qui implique de faire des approximations : les notions d'équilibre thermodynamique qui en découlent permettent de simplifier le système. La théorie des plasmas à l'équilibre est déduite de la physique statistique. Elle établit des lois générales sur la population des niveaux et permet de négliger certains processus plasma par rapport à d'autres. Toutes ces lois ont fait et font toujours l'objet d'études poussées pour obtenir des méthodes précises et rapides.

Le manuscrit de cette thèse est construit autour des deux approches de la fusion : FCI ou FCM. Un chapitre général, deux chapitres pour la FCI et un pour la FCM. Le premier chapitre présente un bref historique de la fusion et des installations associées à chaque approche. Dans la continuité, nous rappellerons les

lois théoriques de la physique atomique et de la physique des plasmas. Le second chapitre portera sur l'émissivité et les pertes radiatives en FCI. Nous décrirons les algorithmes et approximations pour le calcul des niveaux d'énergie des atomes, et les méthodes détaillée et statistique de calcul des spectres. Je présenterai ensuite des résultats sur l'émissivité du carbone, du germanium et de l'or dans un plasma chaud. Le troisième chapitre portera sur le calcul des opacités dans les plasmas de fusion inertielle. Diverses méthodes de calcul d'opacité sont mises en oeuvre : calculs détaillés, calculs statistiques et calculs hybrides. Le dernier chapitre porte sur la physique atomique dans les plasmas de fusion magnétique. En nous appuyant sur les expériences d'injection d'impuretés (Ni, Ar..) faites sur les tokamaks Tore Supra (Cadarache) et Asdex Upgrade (Allemagne), dont nous détaillerons les paramètres, nous expliquerons comment la physique atomique joue un rôle majeur dans l'étude du transport des particules. Nous présenterons la théorie des processus liée à l'équilibre plasma considéré, ainsi que les premières comparaisons entre notre base de données et celle qui est utilisée par la communauté de la fusion magnétique. Une première reconstruction des coefficients de transport des expériences effectuées sera faite.

Physique atomique et plasmas de fusion nucléaire

1.1 Introduction

Le développement démographique et industriel fait de l'énergie un enjeu majeur de notre époque. Devant l'épuisement à terme de certaines ressources telles que le charbon et le pétrole, représentant la majeure partie de la production d'énergie de nos jours, de nouvelles voies technologiques ont été envisagées. Dès les années 50 la fission nucléaire fut utilisée pour la production d'énergie. Actuellement, elle représente 78 % de la production énergétique -électrique- en France, en association avec les énergies fossiles (10 %). Devant les craintes liées aux déchets radioactifs, des recherches pour la production d'énergie alternative, propre et renouvelable sont poursuivies dans le monde. On distingue les voies hydraulique, éolienne et photovoltaïque (11.6% en 2011), les énergies thermiques renouvelables (pompes à chaleur, biomasse ≈ 0.1 % en 2011) et la fusion nucléaire.

Cette dernière source potentielle d'énergie est la seule capable de se substituer à terme aux 19 centrales nucléaires françaises qui représentent 58 réacteurs. Théoriquement les centrales à fusion produiraient autant d'énergie que les centrales classiques à fission, sans les déchets radioactifs à longue durée de vie. Cet avantage ferait de la fusion une alternative crédible aux réacteurs actuels, surtout après l'accident de Fukushima, le 11 mars 2011, qui provoqua la fermeture de certains des 429 réacteurs du parc mondial et l'orientation de la politique internationale sur l'énergie vers une sortie à long terme du nucléaire.

Peu après la seconde guerre mondiale, en 1951, le premier réacteur expérimental de production d'électricité EBR-1 vit le jour aux Etats-Unis. La France disposera d'une centrale fonctionnelle sur le site de Marcoule le 7 janvier 1956.

La fission s'imposa en premier lieu par sa simplicité d'exploitation : l'énergie dégagée par les produits de fission est récupérée par un liquide calorifère qui induit le fonctionnement de turbines génératrices d'électricité. Par souci de comparaison, pour un kilo de combustible, les réactions de fission produisent 24 GWh contre 94 GWh pour la fusion Deutérium-Tritium. L'idée d'une fusion thermonucléaire civile est donc née à la même époque que la fission mais plusieurs problèmes liés au confinement des particules et aux températures élevées font que ce système est plus compliqué à mettre en œuvre.

1.1.1 Principe

La fusion de deux noyaux, ayant chacun un nombre N de neutrons et un nombre Z de protons, n'a lieu que si la barrière coulombienne est franchie. L'énergie de liaison d'un noyau est donnée par :

$$B(A, Z) = Zm_p c^2 + Nm_n c^2 - M(A, Z)c^2 \quad (1.1)$$

où $A = N + Z$ est le nombre de masse, $M(A, Z)$ la masse totale réelle du noyau, c la vitesse de la lumière, m_p (resp m_n) la masse d'un proton (resp neutron). $B(A, Z)$ représente l'énergie dégagée lors de la formation d'un noyau à partir de nucléons. Plus $B(A, Z)$ est grand plus le noyau obtenu est stable. L'énergie de liaison ne peut dépasser une certaine limite comme le prouve la formule semi-empirique de Bethe et Weizsäcker :

$$B(A, Z) \approx 15A - 18A^{2/3} - 0.7 \frac{Z(Z-1)}{A^{1/3}} - 23 \frac{(A-2Z)^2}{A}, \quad (1.2)$$

où le premier terme est l'énergie de volume, le second l'énergie de surface, le troisième l'énergie coulombienne et le dernier l'énergie d'asymétrie. Cette dernière est avant tout un terme correctif : les noyaux tendant à avoir le même nombre de protons et de neutrons. La dépendance en A de B nous permet de tracer la courbe "énergie de liaison par nucléon" en fonction du nombre de masse, soit B/A en fonction de A .

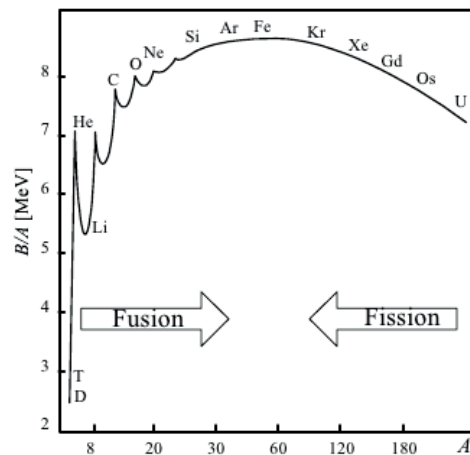
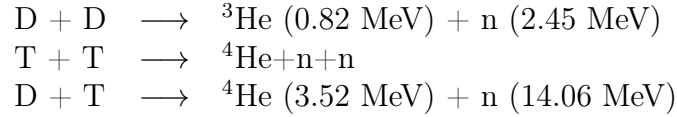


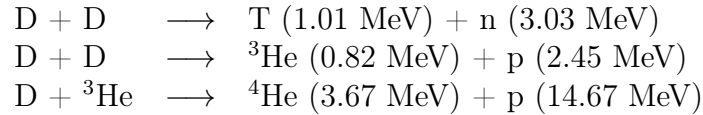
FIGURE 1.1: Énergie de liaison par nucléon, $B(A, Z)$, en fonction du nombre de masse A .

Tous les noyaux tendent à se rapprocher de la configuration stable du seuil de la courbe correspondant au fer au moyen d'une réaction exoénergétique. Les processus nucléaires induits par ce comportement montrent que la fusion de deux noyaux d'hydrogène est plus énergétique que l'équivalent fission en noyaux lourds

d'uranium (U). Si on considère les isotopes de l'hydrogène (deutérium ^2H et tritium ^3H), on obtient plusieurs réactions possibles, mais une seule a été retenue pour l'utilisation expérimentale et, dans un avenir plus lointain, industrielle : la fusion D-T.



Les réactions nucléaires ci-dessus sont les plus intéressantes mais il en existe d'autres ne produisant pas de particules α ou bien mettant en jeu des noyaux secondaires comme noyau parent (par exemple ^3He).



Le choix de la réaction $\text{D} + \text{T} \longrightarrow \text{}^4\text{He} + \text{n}$ découle de l'étude des sections efficaces σ pour chaque interaction. En effet, les noyaux ne peuvent fusionner que par effet tunnel, la grandeur physique σ représente la probabilité que le "choc" entre les particules provoque la création d'un noyau fils. Compte tenu de la nature simple du système étudié (A et Z faibles), plusieurs modèles furent développés pour calculer cette grandeur, les plus connus étant ceux de Gamow [1] et Bosch et Hale [2]. La figure 1.2 représente la section efficace de réaction des réactions D-D et D-T en fonction de l'énergie.

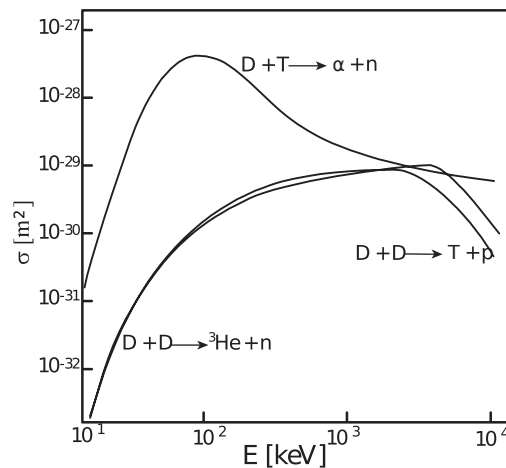


FIGURE 1.2: Sections efficaces de réaction en fonction de l'énergie

On voit que la probabilité de la réaction D-T atteint son maximum dans une gamme d'énergie de l'ordre de 100 keV (≈ 1 milliard de degrés). Ceci explique

le choix de ce mélange pour l'étude de la fusion thermonucléaire en vue d'une production d'énergie civile. De telles températures sont difficiles à atteindre. On les rencontre dans les plasmas chauds.

Les plasmas chauds sont des gaz fortement ionisés qu'il faut confiner tout en extrayant de l'énergie. Pour cela une analyse théorique a permis d'établir un critère à l'ignition faisant intervenir les paramètres physiques. Ce critère est connu sous le nom de critère de Lawson [3].

1.1.2 Critère de Lawson

L'étude de la faisabilité d'une centrale à fusion implique le rendement énergétique, facteur primordial dans la recherche d'applications rentables. Le seul apport interne est fourni par les réactions de fusion : les neutrons produits ne peuvent chauffer le plasma car ils ont trop d'énergie pour que les autres particules les "voient". De plus, ils ne sont pas confinés. L'essentiel de l'apport est fourni par les particules α (noyaux de ^4He) sous forme d'énergie cinétique. La puissance dégagée par la fusion des noyaux s'écrit :

$$W_{\text{fusion}} \equiv \frac{n^2}{4} \langle \sigma v \rangle Q_{\text{DT}} V = W_{\alpha} + W_n = 5W_{\alpha}, \quad (1.3)$$

où V est le volume du plasma, n la densité ionique, $\langle \sigma v \rangle$ la moyenne de σv (produit de la section efficace et de la vitesse des noyaux) sur la distribution des vitesses. Q_{DT} est l'énergie libérée par la réaction $\text{D} + \text{T} \rightarrow \alpha + \text{n}$.

L'énergie interne (thermique) du plasma s'écrit :

$$E_{\text{int}} = \frac{3}{2} n k_B T V. \quad (1.4)$$

Les collisions coulombiennes permettent le chauffage du plasma à travers le flux de particules α , ce qui implique que seulement un cinquième de l'énergie de fusion est utile au système. En régime de fonctionnement normal, l'entretien d'une combustion thermonucléaire implique que les pertes énergétiques équilibrent la puissance fournie par la fusion :

$$W_{\text{pertes}} = W_{\alpha} + W_{\text{aux}} = \frac{E_{\text{int}}}{\tau_E}, \quad (1.5)$$

où τ_E est le temps de confinement de l'énergie dans le plasma et W_{aux} la puissance fournie par les systèmes de chauffage. Le rendement théorique d'un réacteur se définit comme le rapport de W_{aux} et de la puissance produite par réaction de fusion (W_{fusion}) :

$$Q = \frac{W_{\text{fusion}}}{W_{\text{aux}}}. \quad (1.6)$$

En portant l'équation 1.5 dans l'équation 1.6 on obtient

$$W_\alpha + W_{aux} = W_{fusion} \left(\frac{1}{5} + \frac{1}{Q} \right) = \frac{E_{int}}{\tau_E}$$

ce qui donne :

$$\tau_E = \frac{E_{int}}{W_{fusion} \left(\frac{1}{5} + \frac{1}{Q} \right)}.$$

Et en remplaçant les termes W_{fusion} et E_{int} par leurs expressions (1.3 et 1.4) on obtient le critère de Lawson :

$$n\tau_E = \frac{60k_B T}{\langle \sigma v \rangle Q_{DT} \left(1 + \frac{5}{Q} \right)} \quad (1.7)$$

Ce critère permet de caractériser et de paramétrer le confinement du plasma. Il existe plusieurs valeurs remarquables pour le rendement Q :

1. La première correspond à la notion de "breakeven" où la puissance injectée est égale à la puissance –fusion– produite. Cette valeur n'a pour l'instant jamais été atteinte mais fut approchée par le tokamak JET (Joint European Torus, Culham Science Center, Abingdon) qui produisit par fusion l'équivalent de 70% de la puissance auxiliaire injectée.
2. Le cas où le rendement $Q \gg 1$, autrement dit $W_{fusion} \gg W_{aux}$, est ce qu'on appelle l'ignition. Le plasma est auto-entretenu et indépendant grâce à l'énergie qu'il produit.
3. Le cas le plus réaliste, d'un point de vue industriel, est la valeur $Q=14$. C'est l'objectif visé avec le réacteur expérimental ITER (International Thermonuclear Experimental Reactor) en mode stationnaire. Cette machine devrait théoriquement atteindre $Q = 30$ en pic de puissance sur de courtes durées.

Le produit $n\tau_E$ doit donc être supérieur ou égal à une constante établie par les variables T et Q . Le critère de Lawson définit la qualité du confinement plasma. Il est possible d'envisager plusieurs approches en jouant sur le seul paramètre ajustable physiquement : la densité n ; la température $k_B T$ étant définie par minimisation de ce critère $n\tau_E$: 13.6 keV. Ce sont les approches basées sur le confinement inertiel et le confinement magnétique, respectivement.

Pour un temps de confinement élevé la valeur de la densité peut être relativement faible, de l'ordre de $10^{12} - 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. Techniquement, la configuration des machines magnétiques permet des décharges plasma de longue durée et permet ainsi d'atteindre un régime stationnaire, sur le principe d'une centrale classique à fission. Actuellement, les recherches se font essentiellement sur des tokamaks tels que Tore Supra (France), JET (Angleterre), ASDEX Upgrade (Allemagne), JT60 (Japon) et EAST (Chine). Il existe par ailleurs d'autres concepts magnétiques comme le stellarator (W7X en Allemagne) ou le spherator (FM-1 Japon).

Avec un temps de confinement petit, la densité doit être très élevée $10^{22} - 10^{24} \text{ cm}^{-3}$. C'est la voie de la fusion inertielle qui consiste à focaliser des faisceaux

laser intenses sur une cible et à comprimer la matière jusqu'à atteindre l'allumage par collision des atomes. Des recherches sont poursuivies au CESTA (Bordeaux) avec le LMJ (Laser Mégajoule) ou à Livermore, près de San Francisco, avec le NIF (National Ignition Facility).

1.2 Les modes de confinement

Les recherches dans le domaine de la fusion ont permis de définir le critère de Lawson qui établit un domaine en température et en densité permettant l'ignition.

1.2.1 Fusion inertielle

La fusion inertielle consiste à créer un plasma de haute densité en focalisant des faisceaux laser sur une cible contenant un mélange D-T. On distingue plusieurs voies. Dans le schéma classique, la compression d'une cible de D-T, de dimension 2.4 mm ou 4 mm, est réalisée grâce à des impulsions nanosecondes de quelques kJ. Celles-ci fournissent l'énergie nécessaire à l'augmentation de la pression dans le plasma qui induit l'ignition. Au fil des ans, deux approches alternatives ont vu le jour : l'allumage rapide qui s'appuie sur une impulsion ultracourte après compression pour déclencher la fusion, et la Z-machine utilisant le Z-pinch.

Ces méthodes impulsives nécessitent un refroidissement des lasers après chaque tir et la mise en place d'une nouvelle cible. Ce désavantage est aussi un point positif sur la sécurité d'un possible réacteur à fusion inertielle. En cas de problème sur la machine, le système s'arrête après destruction d'une seule capsule ce qui évite l'emballement et présente ainsi un net avantage sur les centrales à fission.

a Schéma classique

Dans le schéma classique, la compression se fait isotropiquement grâce au rayonnement fourni par une chaîne laser. Cette action provoque une augmentation de la densité et de la température dans le plasma. L'ablation de la couche externe de la capsule et la détente du plasma vers l'extérieur induit une onde de choc qui se propage jusqu'à son cœur. Pour éviter une trop grande variation d'entropie, suite à la compression rapide, on calibre plusieurs ondes de choc, par augmentation de la puissance laser, de sorte qu'elles se propagent et atteignent le centre du plasma au même temps t . En théorie, seul le noyau de combustible, appelé point chaud, atteint une température suffisante pour induire des réactions de fusion. Les noyaux fils d'hélium ^4He ainsi créés chauffent le plasma alentour par collision, provoquant ainsi de nouvelles réactions. Ce phénomène de propagation de l'énergie provoque une dispersion du plasma, qui ne reste confiné et allumé que 50 ps. Les simulations prédisent que lors d'un tir l'énergie dégagée est de l'ordre de 100 MJ–1 GJ pour environ un tiers du combustible brûlé dans le point chaud.

L'installation LMJ possèdera quatre halls laser avec, en bout de chaîne, 240 faisceaux qui seront focalisés, après une conversion de fréquence, sur la cible se trouvant dans la chambre d'expérience. Celle-ci est constituée d'une sphère en aluminium de diamètre égal à 10 mètres et recouverte de béton boré pour protéger les utilisateurs du rayonnement. Les premiers tirs sont prévus pour 2014, avec seulement deux chaînes laser (soit 16 faisceaux). En comparaison, l'installation du NIF ne possède que 192 faisceaux. Le système expérimental est donc connu mais il reste l'aspect irradiation/compression de la cible pour lequel plusieurs approches existent.

Approche directe

L'approche directe est la méthode la plus intuitive pour envisager l'ignition. Elle fut étudiée dans les années 50 mais ne devint vraiment envisageable qu'après la découverte du laser en 1960. Dans ce domaine, les recherches étaient classifiées et on ne parla publiquement de fusion par laser qu'à partir de 1972 avec la publication de Nuckolls [4]. Cette approche consiste à comprimer directement la capsule, figure 1.3, contenant le mélange D-T avec des lasers d'intensité totale $10^{14} - 10^{15} \text{ W cm}^{-2}$.

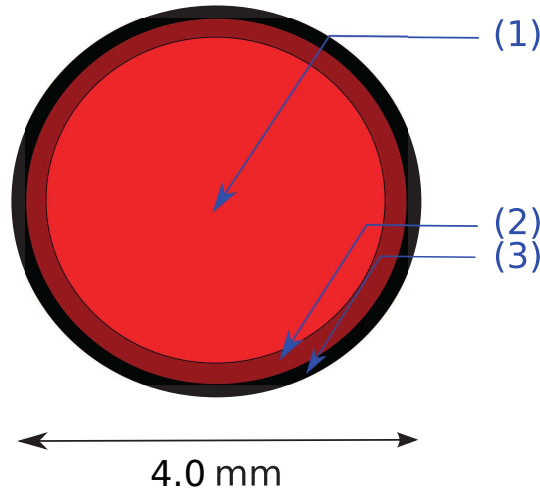


FIGURE 1.3: Composition de la cible pour la fusion inertielle. (1) : D-T gazeux – 1.76 mm de rayon, (2) : D-T solide (cryogénique) – 0.2 mm, (3) : plastique + dopants – 0.04 mm

Cette cible est constitué d'un ablateur en plastique qui peut contenir des dopants sous forme de trace pour augmenter l'absorption des faisceaux incidents, et d'un noyau de D-T sous forme cryogénique.

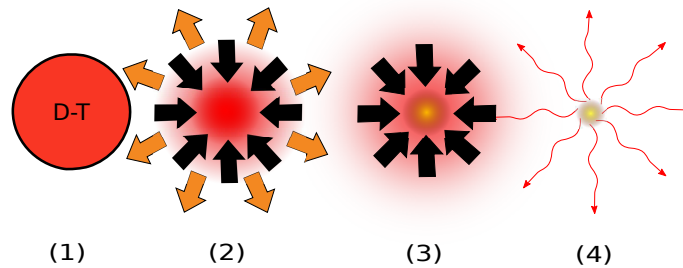


FIGURE 1.4: (1) : Irradiation de la capsule ; (2) : Compression du combustible par éjection du plasma de bord ; (3) : Allumage du point chaud ; (4) : Combustion du mélange D–T

Cette approche qui est schématisée dans la figure 1.4, est la plus simple mais elle présente de fortes contraintes qui sont liées à la géométrie de la compression. Pour que le plasma soit parfaitement symétrique, et donc que le noyau soit sphérique, les lasers doivent être très finement synchronisés en puissance et doivent être focalisés avec précision sur la capsule. L'asymétrie provoque des instabilités hydrodynamiques, la plus importante étant celle de Rayleigh-Taylor [5], aussi appelée instabilité d'interchange. Cet effet, qui ne peut pas être contrôlé, est le principal problème de l'approche directe.

Les recherches pour diminuer l'amplitude de ces effets hydrodynamiques permirent de développer le schéma indirect dans lequel la capsule de combustible est placée au centre d'un "four".

Approche indirecte

L'approche indirecte est le schéma standard dans la plupart des installations de fusion inertielle de par le monde. Dans cette approche, l'irradiation laser ne se fait pas directement sur la capsule de combustible mais sur une cavité cylindrique, appelé Hohlraum, dont la paroi intérieure est recouverte d'une fine couche d'or. L'interaction laser-paroi produit un plasma d'or qui émet des rayons X. Ce rayonnement produit une compression relativement isotrope de la capsule contenant le mélange de D–T. Le rendement calculé par les simulations supposent que $\sim 70\%$ de l'énergie du faisceau incident est convertie en rayonnement X (en raison du Z élevé de l'or).

Initialement la cavité n'est pas vide mais contient un gaz léger (mélange Helium-Hydrogène) qui initie un plasma à l'instant où les faisceaux laser entrent dans celle-ci. Ce gaz est présent afin d'éviter l'expansion du plasma d'or créé par l'irradiation de la paroi. Dans un cas idéal, l'énergie du laser serait entièrement déposée sur l'or, mais concrètement ces faisceaux se propagent d'abord dans le plasma He–H ainsi qu'une partie du plasma d'or, après la phase initiale. Ceci induit des effets d'absorption et des effets non linéaires dans l'interaction laser-plasma. Ces derniers

empêchent le transfert de l'énergie au plasma. Ils sont connus sous le nom de processus d'instabilités paramétriques. Ces instabilités font l'objet de recherches dans beaucoup d'installations comme le CELIA à Bordeaux ou le LULI à Palaiseau [6] car elles provoquent des rétrodiffusions liées au couplage avec une onde plasma : diffusion Brillouin pour les ions et Raman pour les électrons. De plus des phénomènes de filamentation du laser peuvent apparaître, ce qui nuit au dépôt de puissance sur la paroi du Hohlraum ainsi qu'une possibilité de création d'électrons runaways (relativistes) qui perturbent l'absorption de l'énergie laser.

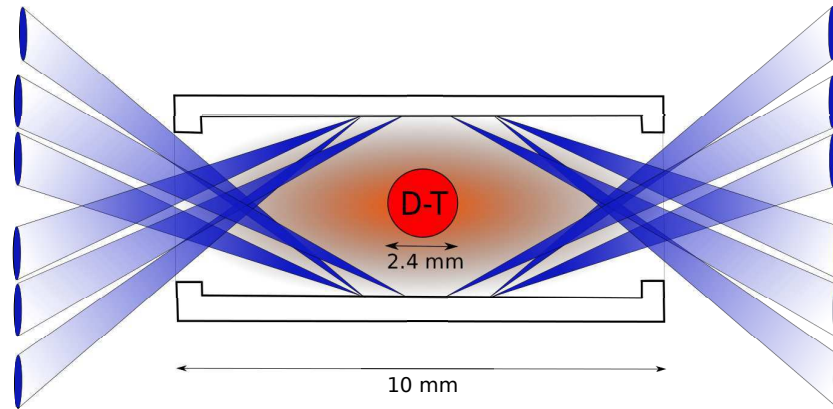


FIGURE 1.5: Schéma de l'irradiation dans le cas de l'approche indirecte.

L'avantage sur l'approche directe est que la compression par le rayonnement X est plus isotrope et les modèles de simulation sont bien connus [7]. L'absorption des X-mous et des X-durs par la cible fait l'objet de recherches intenses dans le domaine de la physique atomique. En effet, l'opacité des dopants est primordiale car elle peut améliorer de manière importante la compression. De nombreux codes d'opacité se développèrent donc aux cours des dernières décennies pour simuler ce système correctement. De même, la connaissance précise du spectre en émission de l'or a été un enjeu majeur ces dernières années.

b L'allumage rapide

L'allumage rapide consiste en une compression de la cible par des impulsions ns suivies d'un dépôt de l'énergie sur le point chaud au moyen d'une impulsion laser ps ultra-intense (10^{20} W/cm²). L'allumage rapide fut envisagé dans les années 90. Il se compose de 3 étapes [8].

La première étape -compression- n'a pas besoin d'être parfaitement isotrope. Elle ne sert qu'à augmenter la densité de la cible. La deuxième sert à creuser un tunnel dans le plasma afin d'atteindre le point chaud. La dernière sert à allumer le combustible en fournissant l'énergie nécessaire à l'allumage. L'idée est de déposer l'énergie à travers le transport des électrons dans le plasma jusqu'au point chaud.

Cette méthode est isochore et montre un gain théorique de réaction supérieur au gain du schéma classique qui lui est isobare. La simplicité du principe n'empêche pas de nombreux problèmes inhérents au creusage du canal. Comme pour l'attaque indirecte, des instabilités paramétriques, surtout de filamentation, existent dans le plasma ainsi que des instabilités de propagation. Dans ce modèle, cela engendre des problèmes de diffusion, pertes d'énergie, création d'électrons suprathérmiqes, pointage non précis du laser, propagation non contrôlée etc...

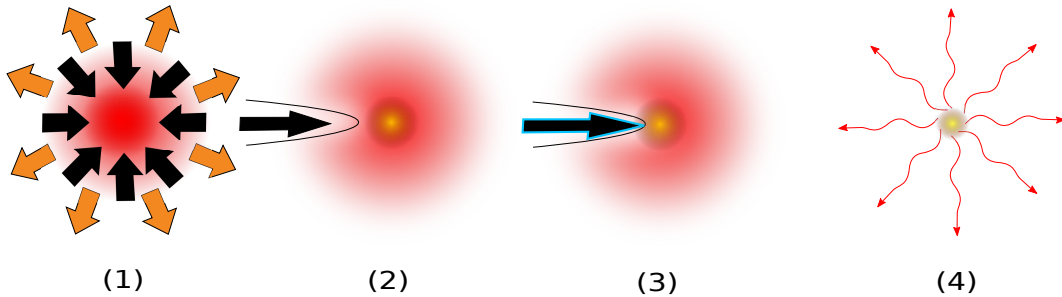


FIGURE 1.6: Schéma du processus d'allumage rapide. (1) : Irradiation et compression du combustible par éjection du plasma de bord, (2) : Creusage par laser du tunnel dans le plasma de l'ablateur, (3) : Allumage du point chaud par une impulsion laser ps (4) : Combustion du mélange D–T

Pour remédier à ces instabilités plusieurs solutions sont envisagées, en particulier en agissant sur les paramètres physiques telles que la densité (compression initiale) ou en réalisant un cône d'entrée laser [9]. Le transport des électrons, qui joue un rôle important, est sujet aux effets d'instabilités (filamentation, instabilité de Weibel...) [10] et des effets du milieu tels que le ralentissement dû aux chocs entre particules et à la diffusion du faisceau électronique.

En Europe, de nombreuses installations sont en développement afin de tester la faisabilité d'une telle approche. On distingue le laser ultra-intense PETAL (Bordeaux), caractérisé par des impulsions de 3.5 kJ pendant 0.5 à 5 picosecondes, qui sera à terme couplée avec le LMJ. Cette installation permettra de faire des tests en prévision de la construction de HIPER (High Power laser Energy Research) qui sera un démonstrateur d'un réacteur à fusion inertielle civil à l'instar de ITER pour la fusion magnétique. Les deux approches, directe et indirecte, seront testées ainsi que la faisabilité de la répétition des tirs, pré-établie par PETAL et le LMJ, cadencé à 10 tirs par seconde. Cette fréquence est le cap technologique à résoudre avant de pouvoir envisager la construction de HIPER en Angleterre aux environs de 2015 – 2020.

c Z-Machine

La Z-machine se trouve au Sandia National Laboratories à Albuquerque (Nouveau Mexique). Elle est basée sur le principe physique du Z-pinch, et donc sur la striction magnétique d'un plasma. Le rayonnement X émis permettrait de comprimer une capsule de combustible selon le même principe que l'approche indirecte.

L'installation est constituée de fils minces de tungstène formant un cylindre, dans lesquels on fait circuler un courant de très haute intensité (26 MA) pendant 100 ns. Au passage de ce courant de densité \mathbf{j} , les fils se mettent à l'état de plasma quasi instantanément, et un champ magnétique orthoradial est créé. Son expression est déduite du théorème d'Ampère : $\mathbf{B}(r) = \frac{\mu_0 I}{2\pi r} \mathbf{u}_\theta$, où r est la distance à l'axe du cylindre.

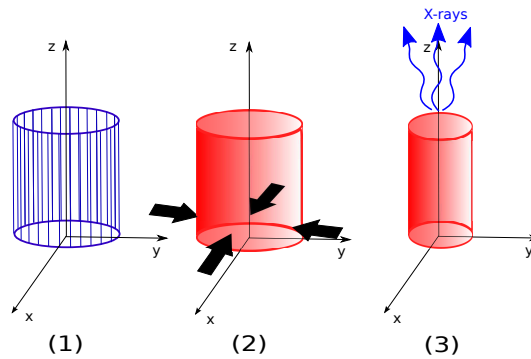


FIGURE 1.7: Schéma de principe de la Z-machine. (1) : Circulation du courant dans les filaments de tungstène et création du plasma, (2) : Pincement de la colonne plasma par la force de Laplace, (3) : Equilibre de Bennett, rayonnement X.

L'effet de pincement est dû à la force de Laplace $\mathbf{j} \wedge \mathbf{B}(r)$ (ici centripète), qui comprime la colonne plasma. Les particules du bord se déplacent donc vers l'axe du cylindre. Cela provoque une "implosion" du plasma sur l'axe \mathbf{u}_z . L'énergie cinétique de la matière ainsi déplacée se transforme au cours du transport en énergie thermique par collisions avec les électrons et ions du milieu. Un équilibre se fait alors entre la pression magnétique et la pression cinétique (stagnation), c'est ce que l'on nomme l'équilibre de Bennett. Pour les éléments lourds, ici le tungstène, une partie de l'énergie thermique est émise sous forme de rayons X-mous ($\simeq 350$ TW). Seulement 20 % de l'énergie électrique est convertie en rayonnement X.

Des études ont établi des lois sur l'émissivité en fonction du nombre de fils. En régime standard, il y a 240 fils de tungstène de $7.5 \mu\text{m}$ de diamètre. En ce qui concerne la fusion, il a été envisagé dans les années 90 de modifier une des machines Z pour étudier un modèle alternatif aux lasers intenses. Comme l'approche par compression laser ce schéma est impulsif et nécessite un Hohlraum très similaire à l'attaque indirecte. La recherche sur la fusion sur machine Z-pinch fut

relancée en 1997 avec la reconfiguration d'un des accélérateurs du laboratoire de la Sandia. S'ensuivirent plusieurs modèles de Hohlraum dont le plus prometteur, à l'heure actuelle, est celui du double Z-pinch [11] La figure 1.8 ci-dessous est une représentation schématique du Hohlraum avec double Z pinch.

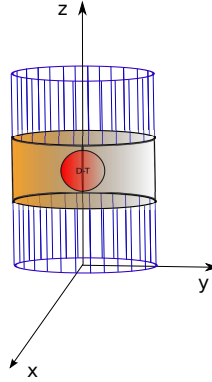


FIGURE 1.8: Schéma du hohlraum de la machine Z. Au centre, la capsule contenant le combustible.

L'intérêt de la fusion par Z-pinch réside dans le rendement énergétique d'un tir. La cible peut être d'une taille plus importante (Hohlraum de 3 cm, capsule de quelques mm). L'énergie attendue suite à l'allumage est estimée à 1.2 GJ pour la valeur la plus basse ; c'est-à-dire un ordre de grandeur supérieur au rendement du schéma classique.

1.2.2 Fusion magnétique

La fusion magnétique implique des temps de confinement longs, en comparaison de la fusion inertielle, et des densités plus faibles, typiquement $10^{12} - 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. En raison de ces valeurs basses, le chauffage ne peut se faire via les collisions. Des systèmes secondaires externes -antennes/injection de particules- sont donc nécessaires pour atteindre l'allumage.

Le confinement du plasma est assuré par un jeu de bobines qui créent un champ magnétique délimitant une chambre d'expérience. Les particules sont confinées par la force de Laplace. Il en résulte que les ions et les électrons composant le plasma *orbitent* autour des lignes de champ \mathbf{B} . Par analogie aux orbites planétaires, on peut définir la période de circonvolution d'une particule. Le champ électrique n'est pas considéré dans les équations. Dans un plasma, il y a un effet de moyenne qui sera abordé dans une prochaine section. L'équation se réduit à :

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = q\mathbf{v} \wedge \mathbf{B}.$$

En projetant sur l'axe parallèle à \mathbf{B} et dans le plan perpendiculaire à celui-ci, on obtient

$$m \frac{d\mathbf{v}_\perp}{dt} = q\mathbf{v}_\perp \wedge \mathbf{B},$$

$$\frac{dv_\parallel}{dt} = 0.$$

Si on considère le champ \mathbf{B} selon l'axe \mathbf{u}_z , $\mathbf{B} = B_z \mathbf{u}_z$, on peut écrire la vitesse au moyen de coordonnées cartésiennes dans le plan (xOy) orthogonal à \mathbf{u}_z .

$$m \frac{dv_x}{dt} = qv_y B_z,$$

$$m \frac{dv_y}{dt} = -qv_x B_z,$$

où v_x et v_y sont les composantes de \mathbf{v} sur \mathbf{u}_x et \mathbf{u}_y , respectivement. Ces équations couplées se résolvent dans l'espace complexe en posant $V = v_x + i v_y$. On obtient alors une équation unique :

$$\frac{dV}{dt} + i\omega_c V = 0,$$

où ω_c est une fréquence caractéristique, appelée fréquence cyclotron, de l'orbite de la particule autour d'une ligne de champ :

$$\omega_c = \frac{|q|B}{m}. \quad (1.8)$$

On peut alors exprimer le rayon de l'orbite en égalant la vitesse des électrons au sein du plasma à la vitesse thermique. On obtient alors :

$$R_{\text{Larmor}} = \frac{v_{\text{th}}}{\omega_c},$$

où la vitesse thermique v_{th} est égale à $\sqrt{3k_B T_e/m}$. On a alors :

$$R_{\text{Larmor}} = \frac{\sqrt{3mk_B T_e}}{|q|B}. \quad (1.9)$$

Le champ magnétique permet de confiner le plasma dans le plan qui lui est orthogonal, mais les particules ont un mouvement libre suivant son axe. Pour remédier à ce problème, il a fallu concevoir une machine dont les lignes de champ se referment sur elles-mêmes. Ainsi, les constituants du plasma restent confinés. La géométrie de champ magnétique la plus simple est la forme torique.

L'ignition ne peut être atteinte qu'avec des températures au voisinage de 10 keV. Le chauffage se faisant majoritairement par injections de neutre IDN (absorption par collisions) ou au moyen d'ondes générées par des antennes (absorption sans collisions) réglées sur les fréquences cyclotroniques électroniques (FCE) ou ioniques (FCI) ou sur la fréquence hybride (LH).

Différentes machines sont basées sur ce principe. Elles utilisent des symétries magnétiques différentes. La plus courante est le tokamak que nous allons maintenant décrire.

a Tokamak

Principe

Le tokamak est une machine qui a été développée en Russie au cours des années 50. Il fut utilisé pour l'étude de la fusion thermonucléaire dans les décennies suivantes [12]. Il se présente comme une machine torique dans laquelle le plasma, créé par claquage, est confiné grâce à des bobines toroïdales. Le problème de cette configuration, très simple, apparaîtra quelques années après. Il est dû aux vitesses de dérive magnétique des particules, qui sont liées au gradient et à la courbure du champ magnétique. Les ions et les électrons sont donc séparés verticalement dans le plasma, ce qui provoque sa recombinaison. Pour essayer de compenser cet effet, on introduit un solénoïde central qui crée un champ magnétique vertical qui induit un courant toroïdal dans le plasma. Ce courant génère un champ B_θ (coordonnées toriques) qui fait que les lignes de champ prennent une forme hélicoïdale se refermant sur elles-mêmes après un tour du tore (voir Fig. 1.9, système analogue à un transformateur). Les effets de dérive sont donc moyennés sur un tour et sont ainsi stabilisés.

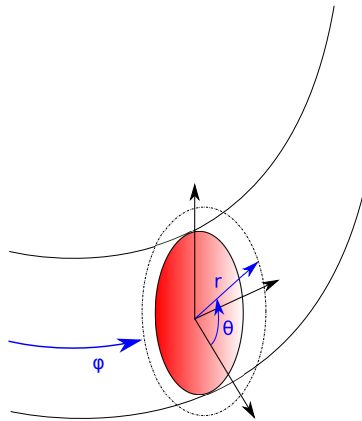


FIGURE 1.9: Coordonnées toriques

Il est donc possible, théoriquement, d'obtenir des temps de confinement significatifs permettant ainsi le chauffage du plasma et l'ignition. Expérimentalement, le *pilote* de la machine doit s'assurer que le plasma reste loin des parois du tokamak afin d'éviter que des impuretés ne viennent le polluer. Néanmoins, le plasma repose sur ce qu'on appelle le *limiteur*. Le tokamak Tore Supra (CEA, Cadarache) est basé sur ce principe. Le limiteur implique que la configuration magnétique du plasma a une géométrie circulaire.

Le limiteur permet de définir la limite où les lignes de champ se referment sur elles-mêmes, et donc la dernière surface magnétique fermée (DSMF). Mais par ce contact une partie de la chaleur est dissipée. La zone partiellement confinée, après la DSMF, se situant à l'extérieur jusqu'au plasma faisant face à la paroi est appelée SOL (Scrape Off Layer). En raison de la forte concentration en impuretés issues de la paroi du tokamak, la SOL est le siège de nombreuses réactions atomiques.

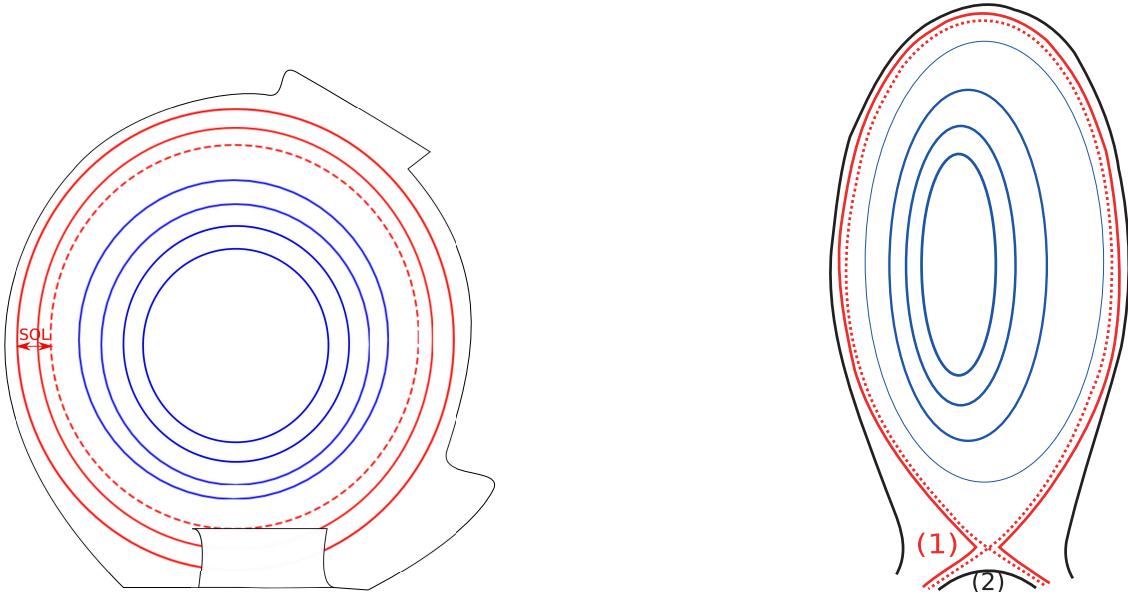


FIGURE 1.10: Limiteur et surfaces magnétiques de la configuration limiteur et divertor. Courbes rouges : surfaces magnétiques non fermées, courbes bleues : surfaces magnétiques fermées. La courbe discontinue représente la dernière surface magnétique fermée (DSMF). (1) : Point X magnétique, (2) : Divertor.

Lorsque des réactions de fusion se produisent, il faut pouvoir recycler aisément une partie des déchets du plasma. Le composant divertor a ainsi été développé pour extraire la chaleur et les cendres d'hélium, et fera partie de la chambre du réacteur ITER. Les symétries magnétiques en présence du divertor font que le plasma a une section en D (Fig. 1.10). Le point X correspond à la zone où le champ magnétique poloidal est nul ce qui permet de capter l'hélium créé par fusion, ainsi que les cendres des impuretés éjectées du plasma. L'autre avantage de cette configuration est que la paroi est loin du plasma. On limite ainsi les effets de pollution par des atomes lourds. Les tokamaks ASDEX Upgrade, JET, JT60 sont basés sur cette configuration.

Chauffage

L'enjeu d'une telle machine est de produire de l'énergie sans interruption. Il faut donc pouvoir chauffer le plasma en continu. La création de courant plasma par le

solénoïde central permet d'obtenir, par effet Joule, des températures voisines de 2 keV, ce qui n'est pas suffisant. Le chauffage par effet Joule est limité par une saturation due à la dépendance de la résistance du plasma en T_e . On doit donc recourir à des chauffages additionnels basés sur les fréquences cyclotroniques ioniques et électroniques. Ceux-ci prennent la forme d'antennes réglées sur ces fréquences (40 MHz pour les ions et ≈ 100 GHz pour les électrons) qui injectent de l'énergie au cœur du plasma.

L'autre système utilisé sur la plupart des machines est l'injection de neutres (environ 20 MW disponibles). Ce sont des atomes d'hydrogène qui sont ionisés, accélérés puis neutralisés avant d'être injectés dans le plasma. Cette méthode permet de générer un courant plasma et réalimente la machine en combustible. L'ionisation peut donner, selon la procédure utilisée, des ions négatifs [13] ou positifs avec des rendements liés à l'obtention du faisceau de neutres différents.

La configuration idéale est réalisée lorsque la densité et la température sont élevées au cœur ; une forte densité au bord impliquant une puissance rayonnée élevée et donc un écrantage des impuretés. Mais il existe un transport des particules du bord vers le centre du plasma qui peuvent le refroidir dans le cas d'impuretés lourdes [14] (Tungstène, Fer, Béryllium..). Actuellement, de nombreuses études caractérisent le transport afin d'inverser les coefficients de transport pour éjecter ces ions vers le bord afin de purifier le cœur [15].

Mode de confinement

Plusieurs modes de confinement furent envisagés aux cours d'expériences sur les installations tokamaks (voir Fig. 1.11, ci-dessous).

1. Le mode L (Low confinement) qui correspond au confinement le plus standard observable. On l'associe au plasma en configuration limiteur. Néanmoins, des instabilités MHD (association des lois de la mécanique des fluides et des équations de Maxwell), sont présentes sous formes de dents-de-scie (chute brutale de la température dans le cœur suivie d'une augmentation lente qui se répètent de manière périodique). Dans les expériences actuelles, on arrive à minimiser et contrôler ce phénomène en paramétrant le chauffage sur ces instabilités.
2. Le mode H (High confinement) a été découvert, de manière fortuite, en 1982, dans le tokamak ASDEX Upgrade [16]. C'est un mode plus évolué dans lequel une barrière de transport apparaît au niveau de la DSMF lorsque la puissance de chauffage est suffisante et dépasse un certain seuil. De plus, les turbulences plasma sont amoindries. Il dépend également de la géométrie du plasma : en configuration divertor ce régime est aisément atteint au contraire d'un tokamak avec limiteur. Le temps de confinement de l'énergie et des composants du plasma est multiplié par deux environ. Ce régime de fonctionnement amélioré est celui qui est prévu pour le projet ITER. La possibilité de créer des barrières internes de transport par contrôle du chauffage permettrait de maîtriser à terme le transport et le profil de courant de la décharge plasma.

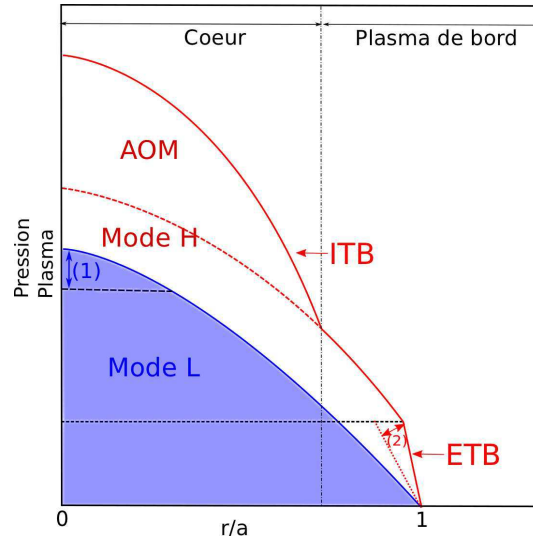


FIGURE 1.11: Modes opérationnels d'un tokamak. (1) : Dents de scie, (2) : ELM (Edge Localized Modes), ETB (Barrière de transport externe), ITB (Barrière de transport interne), AOM (Modes d'opérations avancés). r/a : rayon normalisé (a : petit rayon du plasma).

Ce mode de fonctionnement, bien que plus efficace en terme de fonctionnement, fait apparaître d'autres instabilités MHD, connues sous le nom de ELM (Edge Localized Modes), sur le bord du plasma. Celles-ci provoquent périodiquement l'éjection d'ions et d'électrons ainsi que de l'énergie sur la paroi externe de la chambre, pouvant détériorer les diagnostics et l'enceinte (voir Fig. 1.11). Le plasma déstabilisé *disrupte* instantanément si l'énergie libérée est trop grande. Les modes ELM doivent être contenus et contrôlés pour que la fusion magnétique soit envisageable en tant que source d'énergie.

ITER devrait permettre la résolution de ces problèmes et démontrer la pertinence de l'approche tokamak. Dans le tableau ci-dessous, on compare les caractéristiques de la machine à celles de machines existantes.

Les machines Tore Supra et ITER sont caractérisés par des temps de décharge longs en raison de leur bobines supraconductrices qui évitent le chauffage des composants conduisant le courant initiateur du champ. Les simulations ont montré que ITER devrait fournir environ 500 MW de puissance fusion pour atteindre $Q=10$.

	Tore Supra	ASDEX-Upgrade	ITER
Section	Circulaire	en D , point X	en D , point X
Grand rayon (m)	2.40	1.65	6.20
Petit rayon horizontal (m)	0.72	0.5-0.8	2
Petit rayon vertical (m)	N/A	N/A	6.80
Champ toroïdal (T)	3.9	3.9	5.3
Courant plasma (MA)	1.5	1.6	15
Chauffage FCE (MW)	0.5	2	20
Chauffage FCI (MW)	9	8	20
Chauffage hydride LH (MW)	4	N/A	N/A
Chauffage par neutres (MW)	0.5	20	33
Temps de la décharge	\simeq minutes	\approx qq secondes	Q=15 \rightarrow permanent, Q=30 \rightarrow \approx qq 10 minutes

TABLE 1.1: Caractéristiques des tokamaks Tore Supra, ASDEX-Upgrade et ITER.

b Les stellarators

Ce qui différencie le stellarator du tokamak est le courant plasma qui est nul dans le cas d'un stellarator. Le champ poloïdal est établi par la géométrie des bobines extérieures. Cette géométrie est compliquée à concevoir et à mettre en oeuvre. Elle a nécessité des calculs et des simulations numériques. Le principe du stellarator, développé en 1952 par Lyman Spitzer a un avantage certain sur le tokamak : le courant étant quasi nul, il n'y a aucun risque de disruption. Ceci s'explique par de la densité de Greenwald :

$$n_{\text{GW}}(10^{20} \text{ cm}^{-3}) = \frac{I(\text{MA})}{\pi a^2}.$$

Lorsque cette limite est atteinte, le plasma se met à rayonner fortement, essentiellement au bord. Le courant, s'il existe, augmente et provoque l'apparition d'axes magnétiques secondaires qui déstabilisent l'ensemble du système qui finit par toucher la paroi de l'enceinte. Ce phénomène s'appelle disruption. Dans le cas d'un stellarator, cette limite n'est jamais atteinte. Il est donc possible, en théorie, d'avoir un plasma en régime permanent.

Un projet allemand de construction d'un stellarator -W7X- est en cours à Greifswald en Allemagne (voir Fig. 1.12, Table 1.2). C'est le successeur de W7-AS et il doit démontrer la pertinence des stellarators de nouvelle génération pour l'étude de la fusion nucléaire à l'instar de ITER pour les tokamaks.

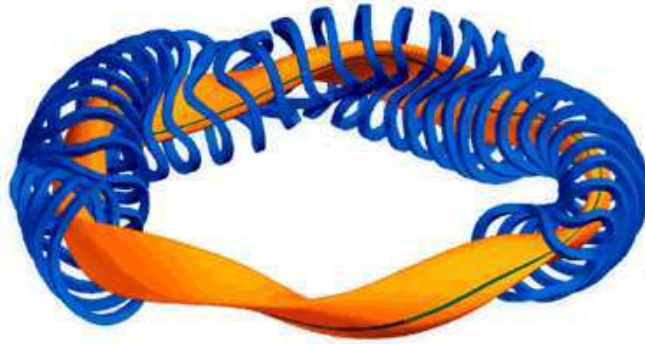


FIGURE 1.12: Schéma d'un stellarator.

Section	en D , point X
Grand rayon (m)	5.5
Petit rayon horizontal (m)	0.53
Petit rayon vertical (m)	N/A
Champ Toroïdal (T)	3
Courant plasma (MA)	N/A
Chauffage (MW)	14
Temps de la décharge	\approx qq minutes, < 30 min

TABLE 1.2: Caractéristiques du stellarator W7X.

Il existe d'autres installations de fusion magnétique basées sur d'autres principes : les héliotrons comme le LHD (Large Helical Device) au Japon, ou le RFX en Italie, qui est basé sur le reversed Field Pinch. Ce dernier utilise le même principe que le tokamak mais la configuration magnétique est différente. Les champs B_θ et B_ϕ ont le même ordre de grandeur, et le champ toroïdal inverse son signe entre les côtés interne et externe du plasma. Cette configuration est bien adaptée à l'étude des instabilités magnétohydrodynamiques qui sont favorisées [17].

La physique atomique joue un rôle important dans la caractérisation du plasma. En effet, la connaissance des spectres en émission ou en absorption est essentielle, d'une part à des fins de diagnostic du plasma et d'autre part comme moyen d'optimiser la compression de la capsule de D-T, en cherchant les bons mélanges de dopants.

1.3 Physique atomique

La connaissance des profils d'émission et d'absorption nécessite un calcul de la structure atomique du système radiatif, i.e., atome ou ion chargé positivement. Dans la suite, on appellera atome un tel système. La structure atomique comprend la connaissance des énergies des niveaux liés et les taux de transition lié-lié, lié-libre. La complexité des calculs réside dans :

- l'occupation des différentes couches atomiques
- la présence d'un environnement –le plasma– qui perturbe l'atome.

Dans cette partie, on s'intéressera à un atome isolé. L'action de l'environnement (plasma) sera traitée plus loin.

1.3.1 Définitions : Configuration, superconfiguration

La structure d'un atome à un électron (hydrogène ou ion hydrogénoïde) peut être connue de manière exacte (voir Annexe 1). Pour un système aussi simple, l'état physique est caractérisé par l'ensemble des nombres quantiques : n , l , m_l et m_s . Le nombre quantique principal n représente une couche. A cette couche sont associées des sous-couches, chacune étant représentée par les nombres quantiques nl . Ainsi, à une couche caractérisée par n sont associées n sous-couches nl , avec $0 \leq l \leq n - 1$. Une sous-couche nl peut contenir au maximum $2(2l + 1)$ électrons. On définit la configuration électronique non relativiste par :

$$C = (n_1 l_1)^{N_1} (n_2 l_2)^{N_2} (n_3 l_3)^{N_3} \dots$$

où N_i est le nombre d'électrons occupant la sous-couche $n_i l_i$. On a $N_1 + N_2 + N_3 + \dots = N$, où N est le nombre d'électrons liés.

Par convention, on appelle


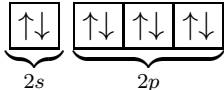
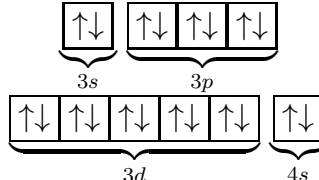
- couches K, L, M, \dots les couches correspondant à $n = 1, 2, 3 \dots$, respectivement
- sous-couches s, p, d, \dots les sous-couches correspondant à $l = 0, 1, 2 \dots$, respectivement

L'état fondamental correspond à la configuration dans laquelle les électrons occupent les sous-couches d'énergie la plus basse, selon la règle de Klechkowski. Toute autre configuration génère des états excités. Les états excités ne sont accessibles que lorsque l'atome/ion est perturbé. Dans notre cas, la perturbation est due à un plasma chaud, parfois appelé *bain*. Lorsque la température du bain est élevée, les états associés à des couches de n élevé (jusqu'à 7–8 dans certains cas) peuvent être occupés. Définissons la superconfiguration (SC). Celle-ci est obtenue en remplaçant dans C les sous-couches par des super-couches. Une super-couche σ_i est un ensemble de sous-couches :

$$SC = (\sigma_1)^{N_1} (\sigma_2)^{N_2} (\sigma_3)^{N_3} \dots ,$$

où N_i est le nombre d'électrons occupant la super-couche σ_i . On a $N_1 + N_2 + N_3 + \dots = N$

Etudions un exemple simple pour illustrer ces structures. Considérons les atomes He, Ne et Zn de numéros atomiques 2, 10 et 30, respectivement. Dans le tableau ci-dessous, nous indiquons la dernière couche, les sous-couches occupées et la configuration associée à l'état fondamental. Le zinc est un cas particulier de l'application de la règle de remplissage de Klechkowski (observée par Madelung) : l'énergie de la sous-couche 4s est plus basse que celle de la sous-couche 3d. Elle est donc remplie en premier [18, 19].

Atome	He	Ne	Zn
Dernière couche	$n = 1$ (couche K)	$n = 2$ (couche L)	$n = 3$ (couche M)
Sous-couches	$l = 0$ (1s)	$l = 0, 1$ (2s, 2p)	$l = 0, 1, 2$ (3s, 3p, 3d)
C fondamentale	$1s^2$	[He] $2s^2 2p^6$	[Ne] $3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2$
Etats occupés			

Considérons la SC dans laquelle les super-couches sont en fait des couches. Dans ce cas,

$$SC = (n_1)^{N_1} (n_2)^{N_2} (n_3)^{N_3} \dots$$

Intéressons-nous maintenant au cas particulier de la SC dans laquelle les couches K et L sont pleines et la couche M contient trois électrons : $(1)^2(2)^8(3)^3$. Nous donnons dans le tableau ci-dessous la liste des configurations non-relativistes associées à cette SC.

SC	$(1)^2(2)^8(3)^3$
Configurations non-relativistes associées	$3s^2 3p^1$ $3s^2 3d^1$ $3s^1 3p^2$ $3s^1 3p^1 3d^1$ $3s^1 3d^2$ $3p^3$ $3p^2 3d^1$ $3p^1 3d^2$ $3d^3$

Lorsque l'atome comporte plusieurs électrons, l'équation de Schrödinger est difficile à résoudre. On distingue les interactions électron-noyau, électron-électron, spin-orbite etc. L'Hamiltonien de l'atome s'écrit :

$$H = - \sum_{k=1}^N \nabla_k^2 - \sum_{k=1}^N \frac{2Z}{r_k} + \sum_{k,j (k>j)}^N \frac{2}{r_{kj}} + \sum_{k=1}^N \zeta_k(r_k) (\mathbf{l}_k \cdot \mathbf{s}_k), \quad (1.10)$$

On omettra les termes relativistes de masse-vélocité et de Darwin. La difficulté de la résolution de l'équation de Schrödinger vient de l'interaction électron-électron, $(2/r_{kj})$. Les méthodes de résolution les plus couramment utilisées consistent à déterminer le potentiel $V(r)$ *ressenti* par un électron lorsque ce dernier est soumis au champ créé par les $N - 1$ autres électrons et le noyau. On suppose que le champ calculé est stationnaire et présente une symétrie sphérique. Cette approche est connue sous le nom de modèle du champ –moyen– central. Les effets relativistes peuvent être inclus dans ce champ moyen car ils dépendent des coordonnées d'un seul électron.

La fonction d'onde d'un électron est notée ϕ_α , où α désigne un ensemble de nombres quantiques. La fonction d'onde totale de l'atome est une combinaison linéaire de telles fonctions d'onde. Le principe d'exclusion de Pauli impose que l'état quantique soit complètement antisymétrique, ce qui conduit à

$$\psi(1, 2, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \epsilon_P P \{ \phi_\alpha(1) \phi_\beta(2) \dots \phi_\nu(N) \}, \quad (1.11)$$

où ϵ_P est la parité de la permutation P , $\epsilon_P = +1$ (-1) si la permutation est paire (impaire). La fonction d'onde peut aussi s'exprimer sous la forme d'un déterminant de Slater :

$$\psi(1, 2, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_\alpha(1) & \phi_\alpha(2) & \dots & \phi_\alpha(N) \\ \phi_\beta(1) & \phi_\beta(2) & \dots & \phi_\beta(N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_\nu(1) & \phi_\nu(2) & \dots & \phi_\nu(N) \end{vmatrix} \quad (1.12)$$

Le déterminant de Slater s'annule si deux électrons occupent le même état quantique. On retrouve donc le principe d'exclusion de Pauli. Lorsque l'atome est isolé, les électrons occupent tous les niveaux d'énergie inférieure à l'énergie de Fermi. Si l'atome est dans un plasma, des électrons peuvent occuper des niveaux d'énergie supérieure à l'énergie de Fermi. Les taux d'occupation des niveaux discrets dépendent de la température et de la densité du plasma environnant.

Afin de résoudre l'équation de Schrödinger, il faut choisir le type de couplage entre le moment cinétique orbital et le spin. Il en découle l'utilisation d'une base dans laquelle on exprimera les fonctions d'onde solutions de l'équation de Schrödinger. La résolution de cette équation donnera les énergies et les fonctions d'onde de l'atome. Voyons les divers types de couplage des moments cinétiques.

1.3.2 Couplage électronique

L'Hamiltonien de l'atome isolé est invariant par rotation. Il commute donc avec le moment cinétique total \mathbf{J} . Si on utilise la base $|JM\rangle$ constituée par les vecteurs propres de \mathbf{J}^2 et J_z , la matrice de H sera diagonale et sa résolution donnera des valeurs propres. Chaque valeur de J conduira à une valeur propre de H et $2J + 1$ vecteurs propres. Mais comment coupler les moments cinétiques pour obtenir les valeurs propres et les vecteurs propres? On a essentiellement deux types de couplage : le couplage LS et le couplage jj (il existe néanmoins d'autres couplages applicables à d'autres systèmes [18]).

Le couplage LS consiste à coupler les moments cinétiques orbitaux des électrons d'une part et les spins d'autre part. Ce couplage permet d'obtenir des états propres de \mathbf{L}^2 , \mathbf{S}^2 , L_z et S_z . Malheureusement, ces états ne diagonalisent pas la matrice de H . Il convient alors de coupler \mathbf{L} et \mathbf{S} : $\mathbf{L} + \mathbf{S} = \mathbf{J}$ (règle de Hund [18]). Pour chaque valeur de J , on aura une valeur propre de H et $2J + 1$ vecteurs propres : $|LSJM\rangle$, avec $-J \leq M \leq J$.

Couplage jj : On couple le moment cinétique \mathbf{l} et le spin \mathbf{s} d'un électron, ce qui donne le moment cinétique \mathbf{j} . Les moments cinétiques \mathbf{j}_i sont ensuite couplés entre eux pour obtenir le moment cinétique total \mathbf{J} . Les états $|j_1 j_2 JM\rangle$ sont états propres de H .

Le choix du couplage n'est pas fait de manière arbitraire ; il dépend de l'importance des effets relativistes, en particulier l'effet de spin-orbite. Si ce dernier est négligeable devant l'interaction électrostatique, le couplage LS est le plus approprié. Par contre, s'il domine l'interaction électrostatique, le couplage jj est le plus approprié [18, 19].

Il faut donc comparer l'interaction de spin-orbite et l'interaction électrostatique. Celle-ci se décompose en une interaction électron-noyau (force centrale) et l'interaction électron-électron. C'est cette interaction -non centrale- qui rend difficile la résolution de l'équation de Schrödinger.

1.3.3 Intégrales de Slater

Considérons deux électrons (1 et 2). Leur interaction électrostatique s'écrit :

$$V_{12} = \frac{2}{r_{12}},$$

où r_{12} est la distance séparant les deux électrons. Cette interaction peut aussi s'écrire :

$$\frac{2}{r_{12}} = \frac{2}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta}}$$

ou

$$\frac{2}{r_{12}} = \frac{2}{r_{>} \sqrt{\left[1 + \left(\frac{r_{\leq}}{r_{>}}\right)^2 - 2\frac{r_{\leq}}{r_{>}} \cos \theta\right]}}$$

où $r_< = \inf(r_1, r_2)$, $r_> = \sup(r_1, r_2)$ et $\theta = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. On peut également exprimer cette interaction sous la forme d'un développement sur les polynômes de Legendre :

$$\frac{2}{r_{12}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2(r_<)^k}{(r_>)^{k+1}} P_k(\cos(\theta)), \quad (1.13)$$

ou encore, en introduisant les symboles $C_q^{(k)}$ ¹

$$\frac{2}{r_{12}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2(r_<)^k}{(r_>)^{k+1}} \sum_{q=-k}^k (-1)^q C_{-q}^{(k)}(\theta_1, \phi_1) C_q^{(k)}(\theta_2, \phi_2), \quad (1.14)$$

où θ_i et ϕ_i sont les coordonnées sphériques des électrons ($i = 1, 2$).

Si on appelle $|ij\rangle$ et $|tu\rangle$ deux états du système constitué des deux électrons, les éléments de matrice de V_{12} s'écrivent :

$$\langle ij | \frac{2}{r_{12}} | tu \rangle = \langle ij | \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2(r_<)^k}{(r_>)^{k+1}} \sum_{q=-k}^k (-1)^q C_{-q}^{(k)}(\theta_1, \phi_1) C_q^{(k)}(\theta_2, \phi_2) | tu \rangle. \quad (1.15)$$

Dans l'équation ci-dessus, les variables radiales et angulaires sont séparées. Si on utilise les fonctions d'onde individuelles données dans l'annexe (Equation A.5), la partie angulaire des éléments de matrice fait intervenir les quantités :

$$\begin{aligned} \langle lm | C_q^{(k)} | l'm' \rangle &= \sqrt{\frac{4\pi}{[k]}} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{lm}^* Y_{kq} Y_{l'm'} \sin \theta d\theta d\phi \\ &= \delta_{q, m-m'} c^k(lm, l'm'), \end{aligned} \quad (1.16)$$

où

$$c^k(lm, l'm') = (-1)^m [l, l']^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} l & k & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & k & l' \\ -m & q & m \end{pmatrix}. \quad (1.17)$$

L'élément de matrice de V_{12} s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \langle ij | \frac{2}{r_{12}} | tu \rangle &= \delta_{m_{s_i} m_{s_t}} \delta_{m_{s_j} m_{s_u}} \sum_{k=0}^{\infty} R^k(ij, tu) \\ &\times \sum_{q=k}^k \delta_{q, m_{l_t} - m_{l_i}} \delta_{q, m_{l_u} - m_{l_j}} c^k(l_i m_{l_i}, l_t m_{l_t}) c^k(l_j m_{l_j}, l_u m_{l_u}). \end{aligned}$$

La partie radiale fait intervenir les intégrales de Slater R^k :

$$R^k(ij, tu) = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{2(r_<)^k}{(r_>)^{k+1}} P_i(r_1) P_j(r_2) P_t(r_1) P_u(r_2) dr_1 dr_2 \quad (1.18)$$

Les indices i, j, t et u représentent seulement les nombres quantiques nl . On distingue :

1. $C_q^{(k)} = (\frac{4\pi}{2k+1})^{1/2} Y_{kq}$.

– L'intégrale de Slater directe : $tu = ij$

$$F^k(ij) = R^k(ij, ij) = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{2(r_<)^k}{(r_>)^{k+1}} |P_i(r_1)|^2 |P_j(r_2)|^2 dr_1 dr_2. \quad (1.19)$$

– L'intégrale de Slater d'échange : $tu = ji$

$$G^k(ij) = R^k(ij, ji) = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{2(r_<)^k}{(r_>)^{k+1}} P_i(r_1)^* P_j(r_2)^* P_i(r_2) P_j(r_1) dr_1 dr_2. \quad (1.20)$$

Les symboles $3j$ qui apparaissent dans l'équation 1.17 doivent vérifier la règle de sélection : $l + k + l'$ est un nombre paire. Cela implique que seulement certaines valeurs de k donnent un résultat non nul. Pour l'intégrale directe $F^k(ij)$, $k = 0, 2, 4, \dots, \min(2l_i, 2l_j)$. Pour l'intégrale d'échange $G^k(ij)$: $k = |l_i - l_j|, |l_i - l_j| + 2, \dots, l_i + l_j$.

L'énergie de l'atome à N électrons liés s'exprime en fonction des intégrales de Slater et de l'énergie E_{av} , valeur propre de l'Hamiltonien $H_0 = -\sum_{k=1}^N \nabla_k^2 - \sum_{k=1}^N \frac{ZZ}{r_k}$:

$$E = E_{av} + \sum_{i,j=1}^N \sum_{(i<j)} \sum_k [f_k F^k(ij) + g_k G^k(ij)] + \sum_{i=1}^N d_i \zeta_i. \quad (1.21)$$

Le dernier terme dans le membre de droite est la correction de spin-orbite.

Les codes de physique atomique permettent de calculer les intégrales de Slater et les ζ_i . Dans la suite, nous utiliserons particulièrement les codes COWAN [18], MCDF (Multi-Configuration Dirac-Fock) [20] et HULLAC (Hebrew University Lawrence Livermore Atomic Code) [21] pour un traitement détaillé de la structure atomique, niveau par niveau et le code SCO [22] qui s'impose lorsque le nombre de configurations est élevé et que celles-ci conduisent à un spectre dans lequel les raies ne sont pas résolues.

Intéressons-nous aux transitions entre niveaux atomiques discrets. Les plus intenses étant les transitions dipolaires électriques.

1.3.4 Transitions dipolaires électriques E1

L'intensité des transitions dipolaires électriques s'exprime à l'aide des éléments de matrice de l'opérateur moment dipolaire électrique \mathbf{D} : $\langle \gamma J M | \mathbf{D} | \gamma' J' M' \rangle$.

On définit la force de raie $S(\gamma J; \gamma' J')$ entre les niveaux γJ et $\gamma' J'$ par :

$$S(\gamma J; \gamma' J') = \sum_{MM'} |\langle \gamma J M | \mathbf{D} | \gamma' J' M' \rangle|^2 = |(\gamma J || D || \gamma' J')|^2, \quad (1.22)$$

où $|(\gamma J || D || \gamma' J')|$ est un élément de matrice réduit. On peut alors exprimer la probabilité de transition radiative A et la force d'oscillateur f :

$$A(\gamma J; \gamma' J') = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} \frac{1}{[J]} S(\gamma J; \gamma' J'), \quad (1.23)$$

$$f(\gamma J; \gamma' J') = -\frac{2m}{3\hbar e^2} \frac{\omega}{[J]} S(\gamma J; \gamma' J'), \quad (1.24)$$

où ω est la pulsation associée à la transition entre les niveaux γJ et $\gamma' J'$. La force d'oscillateur est sans dimension alors que A est homogène à l'inverse d'un temps.

1.4 Physique des plasmas

Un plasma est composé d'électrons libres, de densité N_e , et d'ions dans divers états de charge ze ($z = 1, 2 \dots Z - 1$)². Si on appelle N_z la densité d'ions de charge ze , on peut écrire la relation :

$$N_e = \sum_{z=1}^{Z-1} N_z z = N_i \bar{Z} \quad (1.25)$$

où \bar{Z} est la charge moyenne de l'ion et N_i la densité ionique totale.

La densité N_z est donné par

$$N_z = \sum_k N_z^{(k)}, \quad (1.26)$$

où $N_z^{(k)}$ est la (densité de) population du niveau k de l'ion de charge ze .

L'état du plasma est déterminé par la densité électronique, les températures électronique et ionique et les populations $N_z^{(k)}$. Ces quantités dépendent du temps et de la position. La connaissance des $N_z^{(k)}$ passe par le développement d'un modèle atomique du plasma. L'atome optiquement actif interagit avec les particules chargées du bain thermique (plasma) et avec les photons du champ électromagnétique. Dans le premier cas, l'interaction est réalisée à travers des processus collisionnels impliquant les électrons libres. Cette interaction dépend de la densité et de la température électronique. Dans le deuxième cas, ce sont les photons qui induisent des processus radiatifs. La répartition des électrons liés sur les niveaux atomiques s'explique par un certain nombre de processus que nous détaillerons dans la section 1.4.1. Ces processus sont représentés par des taux qui interviennent dans les équations de population des niveaux atomiques. Ils dépendent de la densité et de la température. Les principaux processus qui peuplent ou dépeuplent un niveau atomique sont :

- la désexcitation radiative ou émission spontanée,
- l'excitation collisionnelle et le processus inverse, la désexcitation collisionnelle, qui résultent d'un choc entre l'ion émetteur et un électron libre,

2. On notera que $z=0$ (resp. Z) correspond à l'atome neutre (resp. atome complètement épluché).

- l’ionisation collisionnelle et le processus inverse, la recombinaison à trois corps
- la recombinaison radiative et le processus inverse, la photoinisation
- la recombinaison diélectronique et le processus inverse, l’autoionisation
- l’absorption et l’émission induite

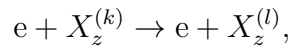
Les populations des niveaux de tous les ions sont solutions d’un système d’équations différentielles qui fait intervenir les taux des divers processus microscopiques. Il faut donc calculer les taux des processus microscopiques et ensuite résoudre le système d’équations de population. Le deuxième calcul passe par un modèle collisionnel-radiatif (CR). Lorsque le nombre de niveaux est grand le calcul CR devient vite prohibitif. Il faut donc recourir à des approximations sur l’état d’équilibre du plasma.

1.4.1 Processus collisionnels

Les processus qui nous intéressent ici mettent en jeu un électron libre et l’atome optiquement actif. On distingue l’excitation et la désexcitation collisionnelles, la recombinaison diélectronique et l’autoionisation, ... La connaissance des taux est d’un intérêt majeur.

a Excitation collisionnelle

L’excitation collisionnelle (EC) est un processus dans lequel l’électron libre cède une partie de son énergie cinétique pour faire passer l’atome optiquement actif à un niveau lié d’énergie supérieure. On représente ce processus par la réaction :



où k et l désignent les niveaux impliqués dans la transition. S’agissant d’une excitation, on a $E_l > E_k$.

L’EC est caractérisée par la section efficace σ_{kl} . On définit la force de collision Ω_{kl} par [23]

$$\Omega_{kl} = \frac{\sigma_{kl}}{\pi a_0^2} g_k \frac{\epsilon_k}{I_H}, \quad (1.27)$$

où g_k est le poids statistique du niveau inférieur de la transition, ϵ_k l’énergie de l’électron incident et I_H le Rydberg ($I_H=13.6057$ eV). La force de collision est sans dimension et présente l’avantage de la symétrie entre état initial et état final.

Dans la figure 1.13 nous avons représenté une section efficace d’EC en fonction de l’énergie cinétique du projectile. La section efficace a été calculée à l’aide de la chaîne de codes HULLAC [21].

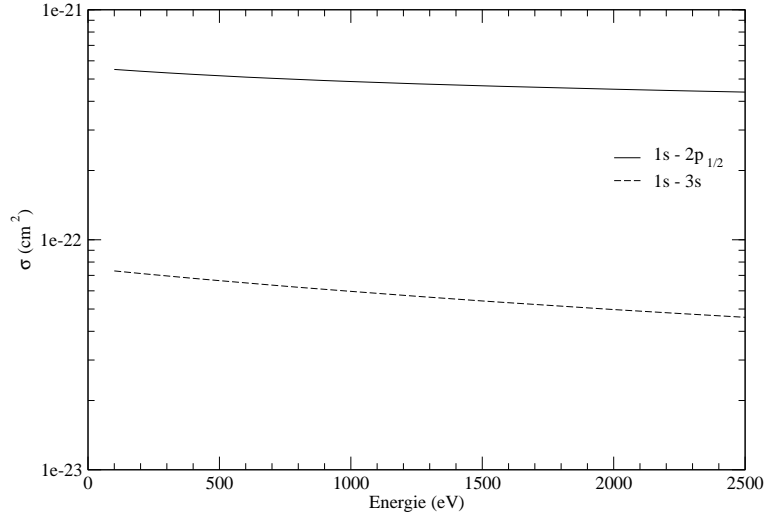
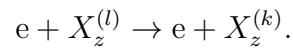


FIGURE 1.13: Section efficace d'excitation collisionnelle des transitions $1s - 3s$ et $1s - 2p_{1/2}$ de Ar XVIII.

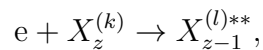
b Désexcitation collisionnelle

La désexcitation collisionnelle (DC) est le processus inverse de l'excitation collisionnelle. On la représente par

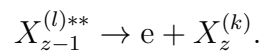


c Recombinaison diélectronique et autoionisation

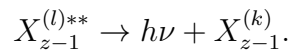
La recombinaison diélectronique, représentée par



donne naissance à un état ionique doublement excité mais instable. Cet état se désexcite soit par autoionisation vers un des états d'excitation de l'ion initial :

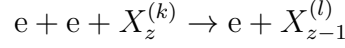


soit par émission d'un photon :

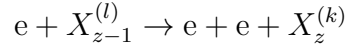


d Recombinaison à trois corps et ionisation collisionnelle

Il peut arriver que l'ion entre en collision avec deux électrons libres. Un électron peut alors être capturé par l'ion qui passe de l'état de charge z à l'état de charge $z - 1$:



Le processus inverse :



est l'ionisation collisionnelle.

1.4.2 Processus radiatifs

Dans cette partie, on se concentrera sur les processus radiatifs entre deux états liés du même ion. On distingue les processus d'émission et d'absorption.

a Emission spontanée

L'atome actif émet un photon et son état interne change. Il passe de l'état ψ_l à l'état ψ_k (Eq. 1.11) :

$$\psi_l \rightarrow \psi_k + h\nu_{lk}$$

Lors de cette transition, son énergie passe de E_l à l'énergie E_k . La conservation de l'énergie implique :

$$E_l - E_k = h\nu_{lk},$$

où ν_{lk} est la fréquence du photon émis.

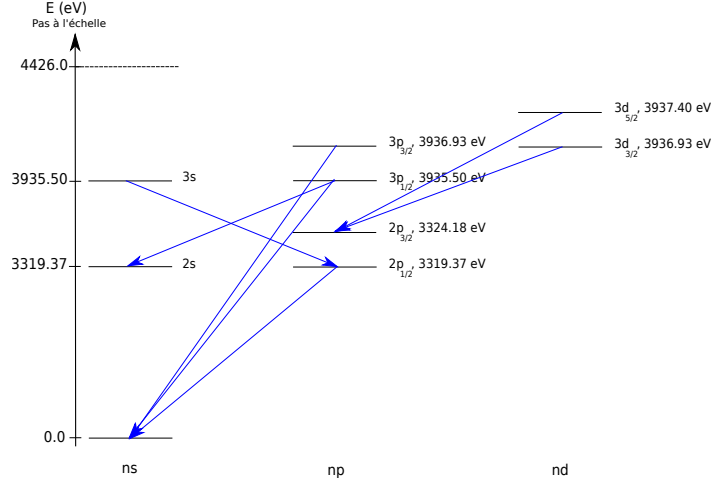
Le taux de ce processus, parfois appelé probabilité d'émission spontanée ou coefficient d'Einstein, est noté A_{lk} ³.

Transition	ΔE (eV)	A (s ⁻¹)
$3s - 2p_{1/2}$	616.1	2.224×10^{11}
$3p_{3/2} - 1s$	3937.0	1.767×10^{13}
$3p_{1/2} - 2s$	616.1	2.374×10^{12}
$3p_{1/2} - 1s$	3936.0	1.725×10^{13}
$2p_{1/2} - 1s$	3319.0	6.480×10^{13}
$3d_{5/2} - 2p_{3/2}$	613.2	6.792×10^{12}
$3d_{3/2} - 2p_{3/2}$	612.7	1.125×10^{12}

TABLE 1.3: Énergie ΔE et coefficient d'Einstein A de quelques transitions E1 de Ar XVIII calculés à l'aide du code HULLAC.

Dans la table 1.3 on donne la différence d'énergie entre les deux niveaux de la transition et le coefficient d'Einstein correspondant. La figure 1.14 montre le diagramme en énergie de Ar XVIII et quelques transitions dipolaires électriques.

3. Le taux est donné par l'équation 1.23 : $l \equiv \gamma J, k \equiv \gamma' J'$

FIGURE 1.14: Diagramme en énergie de Ar^{17+} .

b Emission induite et absorption

Un champ électromagnétique intense de fréquence ν peut induire une transition radiative d'un niveau l vers un niveau k d'énergie inférieure, si $\nu = (E_l - E_k)/h$ et si les règles de sélection sont vérifiées. Ce processus d'émission induite est schématisé par :

$$h\nu + X_z^{(l)} \rightarrow X_z^{(k)} + h\nu + h\nu.$$

Le photon émis a les mêmes caractéristiques (énergie, polarisation, direction) que le photon incident. Cette transition est caractérisée par le coefficient d'Einstein B_{lk} qui dépend de la fréquence ν des photons incidents. On a :

$$B_{lk} = \frac{c^3}{8\pi h\nu^3} A_{lk}. \quad (1.28)$$

Un photon du champ électromagnétique peut être absorbé si les deux conditions précédentes sont vérifiées. Ce processus est schématisé par :

$$X_z^{(l)} + h\nu \leftarrow h\nu + h\nu + X_z^{(k)}.$$

La probabilité de ce processus est représentée par le coefficient d'Einstein pour l'absorption B_{kl} :

$$B_{kl} = \frac{g_l}{g_k} B_{lk}. \quad (1.29)$$

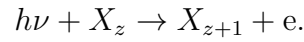
Pour le niveau l les taux correspondants à ces deux processus sont :

$$-B_{lk}\rho(\nu, \mathbf{u}) \quad B_{kl}\rho(\nu, \mathbf{u}),$$

où \mathbf{u} et $\rho(\nu, \mathbf{u})$ désignent respectivement le vecteur unitaire de la direction de propagation et la densité spectrale d'énergie. Dans la suite de ce travail, le processus d'absorption joue un rôle très important. L'émission induite ne sera pas considérée.

c Photoionisation et recombinaison radiative

La photoionisation et la recombinaison radiative (RR) sont des processus inverses l'un de l'autre. Dans le premier processus, un photon ionise l'ion de charge z . L'état final est composé d'un ion de charge $z + 1$ et d'un électron libre :



On peut trouver une expression de la section efficace dans l'ouvrage de H. R. Griem [24]. Dans la figure 1.15 nous avons représenté la section efficace de RR de l'argon en fonction de l'énergie cinétique de l'électron libre. Les états finaux de l'argon hydrogénoïde considérés sont $1s$, $3s$ ou $2p_{1/2}$. La section efficace de la RR vers l'état fondamental varie peu avec l'énergie de l'électron libre.

L'ensemble des processus –collisionnels et radiatifs– que nous avons décrits sont schématisés dans la figure 1.16.

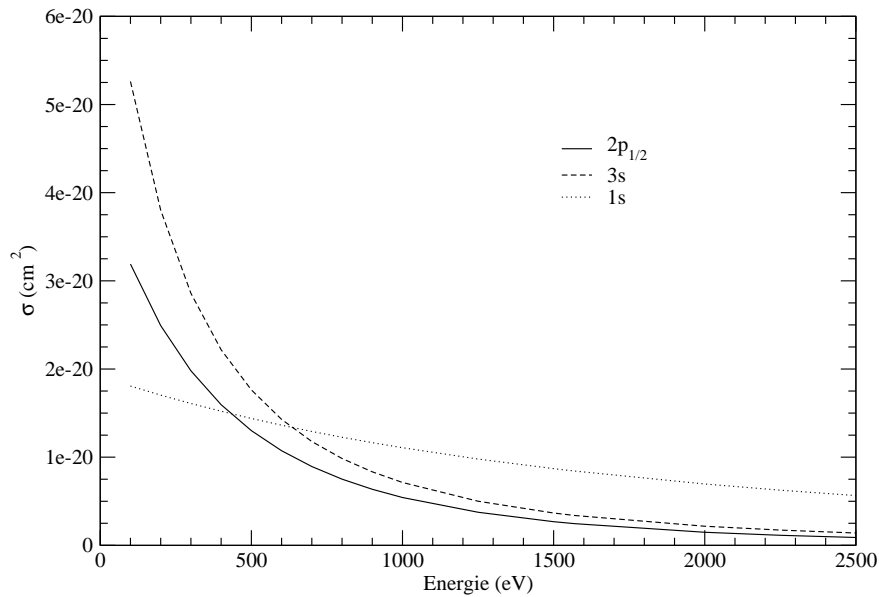


FIGURE 1.15: Section efficace de recombinaison radiative : $\text{Ar}^{18+} \rightarrow \text{Ar}^{17+}$.

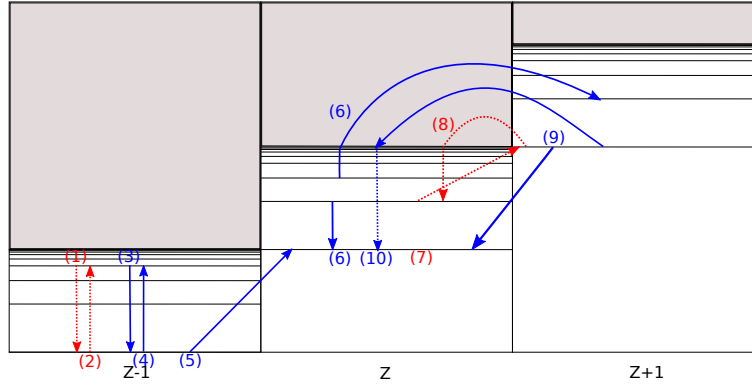


FIGURE 1.16: Processus atomiques dans les plasmas chauds. Flèches rouges : processus radiatifs, flèches bleues : processus collisionnels. (1) Désexcitation radiative, (2) Excitation radiative, (3) Désexcitation collisionnelle, (4) Excitation collisionnelle, (5) Ionisation collisionnelle, (6) Autoionisation, (7) Photoionisation, (8) Recombinaison radiative, (9) Recombinaison à trois corps, (10) Recombinaison diélectro-nique

1.4.3 Equilibre thermodynamique

a Equilibre détaillé

L'équilibre détaillé dans un plasma est réalisé lorsque tout processus microscopique est exactement équilibré par son processus inverse. Le rayonnement émis est complètement réabsorbé et le plasma émet alors un rayonnement de corps noir. Dans ce cas (idéal) les lois de Planck, de Maxwell, de Boltzmann et de Saha s'appliquent. Les collisions électron-électron sont suffisamment nombreuses pour que les électrons soient en équilibre de Maxwell entre eux, ce qui permet de définir une température électronique T_e . On peut dire la même chose des ions et définir une température ionique T_i . Cependant, l'équilibre entre électrons et ions d'une part, et entre les particules et le rayonnement d'autre part est difficile à atteindre. L'équilibre détaillé est rarement réalisé.

La loi de Boltzmann nous permet d'exprimer facilement certains taux. En particulier, le taux d'excitation collisionnelle. Pour cela, on définit également la force de collision effective Υ à la température T_e (Ω_{kl} définit par la formule 1.27) :

$$\Upsilon_{kl} = \int_0^\infty \Omega_{kl} \exp(-\epsilon_l/k_B T_e) d(\epsilon_l/k_B T_e), \quad (1.30)$$

où ϵ_l est l'énergie de l'électron libre après l'excitation. Nous verrons plus loin que les divers processus sont représentés par leurs taux respectifs dans les codes collisionnels-radiatifs. Le coefficient de taux d'EC s'écrit :

$$q_{kl} = 2\pi^{1/2} \alpha c a_0^2 \left(\frac{I_H}{k_B T_e} \right)^{1/2} \frac{\Upsilon_{kl}}{g_k} \exp(-\Delta E / k_B T_e), \quad (1.31)$$

où $\Delta E = E_l - E_k$, α est la constante de structure fine et c la vitesse de la lumière dans le vide. Pour avoir le taux d'EC, il faut multiplier le coefficient de taux par la densité électronique.

L'EC est équilibrée par la désexcitation collisionnelle (DEC). On peut alors exprimer le coefficient de taux de DEC :

$$q_{lk} = q_{kl} \frac{g_k}{g_l} \exp(\Delta E / k_B T_e), \quad (1.32)$$

b Equilibre thermodynamique local

Le plasma peut être *localement* à l'équilibre thermodynamique. On parle alors d'équilibre thermodynamique local (ETL). Cet équilibre est réalisé lorsque la densité électronique est élevée. Ainsi, tout photon émis est réabsorbé localement : tous les processus radiatifs se compensent. Dans ce système, on peut avoir des gradients de densité et de température mais pour un couple de densité et de température définis localement, on a l'équilibre thermodynamique. Le principe du bilan détaillé est vérifié uniquement par les processus collisionnels.

Dans ce cas, le plasma peut être modélisé simplement : les vitesses des électrons libres sont données par une distribution maxwellienne :

$$dN_v = N_e \left(\frac{m_e}{2\pi k_B T_e} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T_e}\right) 4\pi v^2 dv, \quad (1.33)$$

où dN_v est le nombre d'électrons par unité de volume dont la vitesse v ($v = \|\mathbf{v}\|$) est comprise entre v et $v + dv$. Les niveaux d'un ion de charge ze sont en équilibre de Boltzmann et on peut écrire :

$$\frac{N_z^{(k)}}{N_z^{(l)}} = \frac{g_z^{(k)}}{g_z^{(l)}} \exp\left(-\frac{E_k - E_l}{k_B T_e}\right). \quad (1.34)$$

La distribution des populations ioniques, suivant les états fondamentaux f , est donnée par l'équation de Saha :

$$\frac{N_{z+1}^{(f)} N_e}{N_z^{(f)}} = \frac{2(2\pi m_e k_B T)^{3/2} g_{z+1}^{(f)}}{h^3 g_z^{(f)}} \exp\left(-\frac{\Gamma_z}{k_B T_e}\right), \quad (1.35)$$

où $N_{z+1}^{(f)}$ est la population de l'état fondamental de l'ion de charge $(z+1)e$ et Γ_z le potentiel d'ionisation du niveau fondamental de l'ion de charge ze .

Les équations de population des niveaux (Eq. 1.34) et des ions (Eq. 1.35) peuvent se mettre sous une forme qui fait intervenir des fonctions de partition (voir Annexe B).

Une condition nécessaire mais non suffisante pour que le plasma soit à l'ETL a été donnée par McWhirter [25]. Cette condition porte sur la densité électronique :

$$N_e \geq 1.7 \times 10^{14} T_e^{1/2} \Delta E_{kl}, \quad (1.36)$$

où la densité s'exprime en cm^{-3} et la température électronique et la différence d'énergie entre les niveaux k et l en eV.

c Equilibre coronal

Lorsque la densité est basse, la température élevée et le plasma optiquement mince, trois processus dominent les autres. Il s'agit de l'ionisation collisionnelle, la recombinaison radiative et l'autoionisation (cf. 1.4.1). La recombinaison à trois corps, proportionnelle à N_e^2 , est négligeable devant la recombinaison radiative et, lorsque Z est élevé, devant la recombinaison diélectronique. Les populations des niveaux liés sont déterminées par l'excitation collisionnelle et l'émission spontanée. A l'état stationnaire, on a

$$N_e q_{fk} N_z^{(f)} = A_{kf} N_z^{(f)},$$

où $N_e q_{fk}$ et A_{kf} sont respectivement les taux d'EC du fondamental vers l'état excité k et d'émission spontanée de cet état vers le fondamental.

L'émission spontanée domine l'EC. Pour un niveau excité l , on peut alors écrire :

$$N_e \sum_k q_{kl} \leq \sum_{k (E_k < E_l)} A_{lk}.$$

Comme la densité électronique est basse, les populations des niveaux excités seront faibles. Ainsi, la population d'un ion est pratiquement égale à la population du niveau fondamental.

C'est le bilan entre l'ionisation collisionnelle et la recombinaison radiative qui détermine les $N_z^{(f)}$.

Les populations des états fondamentaux vérifient les équations :

$$\begin{aligned} \frac{dN_z^{(f)}}{dt} = & -N_e S_{z \rightarrow z+1} N_z^{(f)} - N_e R_{z \rightarrow z-1} N_z^{(f)} \\ & + N_e R_{z+1 \rightarrow z} N_{z+1}^{(f)} + N_e S_{z-1 \rightarrow z} N_{z-1}^{(f)}, \end{aligned} \quad (1.37)$$

où $R_{z+1 \rightarrow z}$ et $R_{z \rightarrow z-1}$ sont les coefficients de taux de recombinaison radiative et $S_{z \rightarrow z+1}$ et $S_{z-1 \rightarrow z}$ les coefficients de taux d'ionisation collisionnelle.

Cet équilibre est réalisé dans la couronne solaire et dans les plasmas de tokamaks.

Lorsqu'une transition entre deux niveaux d'un ion s'accompagne d'une émission ou d'une absorption de rayonnement, l'intensité émise ou absorbée n'est pas monochromatique. Son spectre montre un élargissement des raies qui dépend des champs électriques qui règnent au sein du plasma dans lequel se trouve l'ion actif. Divers mécanismes physiques contribuent à cet élargissement spectral.

1.4.4 Elargissement de raie

Limitons-nous à une transition radiative entre les niveaux atomiques l et k d'énergies respectives E_l et E_k . Si on ignore tout phénomène d'élargissement spectral, la transition se produit avec absorption ou émission d'un photon d'énergie $E_l - E_k$ et de fréquence $\nu_0 = (E_l - E_k)/h$.

Trois mécanismes participent majoritairement à l'élargissement des raies. On distingue :

- a. l'élargissement Doppler
- b. l'élargissement naturel
- c. l'élargissement Stark

a Elargissement Doppler

L'élargissement Doppler est dû à l'agitation thermique des ions actifs. Il augmente avec la température ionique et peut devenir le mécanisme d'élargissement dominant lorsque la densité du plasma est basse, la température ionique élevée et la charge ze modérée. Si la distribution des vitesses est maxwellienne et si le processus radiatif étudié est dominé par l'effet Doppler, le profil spectral de la raie, centrée sur la fréquence ν_0 , est gaussien. Il s'écrit sous la forme :

$$\phi(\nu) = \frac{1}{\sqrt{\pi}y} \exp \left[- \left(\frac{\nu - \nu_0}{y} \right)^2 \right], \quad (1.38)$$

où $y = \nu_0(2k_B T_i / M c^2)^{1/2}$ et M désigne la masse de l'atome. La largeur à mi-hauteur (full-width at half-maximum, FWHM) est donnée par

$$\Delta\nu_D = 2(\ln 2)^{1/2} y = 2(\ln 2)^{1/2} \nu_0 \left(\frac{2k_B T_i}{M c^2} \right)^{1/2}. \quad (1.39)$$

On notera que la largeur augmente comme la racine carrée de la température ionique.

b Elargissement naturel

L'élargissement naturel est dû à la durée de vie, finie, des niveaux atomiques. On sait que l'émission spontanée augmente rapidement avec la charge ionique, comme z^4 . Ainsi, l'élargissement naturel peut devenir plus important que l'élargissement Doppler. Lorsque l'élargissement naturel domine les autres types d'élargissement, le profil spectral est Lorentzien. Il s'écrit :

$$\phi(\nu) = \frac{1}{\pi} \frac{\Delta\nu_n/2}{(\nu - \nu_0)^2 + (\Delta\nu_n/2)^2}, \quad (1.40)$$

où $\Delta\nu_n$ est la largeur naturelle. Celle-ci s'exprime en fonction des durées de vie des niveaux impliqués (l : niveau supérieur, k : niveau inférieur) de la transition radiative. On a

$$\Delta\nu_n = \sum_{l'} A_{ll'} + \sum_{k'} A_{kk'}, \quad (1.41)$$

où les énergies des niveaux l' et k' sont telles que $E_{l'} < E_l$ et $E_{k'} < E_k$, respectivement.

Lorsque ces deux mécanismes jouent un rôle non négligeable, le profil spectral est représenté par le produit de convolution d'une fonction gaussienne et d'une fonction lorentzienne. Le résultat de cette convolution est connu sous le nom de profil de Voigt.

Dans la plupart des cas qui nous intéressent, l'élargissement naturel est faible devant les autres types d'élargissement.

c Profil de Voigt

Le produit de convolution de deux fonctions réelles ou complexes f et g est défini par :

$$(f \otimes g)(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x-t)g(t)dt = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)g(x-t)dt.$$

Si on applique cette définition aux deux profils (Eq. 1.38, Eq. 1.40), on obtient le profil de Voigt :

$$\phi(\nu) = \frac{\sqrt{\ln 2}}{\pi^{3/2}} a \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp\left[-\left(\frac{\eta-\nu_0}{y}\right)^2\right]}{(\nu - \eta - \nu_0)^2 + (\Delta\nu_n/2)^2} d\eta, \quad (1.42)$$

où a est le rapport des deux largeurs de raie : $a = \Delta\nu_n/\Delta\nu_D$.

Il est facile de montrer que le profil de Voigt s'écrit aussi :

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{y} H(x, u), \quad (1.43)$$

où H est la fonction de Voigt et $u = a\sqrt{\ln 2}$. Cette fonction est donnée par :

$$H(x, u) = \frac{u}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-t^2)}{(x-t)^2 + u^2} dt.$$

Si la température ionique du plasma est connue, on a la largeur Doppler, c'est-à-dire y . Si de plus la valeur de la largeur naturelle est connue, on a a , et le calcul du profil de Voigt se réduit à celui de la fonction de Voigt. Plusieurs auteurs, dont Humlicek [26], ont proposé des algorithmes efficaces pour calculer la fonction de Voigt.

Lorsque la densité du plasma est élevée, le champ électrique dû aux particules chargées lève la dégénérescence des niveaux, ce qui produit un élargissement spectral supplémentaire connu sous le nom d'élargissement Stark.

d Elargissement Stark

L'élargissement Stark est dû au champ électrique généré par les particules chargées. Ce champ dépend du temps. Il est constitué :

- d'une composante électronique qui est caractérisée par des fluctuations rapides,
- d'une composante ionique qui est caractérisée par des fluctuations lentes.

Les électrons ayant des vitesses beaucoup plus grandes que les ions, le traitement de l'effet Stark sera différent pour les deux composantes.

Dans les théories standard, les ions sont supposés quasi-statiques : leur effet est modélisé par une distribution de micro-champ statique [27]. Le champ électrique ionique lève la dégénérescence des niveaux de nombres quantiques l différents. A une transition radiative donnée correspondront alors plusieurs composantes Stark (nommées canaux radiatifs). Dans certains cas, l'approximation statique ne s'applique pas, et il importe de tenir compte de la dynamique des ions en modifiant les théories standard. Pour considérer les fluctuations du champ ionique, on applique un opérateur d'évolution supplémentaire modélisé par un processus de marche au hasard (Markovien, etc.). Ce dernier caractérise les fluctuations collectives du micro-champ ionique [28].

L'effet de la composante électronique est modélisé par des collisions électrons-atome actif. Le traitement le plus simple s'appuie sur la théorie d'impact de Lorentz dans laquelle les collisions sont instantanées et séparées dans le temps (collision binaire). Chaque collision interrompt complètement le train d'onde de lumière. La loi de probabilité correspondante à ce processus physique est un processus de Poisson. Lorsque seules les collisions binaires participent à la largeur électronique, on montre que celle-ci est proportionnelle à la densité électronique. L'élargissement électronique est traité par les théories unifiées [29, 30] ou à l'approximation d'impact [31, 32]. Les codes que nous présenterons dans les chapitres 2 et 3 utilisent l'approximation d'impact. Les collisions électron-atome actif élargissent chaque composante Stark. Celles-ci présentent un profil Lorentzien.

La largeur Stark augmente avec le nombre quantique principal n : plus les niveaux sont excités, plus l'interaction avec le noyau est faible. L'interaction avec le champ électrique peut alors devenir importante. Le calcul de la largeur de raie est complexe et il existe très peu de formules approchées.

e Exemple

Pour mettre en évidence les mécanismes d'élargissement, nous avons calculé, à l'aide d'un code de profil de raie [28] que nous présenterons dans la suite, le profil spectral de Al^{9+} . La base atomique est générée par le code atomique relativiste MCDF [?]. La configuration fondamentale est $1s^2 2s^2$. Nous nous sommes limités à $n = 3$.

La figure 1.17 montre le profil spectral de Al^{9+} à la température de 50 eV. On a représenté le profil élargi uniquement par les collisions électroniques et le profil

de Voigt. Deux densités électroniques ont été considérées : 10^{21} et 10^{22} cm^{-3} . A la densité la plus faible, c'est l'élargissement Doppler qui domine. Lorsque la densité est égale à 10^{22} cm^{-3} , c'est l'élargissement électronique qui domine. Nous avons vérifié que l'élargissement dû au microchamp ionique était négligeable.

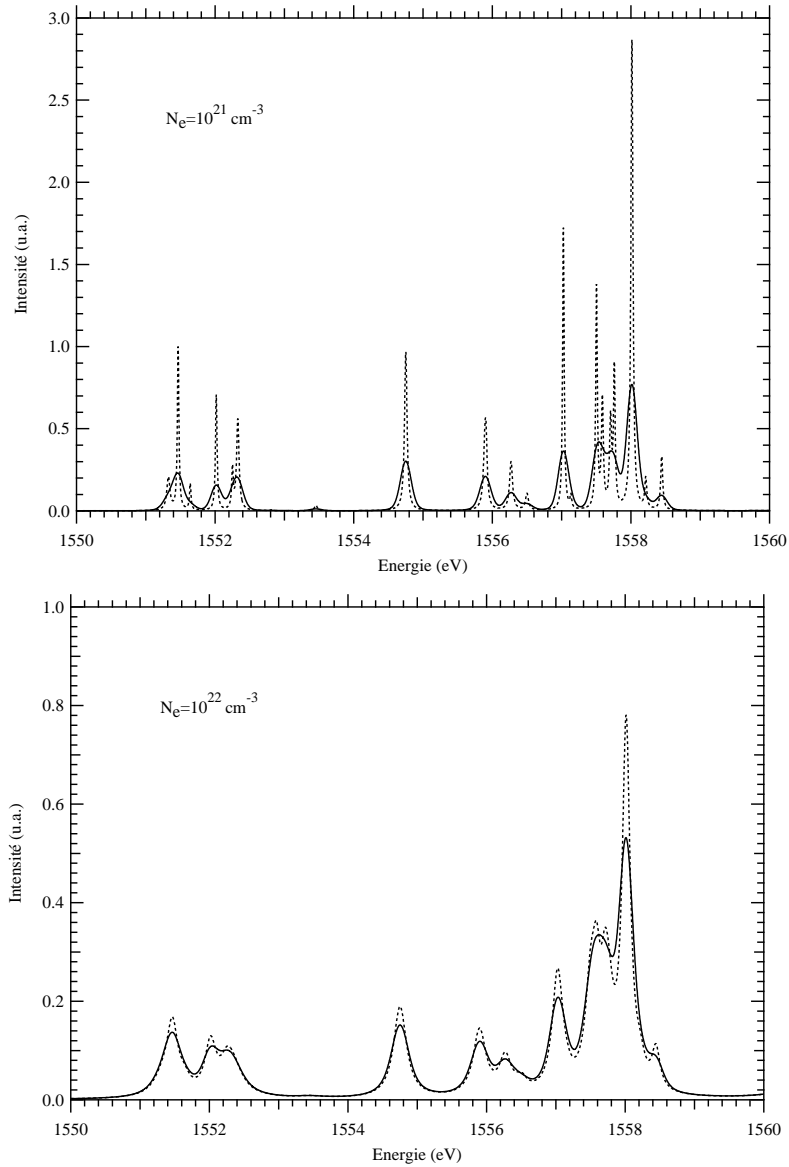


FIGURE 1.17: Profil d'intensité de Al^{9+} en unités arbitraires. $T_e = T_i = 50$ eV. Courbes discontinues : élargissement -Stark- électronique seul, courbes pleines : élargissement électronique + élargissement Doppler (Voigt).

1.5 Conclusion

Nous avons présenté les deux modes de fusion et situé notre étude sur les propriétés radiatives des plasmas chauds. Nous avons expliqué les mécanismes collisionnels et radiatifs qui interviennent dans la cinétique de population des ions actifs. Ceux-ci sont perturbés par le plasma environnant. Cette perturbation se traduit par un effet important sur les profils en émission ou absorption, qu'il faut prendre en compte de la manière la plus réaliste possible. Une description des différents équilibres a été faite. Nous avons également fait un bref rappel sur les divers mécanismes d'élargissement spectral. Dans la suite, nous définirons des grandeurs physiques telles que l'opacité et l'émissivité, et nous verrons que ces mécanismes y jouent un rôle.

Appendices

ANNEXE A

Atome hydrogénoïde isolé

Pour un atome hydrogénoïde l'Hamiltonien non-relativiste s'écrit simplement :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r), \quad (\text{A.1})$$

où $V(r)$ est l'énergie potentielle d'interaction entre l'électron et le noyau de charge Ze :

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}.$$

La symétrie du système étudié impose le choix du système de coordonnées sphériques : (r, θ, ϕ) .

L'Hamiltonien s'écrit alors :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] + V(r),$$

ou, en introduisant le moment cinétique orbital :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{\mathbf{L}^2}{r^2} \right] + V(r). \quad (\text{A.2})$$

L'équation de Schrödinger s'écrit alors :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r \psi - \frac{\mathbf{L}^2}{r^2} \psi \right] + V(r)\psi = E\psi. \quad (\text{A.3})$$

La résolution de cette équation donne les énergies E et les fonctions d'onde ψ . Si on exprime r en unité a_0 (rayon de la première orbite de Bohr) et les énergies en Rydberg, l'équation de Schrödinger s'écrit simplement

$$\left[-\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\mathbf{L}^2}{r^2} + V(r) \right] \psi = E\psi. \quad (\text{A.4})$$

La séparation des variables permet d'exprimer les fonctions d'onde sous la forme :

$$\psi_{nlm_l m_s}(r, \theta, \phi, s_z) = \frac{1}{r} P_{nl}(r) Y_{lm_l}(\theta, \phi) \sigma_{m_s}(s_z), \quad (\text{A.5})$$

où les nombres quantiques n et l sont tels que $n \in \mathbb{N}^*$ et $0 \leq l \leq n - 1$. P_{nl} est la fonction radiale normalisée et Y_{lm_l} une harmonique sphérique. Comme

$$\mathbf{L}^2 \psi = l(l+1)\hbar^2 \psi$$

l'équation de Schrödinger se réduit à l'équation radiale :

$$\left[-\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E \right] \psi = 0. \quad (\text{A.6})$$

La résolution de cette équation donne les énergies (en Rydbergs) des états liés :

$$E = -\frac{Z^2}{n^2} \quad (\text{A.7})$$

et les fonctions radiales :

$$P_{nl}(r) = - \left[\frac{Z(n-l-1)!}{n^2[(n+1)!]^3} \right] \left(\frac{2Zr}{n} \right)^{l+1} e^{-\frac{Zr}{n}} L_{n+l}^{2l+1} \left(\frac{2Zr}{n} \right), \quad (\text{A.8})$$

où L_{n+l}^{2l+1} désigne les polynômes de Laguerre.

Lorsque les effets relativistes sont négligés, l'énergie est dégénérée.

ANNEXE B

Lois de Boltzmann et loi de Saha-Boltzmann

Nous nous proposons d'exprimer les densités de population des niveaux liés d'un ion à l'aide des fonctions de partition. Les densités de population de deux niveaux k et l d'un ion donné sont reliées, à l'équilibre thermodynamique, par la loi de Boltzmann :

$$\frac{N^{(k)}}{N^{(l)}} = \frac{g^{(k)}}{g^{(l)}} \exp\left(-\frac{E_k - E_l}{k_B T}\right) \quad (\text{B.1})$$

où les g sont les poids statistiques des niveaux. La densité de population totale est donnée par

$$N_z = \sum_k N^{(k)} = \frac{N^{(f)}}{g^{(f)}} \sum_k g^{(k)} \exp\left(-\frac{E_k - E_f}{k_B T}\right) = \frac{N^{(f)}}{g^{(f)}} Q,$$

où f désigne le niveau fondamental et où

$$Q = \sum_k g^{(k)} \exp\left(-\frac{E_k - E_f}{k_B T}\right) \quad (\text{B.2})$$

est la fonction de partition. La population du niveau k s'écrit donc

$$N^{(k)} = \frac{N_z}{Q} g^{(k)} \exp\left(-\frac{E_k - E_f}{k_B T}\right). \quad (\text{B.3})$$

On a

$$Q(T = 0) = g^{(f)}.$$

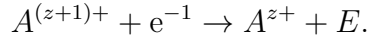
Remarque : La suite des niveaux d'un atome ou d'un ion est infinie. En effet, au voisinage de l'énergie d'ionisation, l'électron le plus extérieur peut occuper des orbitales de nombre quantique principal aussi grand que l'on veut, appelées orbitales de Rydberg.

Si chaque ion est isolé en permanence, il est nécessairement au niveau fondamental, et $Q = g^{(f)}$. En fait, les ions ne sont pas isolés et leurs niveaux sont perturbés par les ions voisins. Il en résulte que la suite des niveaux est limitée : le nombre quantique principal est fini : $n \leq n_{\max}$.

Pour deux types d'ions du même élément, de charges respectives ze et $(z+1)e$, les densités de population totales sont liées, à l'équilibre thermodynamique, par

$$\frac{N_{z+1}}{N_z} = \frac{1}{N_e} \frac{2Q_{z+1}(T)}{Q_z(T)} \frac{(2\pi m k_B T)^{3/2}}{h^3} \exp(-E_z/k_B T) \quad (\text{B.4})$$

où E_z est l'énergie d'ionisation de l'ion de charge ze . Cette loi est analogue à une loi d'action de masse puisqu'elle exprime que le rapport $N_{z+1}N_e/N_z$ dépend de la température, surtout en $\exp(-E/k_B T)$ (loi d'Arrhénius), où E est l'énergie de la réaction chimique :



On peut aussi l'écrire pour les niveaux l et k des deux ions considérés, en utilisant la loi de Boltzmann. Il suffit de combiner les équations B.1 et B.4 :

$$\frac{N_{z+1}^{(k)}}{N_z^{(l)}} = \frac{1}{N_e} \frac{2g_{z+1}^{(k)}}{g_z^{(l)}} \frac{(2\pi m k_B T)^{3/2}}{h^3} \exp\left(-\frac{E_{z+1}^{(k)} - E_z^{(l)}}{k_B T}\right). \quad (\text{B.5})$$

Bibliographie

- [1] G. Gamow and C. L. Critchfield, Theory of atomic nucleus and nuclear energy-sources, Clarendon Press, Oxford (1949).
- [2] H. S. Bosch and G. M. Hale, Nucl. Fusion **32**, 611 (1992).
- [3] J. D. Lawson, Proc. Phys. Soc., Section B **70**, 6 (1957).
- [4] J. Nuckolls et al, Nature **239**, 139 (1972).
- [5] S. E. Bodner, M. H. Emery and J. H. Gardner, Plasma Physics and Controlled Fusion **29**, 1333 (1987).
- [6] P.-E. Masson Laborde, Modélisation réaliste de l'instabilité de diffusion Brillouin stimulée, Ecole Polytechnique (2006).
- [7] J. Lindl, Phys. Plasmas **2**, 3933 (1995).
- [8] M. Tabak, J. Hammer, M. E. Glinsky, W. L. Kruer, S. C. Wilks, J. Woodworth, E. M. Campbell, M. D. Perry, and R. J. Mason, Phys. Plasmas **1**, 1626 (1994).
- [9] D. Batani, S. Baton, M. Koenig, P. Guillou, B. Loupiau, T. Vinci, C. Rousseaux, L. Gremillet, A. Morace, R. Redaelli, M. Nakatsutsumi, R. Kodama, N. Ozaki, T. Norimatsu, J. Rassuchine, T. Cowan, F. Dorchies, C. Fourment, J. J. Santos, J. of Phys. Conf. Series **112**, 022048 (2008).
- [10] A. J. Schmitt and Bedros B. Afeyan, Phys. Plasmas **5**, 503 (1998).
- [11] M. E. Cuneo, R. A. Vesey, J.L Porter Jr., G. R. Bennett. D. L. Hanson, L. E. Ruggles, W. W. Simpson, G. C. Idzorek, W. A. Stygar, J. H. Hammer, J. J. Seamen, J. A. Torres, J. S. McGurn and R. M. Green, Phys. Rev. Lett. **88**, 215004 (2002).
- [12] L.A. Artsimovich, Nuclear Fusion, **12**, 215 (1972).
- [13] W. Chaibi, C. Blondel, L. Cabaret, C. Delsart, C. Drag and A. Simonin, NEGATIVE IONS, BEAMS AND SOURCES : Proc. of the 1st Int. Symp. on Negative Ions, Beams and Sources, AIP Conf. Proc. **1097**, 385 (2009).
- [14] R. Guirlet, A. Sirinelli, T. Parisot, R. Sabot, J.F. Artaud, C. Bourdelle, X. Garbet, P. Hennequin, G.T. Hoang, F. Imbeaux, J.L Ségui, D. Mazon and D. Villegas, Nuclear Fusion **50**, 095009 (2010).
- [15] D. Villegas, R. Guirlet, C. Bourdelle, G. T. Hoang, X. Garbet, and R. Sabot, Phys. Rev. Lett. **105**, 035002 (2010).
- [16] F. Wagner, G. Becker, K. Behringer, D. Campbell, A. Eberhagen, W. Engelhardt, G. Fussmann, O. Gehre, J. Gernhardt, G. v. Gierke, G. Haas, M. Huang, F. Karger, M. Keilhacker, O. Klüber, M. Kornherr, K. Lackner, G. Lisitano, G. G. Lister, H. M. Mayer, D. Meisel, E. R. Müller, H. Murmann, H. Niedermeyer, W. Poschenrieder, H. Rapp, H. Röhr, F. Schneider, G. Siller, E. Speth, A. Stäbler, K. H. Steuer, G. Venus, O. Vollmer and Z. Yü, Phys Rev. Lett. **49**, 1408 (1982).

-
- [17] H. A. B. Bodin and A. A. Newton, *Nuclear Fusion* **20**, 1255 (1980).
 - [18] R. D. Cowan, *The theory of atomic structure and spectra*, University of California Press (1981).
 - [19] I.I. Sobel'man, *Introduction to the Theory of Atomic Spectra*, Pergamon Press (1972).
 - [20] I. P. Grant, B. J. McKenzie, P. H. Norrington, D. F. Mayers and N. C. Pyper, *Comput. Phys. Comm.* **21**, 207 (1980).
 - [21] M. Klapisch, M. Busquet and A. Bar-Shalom, *AIP Conf. Proc.* **926**, 206 (2007).
 - [22] T. Blenski, A. Grimaldi and F. Perrot, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **65**, 91 (2000).
 - [23] M. H. Hebb and D. H. Menzel, *Astrophys. J* **92**, 408 (1940).
 - [24] H. R. Griem, *Principles of plasma spectroscopy*, Cambridge University Press (1997).
 - [25] Takashi Fujimoto and R. W. P. Mc Whirter, *Phys. Rev. A* **42**, 6588 (1990).
 - [26] J. Humlicek, *J. Quantit. Spectrosc. and Radiat. Transf.* **27**, 437 (1982).
 - [27] B. F. Rozsnyai, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **17**, 77 (1977).
 - [28] A. Calisti, F. Khelifaoui, R. Stamm, B. Talin, and R. W. Lee, *Phys. Rev A* **42**, 5433 (1990).
 - [29] D. Voslamber, *Z. Naturforsch.* **24a**, 1458 (1969).
 - [30] E. W. Smith, J. Cooper and C. R. Vidal *Phys. Rev.* **185**, 140 (1969).
 - [31] H. R. Griem, *Spectral Line Broadening by Plasmas*, New York (1974).
 - [32] M. Baranger, *Phys. Rev.* **111**, 494 (1958).

Emissivité et pertes radiatives en FCI

2.1 Introduction

Les plasmas de fusion inertielle occupent un petit volume et sont caractérisés par une forte densité. Les densités de particules (électrons, ions) ainsi que les températures (électronique et ionique) sont appelées *paramètres* plasma. Elles dépendent du temps et de la position au sein du plasma. L'émissivité et les pertes radiatives, qui dépendent fortement de ces paramètres, sont cruciales

- dans l'analyse directe du spectre expérimental dans la gamme des X. Cette analyse est pertinente dans le cas d'expériences basées sur l'approche indirecte et le Z-pinch.

- dans le transport radiatif, qui est déterminé par des coefficients d'absorption et d'émission. Ces coefficients dépendent des paramètres plasma. Une base de données sur une large gamme de températures et de densités est donc nécessaire. Les coefficients sont calculés pour des couples T_e/N_e en chaque point du plasma.

Nous nous intéresserons principalement à deux systèmes dans notre étude, en premier lieu le spectre en émission du plasma d'or dans le Hohlraum créé par le laser incident et dans un deuxième temps l'opacité des dopants injectés dans l'ablateur ainsi que celle des échantillons dans le cas du Z-pinch.

Dans ce chapitre, nous étudions l'émission (émissivité et pertes radiatives). Nous utiliserons des méthodes détaillées, très précises et prenant en compte les divers mécanismes d'élargissement étudiés dans le chapitre 1, ainsi que des méthodes statistiques dont l'avantage sur les premières est qu'elles permettent de prendre en compte un grand nombre de transitions radiatives. Les méthodes détaillées et les méthodes statistiques se complètent.

Lorsque le système optiquement actif comporte plusieurs électrons liés, l'étude de ses propriétés radiatives est complexe. A cette complexité s'ajoute celle qui est due à l'interaction du système actif avec un environnement –plasma– qui est le siège de champs électriques et dont les paramètres (densité, température) varient dans l'espace et dans le temps. Ces paramètres et la cinétique d'ionisation définissent l'état du plasma à tout instant. Nous verrons que la densité électronique, les températures électronique et ionique (dans le cas où l'équilibre thermodynamique est atteint) et les états de charge des ions jouent un rôle crucial dans l'étude spectroscopique du plasma.

On distingue les transitions radiatives lié-lié (b-b), lié-libre (b-f) et libre-libre (f-f). L'étude de la contribution b-b est celle qui nécessite les calculs les plus complexes. Dans une première partie on effectuera un calcul détaillé, raie par raie, du germanium, du carbone et de l'or, à l'aide d'un code développé au laboratoire de Physique des Interactions Ioniques et Moléculaires (Aix-Marseille Université), le code PPP. Lorsque le nombre de transitions radiatives est très grand, ce code n'est plus adapté. Dans ce cas, on utilisera un code hybride développé au CEA. Ce code combine des calculs détaillés et des calculs statistiques.

Tout calcul d'émissivité nécessite la connaissance de grandeurs atomiques telles que l'énergie des niveaux liés des ions actifs, les forces d'oscillateur des transitions radiatives mais également les sections efficaces de processus collisionnels ou radiatifs (voir Chapitre 1).

2.2 Données atomiques

Le calcul des données atomiques dépend de l'Hamiltonien choisi. Il consiste à résoudre l'équation de Schrodinger pour chaque électron lié :

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l_i(l_i + 1)}{r^2} + V_i(r) \right] \phi_i(r) = \epsilon_i \phi_i(r) \quad (2.1)$$

La fonction d'onde de l'ion actif s'écrit (voir Eq. 1.11) :

$$\psi(1, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_P \epsilon_P P \{ \phi_\alpha(1) \dots \phi_\nu(N) \}.$$

De nombreuses méthodes de résolution ont été utilisées. Les plus courantes sont les méthodes de Hartree-Fock et de Thomas-Fermi que nous allons décrire.

2.2.1 Méthode Hartree-Fock

La méthode de Hartree-Fock (HF) est basée sur le principe variationnel. Celui-ci a été développé en parallèle de la théorie des perturbations qui est peu précise pour des atomes complexes [1]. La méthode HF est basée sur les équations de Hartree-Fock qui sont déduites de l'expression de l'énergie moyenne. Nous allons expliquer brièvement cette méthode.

Considérons une configuration à N électrons d'un atome quelconque. L'énergie moyenne de l'atome sera définie ainsi :

$$E_{av} = \sum_{j=1}^N \left[E_k^j + E_n^j + \frac{1}{2} \sum_{t \neq j} E_{ee}^{jt} \right], \quad (2.2)$$

où E_k^j et E_n^j sont respectivement l'énergie cinétique et l'énergie d'interaction de l'électron j avec le noyau. E_{ee}^{jt} est l'énergie d'interaction électrique entre les électrons j et t . E_{av} peut aussi s'exprimer comme une somme sur les sous-couches. On a ainsi :

$$E_{\text{av}} = \sum_{j=1}^q w_j [E_k^j + E_n^j + \frac{1}{2}(w_j - 1)E_{ee}^{jj} + \frac{1}{2} \sum_{t \neq j}^q w_t E_{ee}^{jt}], \quad (2.3)$$

où q est la dernière sous-couche peuplée de la configuration et w_j le nombre d'électrons équivalents de la sous-couche j . On a

$$\sum_{j=1}^q w_j = N.$$

Le principe variationnel consiste à faire varier la partie radiale $P_{n_i l_i}$ de la fonction d'onde d'un électron de la sous-couche i . La variation sera notée $\delta P_{n_i l_i}$ et la variation qui en résulte pour l'énergie moyennée $\delta_i E_{\text{av}}$ est :

$$\delta_i E_{\text{av}} = w_i [\delta_i E_k^i + \delta_i E_n^i + \frac{1}{2}(w_i - 1)\delta_i E_{ee}^{ii} + \frac{1}{2} \sum_{t \neq i}^q w_t \delta_i E_{ee}^{it} + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^q w_j \delta_i E_{ee}^{ji}]. \quad (2.4)$$

On remplace les termes d'interaction électron-électron par les intégrales de Slater (voir Section 1.3.3) et on minimise $\delta_i E_{\text{av}}$. On obtient ainsi les équations de Hartree-Fock dans le cas général :

$$\left[H_0 - \frac{2Z}{r} + \sum_{j=1}^q (w_j - \delta_{ij}) \int_0^\infty \frac{2}{r_{>}} P_{n_j l_j}^2(r_2) dr_2 - (w_i - 1)A_i(r) \right] P_{n_i l_i}(r) = \lambda_i P_{n_i l_i}(r) + \sum_{j (j \neq i)}^q w_j [\delta_{l_i l_j} \lambda_{ij} + B_{ij}(r)] P_{n_j l_j}(r), \quad (2.5)$$

où λ_{ij} est un multiplicateur de Lagrange servant à l'orthogonalisation entre les fonctions d'onde $P_{n_i l_i}$ et $P_{n_j l_j}$, et λ_i un multiplicateur de Lagrange servant à la normalisation de $P_{n_i l_i}$. Les coefficients A_i et B_{ij} sont issus de l'intégrale d'échange pour des électrons équivalents à i ou non équivalents, respectivement. Ils s'écrivent

$$A_i(r) = \frac{2l_i + 1}{4l_i + 1} \sum_{k>0} \begin{pmatrix} l_i & k & l_i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \int_0^\infty \frac{2r_{\leq}}{r_{>}^{k+1}} P_{n_i l_i}^2(r_2) dr_2, \quad (2.6)$$

$$B_{ij}(r) = \frac{1}{2} \sum_k \begin{pmatrix} l_i & k & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \int_0^\infty \frac{2r_{\leq}}{r_{>}^{k+1}} P_{n_j l_j}(r_2) P_{n_j l_j}(r_2) dr_2. \quad (2.7)$$

La résolution de l'équation de Hartree-Fock pour une configuration donnée se fait en plusieurs étapes. Pour un électron de la sous-couche i , on se donne des fonctions d'essais $P_{n_j l_j}$ correspondant aux autres sous-couches. Ensuite, on calcule les différentes valeurs des opérateurs d'interaction et on estime la valeur du coefficient λ_{ij} . A_i et B_{ij} permettent de résoudre l'équation 2.5 et d'obtenir $P_{n_i l_i}$. Cette routine est répétée pour l'ensemble des valeurs de i . Cet algorithme constitue la première

étape de la méthode de Hartree-Fock. L'obtention des fonctions d'ondes radiales P_{n,l_i} se fait par itération sur la routine en réintroduisant le jeu de fonctions de l'itération précédente. La procédure s'arrête quand la fonction radiale test d'entrée est identique à la fonction de sortie et quand l'orthogonalité des fonctions de même l est validée. Les effets relativistes peuvent être pris en compte à l'aide d'un traitement perturbatif, comme c'est le cas dans le code COWAN développé à Los Alamos, ou être intégrés dans l'Hamiltonien en vue d'un traitement entièrement relativiste (méthode de Dirac-Fock [2]).

Niveaux d'énergie	Code Cowan (Hartree-Fock)	Code MCDF (Dirac-Fock)
1s	0.0	0.0
2s	1471,9795	1472,0283
2p _{3/2}	1472,9243	1472,9734
3s	1744,8464	1744,9048
3p _{3/2}	1745,1266	1745,1849

TABLE 2.1: Energie des premiers niveaux de l'ion Mg¹¹⁺ en eV.

Dans la table 2.1, on donne les énergies des premières sous-couches de l'ion Mg¹¹⁺. On note que les effets relativistes ont une influence assez faible sur l'énergie. Bien que faible (de l'ordre de 10⁻² eV), cette correction joue un rôle important dans le calcul des coefficients de transition et d'émission radiative. Lorsqu'on s'intéresse à des ions de Z élevé, les effets relativistes deviennent plus importants et la méthode MCDF est plus appropriée.

Bien que ces méthodes soient précises, il subsiste des problèmes d'orthogonalisation des fonctions d'onde si la configuration possède beaucoup d'électrons ou s'il y a beaucoup d'électrons dans des états excités. De même, l'orthogonalisation entre les fonctions d'onde globales des configurations n'est pas toujours assurée. Ces méthodes ont donc des limites liées au système étudié. Pour remédier à ce problème, des méthodes de calcul avec approximations ont été envisagées. Une méthode assez simple, couramment utilisée, est connue sous le nom de méthode de Thomas-Fermi.

2.2.2 Méthode de Thomas-Fermi

La méthode de Thomas-Fermi [3, 4] est une méthode semi-classique. Elle consiste à construire un potentiel écranté à partir d'un modèle statistique.

On modélise l'atome par une sphère de rayon R_0 et de centre le noyau. A l'intérieur de la sphère, on a N électrons dont la distribution en énergie est donnée par la statistique de Fermi-Dirac :

$$n(E) \propto \frac{1}{1 + e^{(E-\mu)/k_B T_e}}$$

où $n(E)$ est le nombre d'électrons par unité de volume dont l'énergie est comprise entre E et $E + dE$. μ désigne le potentiel chimique. La densité électronique s'écrit :

$$\rho(r) = \int_0^\infty n(E) dE. \quad (2.8)$$

On fait l'hypothèse de la symétrie sphérique, compatible avec un potentiel central, de sorte que la densité dépend uniquement de la distance r au centre de la sphère¹. On a

$$N = \int_0^{R_0} 4\pi r^2 \rho(r) dr.$$

La méthode consiste à appliquer le principe variationnel à l'énergie totale E_{tot} de l'atome :

$$E_{\text{tot}} = \int_0^{R_0} \left[\frac{3}{5} [3\pi^2 \rho(r_1)]^{2/3} - \frac{2Z}{r_1} + \frac{1}{2} \int_0^{R_0} \frac{2}{r_2} \rho(r_2) 4\pi r_2^2 dr_2 \right] \rho(r_1) 4\pi r_1^2 dr_1. \quad (2.9)$$

Dans cette équation, l'intégrale de $\rho^{2/3}$ représente l'énergie cinétique de tous les électrons. La minimisation de l'énergie totale se fait à nombre d'électrons constant. La condition à remplir est donc

$$\delta(E_{\text{tot}} - \lambda N) = 0, \quad (2.10)$$

où λ un multiplicateur de Lagrange. L'application du principe variationnel permet d'obtenir le potentiel de Thomas-Fermi $V_{\text{TF}}(r)$. Si on pose $x = r/u$, où $u = (1/4)(9\pi^2/2Z)^{1/3}$, $V_{\text{TF}}(r)$ est donné par

$$V_{\text{TF}}(r) = -\frac{2Z}{r} \chi(x) - \frac{2}{R_0} (Z - N), \quad (2.11)$$

où la fonction Φ est solution de l'équation différentielle

$$\chi''(x) = \chi^{3/2}/x^{1/2}. \quad (2.12)$$

et doit vérifier les conditions au bord de la sphère :

$$\chi(x_0) = 0,$$

$$x_0 \chi'(x_0) = -(Z - N)/Z,$$

où $x_0 = R_0/u$. Le potentiel de Thomas-Fermi V_{TF} représente l'énergie potentielle que l'on utilise pour obtenir les fonctions d'onde radiales $P_{n_i l_i}(r)$ et les énergies des sous-couches i . L'avantage de cette méthode est qu'il n'est pas nécessaire de faire des itérations avec des fonctions d'essai comme pour la méthode Hartree-Fock. De plus, la condition d'orthogonalisation des $P_{n_i l_i}(r)$ pour une valeur donnée de l est

1. E dépend de r à travers le terme d'énergie potentielle.

automatiquement satisfaite. Le terme d'échange (voir 1.20) est pris en compte dans la méthode de Thomas-Fermi-Dirac [5]. Le potentiel est alors donné par

$$V_{\text{TFD}} = -\frac{2Z}{r}\Psi(x) + \frac{1}{16\pi^2} - \frac{2}{R_0}(Z - N), \quad (2.13)$$

où Ψ est solution de l'équation

$$\Psi''(x) = x \left[\left(\frac{\Psi}{x} \right)^{1/2} + \beta_0 \right]^3, \quad (2.14)$$

où $\beta_0 = (3/2^5\pi^2Z^2)^{1/3}$. La fonction Ψ satisfait les conditions :

$$\Psi(0) = 1$$

$$\Psi(x_0) = \beta_0^2 x_0 / 16$$

$$x_0 \Psi'(x_0) - \Psi(0) = -(Z - N)/Z.$$

Les termes $1/16\pi^2$ et β_0 proviennent de l'énergie d'échange. Si on les annule, l'équation 2.14 est alors identique à l'équation 2.12. Malgré la faible précision de cette méthode, elle est couramment utilisée pour approcher les valeurs en énergie des niveaux, car elle est rapide en temps machine.

Lorsque les fonctions d'onde et les énergies des niveaux sont calculées, on peut déterminer les grandeurs utiles comme l'émissivité ou les pertes radiatives. Le calcul détaillé -raie par raie- de l'émissivité sera fait à l'aide d'un code développé au laboratoire de Physique des Interactions Ioniques et Moléculaires (Aix-Marseille Université) [6]. Dans la section ci-dessous, nous allons décrire le formalisme sur lequel a été construit le code PPP.

2.3 Approche détaillée

L'approche dite détaillée fournit un spectre dans lequel toutes les raies conservent leur caractère individuel : énergie, largeur de raie et intensité. Dans cette partie, nous nous intéresserons uniquement aux transitions lié-lié. Toute transition radiative se produit entre deux niveaux d'énergie discrets. Le calcul d'un profil nécessite la connaissance préalable de grandeurs atomiques dont l'ensemble constitue ce qui est appelé base atomique.

2.3.1 Profil d'intensité

Le formalisme permettant d'obtenir l'émissivité ou l'opacité est le même que celui qui a été utilisé pour calculer le profil d'intensité. Intéressons-nous à une transition radiative $u - l$ du niveau supérieur (upper) u vers le niveau inférieur

(lower) l . L'énergie de ces niveaux est caractérisé par les nombres quantiques n , l , j . En général, un grand nombre de transitions radiatives ont lieu. La puissance émise est donnée par

$$P(\omega) = \frac{4\omega^4}{3c^3} I(\omega), \quad (2.15)$$

où le profil de raie I s'écrit

$$I(\omega) = \frac{1}{\pi} \mathcal{R}e \int_0^\infty e^{i\omega t} C(t) dt, \quad (2.16)$$

C est la fonction d'autocorrélation du moment dipolaire électrique. Elle est donnée par

$$C(t) = \sum_{u-l} e^{-i\omega_{ul}t} |\langle l | \mathbf{d} | u \rangle|^2 \rho_u. \quad (2.17)$$

où $\omega_{ul} = (E_u - E_l)/\hbar$ et ρ_u la probabilité de trouver l'atome actif dans l'état $|u\rangle$.

Dans l'espace de Liouville, la fonction d'autocorrélation s'exprime comme la trace de l'opérateur d'évolution U , i.e.

$$C(t) = \langle \langle \mathbf{d}^\dagger | U(t) | \rho \mathbf{d} \rangle \rangle, \quad (2.18)$$

où ρ est la matrice densité du système complet (émetteur + perturbateurs).

Dans le premier chapitre, nous avons rappelé les approximations de la théorie standard. A l'approximation quasi-statique, l'effet des ions perturbateurs sur les émetteurs est représenté par un champ électrique statique caractérisé par une densité de probabilité $W(e)^2$. Les électrons sont traités à l'approximation d'impact : les ions émetteurs subissent des collisions binaires avec les électrons libres. L'effet de ces électrons est alors représenté par un opérateur de collision Φ . On montre que l'intensité est donné par

$$I(\omega) = \frac{1}{\pi} \mathcal{R}e \langle \langle \mathbf{d}^\dagger | \int de W(e) \int_0^\infty dt \exp(i\omega t) \exp(-i(L_e - i\Phi)t) \rho \mathbf{d} \rangle \rangle, \quad (2.19)$$

où $\exp(-i(L_e - i\Phi)t)$ est l'opérateur d'évolution de l'émetteur perturbé par un microchamp ionique de valeur e et des électrons libres, et L_e le Liouvillien du système atomique perturbé par le champ électrique constant E_e . La densité de probabilité W est donnée par une distribution statistique [7].

En raison du microchamp ionique, chaque transition radiative $u - l$ donne naissance à L composantes Stark. Chaque composante Stark est assimilée à un système à deux niveaux et son profil spectral montre généralement un élargissement inhomogène -élargissement Doppler- qui est dû au mouvement thermique des ions actifs

2. $W(e)de$ est la probabilité que le microchamp ionique soit égal à e .

et un élargissement homogène. Ce dernier tient compte de l'élargissement naturel et de l'élargissement électronique. L'intensité s'écrit alors [8] :

$$I(\omega) = \sum_{q=1}^L \frac{c_q(\omega - f_q) + a_q\gamma_q}{(\omega - f_q)^2 + \gamma_q^2}, \quad (2.20)$$

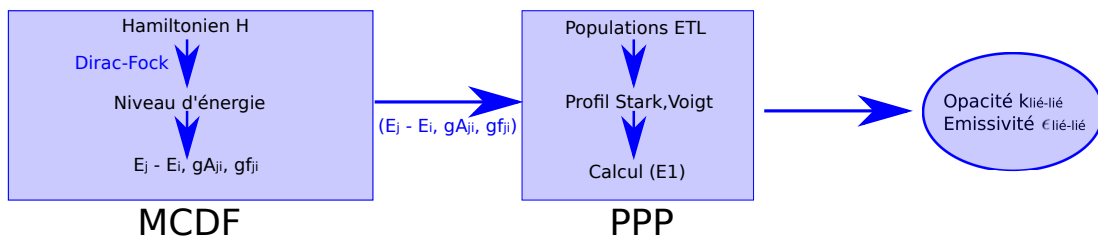
où $(a_q + ic_q)$ est l'intensité généralisée et $(f_q + i\gamma_q)$ la fréquence généralisée de la composante Stark q . Notons que la formule précédente est discrète alors que la formule 2.19 est continue. En effet, il est possible de discrétiser le profil car chaque transition Stark est élargie par l'effet des électrons. L'intensité peut aussi s'écrire :

$$I(\omega) = \sum_{q=1}^L a_q \psi_q(\omega), \quad (2.21)$$

où ψ_q est le profil de la composante Stark q associée à la transition radiative $u - l$. Pour chaque composante Stark, on définit une force de raie effective S_q en posant

$$S_q = e^2 a_q.$$

Les calculs totalement détaillés sont réalisés à l'aide des codes MCDF [9] et PPP [6]. Le premier code fournit la base atomique. Le second permet de calculer le profil spectral en tenant compte des mécanismes d'élargissement. La base atomique est une donnée d'entrée pour le code PPP. Ce dernier nécessite également la connaissance des paramètres plasma tels que la densité et la température électroniques, la température ionique et, lorsque plusieurs espèces ioniques sont présentes dans le plasma, les fractions ioniques. Cette structure est schématisée par le graphe ci-dessous.



Dans la figure 2.1 ci-dessous, on a représenté le profil d'intensité de la raie He- β de l'argon et de raies satellites de l'argon lithiumoïde. Nous avons deux types de satellites :

- $1s2l3l' - 1s^22l$ (électron $2l$ spectateur, transition $3l' - 1s$)
- $1s3l3l' - 1s^23l$ (électron $3l$ spectateur, transition $3l' - 1s$)

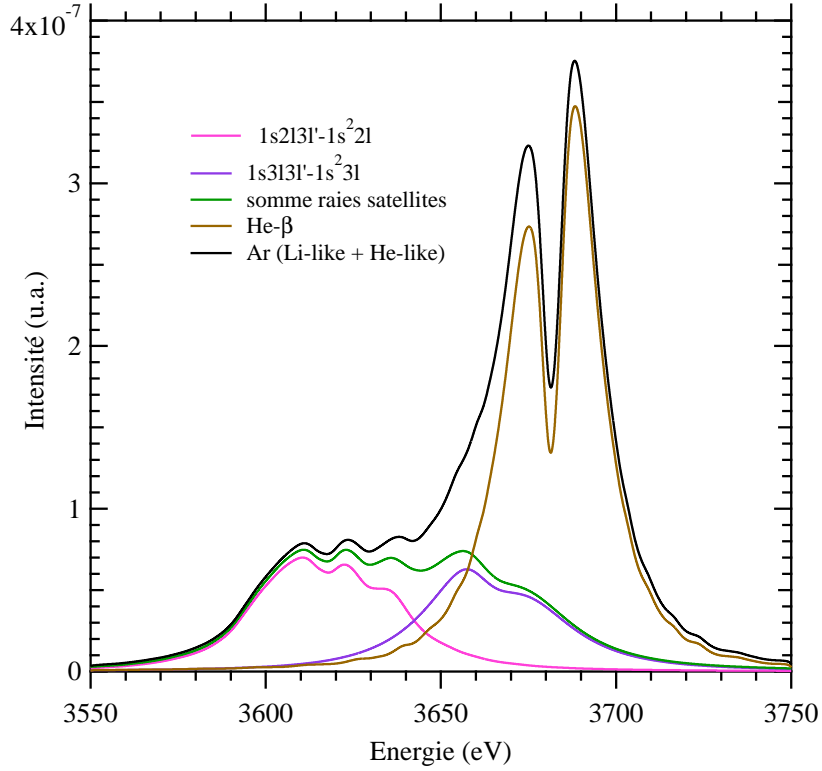


FIGURE 2.1: Intensité (en unités arbitraires) de la raie He- β de l'argon et de raies satellites de Li-like Ar. $N_e = 1,2 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$, $T_e = 700 \text{ eV}$.

La courbe verte représente la somme des intensités des deux types de satellite. La courbe noire prend en compte la raie He- β et les deux types de satellite. Nous avons vérifié que l'élargissement Stark ionique est important. Ce profil est intéressant car le rapport d'intensité de la raie de résonance (He- β) et des raies satellites permet de diagnostiquer la température électronique T_e .

C'est ce formalisme qui est utilisé pour calculer l'émissivité ou l'opacité lié-lié du plasma. Dans la suite de ce chapitre, nous allons nous intéresser à l'émissivité.

2.3.2 Emissivité

La forme la plus simple de l'émissivité des ions de charge ze est :

$$\epsilon_z(\nu) = \sum_{u-l} \frac{1}{4\pi} N_u A_{ul} h\nu \psi_{ul}(\nu), \quad (2.22)$$

où la somme porte sur toutes les transitions radiatives dans la gamme spectrale d'intérêt. N_u est la densité de population³ du niveau supérieur, A_{ul} le coefficient

3. Nombre d'ions par unité de volume. Unité : cm^{-3} .

d'Einstein (unité : s^{-1}) et ψ_{ul} le profil de la transition du niveau u vers le niveau l (unité : Hz^{-1}). Le facteur $1/4\pi$ permet de sélectionner le rayonnement émis par unité d'angle solide. Ainsi, l'émissivité est homogène à une puissance par unité de volume, par unité d'angle solide et par unité de fréquence. Son unité est donc $\text{W cm}^{-3} \text{ Hz}^{-1} \text{ sr}^{-1}$.

Lorsqu'on prend en compte les mécanismes d'élargissement et que l'on passe de la notion de transitions radiatives à celle de composantes Stark, l'émissivité prend la forme :

$$\epsilon_z(\nu) = \frac{2}{3} \left(\frac{2\pi}{c} \right)^3 \sum_{u-l} \sum_{q=1}^L N_q \nu_q^4 S_q \psi_q(\nu), \quad (2.23)$$

où N_q , ν_q et $\psi_q(\nu)$ sont respectivement la densité de population du niveau supérieur, l'énergie et le profil normalisé de la transition Stark q .

Lorsque plusieurs espèces ioniques sont présentes dans le plasma, l'émissivité s'écrit simplement :

$$\epsilon(\nu) = \sum_z \epsilon_z(\nu) p_z, \quad (2.24)$$

où p_z est la fraction ionique correspondant aux ions de charge ze . Evidemment, $\sum_z p_z = 1$.

Cette formule permet une étude détaillée des transitions. Le choix du dopant de l'ablateur, pour l'ignition, vient essentiellement de la bonne simulation du rayonnement X-mous de la paroi du Hohlraum afin de faire coïncider les structures des spectres émissivité/opacité aux énergies optimales pour la compression du combustible.

a Emissivité du carbone

Le carbone est un bon candidat comme atome dans l'ablateur ou en vue du diagnostic du système. On fixe la densité électronique à $1.0 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$. On considère deux températures : 5 et 10 eV. Ces paramètres N_e et T_e sont choisis en fonction de conditions expérimentales de l'approche indirecte de FCI. Une analyse préliminaire par le code FLYCHK [10] permet de calculer les fractions ioniques.

Ion	C I	C II	C III	C IV	C V
Température					
5 eV	0.317	0.460	0.222	0.00041	9.79E-08
10 eV	0.0325	0.137	0.573	0.230	0.0269

TABLE 2.2: Fractions ioniques du carbone.

A 5 eV, l'ion le plus abondant est C^+ . A 10 eV, C^{2+} est l'ion majoritaire. A ces températures sont associées les superconfigurations données dans la table 2.3.

Ion	SCs	Nombres de configurations non relativistes
C ⁺	(1) ² (2) ³ (1) ¹ (2) ⁴ (1) ⁰ (2) ⁵	9
C ²⁺	(1) ² (2) ² (1) ² (2) ¹ (3) ¹ (1) ¹ (2) ³ (1) ¹ (2) ² (3) ¹ (1) ⁰ (2) ³ (3) ¹ (1) ⁰ (2) ⁴	33

TABLE 2.3: Superconfigurations (SC) associées aux températures 5 et 10 eV.

Le nombre de configurations impliquées n'est pas très grand. Un calcul détaillé (MCDF-PPP) pour l'émissivité lié-lié peut être fait. Dans la figure 2.2, nous avons représenté l'émissivité de C⁺. La comparaison des deux courbes montre que l'effet Stark ionique est négligeable, ce qui était prévisible car les nombres quantiques n impliqués dans les transitions sont petits (la plus grande valeur est 3) et la densité électronique modeste. Si N_e augmente, l'élargissement Stark dû aux ions augmentera.

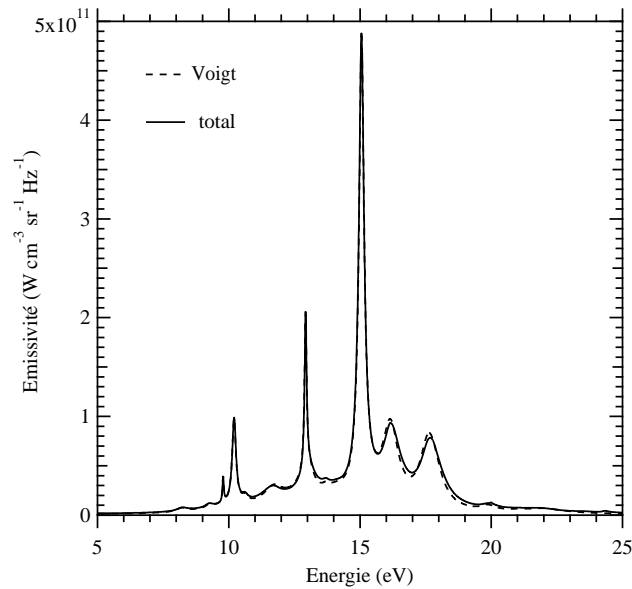


FIGURE 2.2: Profil d'émissivité de C⁺. Courbe en trait pointillé : Elargissement électronique+élargissement Doppler, courbe pleine : les deux mécanismes précédents + élargissement Stark ionique. $N_e = 10^{21} \text{ cm}^{-3}$, $T_e = 5 \text{ eV}$.

Dans la figure 2.3 nous avons représenté l'émissivité de C^{2+} pour les deux températures (5 et 10 eV). L'augmentation de la température accroît la population des niveaux excités, ce qui conduit à une augmentation de l'émissivité. Une diminution est attendue si la température continue d'augmenter car la fraction ionique va diminuer fortement au-delà du seuil d'ionisation de l'ion. L'approche détaillée -très précise- peut être utilisée car le nombre de raies n'est pas très grand.

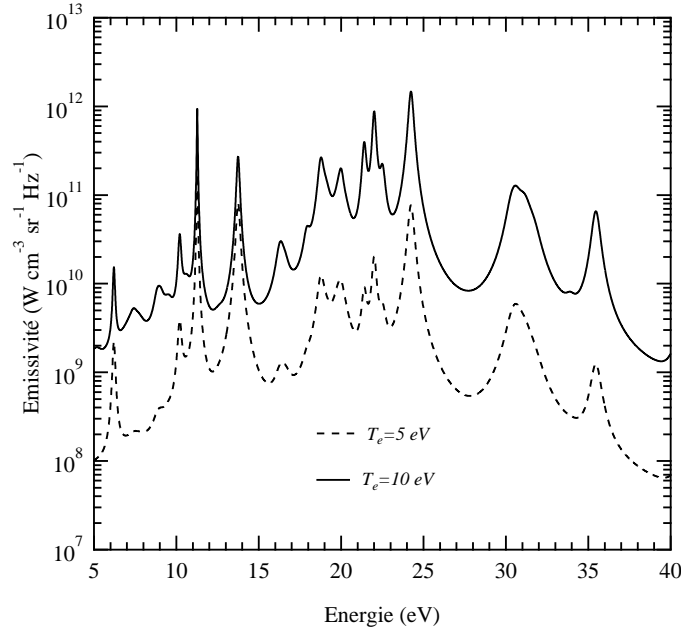


FIGURE 2.3: Profil d'émissivité de C^{2+} . $N_e = 10^{21} \text{ cm}^{-3}$.

Intéressons-nous à l'or. Cet élément est le constituant principal du Hohlraum. Le rayonnement X qu'il émet après irradiation par les lasers permet une compression de la bille contenant le mélange D-T.

b Emissivité de l'or

Le plasma d'or est à des températures beaucoup plus élevées, de l'ordre du keV. Les charges ioniques ze peuvent être élevées. Le nombre de niveaux et donc le nombre de transitions peut rendre la méthode détaillée prohibitive en termes de temps de calcul. Fixons la densité électronique à 10^{24} cm^{-3} et choisissons la température électronique dans l'intervalle [8-10] keV. Un calcul avec le code FLY-CHK montre qu'à la charge ionique $z = 65$ est associée une fraction importante. Nous nous intéresserons donc à l'ion Au^{65+} qui a 14 électrons liés. La configuration fondamentale est $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$. Intéressons-nous aux transitions radiatives entre les sous-couches $3l$, les couches K ($n = 1$) et L ($n = 2$) étant fermées. En d'autres termes, nous considérons les transitions radiatives au sein de la supercon-

figuration $(1)^2(2)^8(3)^4$. A cette superconfiguration sont associées 12 configurations non-relativistes et 33884 transitions dipolaires électriques.

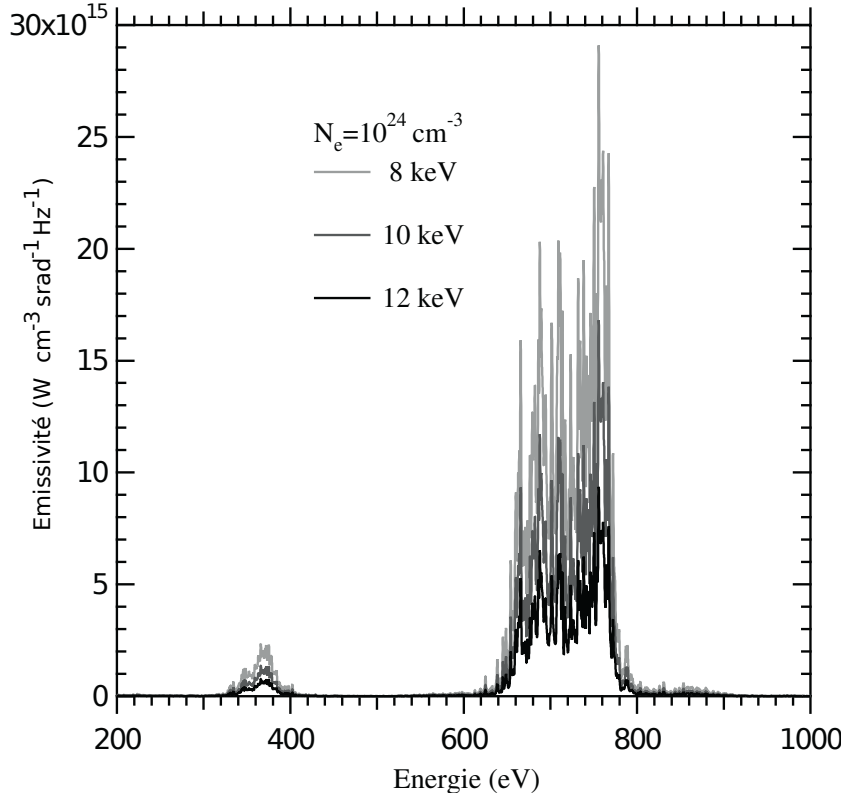


FIGURE 2.4: Emissivité de Au^{65+} dans la SC $(1)^2(2)^8(3)^4$ en fonction de l'énergie pour trois températures. $N_e = 10^{24} \text{ cm}^{-3}$.

Dans la figure 2.4, nous avons représenté l'émissivité lié-lié de Au^{65+} calculée à l'aide du code PPP pour trois valeurs de T_e . Nous avons vérifié que l'élargissement Stark dû au microchamp ionique est négligeable. L'élargissement spectral est dû aux collisions avec les électrons libres et à l'effet Doppler lié à l'agitation thermique des ions émetteurs. Comme on peut le voir, l'émissivité diminue avec la température en raison d'une diminution de la fraction ionique de l'ion Au^{65+} . Nous remarquons que les principaux faisceaux de transitions sont groupés au voisinage de 700 eV. On a également une structure autour de 350 eV. La séparation entre ces deux structures est due à l'interaction de spin-orbite. Nous avons vérifié que la séparation disparaît pour des valeurs de Z plus faibles (par exemple dans le germanium).

Le cas étudié, bien que simple car limité à une espèce ionique et une SC, nécessite un temps de calcul très long. La méthode détaillée n'est malheureusement pas adaptée aux calculs lourds. Une autre approche, plus appropriée aux calculs complets s'impose.

2.4 Méthode statistique

La méthode statistique est très utile lorsque le nombre de transitions radiatives est très grand et que beaucoup de raies spectrales *perdent leur identité* en raison d'un recouvrement causé par l'élargissement spectral.

2.4.1 Moments statistiques

Intéressons-nous à deux configurations C et C' (voir Chapitre 1, Section 1.3). L'ensemble des transitions radiatives (E1) entre ces deux configurations est appelé faisceau de transitions.

Les moments statistiques de l'émissivité découlent de ceux de l'intensité (Eq. 2.22) qui sont définis par [11] :

$$\mu_n = \frac{\sum_{i,j} S_{ij} (E_j - E_i)^n}{\sum_{i,j} S_{ij}}, \quad (2.25)$$

où j (i) est un niveau supérieur (inférieur) d'une transition du faisceau. S_{ij} , force de raie de cette transition, est le poids de la distribution statistique. $S = \sum_{i,j} S_{ij}$ est le poids total. Les moments statistiques de l'émissivité μ_{emiss} se déduisent, par approximation, en écrivant $\mu_{\text{emiss}} = (\mu_1)^4 \mu_n$. On définit également les moments statistiques centrés :

$$\mu_n^c = \frac{\sum_{i,j} S_{ij} (E_j - E_i - \mu_1)^n}{S}. \quad (2.26)$$

On a, de manière évidente,

$$\mu_0 = \mu_0^c = 1.$$

On montre, assez facilement que

$$\mu_2^c = \mu_2 - \mu_1^2 = v = \sigma^2,$$

où v est la variance et σ l'écart-type. Exprimons également μ_3^c et μ_4^c :

$$\mu_3^c = \mu_3 - 3\mu_2\mu_1 - 2\mu_1^3,$$

$$\mu_4^c = \mu_4 - 4\mu_3\mu_1 + 6\mu_2\mu_1^2 + \mu_1^4,$$

Définissons les moments réduits (sans dimension) α_n :

$$\alpha_n = \frac{1}{S} \sum_{i,j} \left(\frac{E_j - E_i - \mu_1}{\sigma} \right)^n S_{ij}. \quad (2.27)$$

On a

$$\alpha_1 = 0,$$

$$\alpha_2 = 1,$$

$$\alpha_3 = \mu_3^c / v^{3/2},$$

$$\alpha_4 = \mu_4^c / v^2.$$

Le moment d'ordre 3, α_3 , est appelé biais ou asymétrie (*skewness*). Si $\alpha_3 = 0$, la distribution est symétrique. Si $\alpha_3 > 0$ la distribution est asymétrique à droite. Si $\alpha_3 < 0$, la distribution est asymétrique à gauche.

Le moment d'ordre 4, α_4 , est appelé *kurtosis*. Il mesure le degré d'écrasement de la distribution. Si α_4 est supérieur à 3, la distribution est plus piquée qu'une Gaussienne. Dans le cas contraire, elle est relativement écrasée.

Les moments ainsi définis permettent de construire une distribution. Nous allons en présenter deux.

2.4.2 Distributions

a Gaussienne généralisée

La distribution gaussienne généralisée (GG) est définie par [12]

$$\text{GG}(E) = \frac{S\nu}{\sigma} \frac{e^{-|u/\lambda|^\nu}}{2\lambda\Gamma(1/\nu)}, \quad (2.28)$$

où $u = (E - \mu_1)/\sigma$, ν est un nombre réel positif, Γ est la fonction Gamma et $\lambda = \sqrt{\Gamma(1/\nu)/\Gamma(3/\nu)}$. Comme la distribution est symétrique, les moments réduits impairs α_{2k+1} sont nuls. La valeur de ν est obtenue en résolvant l'équation

$$\alpha_4 = \frac{\Gamma(1/\nu)\Gamma(5/\nu)}{\Gamma(3/\nu)^2}.$$

b Gaussienne normale inverse

Cette distribution est donnée par [13] :

$$\text{NIG}(E) = \frac{\alpha}{\sqrt{1 + (\frac{E-\mu}{\delta})^2}} \exp(\delta\sqrt{\alpha^2 - \beta^2} + \beta(E - \mu)) K_1(\alpha\sqrt{\delta^2 + (E - \mu)^2}), \quad (2.29)$$

où K_1 est la fonction de Bessel modifiée du troisième type. Les quatre paramètres α , β , δ et μ se déduisent de μ_1 , σ , α_3 et α_4 . En effet, si on pose $\tilde{\alpha}_3 = \alpha_3^2$ et $\tilde{\alpha}_4 = \alpha_4 - 3$ (kurtosis réduit), on a (voir Table 2.4) :

Paramètre	Expression	Rôle
α	$\frac{3\sqrt{3\tilde{\alpha}_4 - 4\tilde{\alpha}_3}}{\sigma(3\tilde{\alpha}_4 - 5\tilde{\alpha}_3)}$	Importance de la queue
β	$\frac{3\alpha_3}{\sigma(3\tilde{\alpha}_4 - 5\tilde{\alpha}_3)}$	Asymétrie
δ	$\frac{3\sigma\sqrt{3\tilde{\alpha}_4 - 5\tilde{\alpha}_3}}{(3\tilde{\alpha}_4 - 4\tilde{\alpha}_3)}$	Paramètre d'échelle
μ	$\frac{\mu_1 - \delta\alpha_3}{\sqrt{3\tilde{\alpha}_4 - 5\tilde{\alpha}_3}}$	Position du maximum

TABLE 2.4: Paramètres de la distribution NIG.

2.4.3 Comparaison

Comparons l'émissivité obtenue à l'aide des deux distributions statistiques à l'émissivité obtenue par la méthode détaillée (voir Section 2.3). Le spectre est généré par les faisceaux de transition (voir Section 1.3). Dans le cas qui nous intéresse, les transitions radiatives se produisent au sein de la couche M. Les faisceaux de transition s'écrivent alors

$$(3l_1)^{N_1}(3l_2)^{N_2}(3l_3)^{N_3} - (3l_1)^{N_1-1}(3l_2)^{N_2+1}(3l_3)^{N_3}$$

où $N_1 + N_2 + N_3 = 4$ et $l_1, l_2, l_3 \in [0, 1, 2]$ (exception : $(l_1, l_2) \neq (0, 2), (2, 0)$). Les faisceaux de transition se rangent en deux groupes : ceux qui sont dus à une transition $3p - 3s$ et ceux qui sont dus à une transition $3d - 3p$. Ces groupes sont des superfaisceaux de transition (super transition arrays : STA). Dans la table 2.5 on

STA	faisceau de transition	STA	faisceau de transition
$3p - 3s$	$3s^13p^3 - 3s^23p^2$	$3d - 3p$	$3s^23p^13d^1 - 3s^23p^2$
	$3s_13p^13d^2 - 3s^23d^2$		$3s_23d^2 - 3s^23p^13d^1$
	$3p^33d^1 - 3s^13p^23d^1$		$3s^13p^23d^1 - 3s^13p^3$
	$3s^13p^23d^1 - 3s^23p^13d^1$		$3s^13p^13d^2 - 3s^13p^23d^1$
	$3p^13d^3 - 3s^13d^3$		$3s^13d^3 - 3s^13p^13d^2$
	$3p^4 - 3s^13p^3$		$3p^3 - 3d^13p^4$
	$3p^23d^2 - 3s^13p^13d^2$		$3p^23d^2 - 3p^33d^1$
	$3p^13d^3 - 3p^23d^2$		
	$3d^4 - 3p^13d^3$		

TABLE 2.5: Faisceaux de transition pour les STA $3p - 3s$ et $3d - 3p$.

voit que le STA $3p - 3s$ se compose de 7 faisceaux de transition et le STA $3d - 3p$ de 9 faisceaux de transition.

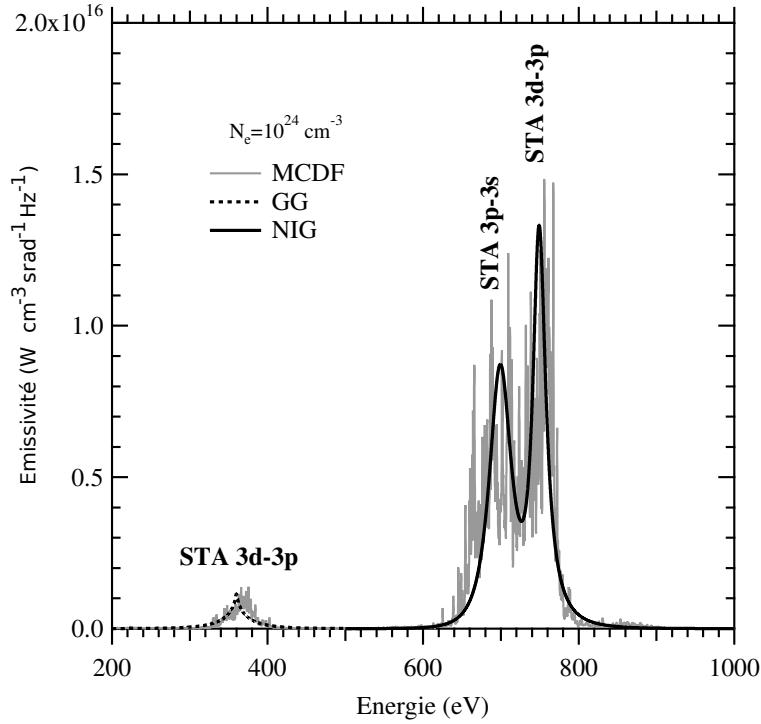


FIGURE 2.5: Emissivité de l'ion Au^{65+} en fonction de l'énergie. $N_e = 10^{24} \text{ cm}^{-3}$ et $kT_e = 12 \text{ keV}$.

Dans la figure 2.5, on montre l'émissivité de l'or dans la super-configuration $(3)^4$. L'émissivité est reproduite par deux gaussiennes normales inverses (NIG) : une pour chaque STA. Ici, la STA $3d - 3p$ comporte deux structures dont la séparation est due à l'interaction de spin-orbite. La structure autour de 350 eV est reproduite par une gaussienne généralisée (GG). Les distributions statistiques reproduisent assez bien l'enveloppe de l'émissivité ; les détails (élargissement, asymétrie, ...) des raies individuelles disparaissent. Ainsi, lorsque le spectre présente des raies dont le recouvrement est faible, seule la méthode détaillée est recommandée. Lorsque toutes les raies du spectre présentent un recouvrement important et que leur nombre est très grand, seule une méthode statistique peut être utilisée. Dans tous les cas intermédiaires, il faut utiliser une méthode *hybride* qui combine des calculs détaillés et des calculs statistiques.

2.5 Méthode hybride

La méthode hybride sera présentée dans le chapitre 3 qui traite de l'opacité. Dans ce chapitre, nous l'utiliserons pour calculer l'émissivité. La méthode sera appliquée au germanium pour des conditions expérimentales de la FCI. Nous nous

intéressons à l'émissivité totale, c'est-à-dire qui tient compte

- de toutes les séquences ioniques
- des transitions lié-lié, lié-libre et libre-libre.

2.5.1 Emissivité totale

L'émissivité totale est donnée par l'équation 2.24 dans laquelle $\epsilon_z(\nu)$ comprend les transitions lié-lié, lié-libre et libre-libre :

$$\epsilon_z(\nu) = \epsilon_{z,bb}(\nu) + \epsilon_{z,bf}(\nu) + \epsilon_{z,ff}(\nu), \quad (2.30)$$

L'émissivité lié-lié est donné par l'équation 2.22. La contribution libre-libre est donnée à l'approximation de Kramers par (voir Ref. [14]) :

$$\epsilon_{z,ff}(\nu) = \frac{32\pi e^4 a_0^2 \alpha^3 \bar{Z}^2}{2\sqrt{3}(2\pi m_e)^{3/2} \hbar} \left(\frac{m_e}{2\pi k T_e} \right)^{1/2} N_e N_z e^{-h\nu/kT_e}, \quad (2.31)$$

où α est la constante de structure fine et m_e la masse de l'électron. On rappelle (voir Section 1.4) que \bar{Z} et N_z désignent respectivement la charge ionique moyenne et la densité de l'ion de charge ze .

Enfin, l'émissivité lié-libre est obtenue par une formule similaire au calcul des transitions lié-lié, la seule différence étant que la force d'oscillateur est différentielle car elle fait intervenir la fonction d'onde d'un électron du continuum. Dans la plupart des codes actuels, à l'ETL, la composante libre-lié du spectre est calculée de manière statistique, que ce soit pour l'émissivité ou l'opacité, l'émissivité se déduisant de l'opacité en multipliant cette dernière par la distribution du corps noir de Planck (loi de Kirchoff). La méthode de calcul statistique est détaillée dans un article de Bar-Shalom [15].

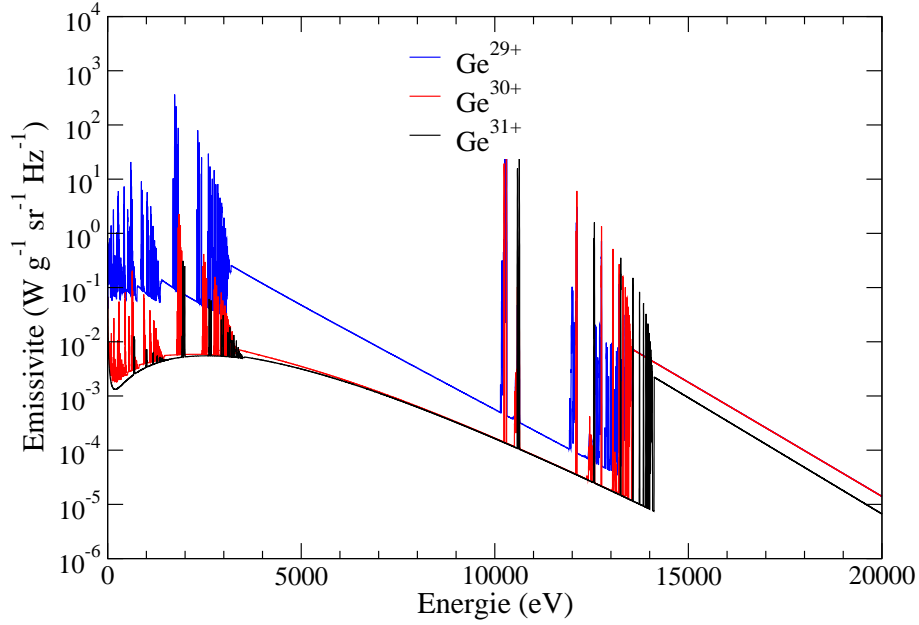
2.5.2 Application au germanium

Nous avons calculé l'émissivité pour $kT_e=1000$ eV et $N_e = 10^{20}$ cm⁻³. Les fractions ioniques p_i calculées sont données dans le tableau 2.6. La charge moyenne $\bar{Z}=30.83$ et l'ion hydrogéoïde est le plus abondant.

Dans la figure 2.6 nous représentons l'émissivité ϵ_z des ions Ge ($Z=32$) les plus abondants. Dans l'intervalle $[0, 5000]$ eV, l'ion Ge²⁹⁺ a l'émissivité la plus grande mais la fraction ionique correspondante est très faible (2.6×10^{-4}). Au-dessus de 10 keV, c'est l'émissivité de Ge³⁰⁺ qui domine. Si on tient compte des fractions ioniques, ce sont les ions hydrogéoïde et helimoïde qui contribuent le plus à l'émissivité totale.

ion	p_i	RPL _z
Ge ³¹⁺	0.8282	65.63 %
Ge ³⁰⁺	0.1715	34.28 %
Ge ²⁹⁺	2.6261×10^{-4}	0.19 %

TABLE 2.6: Fractions ioniques et pertes radiatives des ions les plus abondants.

FIGURE 2.6: Emissivité des ions Ge les plus abondants normalisée par la masse volumique ρ (ϵ/ρ). $N_e = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ ($4 \times 10^{-4} \text{ g cm}^{-3}$), $kT_e = 1000 \text{ eV}$.

Dans la table 2.6, nous donnons la fraction de pertes radiatives pour chaque ion. Celle-ci est définie par

$$\overline{\text{RPL}}_z = \frac{p_z \int \epsilon_z(\nu) d\nu}{\sum_z p_z \int \epsilon_z(\nu) d\nu}.$$

Rappelons que les pertes radiatives⁴ résultent d'intégrations de ϵ_z sur la fréquence et sur l'angle solide. L'unité des pertes radiatives est donc W/cm^3 . Nous voyons que c'est l'ion hydrogénoïde qui émet le plus.

4. Radiative Power Losses, RPL

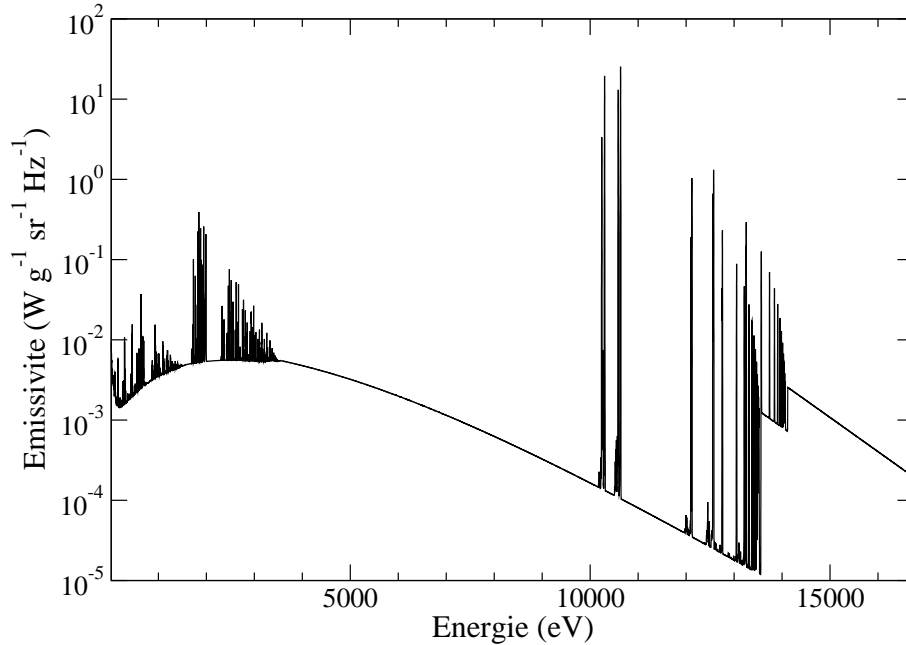


FIGURE 2.7: Emissivité totale du germanium normalisée par la masse volumique ρ (ϵ/ρ). Densité et température : idem Fig. 2.6.

Dans la figure 2.7, nous avons représenté l'émissivité totale, donnée par les équations 2.24 et 2.30. Sa valeur est globalement plus faible car on tient compte des fractions ioniques des ions Ge dans le plasma.

2.6 Conclusion

Les calculs d'émissivité ont été appliqués à l'or, au carbone et au germanium. L'or est présent dans le Hohlraum et il importe de connaître son émission dans le domaine X. Quant au carbone et au germanium, ils sont présents dans les ablateurs. La connaissance du transport de rayonnement de ces éléments et d'autres, comme le silicium (voir chapitre 3), est indispensable. Elle nécessite la connaissance de l'émissivité et de l'opacité.

Nous avons décrit deux méthodes : une méthode détaillée (raie par raie) et une méthode statistique. Dans la plupart des cas qui nous intéressent, la première nécessite des temps de calcul très longs. La seconde est beaucoup plus économe en temps de calcul mais elle ne fournit, au mieux, qu'une enveloppe du spectre détaillé de l'émissivité. Il est donc indispensable d'utiliser une nouvelle méthode qui soit capable de décrire de manière détaillée le spectre lorsque les raies se recouvrent peu

et présentent des structures complexes comme celles qui apparaissent en présence d'un champ électrique (effet Stark ionique) et/ou d'un champ magnétique, et de manière statistique lorsque celles-ci sont très nombreuses et se recouvrent largement. Dans le deuxième cas, une connaissance précise et individuelle des raies ne s'impose pas.

Dans le chapitre 3, nous utiliserons une méthode dite hybride, qui répond à ces deux exigences. Cette méthode sera appliquée au calcul de l'opacité des dopants qui sont présents dans l'ablateur.

Bibliographie

- [1] C. C. Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, *Mécanique quantique, Tome II*, Hermann (1973).
- [2] R. D. Cowan, *The theory of atomic structure and spectra*, University of California Press (1981).
- [3] L. H. Thomas, *Proc. Cambridge Phil. Soc.* **23**, 5, 542 (1927).
- [4] E. Fermi, *Z. Physik* **48**, 73 (1928).
- [5] P. A. M. Dirac, *Proc. Cambridge Phil. Soc.* **26**, 376 (1930).
- [6] A. Calisti, F. Khelifaoui, R. Stamm, B. Talin, and R. W. Lee, *Phys. Rev. A* **42**, 5433 (1990).
- [7] C. A. Iglesias, H. E. DeWitt, J.L. Lebowitz, D. MacGowan and W. B. Hubbard. *Phys. Rev. A* **31**, 1698 (1985).
- [8] D. Benredjem, A. Calisti and C. Mossé, *High Energy Density Phys.* **5**, 187 (2009).
- [9] I. P. Grant, B. J. McKenzie, P. H. Norrington, D. F. Mayers and N. C. Pyper, *Comput. Phys. Comm.* **21**, 207 (1980).
- [10] H. K. Chung, M. H. Chen, W. L. Morgan, Y. Ralchenko, R. W. Lee, *High Energy Density Physics* **1**, 3 (2005).
- [11] J. Bauche and C. Bauche-Arnoult, *Comput. Phys. Rep.* **12**, 3 (1990).
- [12] J.-Ch. Pain, , F. Gilleron, J. Bauche, and C. Bauche-Arnoult, *High Energy Density Physics* **5**, 294 (2009).
- [13] O. E. Barndorff-Nielsen, *Scand. J. Stat.* **24**, 1 (1997).
- [14] E. Mínguez, Radiation transport in ICF targets, in *Nuclear Fusion by Inertial Confinement : a Comprehensive Treatise*, G. Velarde, Y. Ronen, and J. M. Martínez-Val, eds., 198, Boca Raton, FL : CRC Press.
- [15] A. Bar-Shalom, J. Oreg, *Phys. Rev. E* **54**, 1850 (1996).

CHAPITRE 3

Opacité en FCI

Ce chapitre porte sur le calcul de l'opacité dans les plasmas inertiels à l'ETL. Ce travail s'effectue en parallèle des calculs sur l'émissivité pour des plasmas similaires. L'enjeu de cette étude est d'obtenir le spectre d'opacité de dopants pour la simulation du front d'accrétion de la bille de combustible, que ce soit pour l'approche indirecte ou sur machine Z-pinch.

Ces calculs sont effectués pour des atomes à Z moyen ou élevé. Ainsi, pour les températures atteintes dans ces plasmas le nombre de transitions dipolaires E1 devient très grand. On distingue toutefois des faisceaux de transitions mais aussi des raies isolées ce qui ne permet pas un traitement purement statistique. L'approche hybride détaillé/statistique a ainsi été développée dans le but de résoudre ce problème. Dans ce chapitre nous présenterons des opacités calculées à l'aide du code hybride SCO-RCG du CEA DAM.

Après un rappel du rôle des dopants en FCI, nous présenterons l'approche hybride utilisée. Nous comparerons ces opacités à celles obtenues à l'aide d'un code détaillé. La validation de ces simulations permettra d'étendre les calculs à l'opacité totale (lié-lié, lié-libre et libre-libre) obtenue par le code SCO-RCG pour des couples N_e/T_e issus du chemin thermodynamique de la compression de la cible.

3.1 Opacité en FCI

L'opacité spectrale du plasma en FCI implique de nombreux calculs de physique atomique pour les ions dont la fraction ionique est importante. En effet la reconstruction et la comparaison aux spectres expérimentaux permettent d'affiner les modèles théoriques. La simulation de l'opacité des dopants de l'ablateur est un enjeu majeur de l'ignition en fusion inertielle.

3.1.1 Les dopants en FCI

Le rôle des dopants est primordial dans l'approche inertielle par attaque indirecte. L'énergie des lasers étant convertie en rayonnement X par le Hohlraum (fait d'un élément à Z élevé, de l'or dans le cas présent), il faut que la capsule les absorbe. Mais plusieurs problèmes se posent.

Il faut que l'émission X du Hohlraum soit la plus uniforme possible (voir Chapitre 1). Elle doit également être de bonne qualité spectrale. Le problème physique vient de la possible émission de X-durs ($\approx 10 - 400$ keV) par le Hohlraum qui ont la

possibilité de se propager au-delà du front d'ablation et ainsi préchauffer la couche interne de l'ablateur. En conséquence, une différence de densité apparaît entre le combustible interne à la capsule et sa couche externe. Cela favorise les instabilités hydrodynamiques et plus particulièrement celle d'interchange Rayleigh-Taylor (voir section 1.2.1.a). Les dopants sont utilisés pour tenter de contrôler l'absorption en fonction de l'énergie $h\nu$ des X incidents et donc favoriser la compression. Mais il faut quantifier la concentration de dopants que l'on met dans l'ablateur, une trop grande abondance d'atomes tendant à réduire la vitesse d'implosion et donc défavorise l'ignition. La physique atomique intervient alors dans le calcul de l'opacité du plasma créé par l'impulsion X émis par la cavité. Cette grandeur caractéristique fait l'objet de calculs théoriques poussés pour simuler le spectre d'absorption en fonction de la température et de la densité. Cette opacité est surtout importante pour les atomes de Z moyens ou élevés.

Plusieurs dopants sont à l'étude et semblent être de bons candidats pour la fabrication de futures capsules de combustible ; ce sont les atomes de germanium et de silicium. L'ablateur est habituellement constitué d'un mélange carbone-hydrogène-oxygène-dopants. L'idée d'utiliser le silicium a émergé il y a quelques années et depuis les recherches dans ce domaine sont l'objectif principal de plusieurs équipes de par le monde [1]. Les dopants sont des ions moyennement lourds et les températures sont telles que les électrons peuplent les couches de $n \in [1 - 4]$ et parfois les couches de $n \geq 5$. Le nombre de configurations, et par conséquent le nombre de transitions possibles, est élevé. Ainsi, le temps de calcul des niveaux d'énergie peut devenir prohibitif.

3.1.2 Approche détaillée et approche statistique

a Opacité détaillée

L'approche détaillée (voir Section 2.3) convient aux calculs d'opacité lorsque les raies d'absorption (transitions lié-lié) sont identifiables, i.e. se recouvrent peu ou pas du tout, et lorsque le nombre de niveaux liés n'est pas excessivement élevé. Rappelons que le processus d'absorption est schématisé par

$$h\nu + X_z^{(l)} \leftarrow h\nu + h\nu + X_z^{(k)},$$

où l'énergie du niveau k est inférieure à celle du niveau l et où z désigne la charge de l'ion. Un photon est absorbé par l'ion qui passe ainsi à un niveau d'énergie supérieure.

On parle d'absorption en couche K (resp L, M) lorsque l'électron excité est initialement dans la couche $n = 1$ (resp $n=2, 3$). On peut également exciter un électron de la couche L vers la couche M (resp N), par exemple $2p - 3d$ (resp $2s - 4p$). Le nombre de transitions de la couche L ou M sont plus nombreuses que celles issues de la couche K, et peuvent atteindre des nombres très grands.

Dans les plasmas FCI où la densité et la température peuvent être très élevées, les spectres d'émission ou d'absorption dépendent fortement des transitions lié-lié. Ces spectres dépendent des populations ioniques, des populations des niveaux atomiques et des mécanismes d'élargissement spectral. Ceux-ci sont les mêmes que dans le chapitre précédent : élargissement électronique, Doppler et Stark ionique. Habituellement on définit le coefficient d'absorption correspondant au spectre lié-lié d'un ion de charge ze par l'expression :

$$k_z(\nu) = \sum_{u-l} \frac{1}{4\pi} N_l B_{lu} h\nu \psi_{lu}(\nu), \quad (3.1)$$

où la somme porte sur l'ensemble des transitions radiatives entre états liés. Néanmoins, nous avons vu que le microchamp ionique décompose une transition radiative $u-l$ en un ensemble de L composantes Stark qui sont élargies par les collisions électron-ion. Le coefficient d'absorption associé aux transitions lié-lié d'un ion de charge ze est donné par une expression similaire à celle de l'émissivité (Eq. 2.23) :

$$k_z(\nu) = \sum_{u-l} \sum_{q=1}^L N_q \frac{(2\pi)^2}{3\hbar c} \nu_q S_q \psi_q(\nu). \quad (3.2)$$

Les différentes grandeurs ont été définies dans le chapitre 2. L'unité du coefficient d'absorption est cm^{-1} . Pour tenir compte de l'ensemble des différents ions, on somme les coefficients d'absorption pondérés par les fractions ioniques p_z :

$$k(\nu) = \sum_z k_z(\nu) p_z. \quad (3.3)$$

Les fractions ioniques varient avec la température et la densité. On définit

1. la profondeur (ou épaisseur) optique pour une direction de propagation s :

$$\tau(\nu) = \int k(\nu) ds. \quad (3.4)$$

La profondeur optique est sans dimension.

2. l'opacité massique :

$$\kappa(\nu) = k(\nu)/\rho.$$

où ρ est la masse volumique. κ s'exprime en cm^2/g .

Dans la figure 3.1, nous représentons l'opacité du germanium, qui est un dopant possible, dans la super-configuration (3)⁴. Les deux "bosses" à 65 et 80 eV sont associées aux deux superfaisceaux (STA) $3p-3s$ et $3d-3p$ (voir Table 2.5 et Fig. 2.5). Nous avons vérifié que l'élargissement Stark était négligeable. En effet, le nombre quantique principal n'est pas assez grand et les niveaux ne sont donc pas assez excités pour subir l'effet du champ électrique.

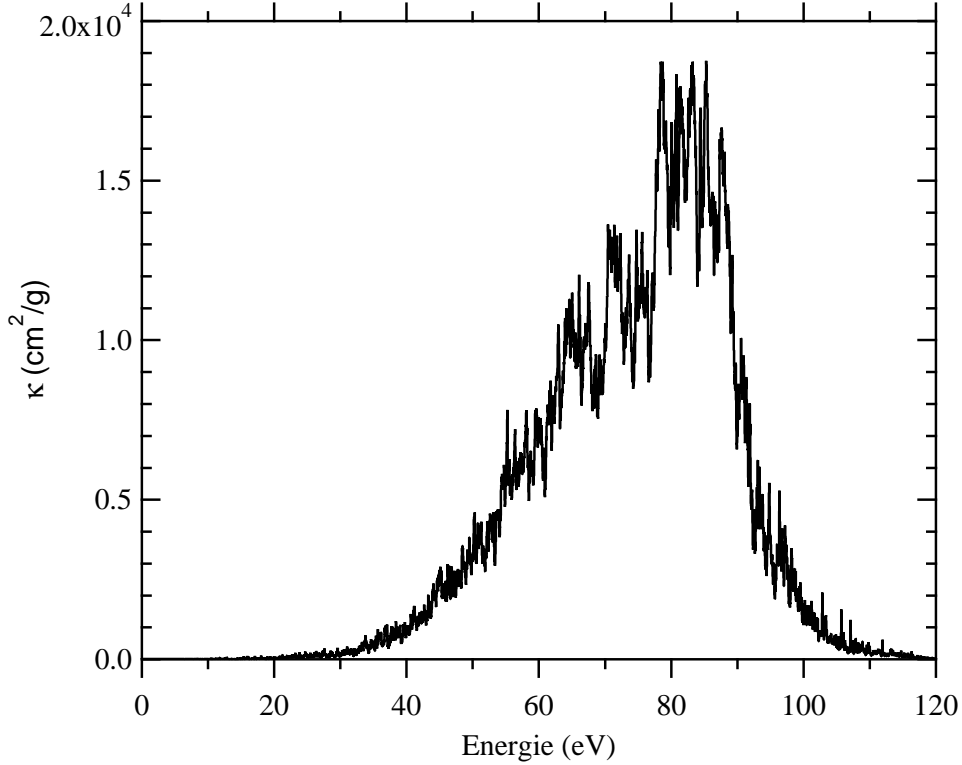


FIGURE 3.1: Opacité massique du germanium dans la super-configuration $(3)^4$. On a $N_e = 1.7 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ et $T_e = 200 \text{ eV}$.

b Méthodes statistiques

Dans le chapitre 2 nous avons introduit des méthodes statistiques pour calculer l'émissivité. Nous allons approfondir ces méthodes et introduire les notations utilisées dans une approche hybride qui combinera méthodes détaillées et méthodes statistiques.

En procédant de la même manière que dans le chapitre précédent, on trouve que l'opacité fait alors intervenir les moments :

$$\mu_n = \frac{\sum_{i,j} (E_j - E_i)^{n+1} S_{ij}}{\sum_{i,j} (E_j - E_i) S_{ij}} \quad (3.5)$$

Dans la pratique, ces moments ne peuvent pas être utilisés. On fait donc l'approximation

$$S_{ij} (E_j - E_i)^{n+1} = \mu_1 [I] S_{ij} (E_j - E_i)^n.$$

où $\mu_1 [I]$ est le moment d'ordre 1 de l'intensité, formule 2.25. Les moments qui en résultent sont utilisés dans les distributions statistiques considérées.

En ce qui concerne les faisceaux de transition non résolus (Unresolved Transitions Array, UTA) [4, 5], on modélise la distribution en énergie de la raie dans

le profil d'élargissement global, les raies n'étant pas traitées individuellement en raison du recouvrement des profils individuels. Il arrive que les faisceaux de transition soient séparés en sous-faisceaux en raison de l'interaction spin-orbite. Ceci peut être observé pour des ions de Z élevé ($Z \geq 25$), où l'interaction électrostatique est faible devant l'interaction spin-orbite. Dans ce cas, on utilise la méthode SOSA (Spin Orbit Split Array) [6]. La modélisation se fait de la même manière que dans l'approche UTA, la seule différence consiste à considérer un couplage jj pur et donc un profil statistique pour chaque sous-faisceau relativiste issu du *splitting* du faisceau de transition. Chacun de ces faisceaux sera donc caractérisé par ces différents moments, et non plus par ceux du faisceau global.

Les méthodes UTA et SOSA sont analogues. Cependant, pour des ions de Z élevé, où SOSA peut paraître pertinente, des cas limites sont malgré tout à considérer. En effet, l'interaction spin-orbite joue un rôle bien avant d'atteindre le couplage jj pur. Les termes diagonaux du Hamiltonien deviennent non négligeables. On parle alors de mélange des couplages ou ICR (Interaction des sous-Configurations Relativistes), ce qui modifie l'ensemble des paramètres des sous-faisceaux relativistes ainsi que la disposition des raies en leur sein [6].

En raison de la taille des calculs numériques, il n'est pas réaliste d'utiliser les méthodes UTA/SOSA pour des ions très lourds ou possédant beaucoup d'électrons liés. Pour illustrer notre propos, considérons un ion avec 44 électrons liés, dans lequel les couches K, L et M sont remplies et la couche N ($n=4$) comprend 16 électrons liés, i.e., $K^2L^8M^{18}N^{16}$. L'ion est dans la super-configuration $(1)^2(2)^8(3)^{18}(4)^{16}$. Il lui correspond

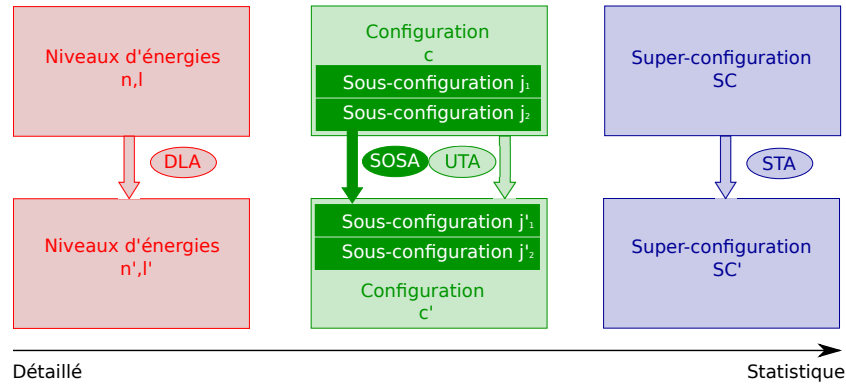
- 233 configurations non-relativistes
- 8535 configurations relativistes
- 49 309 974 niveaux.

Il en résulte un nombre prohibitif de transitions radiatives. Dans ce cas, le nombre de profils UTA/SOSA à calculer est prohibitif. Lorsque le nombre de configurations est trop grand et que par conséquent leur calcul devient impossible, une méthode plus globale peut être envisagée. L'une de ces méthodes s'appuie sur les structures STA (Super Transition Array) [7].

La méthode STA consiste à regrouper les faisceaux de transitions d'énergies proches qui sont eux-mêmes des regroupements de raies spectrales. Le calcul statistique se fait sur un STA qui regroupe des transitions entre deux superconfigurations (celle d'arrivée pouvant être identique à celle de départ). Les moments statistiques globaux de cette structure se déduisent par application des mêmes formules que pour la méthode UTA (formule 3.5) mais pour des superfaisceaux, et son profil est modélisé par une Gaussienne. Dans son principe, la méthode est donc très proche de l'UTA, mais elle a l'avantage d'être plus flexible. On ne peut choisir les super-configurations pertinentes au premier calcul, l'algorithme utilise pour cela des itérations en divisant les super-couches à chaque pas jusqu'à convergence (voir Annexe

2). Cette approche tend vers la méthode DLA¹ et se heurte donc à un problème de précision du spectre de sortie mais s'avère très efficace pour tracer l'allure globale de celui-ci, d'où son utilisation pour l'analyse de certains spectres.

On peut résumer les différents modèles par le schéma ci-dessous :



Ces méthodes ont été largement utilisées depuis le milieu des années 90 [8].

A ce stade, on peut dire que les méthodes détaillées permettent de rendre compte de détails fins du spectre d'opacité, notamment en prenant en compte de manière précise des mécanismes d'élargissement spectral. Malheureusement, ces méthodes ne sont pas applicables lorsque le nombre de raies est très grand. Une alternative, lorsque les raies se superposent et qu'il n'est plus crucial de connaître les détails fins du spectre, peut être trouvée avec les méthodes statistiques. Dans le cas le plus général, où les deux aspects sont présents dans un même spectre, il importe d'utiliser une approche *hybride* pour en rendre compte. C'est ce que nous nous proposons de faire dans la suite de ce chapitre.

3.2 L'approche hybride SCO-RCG

Les propriétés radiatives des plasmas de fusion inertielle et, plus généralement, la physique atomique des plasmas chauds nécessitent une connaissance précise des spectres d'émission et/ou d'absorption d'ions dont le numéro atomique Z est moyen ou grand. Cependant la complexité et le nombre des configurations possibles rendent difficile voire impossible la résolution détaillée (DLA). Les méthodes statistiques sont donc incontournables. Cette approche n'a donné lieu à des applications numériques que récemment, surtout concernant la méthode STA, et nécessite des approfondissements. Ces modèles, après étude, ont donc été jugés peu pertinents dans le cas d'un spectre à faible coalescence ou ayant un nombre de raies faible. C'est pourquoi des codes *hybrides* détaillé-statistique ont été développés. Notre étude fait appel à un code de calcul détaillé (MCDF-PPP) et un code hybride (SCO-RCG).

1. Detailed Line Accounting ou Detailed Level Accounting, nommé initialement Detailed Term Accounting (DTA)

3.2.1 De SCO à SCO-RCG

Le code SCO traite par des méthodes statistiques des structures telles que les UTA ou les SOSA. Il décrit correctement les STA qui composent un profil d'opacité. Il s'avère très utile pour traiter les atomes de Z moyen pour lesquels la structure atomique devient vite complexe en raison du nombre de transitions permises. En revanche, lorsque les raies spectrales sont peu nombreuses et bien séparées les unes des autres le code SCO n'est pas nécessairement l'outil le mieux adapté. Pour ces raies, un traitement détaillé est possible et souhaitable. Un critère de choix sur la pertinence d'un calcul détaillé ou d'un calcul statistique doit être trouvé. Ce critère est utilisé dans l'approche hybride.

Cette approche est au centre du code SCO-RCG [9]. Le code SCO [8] fournit les énergies des niveaux et les forces d'oscillateur des transitions permises, les intégrales coulombiennes et les intégrales dipolaires. Ce code développé dans les années 90, est un code de physique atomique et de calcul d'opacité dans les plasmas à l'équilibre thermodynamique local (ETL). Dans le code SCO-RCG, la résolution de l'équation de Schrödinger utilise la méthode de Hartree-Fock-Slater. L'initialisation du calcul se faisant, par rapport à la méthode Hartree-Fock, au moyen d'un potentiel de Thomas-Fermi [10]. La particularité du code vient d'une prise en compte de l'effet de l'environnement (plasma de température et densité finies) dans le calcul du potentiel d'échange [11]. Le choix du formalisme appliqué dépend de la taille du Hamiltonien ainsi que de la coalescence des raies/faisceaux. On peut représenter l'algorithme de calcul par le schéma ci-dessous :

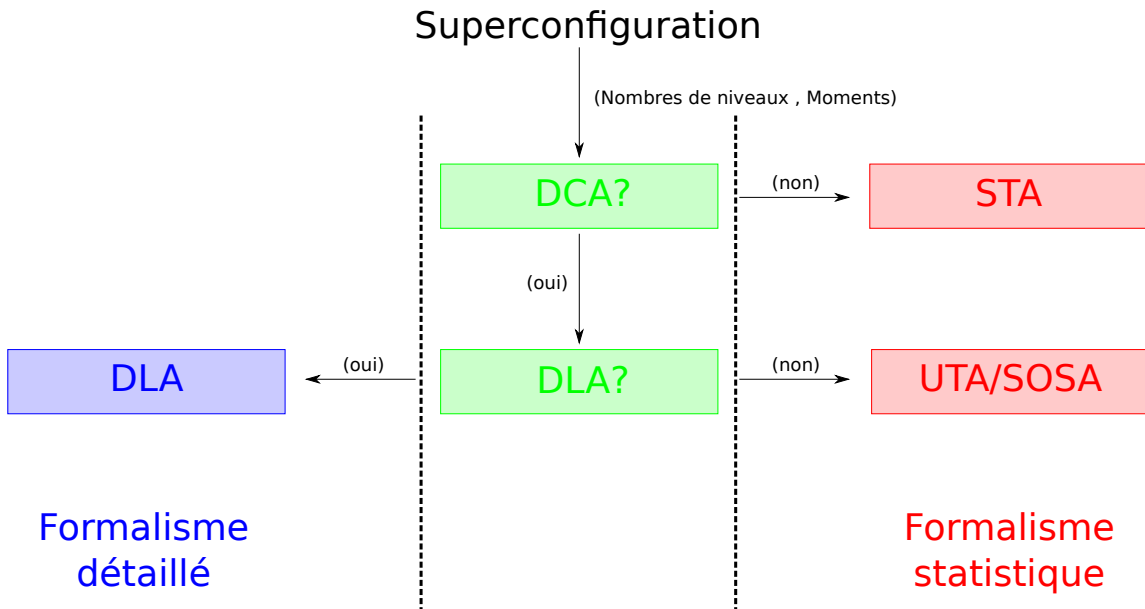


FIGURE 3.2: Principe de fonctionnement du code SCO-RCG.

A partir de la structure de la superconfiguration de départ (nombre de niveaux, moments, etc.), du nombre de transitions considérées et de leurs coalescences, le code fait un test pour savoir si un calcul DCA (Detailed Configuration Accounting) est pertinent ou non. La méthode DCA est une méthode statistique liée aux niveaux et aux transitions partant d'une configuration, elle utilise le formalisme UTA. Si la coalescence ne permet pas un calcul STA, on teste à nouveau pour savoir si un traitement détaillé DLA (*Detailed Line Accounting*) est nécessaire. Si les raies sont trop isolées, on calcule les faisceaux de manière détaillée, sinon on utilise une méthode UTA ou SOSA en fonction de l'importance du spin-orbite. Le calcul détaillé est pris en charge par la routine RCG du code Cowan alors que les calculs statistiques sur les structure UTA, SOSA ou STA sont effectués à l'aide du code SCO.

L'élargissement spectral tient compte des mécanismes suivants :

- les collisions inélastiques : traitées dans l'approximation d'impact
- l'effet Stark dû au microchamp ionique : traité dans l'approximation quasi-statique
- l'effet Doppler dû à l'agitation thermique des ions actifs
- la durée de vie finie des niveaux, responsable de ce qui est appelé élargissement naturel

L'élargissement collisionnel est traité par la méthode de Dimitrijević et Konjević [12]. Il conduit à un profil lorentzien. L'effet Stark ionique et l'effet Doppler sont associés à un profil gaussien. Enfin, l'élargissement naturel est responsable d'un profil lorentzien. La convolution d'un profil gaussien et d'un profil lorentzien conduit au profil de Voigt (voir Chapitre 1, Section 1.4.4). Un calcul exact du profil de Voigt, utilisant les formules de Humlicek [13] ne peut être envisagé car son couplage à un calcul purement statistique se révèle très coûteux en temps de calcul. Dans le code SCO-RCG, la convolution peut être traitée par la distribution de Pearson VII :

$$P_{w,\mu}(x) = \frac{2^{2(\mu-1)}\sqrt{2^{1/\mu}-1}\Gamma(\mu)^2}{\Gamma(2\mu-1)\pi\omega\left[(2^{1/\mu}-1)\left(\frac{x}{w}\right)^2+1\right]^\mu}, \quad (3.6)$$

où Γ est la constante de couplage ion-ion définie par :

$$\Gamma = \frac{\bar{Z}^2 e^2}{R_i k_B T}.$$

$R_i = \left(\frac{3}{4\pi N_i}\right)^{1/3}$ est le rayon ionique moyen, μ le paramètre de forme sur l'importance relative des élargissements gaussien et lorentzien et w la demi-largeur à mi-hauteur. Cette distribution est précise lorsque le profil est dominé par l'élargissement lorentzien (collisionnel). C'est le cas dans la suite. La routine choisie récemment pour le calcul du profil de Voigt est celle qui a été développée par Avrett [14]. De plus, le code a été modifié en intégrant des moments statistiques d'ordre supérieur à 2, afin de mieux décrire les distributions [9].

Les différentes méthodes de calculs (détaillée, UTA, STA) font intervenir des paramètres tels que la fonction de partition, la probabilité d'un faisceau/niveau.

3.2.2 Opacité par l'approche hybride

Un faisceau de transitions est représenté par une distribution qui est caractérisée par son énergie moyenne, sa force d'oscillateur globale f , la dégénérescence g et le nombre des raies. Ainsi, la fonction de partition totale s'écrit :

$$U_{\text{tot}} = \sum_{C_{\text{det}}} \sum_{\gamma J \in C} (2J + 1) e^{-\beta E_{\gamma J}} + \sum_{C_{\text{stat}}} g_C e^{-\beta E_C} + \sum_{\Xi} U_{\Xi} \quad (3.7)$$

où $\beta = 1/k_B T_e$ et U_{Ξ} est la fonction de partition de la super-configuration Ξ ($U_{\Xi} = \sum_{C \in \Xi} g_C e^{-\beta E_C}$). Les trois sommes dans le membre de droite représentent la hiérarchie : niveaux, configurations, super-configurations. γJ désigne un niveau, C_{det} la structure fine de la configuration C , C_{stat} une configuration non détaillée et Ξ une superconfiguration. On notera g_C et g_{Ξ} les poids statistiques de la configuration C et de la super-configuration Ξ , respectivement. L'opacité lié-lié du plasma est donnée par :

$$\kappa(\nu) = \sum_{C_{\text{det}}} \kappa_{C \rightarrow C'}^{\text{det}}(\nu) + \sum_{C_{\text{stat}}} \kappa_{C \rightarrow C'}^{\text{stat}}(\nu) + \sum_{\Xi} \kappa_{\Xi \rightarrow \Xi'}(\nu), \quad (3.8)$$

La contribution pour laquelle on effectue un calcul détaillé est donnée par :

$$\kappa_{C \rightarrow C'}^{\text{det}}(\nu) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{N_A}{A} \frac{\pi e^2 h}{mc} \sum_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'} f_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'} P_{\gamma J} \psi_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'}(\nu), \quad (3.9)$$

où $f_{\gamma J \rightarrow \gamma' J'}$ est la force d'oscillateur entre les niveaux γJ et $\gamma' J'$, ψ le profil de la raie et $P_{\gamma J}$ la probabilité du niveau γJ :

$$P_{\gamma J} = \frac{(2J + 1)}{U_{\text{tot}}} e^{-\beta E_{\gamma J}}. \quad (3.10)$$

La probabilité d'un niveau/configuration/super-configuration est relative au niveau/configuration/super-configuration initial de la transition, que ce soit en émission ou en absorption. La contribution statistique des faisceaux de transitions s'écrit :

$$\kappa_{C \rightarrow C'}^{\text{stat}}(\nu) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{N_A}{A} \frac{\pi e^2 h}{mc} f_{C \rightarrow C'} P_C \psi_{C \rightarrow C'}(\nu), \quad (3.11)$$

où P_C désigne la probabilité de la configuration C :

$$P_C = \frac{g_C}{U_{\text{tot}}} e^{-\beta E_C} \quad (3.12)$$

et $f_{C \rightarrow C'}$ la force d'oscillateur du faisceau de transitions $C \rightarrow C'$. La contribution statistique des super-faisceaux de transitions $\Xi \rightarrow \Xi'$ s'écrit :

$$\kappa_{\Xi \rightarrow \Xi'}(\nu) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{N_A}{A} \frac{\pi e^2 h}{mc} f_{\Xi \rightarrow \Xi'} P_{\Xi} \psi_{\Xi \rightarrow \Xi'}(\nu), \quad (3.13)$$

où P_{Ξ} est la probabilité de la super-configuration Ξ :

$$P_{\Xi} = \frac{g_{\Xi}}{U_{\text{tot}}} e^{-\beta E_{\Xi}}. \quad (3.14)$$

Cette approche est appropriée pour l'analyse des spectres expérimentaux. Une comparaison avec l'approche entièrement détaillée a fait l'objet d'une partie de notre étude. Dans la section suivante, nous présenterons les résultats de nos calculs d'opacités.

Récemment, Mínguez et ses collaborateurs [15] ont calculé l'opacité du carbone à l'équilibre thermodynamique local (ETL) et hors-équilibre thermodynamique local (NETL). Il s'agissait d'un ion léger pour lequel un calcul détaillé peut être envisagé. Lorsqu'il s'agit d'atomes plus lourds, nous n'avons pas toujours la possibilité d'effectuer un calcul détaillé. Pour de tels systèmes, le code SCO-RCG trouve sa pleine justification. Commençons par nous intéresser à la contribution lié-lié.

3.2.3 Opacité lié-lié

Le germanium peut être utilisé comme dopant dans les ablateurs. Cet atome étant assez lourd, $Z = 32$, nous commencerons par étudier un cas simple avant de passer à des situations plus réalistes faisant intervenir les divers degrés de charge ionique. Le code détaillé PPP requérant des temps de calcul très longs, nous limiterons aux transitions $n = 3 - n = 3$ se produisant dans la super-configuration $(1)^2(2)^8(3)^4$. Les couches K et L sont fermées. Cette super-configuration fait intervenir les 12 configurations non-relativistes de la table 3.1.

$$\text{SC } (1)^2(2)^8(3)^4 \left\{ \begin{array}{l} 3s^23p^2 \\ 3s^23p^13d^1 \\ 3s^23d^2 \\ 3s^13p^3 \\ 3s^13p^23d^1 \\ 3s^13p^13d^2 \\ 3s^13d^3 \\ 3p^4 \\ 3p^33d^1 \\ 3p^23d^2 \\ 3p^13d^3 \\ 3d^4 \end{array} \right.$$

TABLE 3.1: Configurations non-relativistes associées à la superconfiguration $(1)^2(2)^8(3)^4$.

Les transitions dipolaires électriques E1 sont au nombre de 33884. Ce cas d'étude est intéressant car il fait intervenir un nombre important de transitions

tout en restant dans le domaine d'application des codes détaillés. Les différences détaillés/statistiques sont ainsi aisément quantifiables. Fixons la densité et la température électroniques² : $N_e = 1.7 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ et $T_e = 200 \text{ eV}$. Ces valeurs sont issues d'une simulation hydrodynamique du plasma.

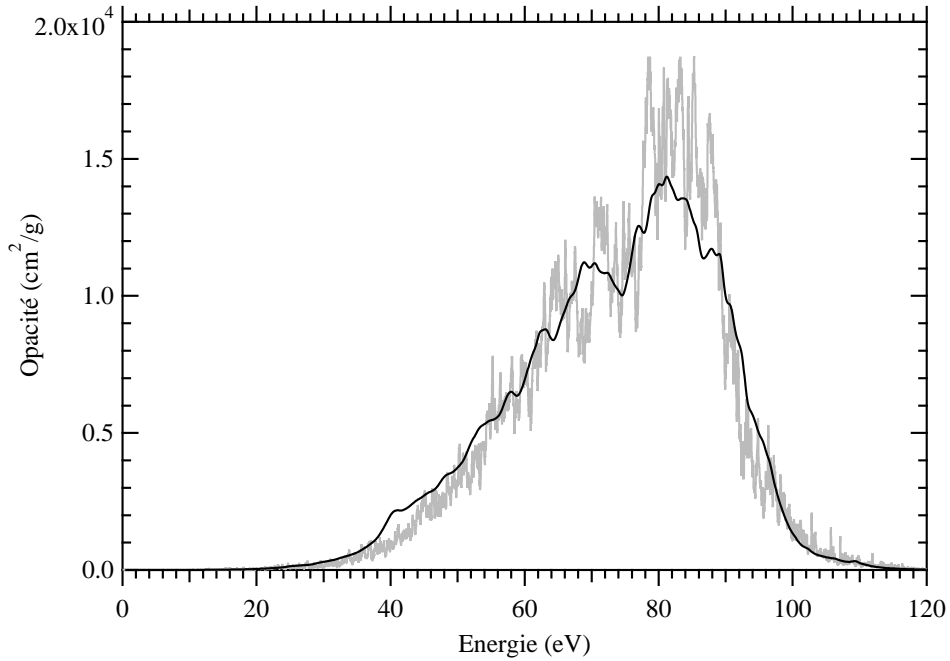


FIGURE 3.3: Opacité lié-lié de Ge^{18+} en fonction de l'énergie. Courbe grise : approche détaillée (code PPP), courbe noire : approche hybride (SCO-RCG). $N_e = 1.7 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$, $T_e = 200 \text{ eV}$.

La figure 3.3 représente l'opacité lié-lié du germanium dans la super-configuration qui est explicitée dans la table 3.1³. Des calculs préliminaires ont permis de vérifier que l'élargissement Stark était négligeable, en raison de la faible valeur de n . De plus, une connaissance précise des élargissements physiques n'est pas nécessaire. En effet, les raies spectrales (niveau-niveau) se recouvrent. Il est important de noter que les termes d'interférences [16], issus de la présence des électrons spectateurs de la couche $n = 3$, n'ont pas été pris en compte ni dans PPP ni dans SCO-RCG. Il est possible que ces effets auraient légèrement modifié le spectre. L'accord entre le calcul détaillé et le calcul hybride est bon, à l'exception des énergies autour de 80 eV. Cette divergence est probablement due à une légère surestimation de l'élargissement électronique dans SCO-RCG. A cette température et cette densité, l'élargissement électronique est plus important que l'élargissement Doppler.

2. La température ionique T_i est prise égale à T_e .

3. Par convention l'opacité massique (en cm^2/g) sera appelée opacité.

Dans la figure 3.4, nous avons représenté l'opacité lié-lié du germanium. La température électronique est fixée à 50 eV. Deux densités sont considérées : $\rho=4.6$ g·cm⁻³ et $\rho=14.3$ g·cm⁻³. Nous avons pris en compte tous les ions germanium avec les fractions ioniques correspondantes. Le calcul a été effectué avec le code SCO-RCG. Dans l'intervalle [0, 300] eV, les transitions correspondent à la bande M. Dans l'intervalle [1200,1600] eV, elles correspondent à la bande L.

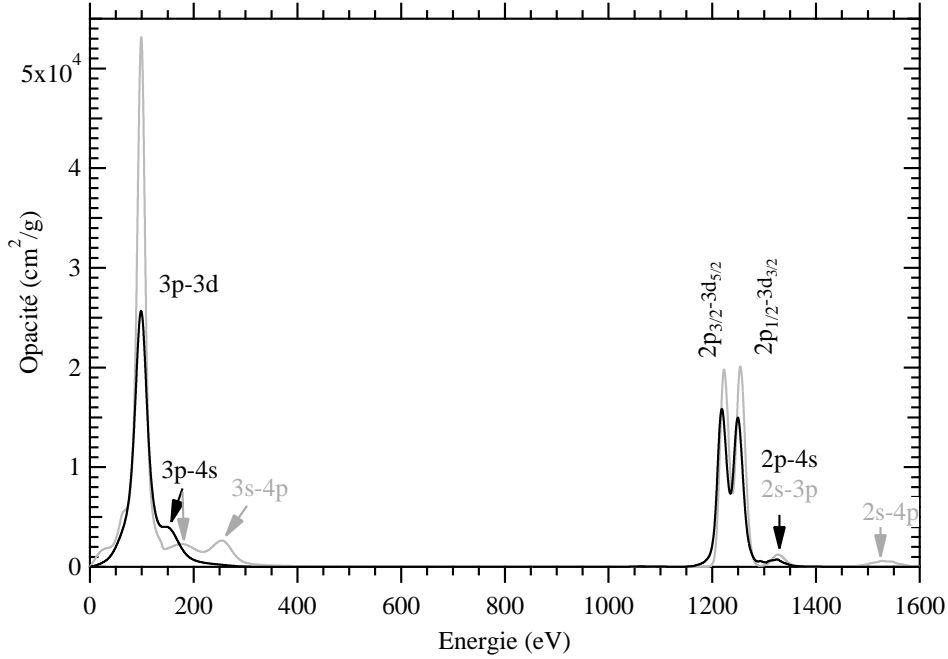


FIGURE 3.4: Opacité lié-lié de Ge en fonction de l'énergie à $T_e = 50$ eV. Courbe grise : $\rho = 4.6$ g·cm⁻³, courbe noire : $\rho = 14.3$ g·cm⁻³.

Quand la densité augmente, les STA $3p - 3d$ et $3p - 4s$ montrent une diminution de l'opacité totale, qui s'explique par l'augmentation de l'élargissement électronique. Ce comportement se produit également pour le doublet relativiste $2p_{3/2} - 3d_{5/2}$ et $2p_{1/2} - 3d_{3/2}$ autour de 1250 eV.

Intéressons-nous maintenant à la variation de l'opacité lié-lié avec la température. Nous avons fixé la masse volumique à $\rho = 4.6$ g·cm⁻³. Comme précédemment, tous les ions germanium sont pris en compte avec leur fractions ioniques respectives. Le calcul est fait avec le code SCO-RCG. Dans la figure 3.5, nous avons représenté l'opacité lié-lié du germanium. L'opacité a été calculée pour trois températures : 50, 100 et 150 eV. L'augmentation de la température induit l'apparition de nouveaux pics. Ceci s'explique par un accroissement de la population des couches supérieures. Nous notons la "disparition" du doublet relativiste, due à une augmentation de l'élargissement Doppler qui est proportionnelle à la racine carrée de la température ionique (voir Equation 1.39).

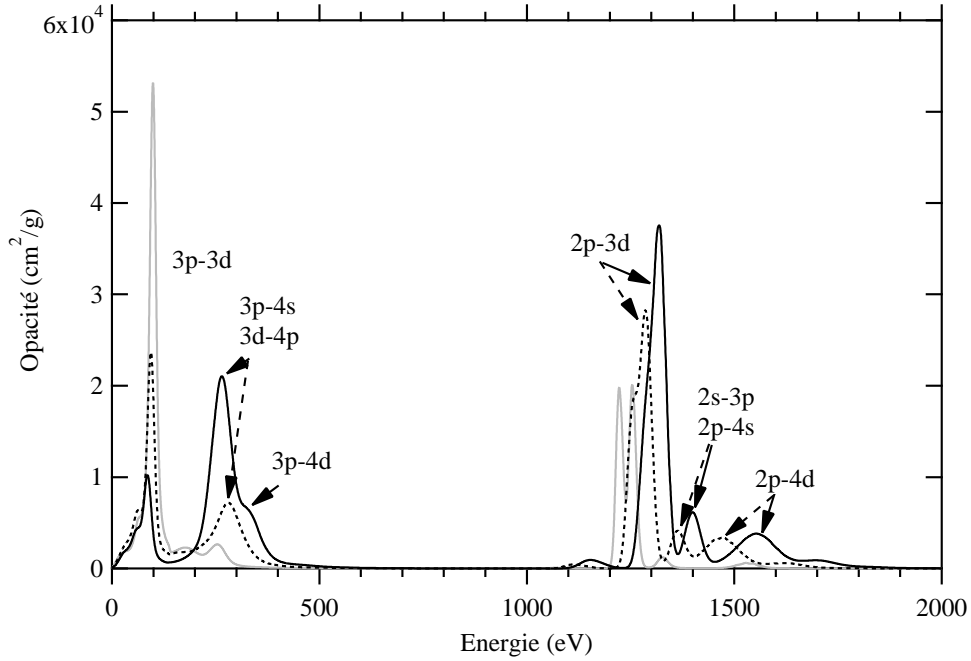


FIGURE 3.5: Opacité lié-lié de Ge en fonction de l'énergie, à $\rho = 4.6 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$. Courbe grise : $T_e = 50 \text{ eV}$, courbe pointillée : $T_e = 100 \text{ eV}$, courbe noire : $T_e = 150 \text{ eV}$.

Nous avons donc montré que le code SCO-RCG fournit un spectre d'opacité valable et est efficace au regard d'un code détaillé dans le cas des ions lourds ayant beaucoup de transitions.

3.2.4 Autres contributions

Les transitions lié-libre (photoionisation) et libre-libre contribuent à l'opacité totale. Nous nous proposons de les inclure dans la suite des calculs.

a Opacité libre-libre

Une particule libre (électron dans le cas présent car plus énergétique) verra son énergie cinétique modifiée par un champ électrique. Cette variation d'énergie peut s'accompagner de l'émission ou de l'absorption d'un photon, selon que l'électron est ralenti ou accéléré :

$$e^-(E) \rightleftharpoons e^-(E') + h\nu.$$

On parle de Bremsstrahlung inverse pour l'opacité. Le spectre est par principe continu. Il dépend de la température à travers la distribution des vitesses des électrons et de la densité du plasma.

L'opacité libre-libre s'écrit [17] :

$$k_{f-f}(\nu) = N_e N_i \int_0^\infty \sigma v f(v) dv,$$

où $f(v)$ est la fonction de distribution des vitesses des électrons, considérée comme Maxwellienne. σ est la section efficace de la transition libre-libre entre les états d'énergie E' et E tels que $E = E' + h\nu$. Le calcul de cette intégrale conduit à l'expression utilisée dans le code SCO-RCG :

$$k_{f-f}(\nu) = \frac{4}{3} \sqrt{\frac{2\pi}{3}} m_e k_B T_e \frac{e^6 h^2 \rho}{c (h\nu)^3} \bar{Z}^2 g_{f-f} N_e N_i. \quad (3.15)$$

b Opacité lié-libre

La méthode de calcul de l'opacité lié-libre a été abordée dans le chapitre 2, section 2.5.1. Nous rappelons que nous utilisons un formalisme statistique pour calculer sa contribution. Afin de mesurer l'importance relative des divers processus, nous avons représenté dans la figure 3.6 les opacités totale, lié-lié, lié-libre et libre-libre du germanium à 50 eV et $4.6 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$. La courbe bleue représente l'opacité totale. Nous notons que dans la bande M de l'or, qui émet le rayonnement X absorbé par les dopants de l'ablateur, c'est-à-dire entre 1 et 2 keV, les processus dominants sont les transitions lié-lié et lié-libre. La contribution des transitions libre-libre à l'opacité totale est marginale.

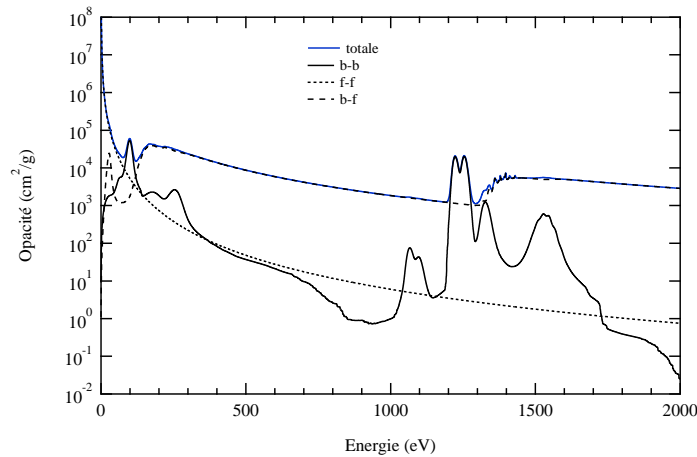


FIGURE 3.6: Opacité lié-lié (courbe noire continue), lié-libre (courbe tiretée), libre-libre (courbe pointillée) et totale (courbe bleue) du germanium. $\rho = 4.6 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$, $T_e = 50 \text{ eV}$.

3.2.5 Opacité totale

Dans la suite de ce chapitre, nous calculerons l'opacité totale du germanium et du silicium. Le silicium est également utilisé comme dopant dans les ablateurs. Les trois types de transition sont pris en compte. Tous les états d'ionisation sont considérés. Les populations ioniques sont supposées à l'équilibre thermodynamique local. Dans ces conditions, l'approche intégralement détaillée ne peut pas être mise en oeuvre. Seule l'approche hybride permet d'accéder à l'opacité.

Considérons quelques températures électroniques réalistes, le long d'un chemin thermodynamique déterminé par la masse volumique $0.1\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$. Si on est à l'équilibre thermodynamique local, le code SCO nous donne l'ion majoritaire et la fraction ionique correspondante. Ce calcul a été fait pour les deux dopants et sont reportés dans la table 3.2 ci-dessous. Les valeurs des fractions ioniques montrent, qu'à ces températures, le calcul de l'opacité totale doit faire intervenir plusieurs ions. Par exemple, si on se concentre sur le germanium, la fraction ionique de l'ion majoritaire n'est pas très grande, ce qui implique la participation de plusieurs ions. En moyenne, l'opacité du germanium impliquera les ions de charge comprises entre $z_{\text{maj}} - 3$ et $z_{\text{maj}} + 3$. En ce qui concerne le silicium, les ions qui participent à l'opacité ont des charges comprises entre $z_{\text{maj}} - 2$ et $z_{\text{maj}} + 2$.

T_e (eV)	Ge	p_i	Si	p_i
100	Ge ¹⁶⁺	0.290	Si ¹⁰⁺	0.374
200	Ge ²¹⁺	0.356	Si ¹²⁺	0.693
300	Ge ²⁴⁺	0.326	Si ¹²⁺	0.532
400	Ge ²⁷⁺	0.323	Si ¹³⁺	0.800
500	Ge ²⁹⁺	0.387	Si ¹⁴⁺	0.784

TABLE 3.2: Ion germanium ou silicium le plus abondant et fraction ionique correspondante en fonction de la température. La masse volumique est fixée à $0.1\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$.

Dans la figure 3.7, nous avons représenté l'opacité du germanium et du silicium pour une masse volumique de $0.1\text{g}/\text{cm}^3$ et une température électronique de 100 eV. Nous voyons que l'opacité du germanium domine celle du silicium dans la quasi-totalité de l'intervalle spectral, à l'exception du faisceau $1s-2p$ du silicium, à $\simeq 1850$ eV. L'analyse des deux spectres montrent que l'opacité varie différemment pour les deux atomes.

Si on augmente la température jusqu'à 500 eV (figure 3.8), on observe une diminution globale de l'opacité de fond (Bremsstrahlung inverse) due à l'augmentation de la température pour les deux atomes. Cependant, pour le germanium on note une conservation de l'opacité lié-lié pour $h\nu \approx 1700$ eV aux dépens des pics à $h\nu \approx 1400$ eV. Ceci s'explique par le peuplement des niveaux supérieurs de l'atome ($n=4, 5$). Dans le cas du silicium, on note une diminution de $1s-2p$ alors qu'un pic, $1s-3p$, émerge autour de ≈ 2 keV. En effet, lorsque la température augmente on

peuple des niveaux de plus en plus excités.

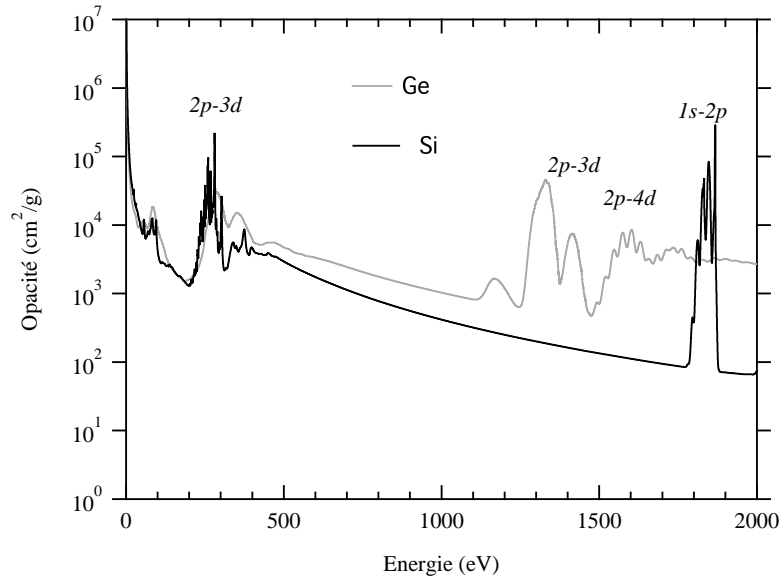


FIGURE 3.7: Opacité totale de Ge et Si pour $\rho = 0.1 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ et $T_e=100 \text{ eV}$. Courbe grise : Ge, courbe noire : Si

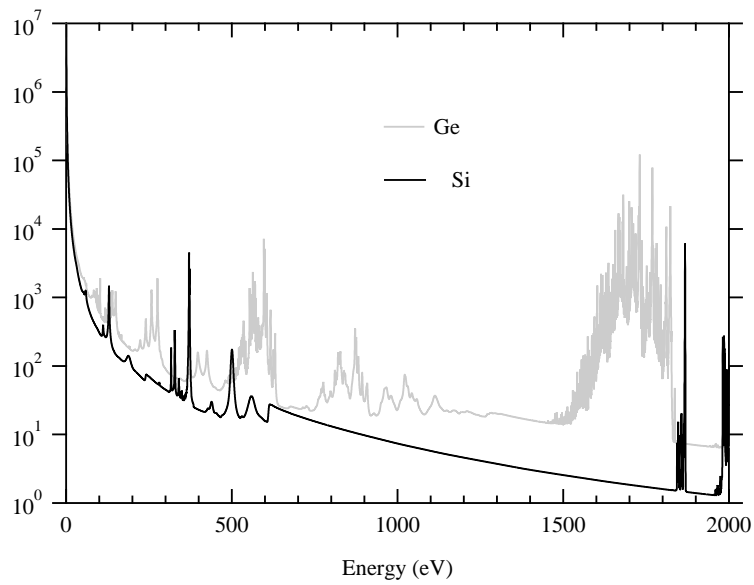


FIGURE 3.8: Idem Fig. 3.7 pour $T_e=500 \text{ eV}$.

Comme on peut le voir le spectre varie de manière importante avec la température électronique. L'évolution du plasma durant l'irradiation de la capsule de

combustible tend à accroître la température et la densité. Il est alors essentiel d'étudier la variation de l'opacité avec T_e et N_e .

Intéressons-nous à la variation de l'opacité totale des deux atomes avec la température [18]. La masse volumique est toujours égale à $0.1 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$. L'opacité du germanium diminue avec la température à l'exception des pics se trouvant à $h\nu \approx 1700 \text{ eV}$ (voir Figure 3.9). A cette énergie, on observe une forte augmentation de l'opacité dès que la température croît d'une centaine d'eV. Ce comportement justifie donc l'analyse faite, selon laquelle les niveaux d'énergie de n élevé se peuplent et créent de nouveaux faisceaux de transition. Concernant le silicium (voir Figure 3.10), la variation est similaire. Quand la température augmente, la structure des faisceaux dans l'intervalle [1850 - 2000] eV diminue au profit de structures apparaissant dans l'intervalle [2200 - 3000] eV pour les mêmes raisons que pour le germanium.

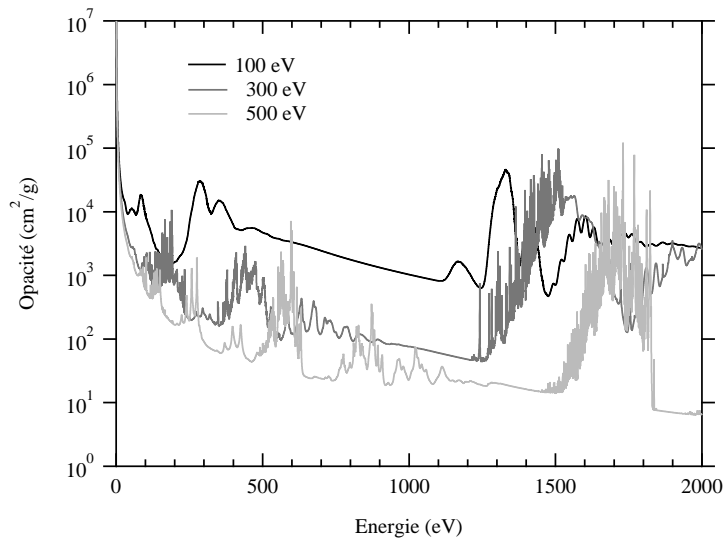


FIGURE 3.9: Opacité totale du germanium pour $\rho = 0.1 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ et trois températures.

Si on compare les spectres d'opacité du germanium et du silicium, on note une forte différence au niveau des énergies dans l'intervalle [1850 - 2500] eV. La présence de structures dans le germanium à ces énergies induit une absorption des rayonnements X à haute énergie. Ces rayons ont la propriété de perturber la compression de la bille de combustible car ils pénètrent au-delà du front d'ablation. La compression n'est donc plus isotrope et tend à diminuer la probabilité des réactions de fusion. Pour confirmer cette analyse, il nous faut également étudier la variation de l'opacité avec la densité. Fixons la température à la valeur médiane de 300 eV et faisons varier la masse volumique entre 0.1 et $1 \text{ g}/\text{cm}^3$.

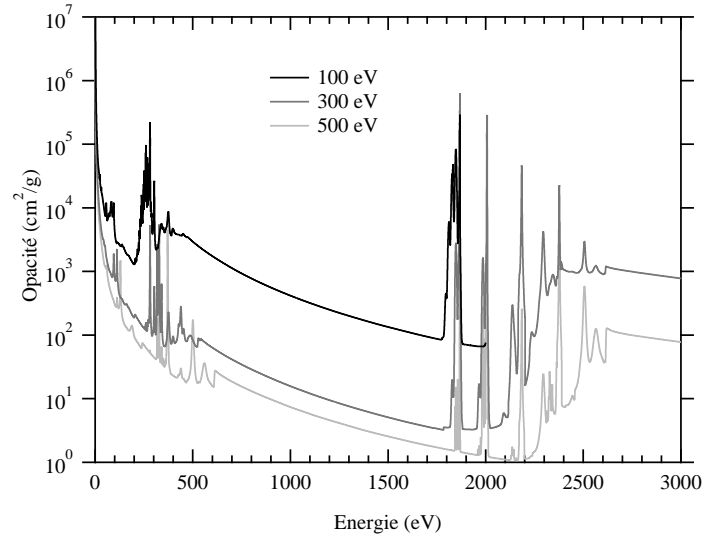
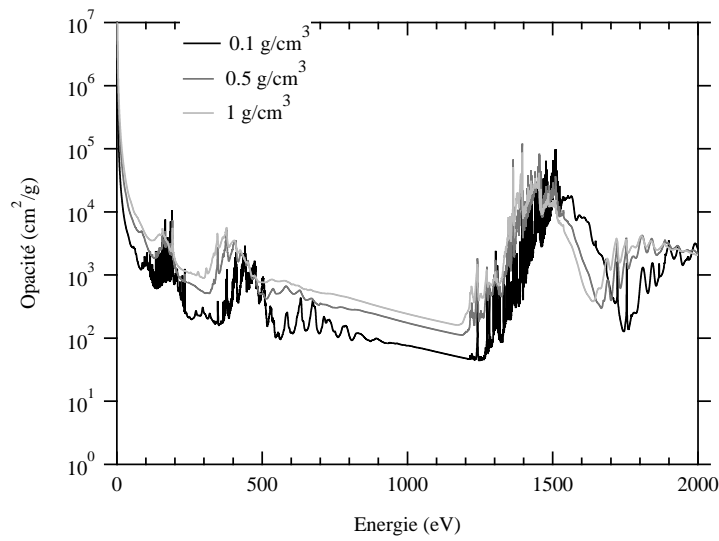


FIGURE 3.10: idem Fig. 3.9 pour le silicium.

FIGURE 3.11: Opacité totale du germanium pour $T_e = 300$ eV et trois masses volumiques.

Lorsque la densité augmente, l'opacité augmente (voir Figures 3.11 et 3.12). Pour le germanium, on remarque que lorsque la masse volumique passe de 0.1 à 1 g·cm⁻³, on a une coalescence des raies qui est due à l'élargissement collisionnel électronique. Les spectres sont moins sensibles aux variations en densité qu'aux variations de température.

Dans les calculs de transport du rayonnement au sein du plasma, on utilise sou-

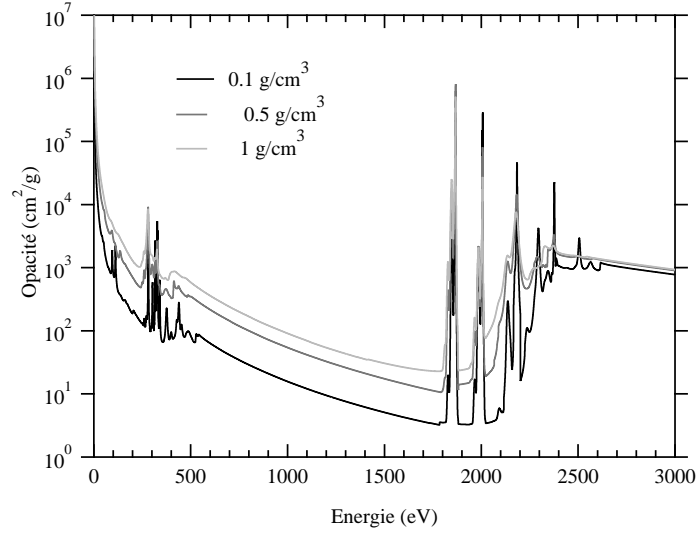


FIGURE 3.12: Idem Figure 3.11 pour le silicium.

vent les valeurs moyennes de l'opacité. On conclut ce chapitre par une présentation des opacités moyennes de Planck et de Rosseland.

3.2.6 Opacité intégrée

L'analyse du spectre monochromatique permet d'obtenir des informations précises sur les énergies correspondant aux raies d'absorption des ions et sur les intensités. La moyenne d'une opacité sur la densité spectrale de Planck est également une source d'information. La densité spectrale de Planck n'est applicable que si on a un équilibre thermodynamique. Elle est donnée par :

$$B_\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^2} \frac{1}{(e^{h\nu/k_B T_e} - 1)}. \quad (3.16)$$

On définit l'opacité moyenne de Planck par :

$$k_P = \frac{\int_0^\infty k(\nu) B_\nu d\nu}{\int_0^\infty B_\nu d\nu}. \quad (3.17)$$

Cette formule représente la moyenne d'énergie émise par le plasma sur la distribution de Planck. Elle s'applique à un plasma optiquement mince dans lequel une partie des photons n'est pas confinée. Pour un plasma optiquement épais, le transfert d'énergie par rayonnement est non négligeable. La théorie a démontré que le transport du rayonnement est déterminé par l'opacité de Rosseland que l'on définit comme la moyenne harmonique de l'opacité spectrale :

$$\frac{1}{k_R} = \frac{\int_0^\infty \frac{1}{k(\nu)} \frac{\partial B_\nu}{\partial T_e} d\nu}{\int_0^\infty \frac{\partial B_\nu}{\partial T_e} d\nu}. \quad (3.18)$$

Comme il s'agit d'une moyenne harmonique, l'opacité de Rosseland est très sensible aux "creux" du spectre. C'est pourquoi le calcul de ce dernier doit être précis. Dans la pratique, on ne peut pas intégrer en énergie jusqu'à l'infini. On choisit donc une valeur "plafond" égale à au moins vingt fois la température (en eV) choisie (car le maximum de B_ν est à $3k_B T_e$ et $\partial B/\partial T_e$ à $4k_B T_e$). De plus, plus le nombre de configurations est élevé, plus on se rapproche d'un modèle réaliste car le spectre contient plus de raies. Le code SCO-RCG fournit les deux opacités moyennes. On les a représentées en fonction de la température électronique et pour la masse volumique de $0.1 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$.

Dans la figure 3.13, nous avons représenté la variation avec la température des opacités moyennes de Planck du germanium et du silicium. Nous avons fait varier la température entre 100 et 500 eV. Nous notons que l'opacité du germanium est supérieure à celle du silicium.

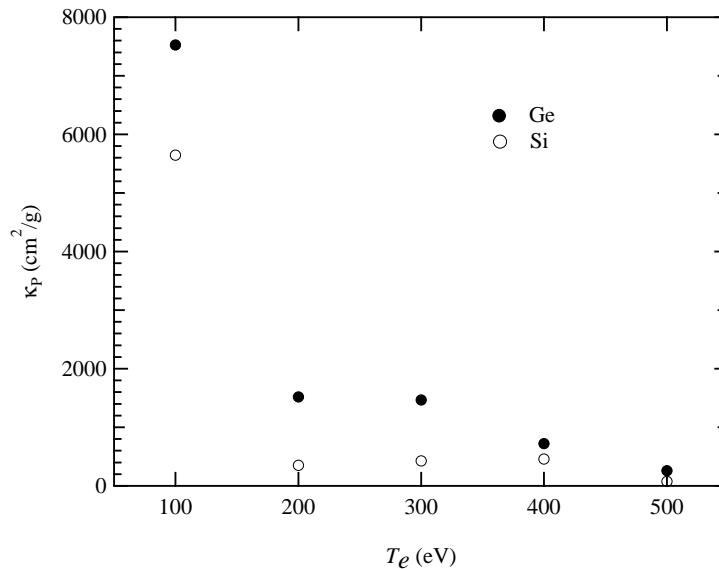


FIGURE 3.13: Opacité moyenne de Planck du germanium et du silicium pour une densité de $0.1 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$.

La figure 3.14 représente la variation de l'opacité moyenne de Rosseland. Nous notons encore que l'opacité du germanium est supérieure à celle du silicium. A l'exception de la température 100 eV, nous constatons que la différence entre les opacités des deux éléments est plus petite que pour l'opacité moyenne de Planck. La comparaison des deux moyennes montre que l'opacité de Planck est supérieure à l'opacité de Rosseland. L'opacité intégrée diminue en fonction de la température car la charge moyenne de l'ion augmente. Pour des températures faibles, le plasma contient des atomes dans de nombreux états ionisés qui ont des fractions ioniques non négligeables. Avec l'augmentation de la température, la distribution ionique est

plus piquée ; par conséquent le nombre de transitions possibles diminue. Ainsi, à température donnée, les états d'ionisation pour le germanium sont plus nombreux, et globalement plus faibles que pour le silicium. Le germanium a donc plus de couches peuplées et favorise ainsi plus de transitions lié-lié que le silicium. En effet, globalement le nombre de transitions pour le germanium est plus grand que pour le silicium.

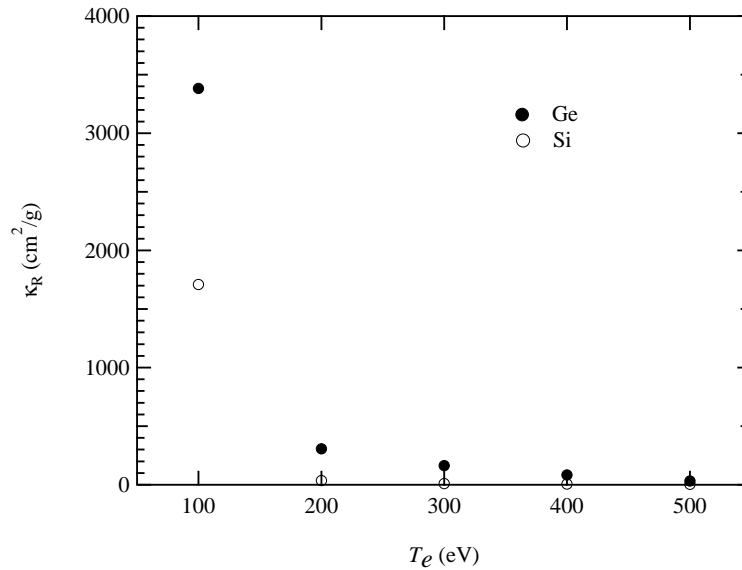


FIGURE 3.14: Opacité moyenne de Rosseland du germanium et du silicium pour une densité de 0.1 g.cm^{-3} .

3.3 Conclusions et perspectives

Nous avons montré qu'une méthode hybride combinant calculs détaillés et calculs statistiques est requise pour l'étude d'un spectre constitué d'un grand nombre de transitions lié-lié. Le code SCO-RCG, développé au CEA, réalise cette combinaison. De plus, il prend en compte les divers mécanismes d'élargissement. Il constitue donc un bon outil pour le calcul d'opacité d'atomes de Z moyen ou grand et a été utilisé pour calculer l'opacité de deux dopants : germanium et silicium. Notons cependant que lorsque le spectre comporte un nombre raisonnable de raies, le code PPP semble plus approprié car il permet une description plus fine des mécanismes d'élargissement spectral. Le code SCO-RCG semble surestimer l'élargissement électronique.

Nous avons calculé l'opacité monochromatique du germanium et du silicium et avons étudié sa variation avec la température électronique et la masse volumique. Le silicium présente une opacité totale moins élevée et moins détaillée pour les hautes

énergies que le germanium, l'absorption des faisceaux X incidents serait donc moins importante et plus homogène, ce qui implique que le silicium semble être un meilleur candidat comme dopant. Nous avons également représenté la variation des opacités moyennes de Planck et Rosseland.

L'étape suivante sera le calcul de l'opacité d'un mélange de dopants. D'autres mécanismes d'élargissement, comme celui induit par l'effet Zeeman seront pris en compte.

Appendices

ANNEXE C

Code Cowan

Le code Cowan développé dans les années 70, à Los Alamos, par R. D. Cowan [10] est un code de physique atomique. Il ne permet pas de calculer les populations des niveaux. Dans sa première version, il utilise la méthode de Hartree-Fock. Les versions suivantes utilisaient d'autres méthodes, telle la méthode Hartree-Fock-Slater. Il comporte trois routines :

1. RCN : première routine. Utilise la méthode HF, ou une autre dans une version plus récente, pour calculer les fonctions radiales de tous les électrons d'une configuration. RCN fournit les différentes intégrales de Slater, directes F_k et d'échange G_k , les termes de spin-orbite. Elle en déduit l'énergie moyenne de la configuration.
2. RCN2 : deuxième routine. Elle sert à paramétrer les données pour l'exécution de la dernière routine : dipôles et quadrupôles électriques, dipôles et quadrupôles magnétiques.
3. RCG : troisième routine. Elle consiste à diagonaliser la matrice hamiltonienne pour chaque valeur de J total, afin d'obtenir les valeurs propres et vecteurs propres en fonction du couplage considéré (LS , jj , intermédiaire). Par application des fonctions d'onde on déduit les forces d'oscillateur et les coefficients d'émission spontanée. Dans les versions récentes, cette routine permet de traiter les transitions (E1) et (E2) ainsi que les transitions (M1) et (M2).

Le code Cowan est un outil robuste pour le calcul des niveaux d'énergie. Malheureusement, il est limité par le nombre de configurations que l'on peut traiter. Ainsi, nous l'utilisons en première approche sans considérer de configurations trop complexes en entrée de RCN. Néanmoins, dans les dernières versions, la routine RCG peut être utilisée dans un calcul des spectres d'opacité et d'émissivité. C'est pourquoi cette routine a été modifiée et implémentée, pour la partie détaillée, dans un code basé sur une méthode hybride.

Bibliographie

- [1] E. G. Hill, S. J. Rose, High Energy Density Physics **8**, 307 (2012).
- [2] A. Calisti, F. Khelifaoui, R. Stamm, B. Talin, and R. W. Lee, Phys. Rev A **42**, 5433 (1990).
- [3] B. Talin, A. Calisti, L. Godbert, R. Stamm, R. W. Lee and L. Klein, Phys. Rev. A **5**, 1918 (1995).
- [4] J. Bauche, C. Bauche-Arnoult, and M. Klapisch, Phys. Rev. A **20**, 2024 (1979).
- [5] J. Bauche, C. Bauche-Arnoult and M. Klapisch, Phys. Scr. **37**, 659 (1988).
- [6] C. Bauche-Arnoult, J. Bauche, and M. Klapisch, Phys. Rev. A **31**, 2248 (1985).
- [7] A. Bar-Shalom, J. Oreg, W. H. Goldstein, D. Shvarts and A. Zigler, Phys. Rev. A **40**, 3183 (1989).
- [8] T. Blenski, A. Grimaldi and F. Perrot, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Trans. **65**, 91 (2000).
- [9] Q. Porcherot, J.-C. Pain, F. Gilleron and T. Blenski, High Energy Density Phys. **7**, 234 (2011).
- [10] R. D. Cowan, The theory of atomic structure and spectra, University of California Press (1981).
- [11] H. Iyetomi and S. Ichimaru, Phys. Rev. A **34**, 1, 433 (1986).
- [12] M. S. Dimitrijević C and N. Konjević, J. Quantit. Spectrosc. and Radiat. Trans. **24**, 451 (1980).
- [13] J. Humlicek, J. Quantit. Spectrosc. and Radiat. Trans. **27**, 437 (1982).
- [14] E. H. Avrett and R. Loeser, Smithsonian Astrophysical Observatory Report **303**, (1969).
- [15] E. Mínguez, R. Florido, R. Rodríguez, J. M. Gil, J. G. Rubiano, M. A. Mendoza, D. Suárez and P. Martel, High Energy Density Phys. **6**, 57 (2010).
- [16] E. Galtier et al, Phys. Rev. A **87**, 033424 (2013).
- [17] I. I. Sobel'man, Introduction to the Theory of Atomic Spectra, Pergamon Press (1972).
- [18] G. Mondet , F. Gilleron, J.-C. Pain, A. Calisti and D. Benredjem, High Energy Density Physics **9**, 553 (2013).
- [19] D. Benredjem, G. Mondet, A. Calisti , F. Gilleron and J.-C. Pain, Proc. SPIE 8602, High Power Lasers for Fusion Research II, 860205 (2013).

Physique atomique et transport en FCM

La fusion par confinement magnétique (FCM) s'appuie sur l'idée de franchir la barrière coulombienne entre les atomes par l'augmentation de la température. La configuration tokamak a été développée dans cette optique et doit permettre une pureté minimale du plasma afin de faciliter la fusion. Néanmoins, des atomes sont arrachés à la paroi faisant face au plasma, ou bien sont injectés délibérément : ce sont les impuretés.

Ces impuretés provoquent des pertes radiatives et modifient la distribution interne en énergie du plasma. De plus, ces atomes en s'ionisant par transfert d'énergie avec les électrons du plasma diminuent la température du système (plus précisément la température électronique). Ce comportement pourrait s'avérer sans conséquence pour les réactions de fusion, mais ces particules *migrent* vers le coeur du plasma et le refroidissent, ce qui abaisse le taux de réaction. Le domaine d'étude porte donc sur l'analyse de cette migration des impuretés. L'objectif final de ce travail serait de contrôler le *transport* des impuretés sur l'installation ITER pour purifier le plasma de coeur au lieu de le polluer. A l'IRFM (Institut de Recherche sur la Fusion par confinement Magnétique), l'étude du transport se fait en analysant les expériences au moyen du code ITC (Impurity Transport Code). Les paramètres de l'expérience sont mesurés par des diagnostics non destructifs principalement basés sur le rayonnement du plasma. Mais pour analyser cette émission, il faut connaître précisément les données atomiques de l'impureté présente. Notre travail a porté sur le calcul et l'analyse des processus au sein du plasma et sur la comparaison avec les données mises à disposition par le consortium ADAS.

Dans ce chapitre, après un bref rappel du fonctionnement d'un tokamak et des lois générales du transport, nous détaillerons l'expérience menée sur Tore Supra (Cadarache) et Asdex Upgrade (Axially Symmetric Divertor EXperiment, Garching) ainsi que le contexte d'étude. Nous exposerons notre travail sur la physique atomique des plasmas FCM, à travers la chaîne de codes HULLAC (Hebrew University Lawrence Livermore Atomic Code).

4.1 Transport des particules dans le plasma

La géométrie du champ magnétique dans un tokamak induit le confinement des particules du plasma. Régies par la force de Lorentz, leurs trajectoires sont

approximativement des hélices dont les axes sont les lignes de champ. Le mouvement le long de ces lignes est responsable du transport parallèle qui tend à homogénéiser les grandeurs caractéristiques du plasma sur chaque surface magnétique. Il existe un transport radial qui résulte des processus collisionnels, des dérives des particules par différentes forces (dérive de champs croisés $\vec{E} \wedge \vec{B}/B^2$) et de la turbulence du plasma [1, 2]. C'est le transport radial qui est responsable de la pollution du coeur par les impuretés.

Ce chapitre porte sur le rôle des impuretés dans la présentation des lois générales du transport et de la physique atomique des plasmas magnétisés. On supposera que pour l'étude du transport radial dans les décharges de Tore Supra, le plasma a une symétrie toroïdale et poloïdale.

4.1.1 Les impuretés

Les impuretés sont les atomes présents dans le plasma et qui ne constituent pas du combustible pour les réactions de fusion. Elles ne sont pas toujours néfastes à la stabilité de la décharge. On distingue ainsi deux types d'impureté.

Les impuretés dites intrinsèques, qui sont toujours présentes dans le plasma avec le combustible. Elles sont issues de la paroi de la chambre du tokamak par interaction avec le plasma. Dans Tore Supra, les parois sont principalement constituées de carbone (limiteur) et de fer (paroi de l'enceinte à vide). Le carbone provient d'une zone où le plasma est en contact avec le limiteur, le contrôle de son érosion est difficile. C'est pourquoi les plasmas contiennent toujours quelques pourcents de carbone ; mais cet élément étant léger il s'ionise rapidement totalement ($E_{\text{ion}} \approx 489$ eV pour C VI) et son rayonnement se limite au Bremsstrahlung et à la recombinaison. Les autres parties du plasma sont éloignées des parois pour des raisons d'ingénierie et de limitation de la pollution de la décharge. Les interactions plasma-paroi sont faibles dans ces zones et arrachent de faibles quantités d'atomes métalliques, principalement du fer mais aussi du nickel. Leur concentration dans le plasma est faible mais ce sont des atomes lourds qui emmagasinent de l'énergie qu'ils réémettent sous forme de rayonnement et diminuent ainsi la température électronique du coeur. Il existe également une concentration d'oxygène dans chaque décharge, issue de sa désorption par les parois face au plasma. Cette pollution est due à la présence de traces d'eau ou d'air dans la machine.

Les impuretés peuvent également être injectées volontairement par l'opérateur pour contrôler le plasma. Le gaz ainsi injecté peut absorber l'énergie excédentaire du plasma de bord et la réémettre par rayonnement afin de limiter le flux thermique sur la paroi. L'injection d'atomes dans la Scrape Off Layer (Section 1.2.2.a) se fait par bouffées de gaz. La vanne permettant des Injections Supersoniques Par Impulsions (ISPI) ne sert que pour les études de transport car cette méthode donne un terme source très court.

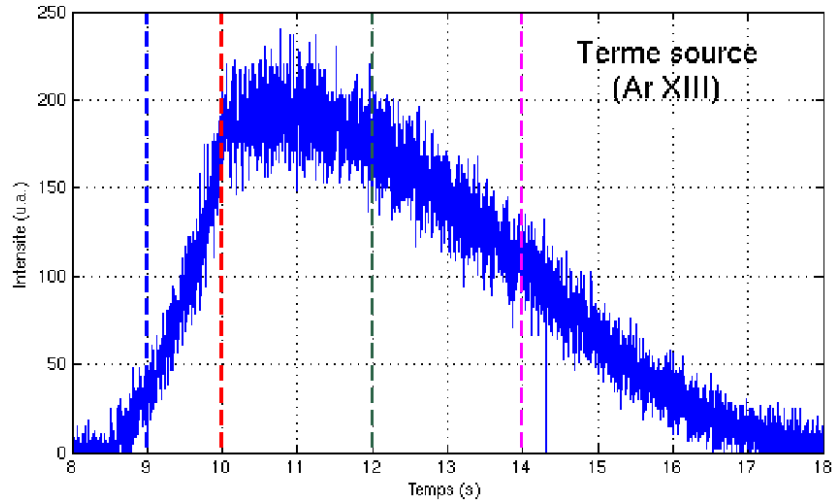


FIGURE 4.1: Variation temporelle du terme source pour la raie à 24.2 nm de l'ion Ar XIII du choc 47191. Les traits verticaux étant des repères pour la figure 4.6.

La figure 4.1 représente l'évolution temporelle de l'intensité d'une raie à 24.2 nm de l'Argon 12+ après injection par bouffée de gaz. Sous l'effet des collisions avec les électrons libres, l'atome s'ionise de plus en plus au contact du plasma. De plus, le temps de confinement est fini. Ceci fait que l'intensité de la raie tend vers zéro au bout de 9 secondes environ ($t = 8.5 \rightarrow \approx 17$ s). La largeur à mi-hauteur caractéristique du terme source est ≈ 4.25 s. Ceci est un exemple d'évolution, sa valeur est grande en raison du temps de diffusion lent de l'argon dans le tuyau menant de la vanne à l'enceinte à vide. Les durées caractéristiques du terme source pour d'autres noyaux tels que l'azote sont de l'ordre de 450 ms pour une bouffée de gaz et de 20 ms pour une injection par ISPI. Le terme source a une grande importance dans le calcul du transport car il permet de modéliser l'apport ionique extérieur au système considéré.

L'analyse des données spectroscopiques est primordiale pour l'étude du transport. Des méthodes ont donc été développées par les théoriciens pour reconstruire les spectres.

4.1.2 Transport des impuretés

Dans un tokamak, les profils de densité et de température varient de plusieurs ordres de grandeur entre le bord et le coeur du plasma. Dans Tore Supra, la densité électronique varie entre 10^{11} et 10^{14} cm^{-3} et la température électronique de quelques eV à plusieurs keV. Les impuretés ont donc une charge moyenne différente selon la position radiale r dans le plasma : c'est l'équilibre d'ionisation. Celui-ci dépend des paramètres plasma (N_e et T_e) et des coefficients de taux des processus atomiques.

Dans les plasmas interstellaires, la densité est faible et le modèle coronal est

pertinent. Dans ce modèle, les processus d'ionisation et de recombinaison se produisent uniquement entre les niveaux fondamentaux des ions. Les niveaux excités ne sont pas peuplés, car les collisions sont trop peu fréquentes. Dans les plasmas de tokamak, les densités atteintes permettent le peuplement des niveaux excités par collision électronique, y compris les niveaux métastables. Nous utilisons donc un modèle plus détaillé tenant compte de l'ensemble de niveaux et de l'ensemble des processus : c'est le modèle collisionnel-radiatif. La reconstruction des spectres utilise ce modèle.

a Notations des processus atomiques et modèle

L'ensemble des processus atomiques décrits dans le chapitre 1 (section 1.4) peuvent se produire dans les plasmas magnétisés mais certains sont caractérisés par des probabilités négligeables. Les processus –majoritaires– que nous considérons dans notre étude sont l'excitation et la désexcitation collisionnelles, l'ionisation collisionnelle, la recombinaison radiative et la recombinaison diélectronique.

Les taux des processus atomiques dépendent de la densité et de la température électroniques. Pour des processus collisionnels où la particule incidente (projectile) est un électron de vitesse \vec{v} , le taux de transition est donné par :

$$\tau = N_e \langle \sigma v \rangle = N_e \int_0^\infty v \sigma(\epsilon) F(\epsilon) d\epsilon, \quad (4.1)$$

où $F(\epsilon)$ est la fonction de distribution en énergie des projectiles et σ la section efficace du processus. $\langle \sigma v \rangle$ est appelé coefficient de taux. Il dépend essentiellement de la température électronique du plasma. A l'opposé, pour des taux où la particule incidente est un photon, négligeables dans les plasmas discutés dans ce chapitre mais utiles pour le calcul des processus inverses (telle que la recombinaison radiative), on note :

$$\tau = c \int_0^\infty \sigma(\epsilon) \frac{U(\epsilon)}{\epsilon} d\epsilon \quad (4.2)$$

où $U(\epsilon)$ est la densité de photons¹, modélisée par la fonction de Planck dans les plasmas chauds. Dans la suite, les coefficients de taux seront nommés simplement coefficients (des processus). Le modèle collisionnel-radiatif consiste à appliquer ces coefficients à chacun des niveaux pour obtenir un système d'équations couplées à N niveaux. Ainsi, l'équation décrivant la population d'un niveau i de l'ion de charge

1. Nombre de photons d'énergie ϵ par unité de volume. Pour ne pas confondre avec le champ électrique, l'énergie des photons est notée ϵ .

Z_e s'écrit :

$$\begin{aligned}
\frac{dN_z^{(i)}}{dt} = & - N_e N_z^{(i)} \sum_f S_{z \rightarrow z+1}^{(if)} - N_e N_z^{(i)} \sum_k R_{z \rightarrow z-1}^{(ik)} \\
& + N_e \sum_f N_z^{(f)} R_{z+1 \rightarrow z}^{(fi)} + N_e \sum_k N_z^{(k)} S_{z-1 \rightarrow z}^{(ki)} \\
& - N_e N_z^{(i)} \left(\sum_{w < i} q_{iw} + \sum_{m > i} q_{im} \right) \\
& + N_e \left(\sum_{w < i} N_z^{(w)} q_{wi} + \sum_{m > i} N_z^{(m)} q_{mi} \right) \\
& - N_z^{(i)} \sum_{w < i} (A_{iw} + U(\epsilon) B_{iw}) \\
& + \sum_{w < i} N_z^{(w)} U(\epsilon) B_{wi} \\
& + \sum_{m > i} N_z^{(m)} (A_{mi} + U(\epsilon) B_{mi}) \\
& - N_z^{(i)} \sum_{m > i} U(\epsilon) B_{im}, \tag{4.3}
\end{aligned}$$

où q est le coefficient de taux d'excitation ou de désexcitation collisionnelles (voir Eqs. 1.31, 1.32). $N_z^{(i)}$ est la densité de population du niveau i . $S^{(i)}$ et $R^{(i)}$ désignent, respectivement, les coefficients d'ionisation $\langle \sigma_{\text{ion}} v \rangle^{(i)}$ et de recombinaison $\langle \sigma_{\text{rec}} v \rangle^{(i)}$ pour les ions z , $z+1$ et $z-1$. L'indice f désigne les niveaux de l'ion $z+1$ pour lesquels on peut avoir une recombinaison vers les niveaux de l'ion de charge z . L'indice k désigne les niveaux de l'ion $z-1$ pour lesquels on peut avoir une ionisation vers l'ion de charge z . Dans les plasmas de tokamak, la densité en énergie du rayonnement $U(\epsilon)$ est faible. La variation de population liée à l'absorption d'un photon est donc négligeable. Pour un ion de charge z , on a un système de N équations différentielles, où N est le nombre de niveaux de l'ion. La résolution d'un tel système est un problème complexe et nécessitant des temps de calcul sur machine très importants. Pour réduire les temps de calcul, une base de données de physique atomique, spécifique aux plasmas solaire et thermonucléaire, a été développée : c'est la base de données ADAS (Atomic Data and Analysis Structure). ADAS est d'abord un ensemble de codes et routines associés à un modèle CR sophistiqué et adaptable à bon nombre de situations (conditions plasmas et élément étudié). ADAS a été créée en 1983, avec la construction du tokamak JET (Oxford), dans le cadre du projet européen sur la fusion nucléaire [3], puis est devenue une collaboration internationale.

Ainsi, dans ADAS, on considère un nouveau jeu de données constitué de la population totale de chaque ion, notée N_{z+1} pour l'ion de charge $Z+1$. La variation temporelle de la population due à l'ionisation s'écrit alors :

$$\frac{dN_{z+1}}{dt} = N_e \sum_i N_z^i S_{z \rightarrow z+1}^i. \quad (4.4)$$

On somme simplement les contributions correspondant aux différents niveaux i de l'ion de charge z . On peut réécrire cette équation en faisant intervenir la population totale N_z de l'ion de charge z ($N_z = \sum_i N_z^i$). On obtient alors :

$$\frac{dN_{z+1}}{dt} = N_e N_z \sum_i \frac{N_z^i}{N_z} S_{z \rightarrow z+1}^i = N_e N_z S_{z \rightarrow z+1}. \quad (4.5)$$

S_Z , appelé coefficient généralisé de l'ionisation, tient compte de l'ensemble des niveaux i . La connaissance des N_z^i nécessite un calcul CR complet. De la même manière, on définit le coefficient généralisé R_z pour les recombinaisons radiative et diélectronique. La base ADAS contient un grand nombre de ces coefficients pour les éléments utilisés en FCM (H, He, Be, B, C, O, Ar, Fe, Ni, etc.). Ils résument la contribution de chaque état d'ionisation en fonction de la population totale de l'élément étudié :

$$\begin{aligned} \frac{dN_z}{dt} = & - N_e N_z S_{z \rightarrow z+1} - N_e N_z R_{z \rightarrow z-1} \\ & + N_e N_{z+1} R_{z+1 \rightarrow z} + N_e N_{z-1} S_{z-1 \rightarrow z}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

La résolution de cette équation pour chaque ion Z permet de trouver l'équilibre d'ionisation du plasma et par conséquent les populations N_z .

L'équation 4.6 ne s'applique qu'aux plasmas isolés et stationnaires (si on considère $dN_z/dt=0$), en négligeant les mouvements des particules. Mais des phénomènes de transport dans les plasmas magnétisés nécessitent de corriger ce bilan.

b Equations du transport

Les impuretés issues de la paroi migrent vers le centre du plasma formant un transport radial modélisé par un flux Γ_z d'ions de charge Z . Ce flux s'exprime comme la somme d'un terme diffusif et d'un terme convectif dans les modèles théoriques du transport :

$$\Gamma_z = -D_z(r) \vec{\nabla} n_z(r) + \mathbf{V}_z(r) n_z(r), \quad (4.7)$$

où D_z est le coefficient de diffusion et V_z la vitesse de convection. Cette vitesse est négative si le flux est orientée vers le cœur du plasma. La présence de ce flux provoque une modification de l'équilibre d'ionisation, en régime transitoire ($dN_z/dt \neq 0$), de l'équation 4.6 qui devient l'équation de continuité :

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_z}{\partial t} + \vec{\nabla}_r \cdot \Gamma_z = & - N_e N_z S_{z \rightarrow z+1} - N_e N_z R_{z \rightarrow z-1} \\ & + N_e N_{z+1} R_{z+1 \rightarrow z} + N_e N_{z-1} S_{z-1 \rightarrow z} + S_{\text{ext}}, \end{aligned} \quad (4.8)$$

où S_{ext} est la source extérieure de neutres, voir Section 4.1.1. Dans les expériences, elle n'est pas mesurée directement. On fait l'hypothèse qu'elle est proportionnelle à la variation temporelle de l'intensité d'une raie du bord du plasma. La résolution de l'équation de continuité en régime stationnaire montre que l'on ne peut caractériser totalement le transport qu'avec des régimes transitoires. Pour ce type d'étude, on crée ce régime transitoire par une injection de gaz par vanne ou par ISPI.

La résolution de l'équation 4.8 permet de déduire les coefficients de transport de l'équation 4.7. La théorie du transport s'appuie sur deux modèles. Le premier est lié aux collisions entre les particules du plasma, c'est le transport néoclassique. On distingue plusieurs régimes de *collisionnalité* selon le rôle des deux types de trajectoire, passantes ou piégées. Le deuxième modèle découle de l'ajout de la turbulence plasma dans la résolution. C'est la théorie du transport turbulent. Des rappels sur ces modèles sont donnés dans l'annexe D.

Revenons aux expériences effectuées sur les tokamaks Tore Supra et Asdex Upgrade. Elles visaient à déterminer les profils des coefficients de transport par le traitement des données expérimentales. L'analyse de ces données implique de résoudre l'équation 4.8, mais les inconnues du système sont multiples : la densité d'impureté N_z et les coefficients de transport D_z et V_z pour chaque état d'ionisation. Pour résoudre ce problème, un code a été développé à l'IRFM : le code ITC (Impurity Transport Code).

c Code ITC

ITC est un code de résolution des équations du transport et de modélisation des données expérimentales : spectroscopiques, X-mous, etc. Il résout les équations de continuité radiales (formule 4.8), couplées pour chaque état d'ionisation de l'impureté étudiée. Son fonctionnement est résumée dans la figure 4.2.

Dans cette figure, le code est décomposé en plusieurs étapes avec les paramètres d'entrée au point (1) de la figure : les paramètres généraux du plasma : géométrie (petit et grand rayon, shift de Shafranov \dots), les données atomiques (niveaux d'énergie, coefficients d'Einstein, coefficients généralisés \dots). Les routines constituant les étapes du code sont les suivantes :

- ITC résout les équations de continuité couplées et détermine les profils de densité d'impuretés $N_z(r)$ pour un jeu de coefficients de transport test initial. **Point 2.**
- A partir des profils de densité d'impuretés, le code reconstruit les signaux X-mous, bolométrique et les raies UV correspondantes, en tenant compte des fonctions d'appareil des diagnostics. **Point 3.**
- Les signaux reconstruits sont comparés aux mesures X-mous ainsi que les signaux de chaque ligne de visée des diagnostics. Cette étape utilise la méthode du χ^2 appliquée à l'évolution temporelle des signaux reconstruits/expérimentaux pour quantifier leurs différences [4] **Point 4.**
- Si la précision attendue n'est pas atteinte, le code doit modifier les coefficients

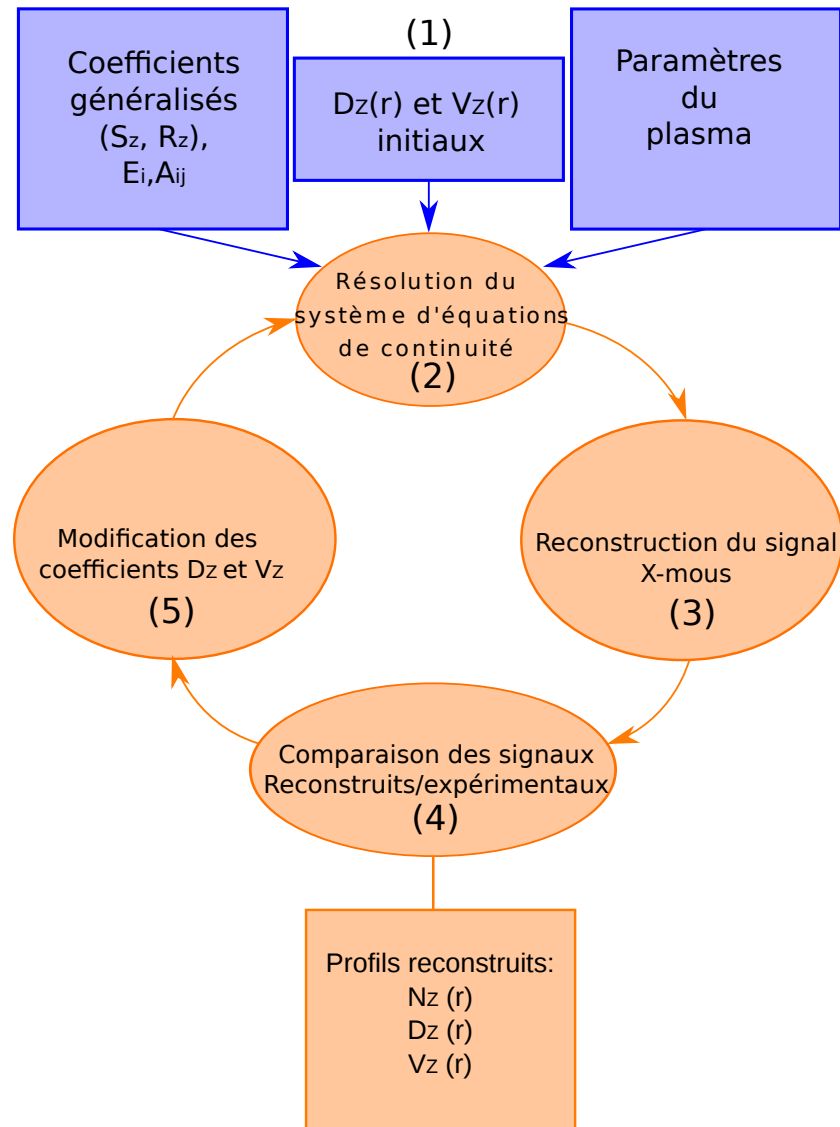


FIGURE 4.2: Schéma de fonctionnement des routines dans ITC

de transport pour converger vers une reconstruction fidèle du signal. Pour cela, on minimise le χ^2 . Cette minimisation était initialement faite par la méthode du gradient [5], qui n'était pas précise car elle ne permettait pas l'obtention du minimum global quels que soient les paramètres d'entrées du code. Une méthode utilisant un algorithme génétique a donc été implémentée dans ITC afin d'atteindre le minimum global du χ^2 [6, 7] **Point 5**.

Ainsi, on obtient les coefficients de transport après itération sur les **Points** 5 \rightarrow 2 $\cdots \rightarrow$ 4. Notre étude porte sur le **Point 1**. Nous nous proposons de construire une autre base de données pour l'argon, à l'aide du code HULLAC [8], afin de la comparer aux coefficients utilisés actuellement à l'IRFM (coefficients ADAS). Ce

code a l'avantage de pouvoir effectuer des calculs de structure atomique (niveaux, coefficients de taux, etc..) pour des ions lourds dans un temps raisonnable pour une étude complète de l'atome considéré. Pour cela, des approximations sont considérées à l'opposé de codes tel que MCDF [9] ou R-Matrix [10].

4.2 Objectifs de l'étude

Dans ce chapitre, la physique atomique est dédiée à l'étude du transport.

Dans une première étape, nous nous proposons de comparer les coefficients de taux $\langle\sigma v\rangle$ de tous les niveaux d'une impureté z , calculés avec le code HULLAC, aux données disponibles dans ADAS. Différentes méthodes de calculs sont nécessaires à la validation des valeurs de coefficients de taux pour certains processus qui font encore l'objet d'études théoriques et expérimentales (recombinaison diélectronique, par exemple [11]).

Deuxièmement, en entrée de routine, le code ITC dépend de coefficients généralisés qui font intervenir les populations des niveaux de l'ion, lesquelles sont calculées par un modèle CR. Il est intéressant de comparer les populations obtenues par deux modèles CR utilisant des algorithmes différents (ADAS et HULLAC). Nous pouvons reconstruire les coefficients généralisés pour une impureté au moyen du code HULLAC.

Pour conclure, si les coefficients de taux ou les coefficients de taux généralisés, s'avèrent utilisables, nous pouvons étudier la sensibilité des résultats du code ITC aux données atomiques (nombre de niveaux, méthodes de calcul, etc...).

Pour appuyer ce travail, des expériences ont été effectuées sur les tokamaks Tore Supra à Cadarache et Asdex-Upgrade en Allemagne. Les paramètres d'étude sur ces deux machines étant similaires, nous détaillerons uniquement la campagne faite sur Tore Supra.

4.3 Diagnostics des plasmas

Contrairement à la FCI, les expériences sur des machines magnétiques ont des temps propres très longs. La durée d'une décharge plasma s'étend en moyenne de quelques secondes à plusieurs dizaines de secondes. Par conséquent, les diagnostics doivent permettre des analyses en temps réel pour piloter la machine. Les paramètres à mesurer sont la température électronique, la densité électronique et le rayonnement total ou X-mous.

4.3.1 Température

Le diagnostic principal est la mesure du spectre d'émission cyclotronique électronique (ECE). Le radiomètre possède une résolution spatiale de quelques cm et une résolution temporelle de l'ordre de la ms, ce qui permet de déduire un profil en

température électronique sur la partie extérieure du plasma au moyen de différents canaux (32 dans le cas de Tore Supra).

L'autre diagnostic de mesure de la température est celui de la diffusion Thomson. Ce mécanisme, cas particulier de la diffusion Compton, consiste à émettre une onde de basse énergie vers le plasma qui va diffuser en retour. Son analyse spectrale permet de remonter à la température électronique. Deux cas existent pour ce phénomène : la diffusion cohérente et la diffusion incohérente. Étant donné le niveau d'énergie, la fréquence est faible, la résolution temporelle est de quelques dizaines de ms, ce qui ne favorise pas l'analyse des phénomènes physiques rapides.

4.3.2 Densité

Deux systèmes optiques mesurent la densité : l'interférométrie au moyen d'un jeu de visées dans l'IR lointain et la réflectométrie dans le domaine micro-onde.

a Interférométrie

L'interférométrie consiste à faire passer une onde à travers un plasma et à comparer la phase de celle-ci avec un faisceau de référence identique mais se propageant dans le vide. Ce déphasage est proportionnel à l'intégrale de la densité sur le chemin du faisceau. Il donne, indirectement, sa valeur en un point du plasma au moyen de la méthode de l'inversion d'Abel.

Résolution temporelle	Résolution spatiale
\approx ms	N/A

b Réflectométrie

La réflectométrie est basée sur le principe qu'une onde émise à la fréquence ν à travers le plasma sera réfléchi sur une couche du milieu, dite couche de coupure, où l'indice de réfraction s'annule. Un calcul de déphasage et de temps de parcours de l'onde permet de déduire la position de la couche de densité N_e en utilisant la formule de la fréquence de coupure. Sur Tore Supra, la mesure se fait en mode X, pour lequel la fréquence de coupure est aussi fonction du champ \vec{B} . Pour obtenir la cartographie du plasma, ce système module en fréquence l'onde-sonde, et analyse ainsi par ce balayage les strates de la décharge plasma.

Résolution temporelle	Résolution spatiale
\approx quelques μ s	\approx mm

Ces diagnostics sont essentiels pour analyser les chocs plasmas.

4.3.3 Le rayonnement

Selon ce que l'expérimentateur veut observer lors de la décharge, plusieurs diagnostics de l'émission du plasma sont disponibles sur Tore Supra (et donc sur ITER, dans le futur).

a Rayonnement détaillé

Sur Tore Supra, il est possible de mesurer l'intensité de raies particulières au moyen de spectromètres UV. Pour une étude de la physique atomique et du transport, on utilise des spectromètres à cercle de Rowland dont le principe est que le rayonnement passe par un réseau courbe qui diffracte en fonction de la longueur d'onde λ . Le cercle de Rowland correspond au lieu de focalisation des faisceaux diffractés.

Des détecteurs constitués d'anodes sont placés sur ce cercle en fonction de la raie que l'on veut étudier. L'intérêt de ce dispositif est que l'on peut observer l'évolution de la raie au cours du temps, si la résolution temporelle (paramètre essentiel du travail sur le transport des impuretés dans le plasma) est suffisamment fine. Sur Tore supra, on a utilisé le spectromètre DUO qui possède deux détecteurs. Les longueurs d'onde accessibles sont dans l'intervalle 100–1000 Å.

Résolution temporelle	Résolution spatiale
\approx quelques ms	N/A

Les détecteurs sont composés d'anodes ayant une largeur spectrale de l'ordre de l'Angström. Ainsi, l'acquisition des données se fait sur une bande de valeurs en longueur d'onde. D'autres spectromètres sont en fonction sur Tore Supra, mais leur résolution temporelle n'est pas suffisante pour des études de physique atomique dans les plasmas (\approx 100 ms pour le spectromètre SIR).

b Rayonnement X

Le rayonnement X-mous, rayons X de basse énergie, est caractéristique de la présence d'ions lourds dans le plasma (voir Fig. 4.3). En effet, les différents rayonnements dépendent de la température et du temps, ce qui implique que leurs analyses permettent d'étudier la présence d'ions plus lourds et plus fortement chargés dans le plasma. Sur Tore Supra, ce diagnostic est constitué de deux jeux de visées pointées vers le plasma, un jeu horizontal et l'autre vertical. Elles ne peuvent capter les photons que sur une gamme en énergie de [2–18] keV : un filtre passe-haut en béryllium stoppe les photons d'énergie inférieure à 2 keV et un détecteur en silicium capte les photons jusqu'à 18 keV.

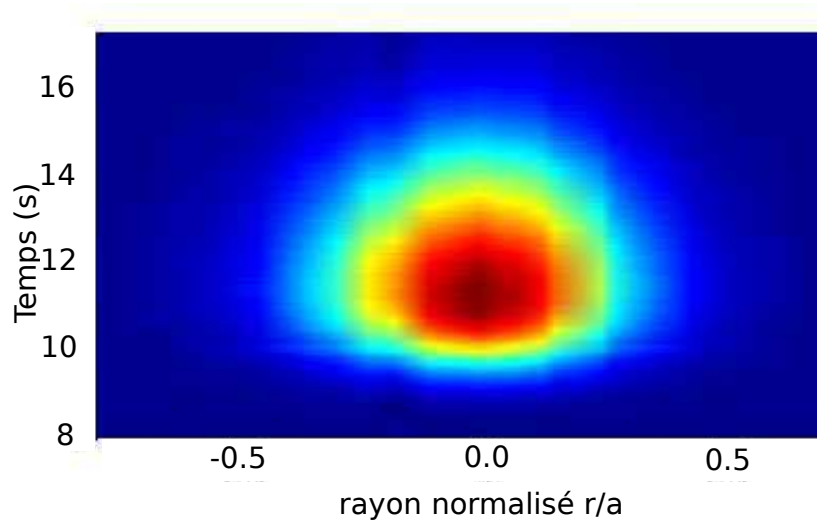


FIGURE 4.3: Variation de l'émission X-mous selon le temps et la position au sein du plasma après une injection d'argon à $t = 10$ s (choc 47191).

c Rayonnement global

Le rayonnement total du plasma est mesuré au moyen d'un dispositif appelé bolomètre. La puissance rayonnée est captée par des caméras contenant des capteurs absorbant l'énergie sur une gamme de longueur d'onde définie. Sur Tore Supra, ce diagnostic est constitué de 5 caméras voyant le plasma sous différents angles. Les diagnostics sur Tore Supra et leur fonctionnement ont été décrits par Gil *et al* [12].

4.4 Expérience

Sur Tore Supra, notre étude s'est jointe à une expérience en 2011 visant à caractériser le transport dans le cœur du plasma, au niveau du seuil de turbulence, en la faisant varier au moyen des antennes de chauffage FCE. Les paramètres de la machine étaient basés sur une expérience déjà effectuée auparavant [6], que l'équipe de l'IRFM voulait refaire pour avoir de nouveaux résultats. La campagne a donné lieu à une journée complète de mesures. Nous nous baserons seulement sur une décharge spécifique, des problèmes techniques ayant affectés certaines mesures sur les autres. Le tableau détaillant l'ensemble des données des expériences est dans l'annexe E.

Notre étude se base sur la décharge 47191, de durée 20 s. Les diagnostics spécifiques utilisés dans cette expérience sont la spectroscopie (DUO et SIR), l'échange de charge CXRS (Spectroscopie par échange de charge), l'ECE (Emission Cyclotronique Electronique). Le protocole consistait, pour un courant plasma $I_p = 0.5$ MA, à chauffer le plasma par FCE (Fréquence Cyclotronique Electronique) avec deux gyrotrons dans le cœur à $r/a=0.35$ de $t = 2 \rightarrow 7$ s, une ablation laser de nickel à

$t=3$ s, une injection ISPI d'azote à $t=4$ et 5 s, IDN (Injection De Neutre) à $t=7.5$ s, injection d'argon (débit 0.01) de $t=8 \rightarrow 10$ s.

Le courant plasma I_p , créé par effet inductif du champ du solénoïde central est établi et stable entre $t=1$ et 18 s. Les simulations porteront donc sur cet intervalle de temps. L'ablation du nickel par laser n'a pas fonctionné, mais nous avons pu injecter de l'argon par la vanne. Les données des diagnostics utiles à notre étude sont résumées sur les courbes de la figure 4.4.

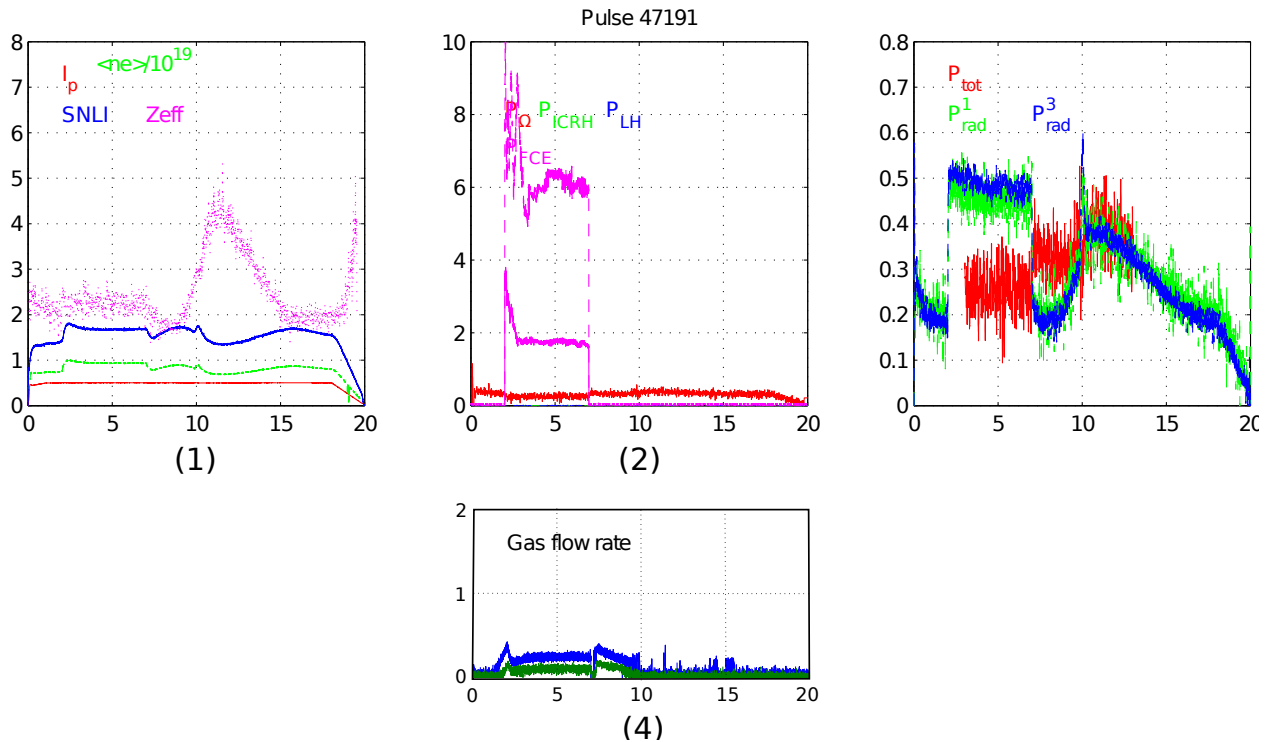


FIGURE 4.4: Evolution temporelle des principaux paramètres pour le choc 47191.

Chaque ordonnée doit être traduite selon les données représentées. Les puissances injectées et émises sont en MW.

1. courbe rouge : courant plasma (I_p) en MA ; courbe rose : charge moyenne du plasma (Z_{eff}) ; courbe verte : densité normalisée $N_e/(1.0 \times 10^{19} \text{ m}^{-3})$; courbe bleue : densité intégrée selon le diamètre du plasma (SNLI), normalisée à $1.0 \times 10^{19} \text{ m}^{-2}$
2. courbe rouge : puissance ohmique (P_{Ω}) ; courbe rose : puissance FCE injectée par chaque gyrotron (P_{FCE}) ; courbe verte : puissance FCI injectée (P_{FCRH} , nom anglais pour la FCI) = 0 ; courbe bleue : puissance hybride injectée (P_{LH}) = 0
3. courbe rouge : puissance totale fourni au plasma (P_{tot}) ; pertes radiatives ($P_{\text{rad}1}$ et $P_{\text{rad}3}$) selon des visées différentes

4. courbe verte et bleue : flux injecté par chaque vanne

Les courbes de la figure 4.4 sont les données brutes des diagnostics en sortie de chocs. Elles sont conformes aux spécificités des paramètres expérimentaux envisagés. La température varie en fonction du temps et du rayon plasma (Fig. 4.5). La valeur centrale de T_e est en moyenne de 2.5 keV, la valeur maximale étant 2.8 keV.

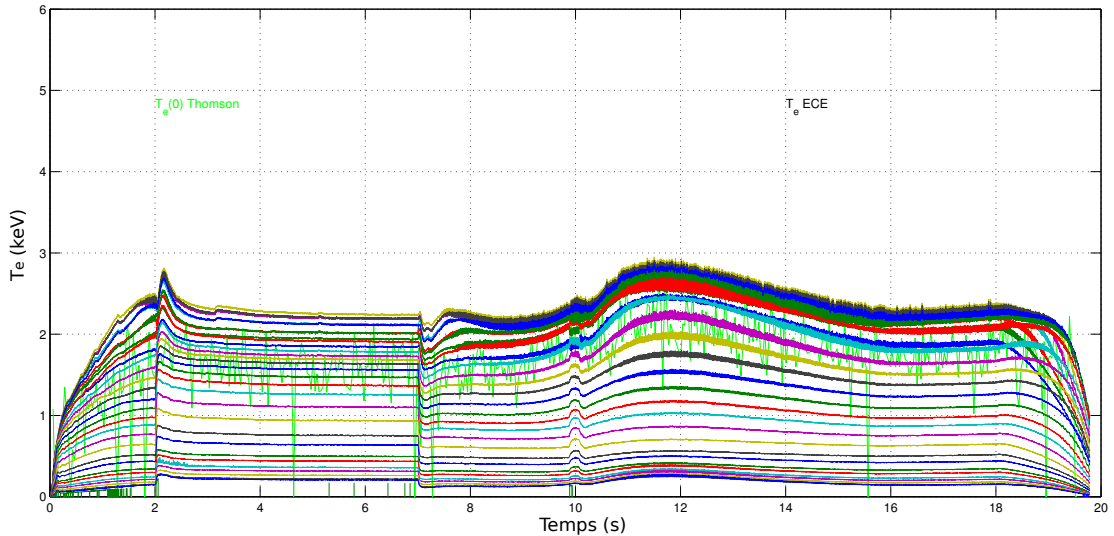
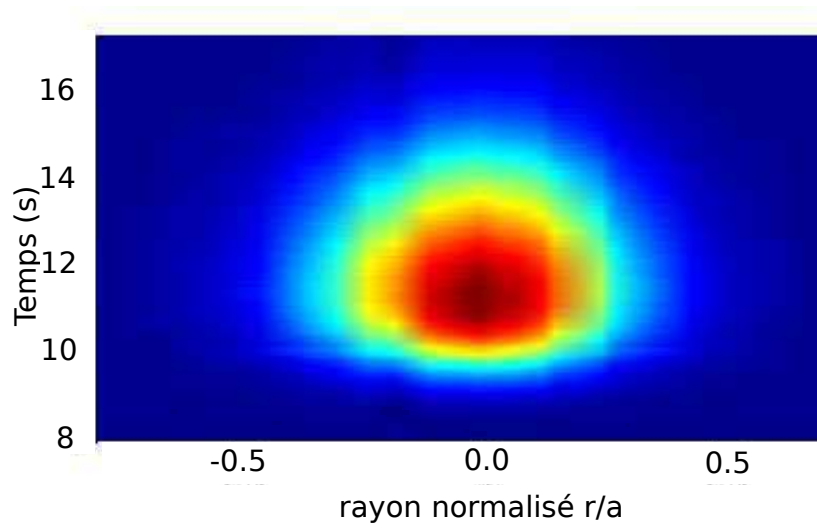


FIGURE 4.5: Profils temporels de la température électronique pour le choc 47191. Les courbes juxtaposées représentent les mesures par ECE, et la courbe verte T_e obtenue par le diagnostic de diffusion Thomson (spectromètres), peu utilisé dans notre étude.

Le diagnostic X-mous fournit également deux types de données : les profils radiaux d'intensité à un instant t et les évolutions temporelles (Fig. 4.6).

Sur le profil X-mous (Fig. 4.6 haut), le rayonnement dans le cœur du plasma, qui dénote la présence d'ion lourds, est à son maximum quelques secondes après l'injection au bord de l'argon à $t=8$ s. En effet, les zones de basse énergie, par exemple au bord, contiennent des atomes faiblement ionisés. Notre travail se concentre sur les zones du plasma où le confinement est le meilleur : le centre ou les couches intermédiaires du plasma. L'analyse des profils de température et de densité électroniques pour cet intervalle de temps permet de définir une gamme d'étude pour la physique atomique. Les profils radiaux d'intensité (Fig. 4.6 bas) permettent d'étudier à un temps t , la position dans le plasma des impuretés lourdes. Ces données sont les détails de la figure précédente et constituent les informations brutes du diagnostic pour chaque visée.



Profil X-mous pour le choc 47191. Profil temporel de la puissance X rayonnée par le plasma en fonction du rayon.

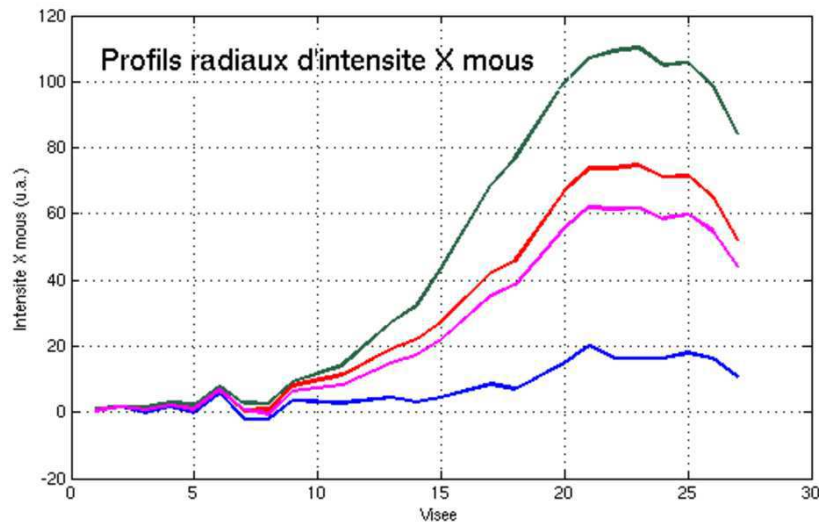


FIGURE 4.6: Intensité émise en fonction de la visée au sein du plasma (20-25 \rightarrow plasma de coeur) à chaque temps t défini sur la figure 4.1 (correspondance des couleurs).

La température électronique varie entre 100 et 3000 eV et la densité électronique dans l'intervalle $10^{12} - 4 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$. Les températures basses n'étant pas considérées, on limite les états d'ionisation à étudier au moyen du code FLYCHK [13], utilisant un modèle CR simple. Ce code fait des approximations mais nous

permet d'obtenir des valeurs approchées de la charge moyenne du plasma ainsi que les fractions ioniques (voir Table 4.1). (T_e élargie à 6000 eV pour utilisation dans d'autres études.)

T_e	Z	p
100	8.2755	Ar ⁷⁺ : 0.0453 Ar ⁸⁺ : 0.669 Ar ⁹⁺ : 0.249
1100	16.018	Ar ¹⁵⁺ : 0.0453 Ar ¹⁶⁺ : 0.871 Ar ¹⁷⁺ : 0.0749
2100	16.684	Ar ¹⁶⁺ : 0.428 Ar ¹⁷⁺ : 0.433 Ar ¹⁸⁺ : 0.130
3100	17.252	Ar ¹⁶⁺ : 0.150 Ar ¹⁷⁺ : 0.442 Ar ¹⁸⁺ : 0.406
4100	17.538	Ar ¹⁶⁺ : 0.0609 Ar ¹⁷⁺ : 0.339 Ar ¹⁸⁺ : 0.6
5100	17.685	Ar ¹⁶⁺ : 0.0293 Ar ¹⁷⁺ : 0.256 Ar ¹⁸⁺ : 0.714
6000	17.767	Ar ¹⁶⁺ : 0.0163 Ar ¹⁷⁺ : 0.2 Ar ¹⁸⁺ : 0.784

TABLE 4.1: Charge moyenne \bar{Z} et fraction ionique p des ions majoritaires en fonction de la température électronique (en eV), pour une densité électronique de 10^{13} cm^{-3} .

La variation de la fraction ionique avec la densité est négligeable (à T_e fixée), car cette dernière est très faible dans les tokamaks. Cette règle s'applique également aux coefficients de taux (Section 4.1.2). Nous fixons la densité à 10^{13} cm^{-3} . Cette gamme de paramètres implique que l'étude se porte sur les ions Ar⁷⁺ jusqu'à Ar¹⁷⁺ ; l'ion Ar¹⁸⁺ n'étant affecté que par les processus de recombinaison.

La reconstruction des coefficients de taux constitue la première étape de notre travail. Pour cela, nous avons utilisé le code HULLAC [8]. Ce code permet d'obtenir la structure atomique et les taux de divers processus microscopiques.

4.5 Données de structures et processus atomiques

Les données utiles à l'étude de la fusion magnétique sont de plusieurs natures (énergies des niveaux, coefficients d'émission spontanée, coefficients de taux, coefficients généralisés). Elles sont mises sous différents formats lisibles par les routines ADAS ainsi que le code ITC. Il faut noter que les sections efficaces des processus ne sont pas toujours présentes dans ADAS, bien qu'elles soient indispensables au calcul des coefficients de taux. Dans cette section, nous présentons un résumé des notations et valeurs disponibles dans ADAS, et expliquons le fonctionnement du code HULLAC.

4.5.1 ADAS

ADAS [3] permet de calculer des données à l'aide d'un modèle CR pour la fusion magnétique, en fonction des besoins des utilisateurs. Dans ce but, des modèles ont été codés afin de calculer des grandeurs spécifiques du plasma telles que les populations des niveaux, les coefficients généralisés... Notre étude se focalisera sur certaines de ces grandeurs. Pour chaque étape de celle-ci (section 4.2), les routines et formalismes utilisés seront différents [3]. Dans le but de simplifier les notations, ADAS établit quelques conventions d'écriture que nous ne détaillerons pas ici car elles n'apportent rien à la compréhension. Néanmoins, certaines grandeurs caractéristiques sont utilisées dans ADAS. On peut les résumer ainsi (la nomenclature ADAS est indiquée entre parenthèses) :

- Les coefficients de taux de chaque niveau (ADF04) pour l'excitation collisionnelle.
- Les coefficients de taux généralisés (ADF08) pour l'ionisation collisionnelle.
- Les Photon Emissivity Coefficients PECs (ADF15). Ces coefficients représentent l'émission spécifique d'une raie de l'ion considéré allouée à chaque processus.
- La fonction de rayonnement du plasma (ADF11). Cette grandeur représente l'émission (lié-lié, libre-lié et libre-libre) totale du plasma après un calcul CR, tenant compte de chaque état d'ionisation de l'atome.

4.5.2 Code HULLAC

HULLAC est un code qui permet de calculer la structure atomique et les taux ou sections efficaces de divers processus microscopiques. Dans cette section, nous présenterons les méthodes utilisées dans les routines de HULLAC pour calculer ces grandeurs.

a Les niveaux d'énergie

Les énergies des niveaux sont obtenues par la méthode du potentiel paramétrique [14] qui consiste à résoudre l'équation 2.1, en couplage jj , avec le potentiel suivant :

$$V(r) = -\frac{2}{r} [(N-1)e^{-\alpha_1 r} + \alpha_2 r e^{-\alpha_3 r} + \dots + \alpha_{n-1} r^k e^{-\alpha_n r} + Z - N + 1], \quad (4.9)$$

où les α_i sont des paramètres à calculer. Ils peuvent être déterminés de deux façons :

1. en trouvant une bonne concordance avec des données expérimentales,
2. en minimisant les énergies calculées.

Cette méthode est similaire à celle de Thomas-Fermi. Elle réalise un compromis entre la précision des méthodes de Hartree-Fock ou Dirac-Fock, et la méthode de Thomas-Fermi-Dirac. Le potentiel paramétrique permet des temps de calculs raisonnables pour des ions lourds et, eu égard au nombre de niveaux considérés dans notre étude, cette méthode est la plus pertinente.

b Excitation collisionnelle (EC)

Les sections efficaces d'excitation collisionnelle sont calculées par la méthode Distorted-Wave [15, 16, 10]. Cette méthode utilise l'approximation de Born. Les fonctions d'onde libres sont obtenues par résolution des équations couplées :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k_0^2 - U_0(r) \right] \psi_0(r) \simeq 0 \quad (4.10)$$

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k_i^2 - U_i(r) \right] \psi_i(r) \simeq U_{i0}(r)\psi_0(r), \quad (4.11)$$

où $k^2 = 2mE/\hbar^2$ et $U_i(r) = 2mV_i(r)/\hbar^2$ et U_i (resp U_0) :

$$U_i = U_{ii}(r) + l(l+1)/r^2. \quad (4.12)$$

La différence par rapport à l'approximation de Born est que l'on ne considère que les diagonales des potentiels "déformés" U_{ij} (déjà projeté sur les états i et j) à l'ordre zéro. Les fonctions d'ondes $\psi(r)$ sont établies au moyen des fonctions de Green :

$$\psi_0(r) = \psi_0^{(0)}(r)$$

$$\begin{aligned} \psi_i(r) &= \int_0^\infty G_i^{(+)}(r, r') U_{i0}(r') \psi_0^{(0)}(r') dr' \\ &\sim_{r \rightarrow \infty} -\frac{1}{k_i} e^{[ik_i r + i\delta_i]} \int_0^\infty \psi_i^{(0)}(r') U_{i0}(r') \psi_0^{(0)}(r') dr' \end{aligned}$$

où, par définition, $\psi_0(r) \sim \sin(k_0 r + \delta_0)^2$ solution de l'équation 4.10 et $\psi_i^{(0)}$ est solution de l'équation 4.11. L'opérateur de transition T est donné par :

$$2. \delta_i = \eta_i - l\pi/2$$

$$T_{0i} = \exp[i(\eta_0 + \eta_i)] \frac{2}{\sqrt{k_0 k_i}} \int_0^\infty \psi_i^{(0)}(r') U_{i0}(r') \psi_0^{(0)}(r') dr', \quad (4.13)$$

où $\eta_i = -k \int_0^\infty U(r) [\tilde{\psi}_i^0(r)]^2 dr$ et $\tilde{\psi}_i^0(r)$ est défini par les fonctions de Bessel $\tilde{\psi}_i^0(r) \sim_{r \rightarrow \infty} \sin(kr - i\pi/2)$. Dans le cas général, on déduit la section efficace de la transition entre un niveau j et un niveau j' , en couplage jj , par l'expression :

$$\sigma_{j,j'} = \frac{4\pi k}{k_0^3} \sum_{j,j',J_T} \frac{2J_T + 1}{2(2j + 1)} |T_{jj'}|^2 \quad (4.14)$$

où J_T est le moment angulaire total du système atome plus électron. La section efficace est reliée à la force de collision par l'équation 1.27 (Chapitre 1). De par la définition des fonctions d'onde, l'approximation distorted-wave n'est pas très précise pour les énergies faibles, ce qui peut être problématique pour le calcul de certains coefficients de taux.

Pour élargir en énergie le domaine d'étude, la force de collision (proportionnelle à la section efficace) est interpolée par une formule similaire à celle de la méthode de Burgess, Tully et Chidichimo [17, 18].

c Ionisation collisionnelle

La section efficace d'ionisation collisionnelle n'est pas calculée par la méthode distorted-wave. L'algorithme utilisé actuellement fait appel à un modèle semi-empirique développé à la fin des années 60 : le modèle de Lotz [19]. La section efficace d'ionisation à partir d'une sous-couche i (n_i, l_i) est alors donnée par :

$$\sigma_i = a_i \bar{n}_i \frac{\ln(E/I_{0i})}{EI_{0i}} [1 - b_i \exp(-c_i(E/I_{0i} - 1))] \quad (4.15)$$

où E est l'énergie de l'électron incident, I_{0i} l'énergie d'ionisation à partir du niveau i , \bar{n}_i le nombre d'électrons équivalents dans la sous-couche i . a_i , b_i et c_i sont des constantes déduites de résultats expérimentaux.

Cette expression de la section efficace est une bonne approximation dans la plupart des cas étudiés, mais elle est moins précise pour des ions lourds fortement ionisés.

d Photoionisation

La photoionisation est assimilée à l'absorption d'un photon, avec un état final contenant un électron du continuum. On utilise le même formalisme que pour le calcul des transitions liée-liée (A_{ij}) afin obtenir les sections efficaces σ_{ij} [14, 15, 20]. Celles-ci s'écrivent :

$$\sigma_{ij} = 4\pi^2 \alpha a_0^2 \frac{df_{ij}}{d\epsilon}, \quad (4.16)$$

où i désigne un état lié et j un état du continuum. ϵ (en Rydberg) représente l'intervalle d'énergie du continuum, et α la constante de structure fine. La force d'oscillateur se calcule par la même méthode que pour une transition liée-liée. Pour étendre l'intervalle de valeurs des sections efficaces, on effectue une interpolation au moyen de la formule de M. Klapisch et M. Busquet [21] :

$$\sigma(E) = C(E + A)^\gamma, \quad (4.17)$$

où A , C et γ sont les coefficients de l'interpolation et E l'énergie.

e Autoionisation

Une approche simple consiste à modéliser ce processus comme un choc entre deux électrons d'un ion doublement excité. Par transfert d'énergie cinétique, l'un des électrons obtient assez d'énergie pour échapper à l'attraction du noyau, l'autre électron ayant abaissé son énergie suite au choc. Ainsi, d'un point de vue quantique, l'obtention de la section efficace passe par l'Hamiltonien d'interaction et par le formalisme distorted-wave en raison de l'électron dans le continuum à l'état final et de l'opérateur de collision. La section efficace d'autoionisation entre un état doublement excité i et un état j de l'ion de charge supérieure, s'écrit :

$$\sigma_{ij} = \frac{8}{2J_i + 1} \sum_{\tilde{j}} \sum_{J_T M_T} |\langle \psi_i^{N+1}(J_T M_T) | H_{\text{int}} | \psi_j^{N\tilde{j}}(J_T M_T) \rangle|^2, \quad (4.18)$$

où \tilde{j} est le moment angulaire de l'électron du continuum et J_T le moment angulaire total du système.

Les coefficients de taux sont obtenus au moyen des formules 4.2 et 4.1 selon que le processus est radiatif ou collisionnel. Dans les plasmas de tokamaks, les processus majoritaires sont la recombinaison radiative, l'ionisation collisionnelle, l'excitation collisionnelle et la recombinaison diélectronique. Les calculs des coefficients de taux de ces processus sont très coûteux en temps. Pour cette raison, on ne résout pas l'ensemble des équations des mécanismes. En effet, dans de nombreux codes de physique atomique des plasmas, on ne traite pas directement les processus inverses mais on utilise le principe de micro-réversibilité (bilan détaillé). Le bilan détaillé [22] permet d'écrire que le taux d'un processus est en équilibre avec le taux du processus inverse, ce qui se traduit par :

$$N_e N_i \langle \sigma_{ij} v \rangle = N_e N_j \langle \sigma_{ji} v \rangle. \quad (4.19)$$

Cette formule s'applique quel que soit l'équilibre considéré et pour tous les processus. Le code HULLAC prend en compte ces processus dans le calcul des populations des niveaux. Pour ce faire, il utilise un modèle collisionnel-radiatif qui implique une méthode itérative [18].

Dans la section suivante, nous présentons les résultats des différentes simulations.

4.6 Simulations et comparaisons HULLAC - ADAS

4.6.1 Cadre d'étude

Les paramètres plasma ont été définis par l'analyse des expériences sur Tore Supra. Ainsi, dans les simulations la densité varie dans l'intervalle $10^{12} - 4 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ et la température entre 100 et 6000 eV. Notons que la température maximale de l'expérience est $\approx 3000 \text{ eV}$. On choisit une gamme jusqu'à 6000 eV afin d'utiliser les données calculées dans le cadre de l'analyse d'expériences futures où T_e sera plus élevée.

Nous ne pouvons représenter ici l'ensemble des calculs effectués. De même, leur analyse terme à terme dans ADAS ne peut être faite en raison du nombre de niveaux et de transitions possibles. Le tableau suivant résume, en notation super-configuration, les calculs qui ont été effectués :

Ion	Conf.	Niveaux	Taux d'excitation
Ar ¹⁷⁺	1s ¹ , ... , 7h ¹	49	1 155
Ar ¹⁶⁺	(1,2) ^[0:2] (3) ^[0:2] (4,5,6) ^[0:1]	783	251 369
Ar ¹⁵⁺	(1) ^[0:2] (2) ^[0:3] (3) ^[0:2] (4,5) ^[0:1]	5 311	6 700 250
Ar ¹⁴⁺	(1) ^[1:2] (2) ^[0:3] (3) ^[0:2] (4) ^[0:1]	4 388	5 795 928
Ar ¹³⁺	(1) ^[1:2] (2) ^[0:4] (3) ^[0:2] (4) ^[0:1]	7 204	7 648 765
Ar ¹²⁺	1s 2 (2) ^[1:4] (3) ^[0:3] (4) ^[0:1]	11 124	19 319 997
Ar ¹¹⁺	1s 2 (2) ^[3:5] (3) ^[0:2] (4,5) ^[0:1]	14 779	46 110 043
Ar ¹⁰⁺	1s 2 (2) ^[5:6] (3) ^[0:2] (4,5) ^[0:1]	994	450 928
Ar ⁹⁺	1s 2 (2) ^[5:7] (3) ^[0:2] (4,5) ^[0:1]	14 071	42 527 110
Ar ⁸⁺	1s 2 (2) ^[6:8] (3) ^[0:2] (4) ^[0:1]	3 533	5 561 875
Ar ⁷⁺	1s 2 2s 2 2p 6 (4,5,6,7,8) ^[0:1] 1s 2 (2) ^[7:8] (3) ^[1:2]	297	31 134

TABLE 4.2: Deuxième colonne : configurations considérées, Troisième colonne : nombre de niveaux, Quatrième colonne : nombre de taux d'excitation.

L'étude a porté sur l'ion hydrogénoïde Ar¹⁷⁺ (ion avec un seul électron lié), qui permet déjà de faire des comparaisons pertinentes pour le système considéré, les autres données étant disponibles sur demande. En ce qui concerne l'ionisation, on considère qu'elle se fait vers l'état fondamental de l'ion de charge supérieure et, par conséquent, la recombinaison ne se fait que depuis ce dernier. Représentons maintenant quelques sections efficaces.

4.6.2 Sections efficaces

Chaque processus peut générer un grand nombre de sections efficaces (voir Table 4.2). Par exemple, dans Ar¹⁷⁺ on a 1155 transitions pour l'excitation collisionnelle.

Ainsi, les résultats présentés ne concerneront que quelques transitions de Ar^{17+} . Les configurations pertinentes sont nl , où $n \leq 4$ et $l \leq n-1$. Les processus entre certains des niveaux associés à ces configurations constituent des événements majoritaires au vu de l'ensemble du système. Étudions maintenant la variation des sections efficaces de certains processus.

a Excitation collisionnelle

Le comportement de la section efficace est le même pour toutes les transitions considérées. Dans l'intervalle énergétique 100 – 6000 eV, les sections efficaces d'excitation collisionnelle sont décroissantes.

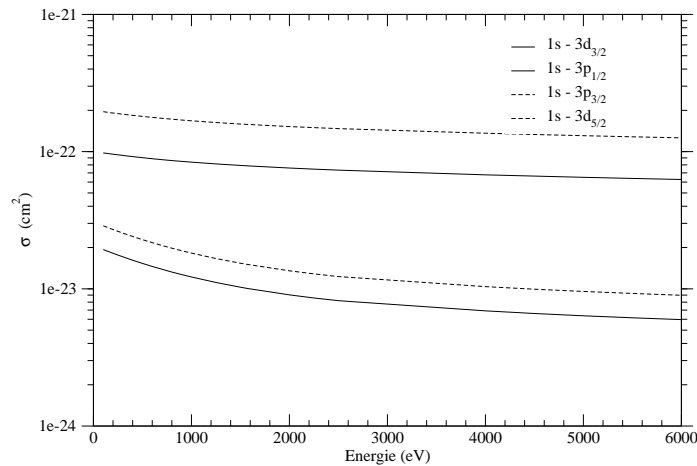


FIGURE 4.7: Section efficace d'excitation collisionnelle des transitions $1s - 3p_{1/2}$, $1s - 3p_{3/2}$, $1s - 3d_{3/2}$ et $1s - 3d_{5/2}$.

Dans la figure 4.7 on a représenté les sections efficaces entre le niveau $1s$ et les deux niveaux du doublet $3p$ ($3p_{1/2}$ et $3p_{3/2}$) d'une part, et entre le niveau $1s$ et les deux niveaux du doublet $3d$ ($1s - 3d_{3/2}$ et $1s - 3d_{5/2}$) d'autre part. Les sections efficaces ont le même comportement mais ceci n'est pas lié au fait que les niveaux d'arrivée soient d'énergies proches (3935.5007 et 3936.9251 eV pour les niveaux $3p$). Dans la figure 4.8, on a représenté la section efficace des transitions $3p_{1/2} - 4d_{3/2}$ et $3p_{3/2} - 4d_{5/2}$. Bien que les niveaux de départ soient proches en énergie, il y a un ordre de grandeur entre les deux courbes. Les variations globales des sections efficaces dans cet intervalle en énergie sont globalement identiques quelle que soit la transition étudiée.

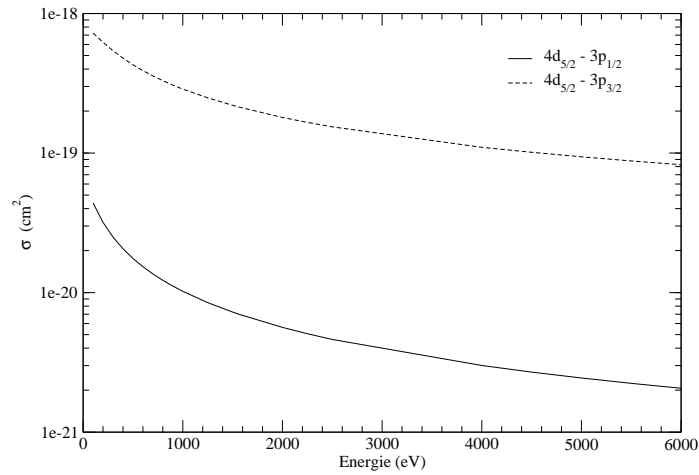


FIGURE 4.8: Section efficace d'excitation collisionnelle des transitions $3p_{1/2} - 4d_{5/2}$ et $3p_{3/2} - 4d_{5/2}$.

Dans la figure 4.9 ci-dessous, on a représenté la section efficace d'excitation collisionnelle des transitions $1s - 3s$ et $1s - 2p_{1/2}$. Les variations sont similaires à celles de la figure 4.7. Globalement les sections efficaces sont faibles ($\approx 10^{-21} \text{ cm}^2$) et n'atteignent au maximum que 10^{-19} cm^2 , ce qui est le cas de la transition $3s - 4p_{1/2}$ (voir figure 4.10).

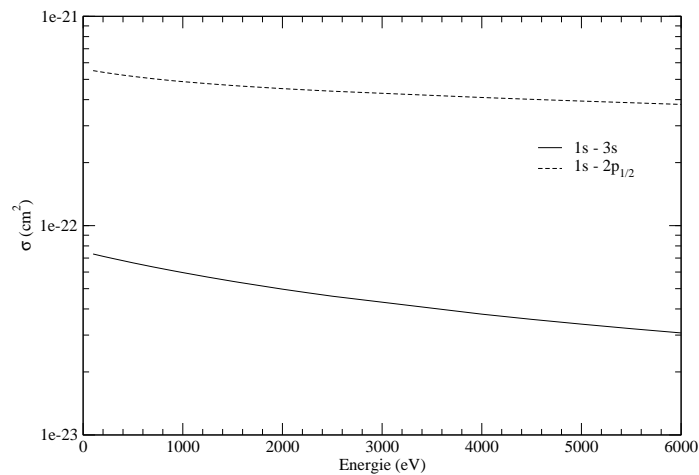


FIGURE 4.9: Section efficace d'excitation collisionnelle des transitions $1s - 3s$ et $1s - 2p_{1/2}$.

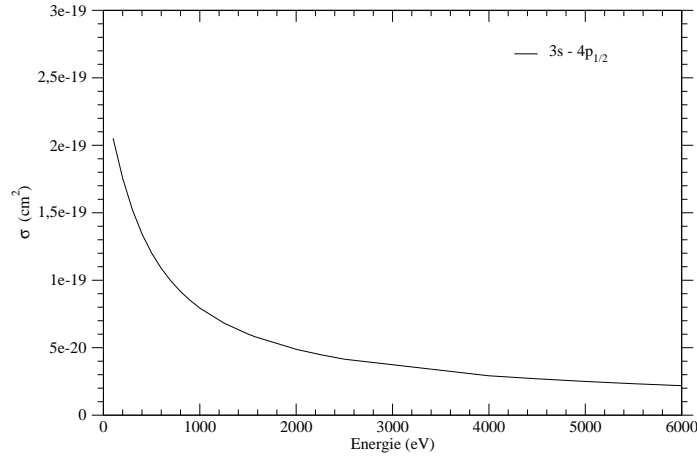


FIGURE 4.10: Section efficace d'excitation collisionnelle de la transition $3s - 4p_{1/2}$.

La petitesse des sections efficaces s'explique par le fait que les énergies des niveaux sont très élevées pour l'ion considéré dans notre étude. De plus, au vu des énergies considérées, les "chocs" entre les électrons liés et ceux du continuum ont un temps caractéristique d'interaction qui est faible. La probabilité d'interaction, proportionnelle à la section efficace, est donc d'autant plus faible.

b Photoionisation

Le code HULLAC calcule la section efficace de photoionisation, le coefficient de taux pour la recombinaison radiative est déduit par le principe de microréversibilité. La probabilité de ce processus ne dépendant pas de l'opérateur d'interaction, les variations seront différentes.

Dans la figure 4.11, on a représenté la photoionisation à partir des niveaux $1s$, $3s$, $2p_{1/2}$, $4p_{1/2}$ et $4d_{5/2}$ vers l'ion complètement ionisé Ar^{18+} . Quel que soit le niveau, la section efficace diminue quand l'énergie augmente. On remarque aisément les deux dépendances de la section efficace en ΔE et S_{ij} la force de raie dans une moindre mesure. Ceci s'explique par le fait que la photoionisation est décrite avec le même formalisme qu'une transition radiative d'Einstein, à l'exception de la fonction d'onde finale qui implique un électron du continuum. Par conséquent, la section efficace dépend de l'écart en énergie entre l'état initial et l'état final. On obtient les mêmes variations pour la photoionisation à partir des niveaux $3p_{1/2}$ et $3p_{3/2}$ (Fig. 4.12).

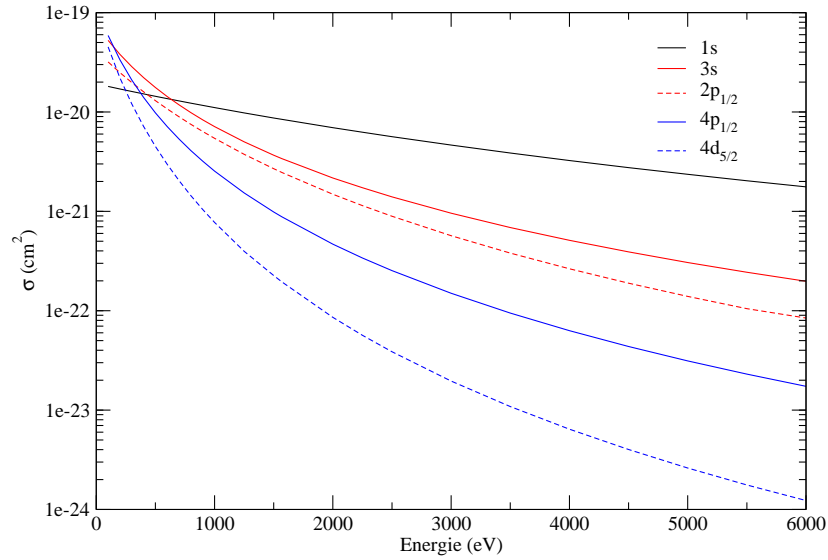


FIGURE 4.11: Section efficace de photoionisation des niveaux $1s$, $3s$, $2p_{1/2}$, $4p_{1/2}$ et $4d_{5/2}$ vers le fondamental de l'ion Ar^{18+} .

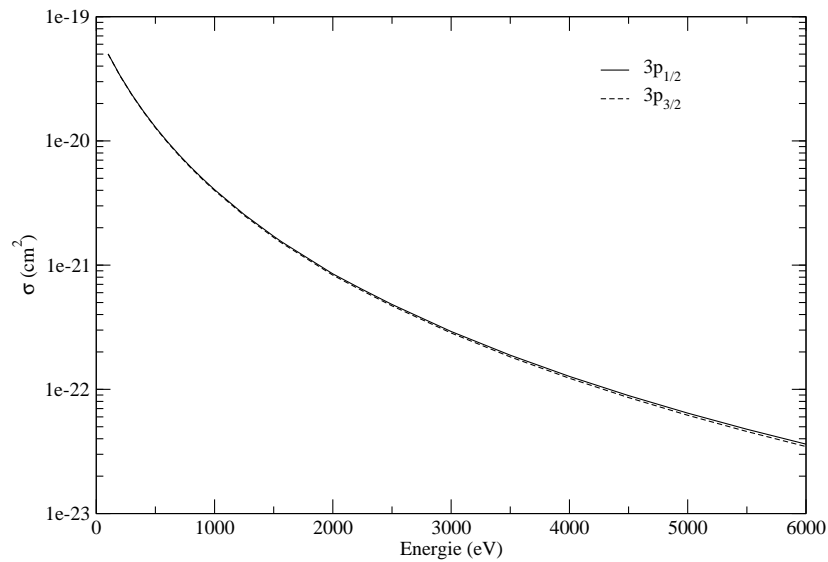


FIGURE 4.12: Section efficace de photoionisation à partir des niveaux $3p_{1/2}$ et $3p_{3/2}$ vers le fondamental de l'ion Ar^{18+} .

Pour calculer toutes les valeurs de sections efficaces en fonction de l'énergie, nécessaires aux calculs des coefficients de taux, on utilise une interpolation (voir section 4.5.2.d).

c Ionisation collisionnelle

L'ionisation collisionnelle étant traitée par le modèle semi-empirique de Lotz, l'interpolation n'est pas nécessaire. Cependant les coefficients a_i , b_i et c_i de l'équation 4.15 sont établis à partir de l'expérience et dépendent ainsi de l'équilibre d'ionisation.

Dans la figure 4.13 ci-dessous, nous avons représenté les sections efficaces d'ionisation collisionnelle à partir de quelques niveaux de Ar^{17+} . Les courbes ne sont pas régulières en raison de la précision du modèle de Lotz, les discontinuités étant dues aux limites numériques du code et au choix du pas en énergie. Un pas plus fin aurait conduit à des valeurs plus précises mais aux dépens de l'intervalle en énergie étudiée dans la simulation (temps de calcul). On observe néanmoins que la section efficace de ce processus augmente en fonction de l'énergie du niveau considéré, comme cela est prédit par la théorie.

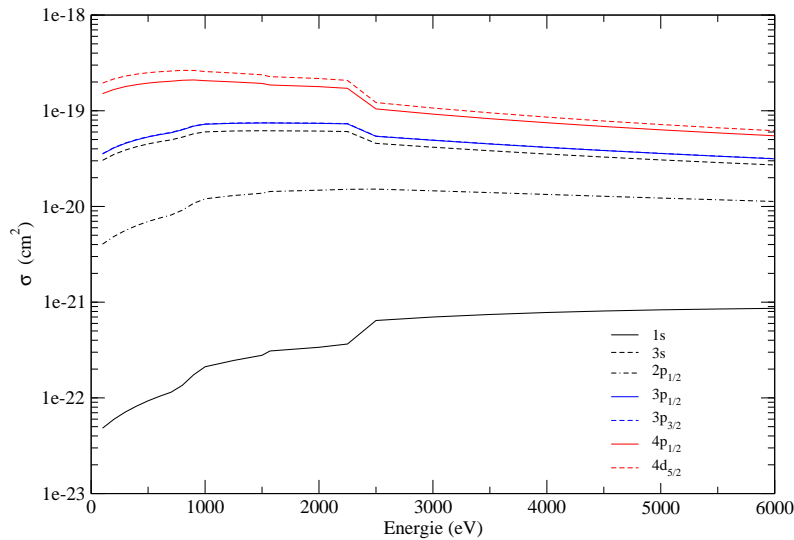


FIGURE 4.13: Section efficace d'ionisation collisionnelle des niveaux $1s$, $3s$, $2p_{1/2}$, $3p_{1/2}$ et $3p_{3/2}$, $4p_{1/2}$, $4d_{5/2}$ vers le fondamental l'ion Ar^{18+} .

L'autoionisation ne peut pas être prise en compte car elle est inexistante pour l'ion Ar^{17+} . L'ensemble des sections efficaces des processus sont utilisables malgré quelques artefacts sur certaines courbes. Les sections efficaces sont trois ordres de

grandeur inférieures à celles d'un plasma laser. Ceci s'explique par la faible probabilité d'interaction liée aux énergies considérées dans les plasmas de tokamak. Étudions les coefficients de taux de ces processus.

4.6.3 Coefficients de taux

Les coefficients de taux sont obtenus par intégration sur l'énergie de la convolution de la section efficace par une distribution Maxwellienne pour un processus collisionnel, ou par une Planckienne pour un processus radiatif, à une température donnée. Les coefficients de taux ont été calculés pour les températures suivantes : 100, 200, 500, 1000, 2000, 3000, 4000, 6000 eV. Ce choix a été fait en raison des variations faibles des coefficients de taux, permettant un maillage assez large en température. De plus, les temps de calculs pour l'ensemble des ions étaient conséquents et nécessitaient une simplification du maillage. Cependant, le protocole de calcul des sections efficaces précédentes a consisté à établir, pour la distribution en énergie des électrons, une grille en énergie spécifique centrée sur chaque température afin d'affiner le calcul.

a Excitation collisionnelle

Dans la figure 4.14 **a**, on note que les taux augmentent avec la température jusqu'à 6000 eV. On remarque des variations particulières pour la transition $3s - 4p_{1/2}$ à basse température. Ce comportement peut s'expliquer par l'interpolation de la force de collision dans le calcul des sections efficaces. Malgré un changement du pas pour avoir un maillage plus fin pour l'interpolation, les résultats sont similaires pour les valeurs à 500 et 1000 eV. Pour d'autres transitions, les variations semblent plus monotones et croissantes (Figure 4.14 **b**). Pour les transitions $3p_{1/2} - 4d_{5/2}$ et $3p_{3/2} - 4d_{5/2}$, figure 4.15, on voit que les coefficients de taux sont des fonctions croissantes de T_e jusqu'à 500 eV environ, puis décroissantes au-delà. Sur la figure du haut (transitions $1s - 3d_{3/2}$ et $1s - 3d_{5/2}$), les coefficients sont croissants. En effet, l'excitation du niveau $1s$ nécessite beaucoup d'énergie car c'est un électron de coeur, le maximum du coefficient sera donc à plus haute température.

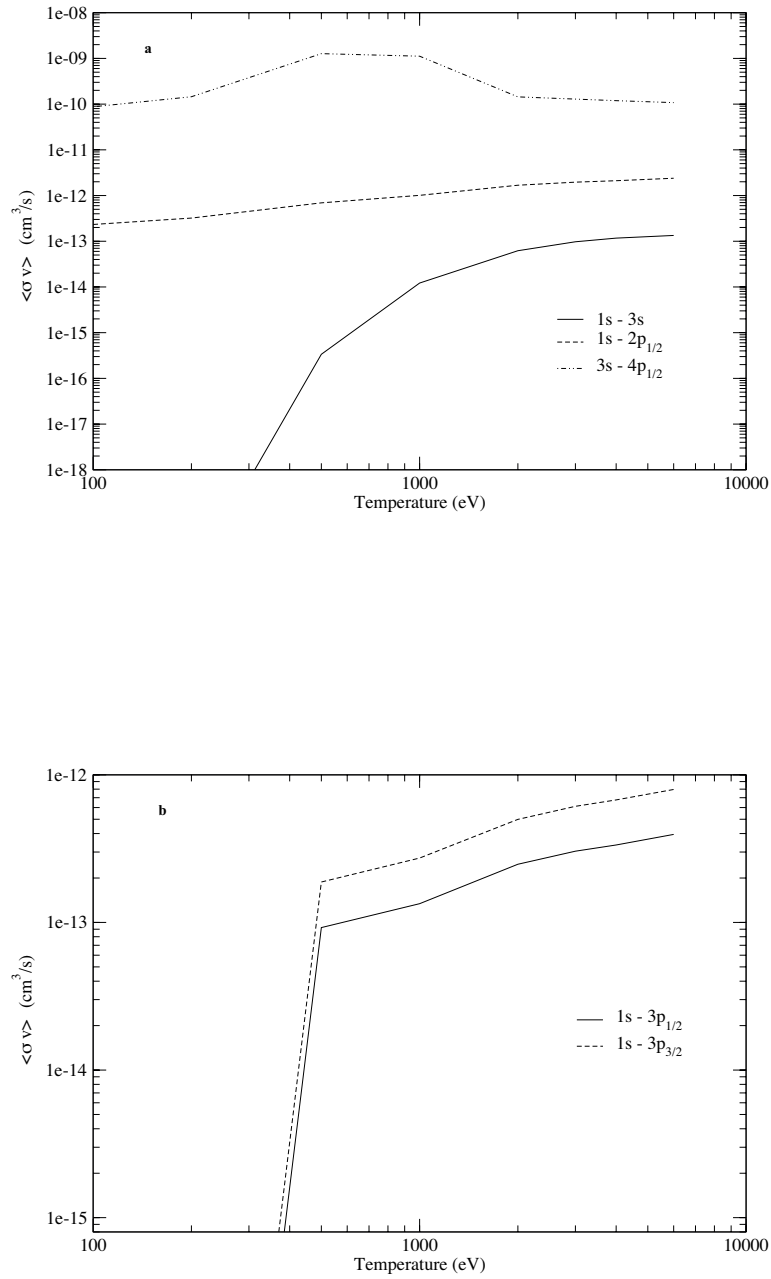


FIGURE 4.14: Coefficient de taux pour l'excitation collisionnelle. **a** : transitions $1s - 3s$, $1s - 2p_{1/2}$, $3s - 4p_{1/2}$. **b** : transitions $1s - 3p_{1/2}$ et $1s - 3p_{3/2}$.

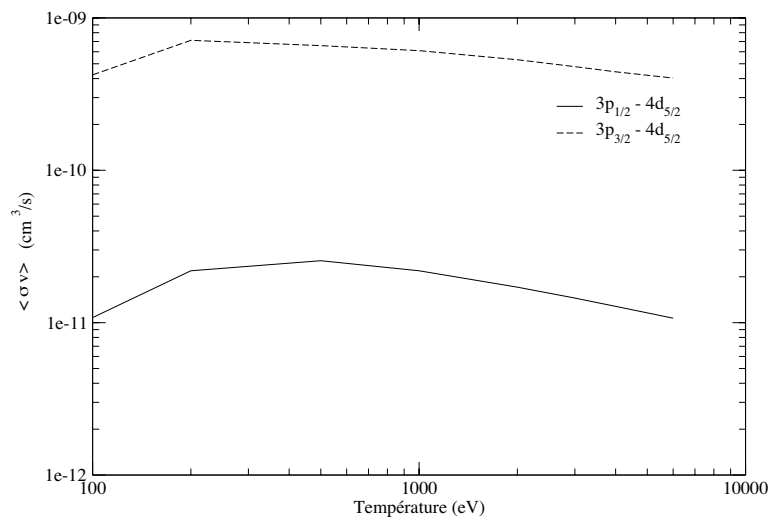
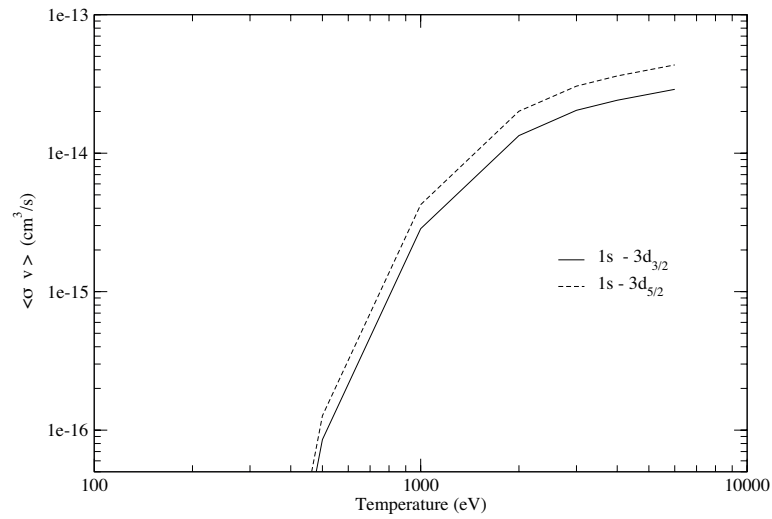


FIGURE 4.15: Figure du haut : transitions $1s - 3d_{3/2}$, $1s - 3d_{5/2}$. Figure du bas : transitions $3p_{1/2} - 4d_{5/2}$ et $3p_{3/2} - 4d_{5/2}$.

b Recombinaison radiative

Les coefficients de taux de la recombinaison radiative ont été obtenus par la méthode de l'équilibre détaillé, à partir des coefficients de taux de la photoionisation. Les coefficients de taux de la figure 4.16 décroissent lorsque la température augmente. Il n'y a pas d'artefact dans les valeurs calculées. On retrouve la même dépendance en énergie de transition que pour les sections efficaces de photoionisation.

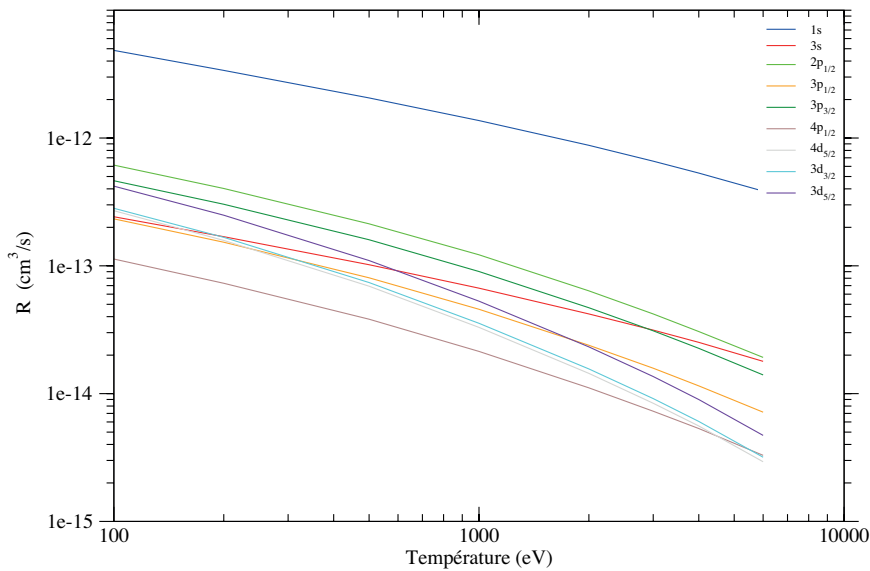


FIGURE 4.16: Coefficient de taux de la recombinaison radiative de l'ion Ar^{18+} vers les niveaux $1s$, $3s$, $2p_{1/2}$, $3p_{1/2}$, $3p_{3/2}$, $4p_{1/2}$, $4d_{5/2}$, $3d_{3/2}$, $3d_{5/2}$.

c Ionisation collisionnelle

Les niveaux considérés dans la figure 4.17 sont les mêmes que ceux de la figure 4.13. Les variations des sections efficaces sont croissantes aux faibles énergies et décroissantes pour de plus hautes énergies. Il existe un artefact pour la transition à partir de $1s$, essentiellement dû à l'intégration sur la section efficace qui a peut être un pas trop grand. Les valeurs de taux montrent que les processus collisionnels sont majoritaires. L'ordre de grandeur de la recombinaison radiative est $10^{-12} \text{ cm}^3/\text{s}$

alors que l'ionisation et l'excitation collisionnelle sont dans la gamme $10^{-11} - 10^{-10}$ cm^3/s .

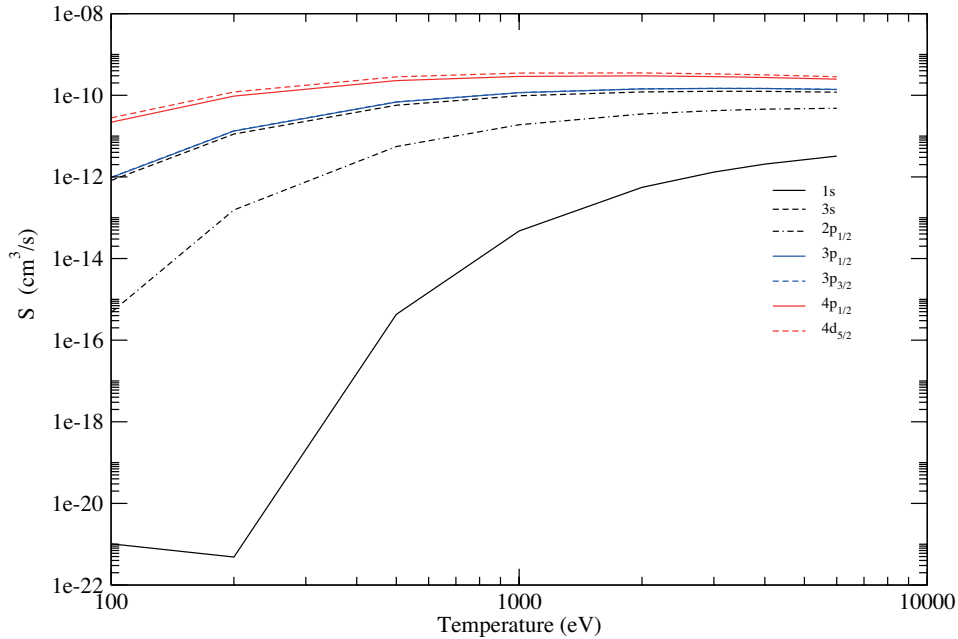


FIGURE 4.17: Coefficient de taux de l'ionisation collisionnelle des niveaux $1s$, $3s$, $2p_{1/2}$, $3p_{1/2}$, $3p_{3/2}$, $4p_{1/2}$, $4d_{5/2}$ de l'ion Ar^{17+} vers l'atome complètement ionisé.

A l'exception de certains coefficients d'excitation, l'ensemble des données est utilisable dans un modèle collisionnel-radiatif (CR). Il faut donc vérifier, pour chaque transition, les valeurs des coefficients d'excitation, avant de lancer le modèle CR.

Nous nous proposons maintenant de comparer les données fournies par HULLAC à celles issues d'ADAS.

4.6.4 Comparaison HULLAC-ADAS

La comparaison ADAS-HULLAC porte sur certaines des transitions vues précédemment. Les données d'ADAS sont obtenues à l'aide de plusieurs méthodes telles que les méthodes R-Matrix [15, 10], Configuration Average [23] et Distorted Wave (DW). Les deux premières sont plus précises que la dernière car elles font moins d'approximations sur la fonction d'onde de l'électron du continuum. N'ayant pas fait l'objet de calcul lors de ma thèse, ces méthodes ne seront pas détaillées ici.

a Excitation collisionnelle

La méthode principale utilisée dans ADAS pour le calcul du coefficient de taux est la méthode R-Matrix. Dans la figure 4.18, nous avons représenté le coefficient de taux des transitions $1s - 3d$. Nous voyons que l'accord ADAS-HULLAC est bon pour les trois méthodes (configuration average, DW et R-matrix).

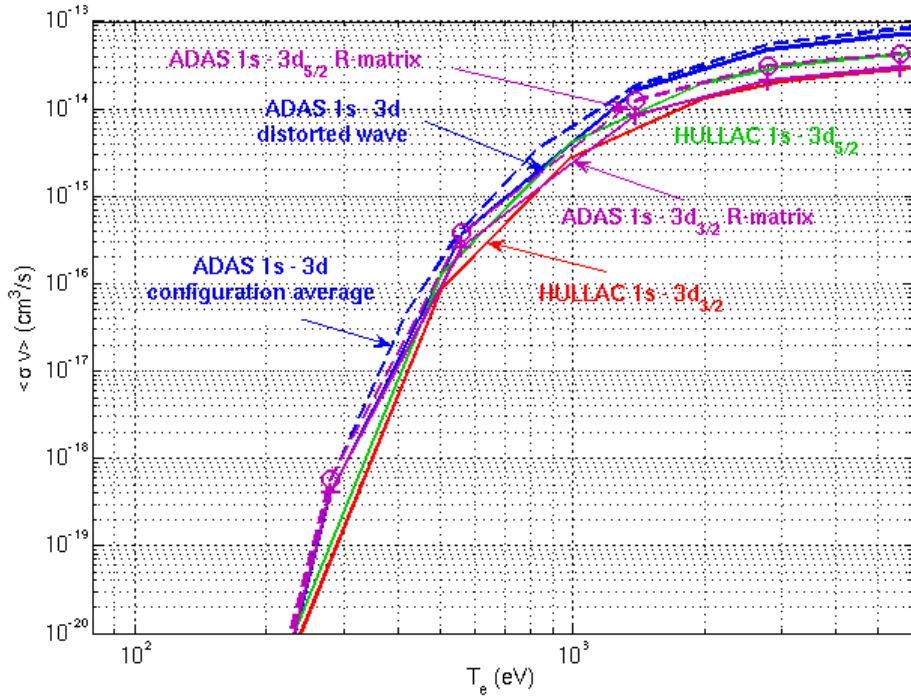


FIGURE 4.18: Comparaison HULLAC-ADAS des coefficients de taux d'excitation collisionnelle des transitions $1s - 3d_{3/2}$ et $1s - 3d_{5/2}$.

L'accord n'est pas aussi bon pour d'autres transitions. En effet, si on considère les transitions $1s - 3p_{1/2}$ et $1s - 3p_{3/2}$ (voir Fig. 4.19 ci-dessous), l'accord est médiocre, en raison de la divergence pour $T_e = 500$ eV. Ce désaccord peut être attribué à l'interpolation de la section efficace calculée par HULLAC où le pas en énergie n'est peut-être pas optimal pour le calcul de l'intégrale des coefficients de taux. En effet pour ces transitions l'accord entre les données HULLAC et les données ADAS distorted-wave devrait être satisfaisant, ce qui n'est pas le cas. Dans le cas présent, l'erreur provient de la méthode de calcul de la section efficace. Dans d'autres cas, il existe des désaccords plus grands, par exemple pour les transitions $3p_{3/2} - 4d_{5/2}$.

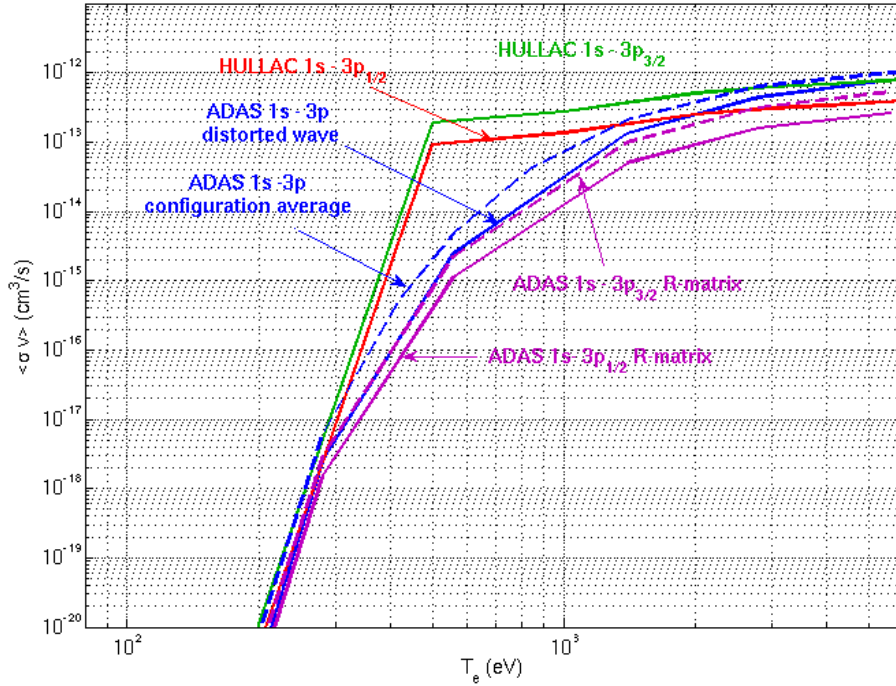


FIGURE 4.19: Idem Fig. 4.18 pour les transitions $1s - 3p_{1/2}$ et $1s - 3p_{3/2}$.

Dans la figure 4.20, nous comparons les coefficients de taux des transitions $3p - 4d$. Nous notons que l'accord entre les deux calculs est acceptable pour les hautes températures. Par contre, aux basses températures, une différence d'un ordre de grandeur est notée pour la transition $3p_{3/2} - 4d_{5/2}$. Nous avons refait des calculs avec différents pas pour l'interpolation de la section efficace mais les données restent sensiblement les mêmes. Cependant, la méthode DW est moins précise pour certaines transitions à basse énergie, ce qui peut expliquer cette divergence. Pour la transition $3p_{1/2} - 4d_{5/2}$, l'accord est satisfaisant quelle que soit l'énergie.

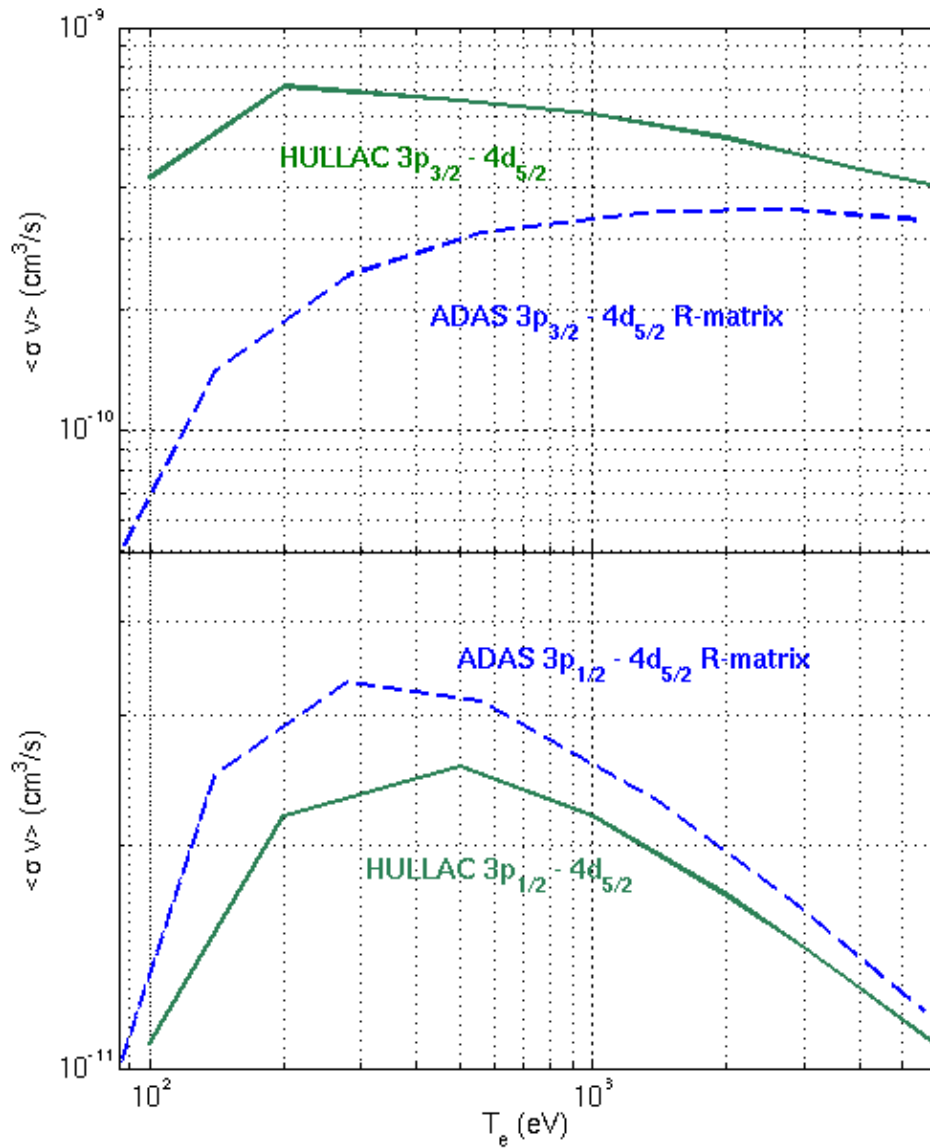


FIGURE 4.20: Idem Fig. 4.18 pour les transitions $3p_{3/2} - 4d_{5/2}$ (figure du haut) et $3p_{1/2} - 4d_{5/2}$ (figure du bas).

b Recombinaison radiative

Pour la recombinaison radiative (RR), les méthodes de calculs sont similaires dans les deux bases de données. Mais les coefficients disponibles dans ADAS sont effectifs et généralisés. Ils font donc intervenir les populations des niveaux. Nous

avons pu comparer seulement les allures des courbes.

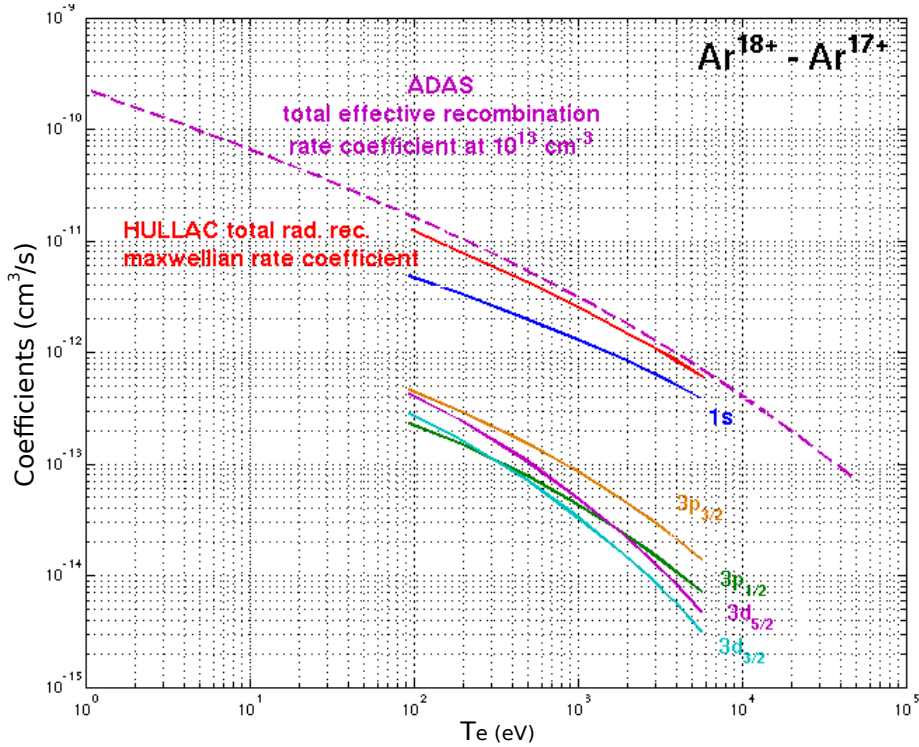


FIGURE 4.21: Comparaison du coefficient de taux de RR de l'atome complètement épluché vers les niveaux $1s$, $3p_{1/2}$, $3p_{3/2}$, $3d_{3/2}$, $3d_{5/2}$, et du coefficient effectif généralisé de ADAS (courbe violette). Courbe rouge : somme des coefficients de taux issus de HULLAC.

Dans la figure 4.21 ci-dessus, nous comparons les coefficients de taux de RR. La courbe représentant la somme des coefficients de taux de HULLAC est très proche de celle de ADAS, et présente la même variation. Ce qui confirme que les calculs sont similaires bien que HULLAC implique les niveaux jusqu'à la couche $n = 7$ et ADAS seulement jusqu'à $n = 5$. Les niveaux de n élevé contribuent peu aux processus radiatifs mais jouent un rôle important dans l'équilibre d'ionisation. On observe les mêmes variations pour la recombinaison radiative du fondamental de Ar^{17+} vers les niveaux de Ar^{16+} (voir Fig. 4.22 ci-dessous). Les variations sont quasi-identiques au cas précédent bien que le coefficient généralisé non effectif de HULLAC soit inférieur à celui du cas $\text{Ar}^{18+} \rightarrow \text{Ar}^{17+}$. Il est important de noter que le coefficient de recombinaison ADAS comprend la recombinaison radiative et la recombinaison diélectronique. Ceci peut expliquer la différence entre les coefficients totaux pour les deux jeux de données, car la contribution de la RD (recombinaison

diélectronique) est non nulle, contrairement au cas $\text{Ar}^{18+} \rightarrow \text{Ar}^{17+}$ de la figure 4.21.

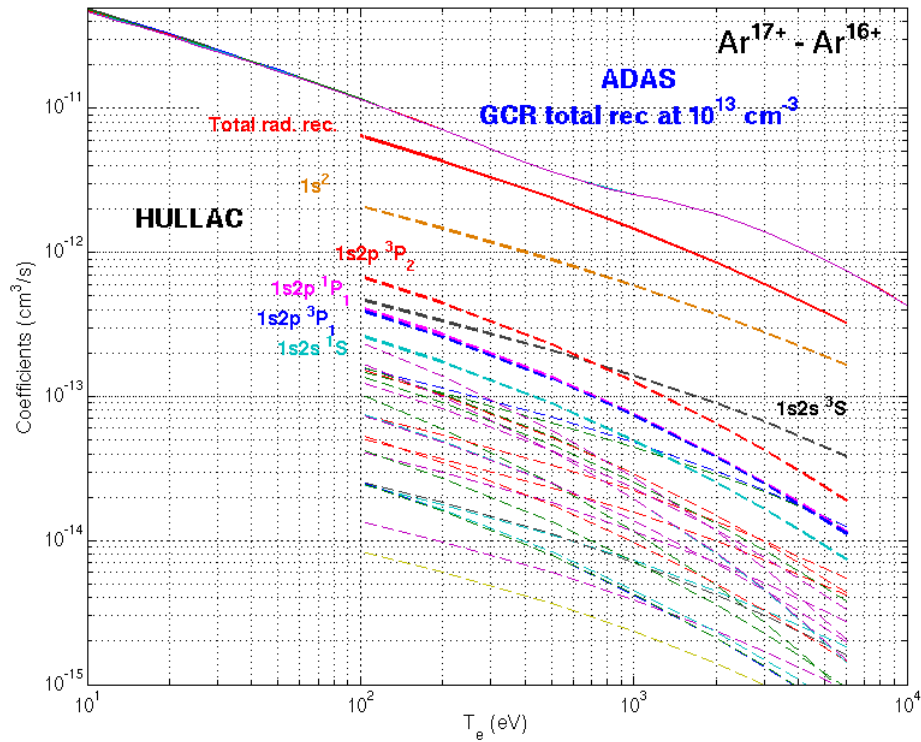


FIGURE 4.22: Idem Fig. 4.21 pour les ions H-like et He-like.

c Ionisation collisionnelle

ADAS utilise la même méthode de calcul que HULLAC : l'algorithme de Lotz. Les résultats sont par conséquent identiques (Fig. 4.23). Les valeurs sont très proches voire identiques pour les niveaux autres que $1s$.

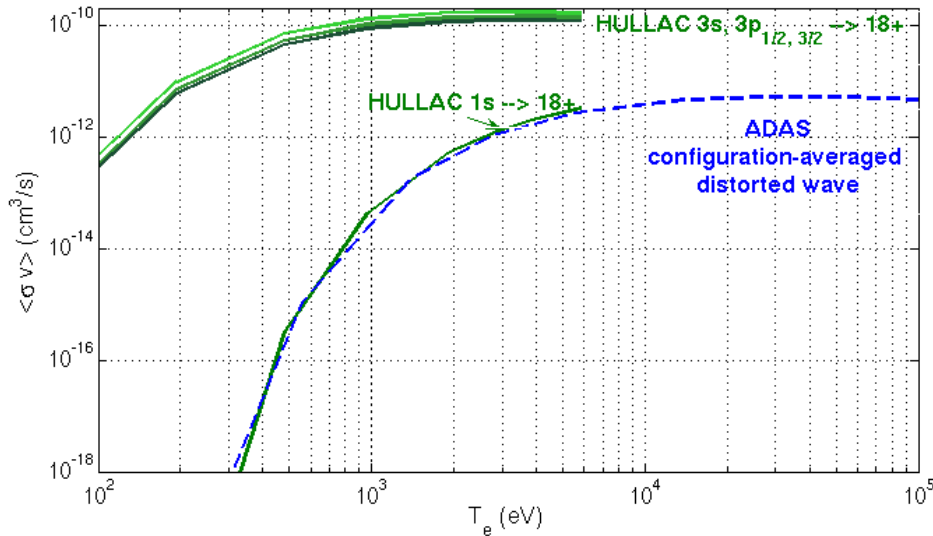


FIGURE 4.23: Comparaison des coefficients de taux d'ionisation collisionnelle HULLAC-ADAS pour les niveaux $1s$, $3s$, $3p_{1/2}$ et $3p_{3/2}$.

L'ensemble des coefficients de taux obtenus à l'aide de HULLAC est donc utilisable dans le modèle collisionnel-radiatif de ADAS, à l'exception de quelques niveaux. Le travail actuel consiste à vérifier les valeurs pour les niveaux majoritaires, car dans la base de données ADAS seuls les niveaux métastables sont pris en compte dans les calculs. Le code HULLAC est donc un outil ayant une précision suffisante pour l'étude du transport et offrant des temps de calculs courts, de l'ordre de quelques heures, en comparaison des méthodes très précises comme R-Matrix qui converge sur plusieurs semaines voire des mois selon les cas.

Des coefficients de taux on été calculés pour les ions argon de $18+$ à $7+$, pour pouvoir les utiliser dans un modèle CR. Il faut vérifier leurs variations en fonction de la température pour éviter les incohérences ou erreurs. L'étape suivante serait de faire tourner le modèle CR d'ADAS et d'injecter les coefficients généralisés obtenus dans ITC. Malheureusement, faute de temps, je n'ai pas pu accomplir cette tâche. Néanmoins, j'ai analysé ITC pour faire des tests du code lors de mes missions à Cadarache. Pour expliquer la démarche de l'étude envisagée dans les mois à venir, présentons un exemple simple de modélisation/reconstruction du rayonnement plasma par ITC.

4.6.5 Exemple d'itération ITC

Le code ITC est actuellement en cours de modification/debugage et n'a pu être utilisé pour obtenir des coefficients de transport pour les expériences réalisées. Seule

la première itération de la routine a été faite. Ainsi, avec les données ADAS en entrée de ITC on obtient (Fig. 4.24) :

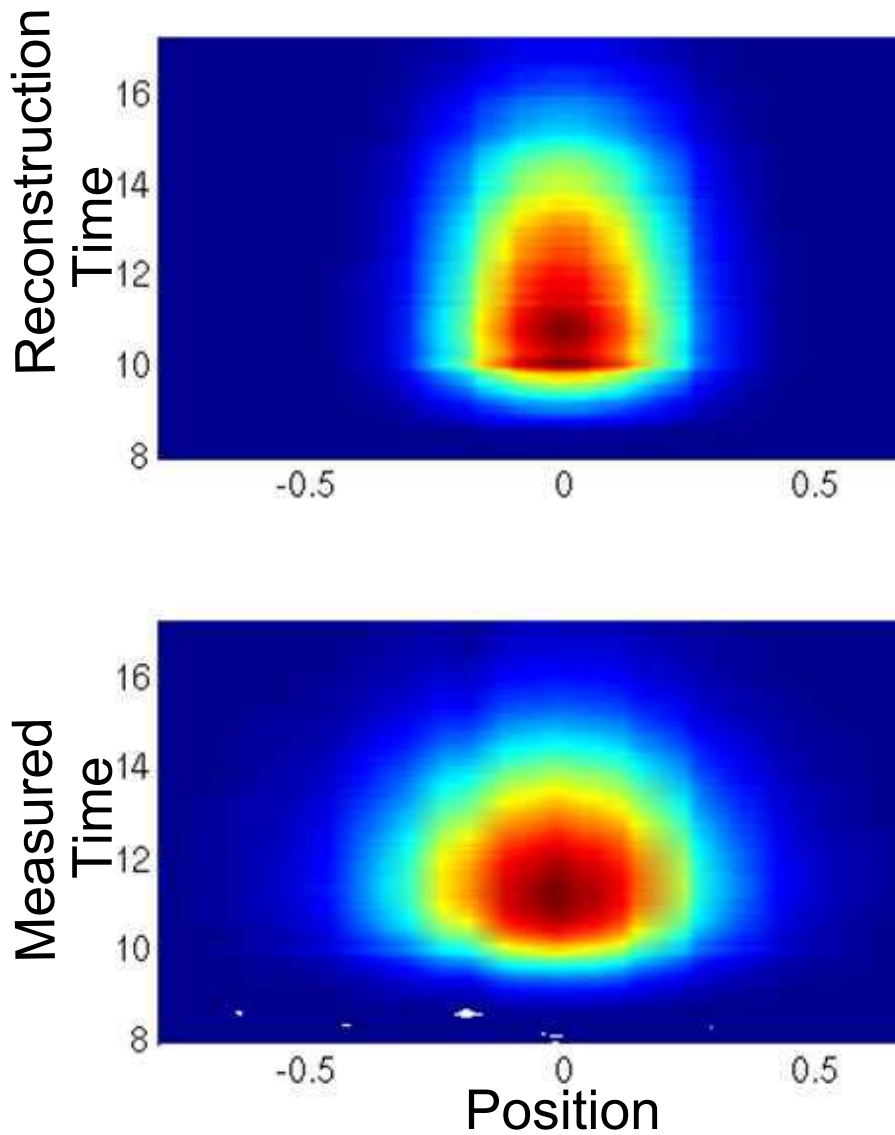


FIGURE 4.24: Comparaison entre le signal reconstruit ITC et le signal brut des diagnostics de la décharge 47191.

Les variations d'émission X-mous sont très différentes, ce qui est logique car il n'y a pas eu d'optimisation par l'algorithme génétique dans les routines de ITC. Par ailleurs, le calcul de la densité d'impuretés en fonction du rayon normalisé donne

(Fig. 4.25) :

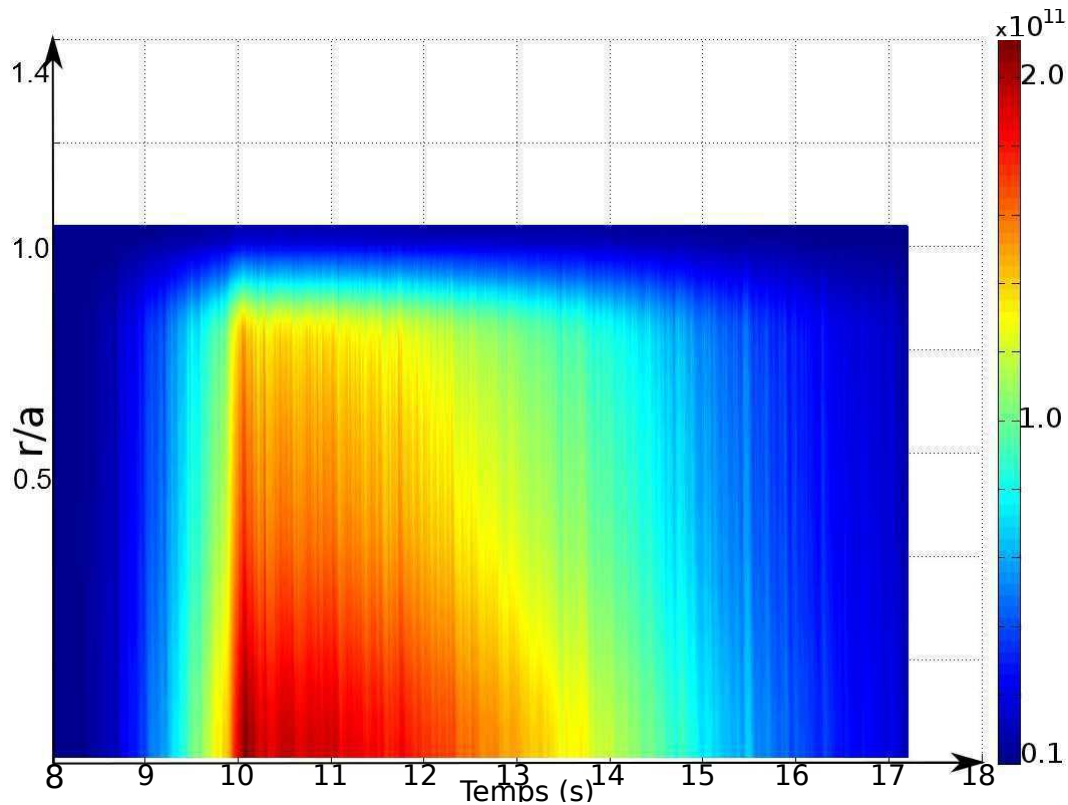


FIGURE 4.25: Densité d'impuretés pour la décharge 47191, après la première itération dans ITC. L'échelle à droite de la figure donne la règle graphique de lecture de la densité en cm^{-3} .

Cette reconstruction montre que la densité est plus importante dans le coeur, en raison du transport des impuretés. Néanmoins, cette simulation n'est pas précise car le rayonnement reconstruit qui en découle (voir figure 4.24) ne correspond pas aux mesures des diagnostics.

Les calculs qui restent à faire portent sur la structure atomique d'autres ions argon. Ceci permettrait de faire un calcul CR impliquant l'ensemble de la séquence ionique compatible avec les conditions plasma. Il convient alors d'examiner la sensibilité des coefficients de transport aux données atomiques (nombre de niveaux considéré, méthode utilisée, etc.).

4.7 Conclusion

Nous avons présenté les expériences effectuées sur Tore Supra au cours de la campagne d'expériences de 2011. Notre étude de la structure atomique et des pro-

cessus collisionnels et radiatifs dans les plasmas de fusion est justifiée par des expériences d'injection d'Argon visant à caractériser l'influence du transport turbulent par rapport au transport néoclassique. En effet, les coefficients de transport (diffusion et vitesse de convection) sont obtenus par reconstruction des signaux X-mous du plasma et dépendent donc des coefficients de taux des processus atomiques. Nous avons donc calculé un nouveau jeu de données atomiques afin d'étudier la sensibilité des résultats des simulations du transport en fonction de celles-ci.

La première étape de l'étude, étape de validation, consistant à comparer les coefficients de taux des processus pour chaque niveau entre nos résultats et ADAS, a montré que les deux jeux de données sont proches pour l'ion Ar^{17+} . Cette comparaison a fait apparaître des problèmes liés au code HULLAC pour certaines valeurs de température. Nos résultats sont néanmoins utilisables en première approximation dans le modèle CR de ADAS. Les calculs CR sont actuellement en cours et ne peuvent donc être présentés ici. L'étape suivante de notre étude serait de comparer les résultats du modèle CR de HULLAC, déjà obtenus, à ceux de ADAS. En effet, les routines des deux codes sont très sensibles à la résolution numérique. La dernière étape serait d'analyser les données des expériences avec le code ITC à partir de données atomiques plus complexes, avec plus de niveaux considérés pour les coefficients généralisées, fournies par HULLAC. Le but serait de quantifier la sensibilité des routines de calcul des coefficients de transport aux différents jeux de données disponibles.

Ce travail permettra d'élaborer par la suite une base de données pour le tungstène (W) dans le cadre du projet WEST qui fera de Tore Supra une machine à paroi en tungstène. Les expériences du transport qui en découleront seront essentielles à la préparation des décharges pour ITER, ce qui en font un enjeu majeur des années à venir.

Appendices

Théorie du transport

Dans cette annexe nous présenterons un résumé des lois principales du transport. Nous ne détaillerons pas les raisonnements donnant les expressions des flux néoclassique et turbulent.

Le transport des particules dans les tokamaks est lié à deux phénomènes : les collisions entre particules, qui définissent le flux néoclassique, et les turbulences du plasma. Dans un premier temps, nous détaillerons le transport néoclassique, puis, dans un second temps, le transport turbulent. Le flux néoclassique s'appuie sur la théorie des collisions entre les particules. Leurs trajectoires sont modifiées et créent un flux radial dans le plasma. Par conséquent, le transport néoclassique dépend des différents régimes de collision spécifiques aux tokamaks et s'applique aux deux types de particules : les particules passantes et piégées.

Formule générale

Ces deux types de particules sont définis par une condition sur leurs énergies cinétiques associées à la vitesse parallèle V_{\parallel} et à la vitesse perpendiculaire V_{\perp} du centre guide :

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2}mV_{\parallel}^2 + \frac{1}{2}mV_{\perp}^2 \\ E &= \frac{1}{2}mV_{\parallel}^2 + \mu_z B \end{aligned}$$

où $\mu_z = \frac{1}{2B}mV_{\perp}^2 = ze\omega_z\rho_L^2/2$ est l'invariant adiabatique, m étant la masse de la particule z , ω_c la pulsation cyclotronique et R_{Larmor} le rayon de Larmor. On déduit aisément une condition sur la vitesse parallèle :

$$V_{\parallel}^2 = \frac{2}{m}(E - \mu_z B)$$

Cette condition permet de spécifier si une particule est piégée ou non. Si sa valeur en énergie E est suffisante ($> \mu_z B$) alors la trajectoire est dite passante, à l'inverse, lorsque $E < \mu_z B$ la particule est piégée et elle décrit une trajectoire périodique du côté faible champ du tore entre les deux points où V_{\parallel} s'annule. Pour ces dernières on parle de trajectoires bananes.

En conséquence, le flux total d'une impureté dans le plasma s'écrit :

$$\Gamma = \Gamma_{\text{Turbulent}} + \underbrace{\Gamma_{\text{Classique}} + \Gamma_{\text{Banane,Plateau}} + \Gamma_{\text{Pfirsch-Schluter}}}_{\text{Flux néoclassique}} \quad (\text{D.1})$$

Flux néoclassique

Les trois derniers termes de la formule D.1 constitue le flux néoclassique. Les flux plateaux, Pfirsch-Schlüter et bananes correspondent aux flux en fonction du régime de collisionnalité considéré. $\Gamma_{\text{Classique}}$ est issu de la loi d'Ohm généralisée et de l'équilibre de pression. Son expression a été établie dans les années 60 pour un plasma de géométrie simple (plasma cylindrique, compression par les champs \vec{E} et \vec{B} , température uniforme). On obtient :

$$\Gamma_{\text{Classique},z} = -D_{\text{Classique}} \vec{\nabla} n_z = \frac{\eta\beta}{2\mu_0}, \quad (\text{D.2})$$

où η est la résistivité du plasma en $\Omega \cdot \text{m}$, $\beta = 2\mu_0 n_z T_e / B^2$ (rapport pression cinétique sur pression magnétique). Néanmoins, cette expression n'est pas valable pour les tokamaks car elle est trop approximative au vu de la physique des plasmas magnétisés. Des calculs analytiques plus précis [24, 25] appliqués aux tokamaks donnent l'expression suivante :

$$\Gamma_{\text{Classique},z} = -\frac{8}{3} \sqrt{\pi} e^2 \frac{\ln(\Lambda) n_D}{B^2} \sqrt{\frac{m_D}{T}} \left[\nabla n_z - \left(z \frac{\nabla n_D}{n_D} - \left(\frac{z}{2} + 1 \right) \frac{\nabla T}{T} \right) n_z \right], \quad (\text{D.3})$$

où $\ln(\Lambda)$ est le logarithme coulombien¹ et n_D la densité de deutérium. Les flux $\Gamma_{\text{Banane,Plateau}}$ et $\Gamma_{\text{Pfirsch-Schluter}}$ dépendent du régime de collisionnalité considéré. Définissons le paramètre de collisionnalité correspondant au rapport de la fréquence de dépiégeage ν_{dp} sur la fréquence des orbites bananes ν_b :

$$\nu_* = \frac{\nu_{\text{dp}}}{\nu_b} = \frac{\pi q R}{v_{\text{Th}} \epsilon^{3/2}} \nu_{\text{Coll}}, \quad (\text{D.4})$$

où v_{Th} est la vitesse thermique, q le facteur de sécurité, R le grand rayon de la surface magnétique et ν_{Coll} la fréquence de collision définie au moyen de la théorie de Rutherford. Si l'on considère une espèce A venant interagir (collisionner) avec une espèce B immobile, la fréquence de collision correspondant à la vitesse initiale v_A sera :

$$\nu_{\text{Coll}} = \frac{e_A^2 e_B^2}{(4\pi\epsilon_0)^2 m_A^2 v_A^3} n_B \ln\Lambda, \quad (\text{D.5})$$

où n_B est la densité de l'espèce B et ϵ la paramètre r/R_0 . A partir de la formule D.4 on définit trois régimes de collisionnalité :

- Régime $\nu_* \ll 1$ (orbites bananes) : la fréquence des collisions est faible. Par conséquent, les particules gardent leur état (passant ou piégé) pendant plusieurs orbites.

1. $\ln(\Lambda) = \ln(\lambda_D/\lambda_L)$, où λ_D est la longueur de Debye et λ_L la longueur de Landau.

- Régime $\nu_* \approx 1$ (plateau) : régime correspondant aux cas intermédiaires entre le domaine de forte collisionnalité et le domaine où elle est faible. Les particules piégées ont une probabilité élevée de se dépiéger au cours de leur première orbite.
- Régime $\nu_* > \epsilon^{-3/2}$ (Pfirsch-Schlüter) : régime à forte collisionnalité. Les particules subissent des collisions tout au long de leurs trajectoires dans le plasma.

Le flux total de l'impureté dans le plasma, formule D.1, doit tenir compte de l'ensemble des régimes de collisionnalité possibles, d'où les termes $\Gamma_{\text{Banane,Plateau}}$ et $\Gamma_{\text{Pfirsch-Schlüter}}$. Leurs expressions approchées sont :

$$\Gamma_{\text{B,P}} = -S \left[\nabla n_z - \left(z \frac{\nabla n_D}{n_D} - \left(\frac{3}{2}(z-1) - \left(z \frac{K_{12}^D}{K_{11}^D} - \frac{K_{12}^Z}{K_{11}^Z} \right) \right) \frac{\nabla T}{T} \right) n_z \right] \quad (\text{D.6})$$

$$\Gamma_{\text{P-S}} = -2q^2 K \frac{8}{3} \sqrt{\pi} \frac{e^2 \ln \Lambda n_D}{B^2} \sqrt{\frac{m_D}{T}} \left[\nabla n_z - \left(z \frac{\nabla n_D}{n_D} + z \frac{H}{K} \frac{\nabla T}{T} \right) n_z \right] \quad (\text{D.7})$$

Ces flux tiennent compte de la viscosité par l'intermédiaire des coefficients K_{ij}^Z et K_{ij}^D qui sont des éléments de la matrice générale de viscosité du plasma. Le coefficient S de la formule D.6 a pour expression :

$$S = \frac{3}{2} \frac{c^2 T}{e^2 B^2 R^2 z^2} \left(\frac{K_{11}^D K_{11}^Z}{K_{11}^D + K_{11}^Z} \right).$$

Quant aux coefficients H et K , ils sont définis par :

$$H = -\frac{1}{2} + \frac{0.29 + 0.68 n_z z^2 / n_D}{0.59 + n_z Z^2 / n_D + 1.34 (\epsilon^{3/2} \nu_*)^{-2}} \quad (\text{D.8})$$

$$K = 1 + \frac{0.52 n_z z^2 / n_D}{0.59 + n_z z^2 / n_D + 1.34 (\epsilon^{3/2} \nu_*)^{-2}}. \quad (\text{D.9})$$

Ces paramètres sont détaillés dans l'article de Hirshman [25].

Flux turbulent

Les plasmas de fusion nucléaire sont caractérisés par la température et la densité, qui dépendent de la position, mais aussi par le gradient de pression cinétique p . Ce dernier induit des fluctuations des champs \vec{E} et \vec{B} , notées $\delta\vec{E}$ et $\delta\vec{B}$ qui modifient les vitesses de dérive des particules dans le plasma.

- Fluctuation de vitesse radiale due au champ $\vec{E} \rightarrow \delta\vec{V}_E = \frac{\delta\vec{E} \wedge \vec{B}}{B^2}$
- Fluctuation de vitesse radiale due au champ $\vec{B} \rightarrow \delta\vec{V}_B = \frac{\delta\vec{B}}{B} V_{\parallel}$

Notre propos n'est pas de rentrer dans le détail du raisonnement donnant le flux turbulent, mais certaines grandes caractéristiques en découlent. Par une étude dimensionnelle, on note tout d'abord que la fluctuation de vitesse due à la variation du champ \vec{B} est négligeable devant celle issue de la variation du champ \vec{E} . Pour

résoudre la dynamique des particules dans le plasma, l'approche la plus pertinente est l'approche fluide. La théorie gyrocinétique en découle. La base de la théorie s'appuyant sur l'équation de Vlasov est détaillée dans l'article de Bourdelle [26]. La résolution de cette équation permet de déduire l'expression du flux (par le code QuaLiKiz à Cadarache) :

$$\Gamma_z^{\text{turb}} = \frac{n_z}{R} \left(-D_z \frac{R \nabla n_z}{n_z} - C_z^{\text{th}} \frac{R \nabla T_z}{T_z} + R C_z^c \right) \quad (\text{D.10})$$

La méthode de résolution ainsi que les expressions des coefficients $D_z, C_z^{\text{th}}, C_z^c$ sont dans la référence [26].

Les expressions de chacun des flux précédents, néoclassique et turbulent, peuvent être décomposées en un terme diffusif et un terme convectif.

ANNEXE E

Expérience Tore Supra

La campagne d'expérience sur Tore Supra a demandé dix-sept décharges plasma. Cependant, un seul choc, le 47191, est utilisable en raison de problèmes techniques sur les diagnostics. Cette annexe résume les paramètres/protocoles des expériences effectuées. Détaillons les diagnostics utilisées dans notre étude :

- Les spectromètres DUO, pour leurs bonnes résolutions temporelles (10 ms), et SIR pour sa bonne résolution en λ .
- CXRS : spectromètre par échange de charge fonctionnant en parallèle de l'injection de neutres IDN.
- Caméras X-mous qui mesurent la puissance rayonnée entre 2 et 18 keV.
- ECE (Emission Cyclotronique Electronique) : diagnostic pour la mesure de la température électronique.
- **Bolométrie** : mesure de la puissance rayonnée
- Réflectométrie : mesure de la densité en fonction de la position au sein du plasma
- **Interférométrie** : mesure de la densité en fonction de la position au sein du plasma

Les diagnostics écrits en gras correspondent aux systèmes indispensables au fonctionnement de la machine. Les quatre premiers, sans compter CXRS, sont ceux dont les mesures sont reconstruites par le code ITC pour évaluer l'écart entre simulations et expériences. Les deux capteurs des spectromètres à cercles de Rowland, respectivement à petite et grande longueur d'onde, sont fixés sur certains angles d'après la loi suivante $\sin i + \sin i' = nk\lambda$, où i et i' sont les angles d'incidence et de sortie du réseau, n le pas du réseau et k l'ordre en diffraction. Les longueurs d'onde observées sont donc :

Spectromètre	petits lambda	grands lambda
SIR	$\approx 15 \text{ \AA}$	$\approx 215\text{-}270 \text{ \AA}$
DUO	$\approx 195 \text{ \AA}$	$\approx 710 \text{ \AA}$

A partir de cette configuration des diagnostics, l'ensemble des expériences se résume à :

Choc	Paramètres	Protocole	Commentaires	Choc	Paramètres	Protocole	Commentaires
47185	$I_p=0.5\text{MA}$	-gaz puff Ar t=6-9s -ISPI N ₂ à t=5s -Ablation laser Nickel à t=3s	-IDN Hors service -FCE Hors service -Test injection impureté et FCE	47192	$I_p=0.5\text{MA}$	-FCE t=2-7s (Idem 47189) (2 gyrotrons dans le coeur r/a=0.35) -Ablation laser Nickel à t=3s -ISPI (0.5s) Azote à t=1, 5s et en fin de plateau	-DUO et CXRS Hors service -Ablation laser Nickel Hors service
47186	$I_p=0.5\text{MA}$	-Idem choc 47185 -ISPI N ₂ à t=4 et 5s -gaz puff Ar t=7-10s (debit 0.02)	Disruption à t=8.7s → trop d'argon	47193	$I_p=0.5\text{MA}$	-Idem 47192	-DUO Hors service
47187	- $I_p=0.5\text{MA}$	-Idem 47186 -FCE t=2-7s -IDN à t=7.5s	-Disruption à t=8.9s -Raie Ar 716 Å	47194	$I_p=0.5\text{MA}$	-Test absorption FCE gyrotrons(r/a=0.35 et 0.5)	Pas de FCE
47188	$I_p=0.5\text{MA}$	-Idem 47187 -Débit Ar à 0.01 -IDN à t=9s	-X-mous Hors service	47195	$I_p=0.5\text{MA}$	-Idem 47194	FCE OK
47189	-Idem 47188	-X-mous Hors service -IDN à t=9.5s		47196	$I_p=0.5\text{MA}$	-Idem 47192	
				47197	$I_p=0.5\text{MA}$	-Idem 47192	
				47198	$I_p=0.5\text{MA}$	-Test absorption FCE gyrotrons r/a=0.35 et 0.5	
				47199	$I_p=0.5\text{MA}$	-Idem 47192 -Pas de CXRS, IDN	-Observation faible sur les X-mous de l'injection à 10.5
				47200	$I_p=0.5\text{MA}$	-Idem 47199	

TABLE E.1: Paramètres expérimentaux des décharges plasmas sur Tore Supra. ECE : Emission Cyclotronique Electronique, CXRS : Spectroscopie par échange de charge, IDN : Injection De Neutres, FCE : Fréquence Cyclotronique Electronique, FCE : Chauffage Cyclotronique Electronique, ISPI : Injection Supersonique.

A partir de la décharge 47191 (idem 47189), l'injection par ablation laser ne fonctionne plus. Il n'y a donc plus de raies observées pour le nickel. La décharge 47190 a servi à nettoyer la chambre et n'apparaît pas dans le tableau E.1. Les disruptions des décharges 47186 et 47187 sont dues à la trop grande concentration en argon dans le plasma, qui se recombine car l'énergie rayonnée devient supérieure à l'énergie injectée dans le plasma. Expérimentalement, ce comportement n'a pu être prévu avant car l'argon diffuse lentement dans le plasma, et son observation sur les X-mous implique que la quantité injectée dans le plasma est déjà importante. D'où la diminution du débit d'injection dans les expériences suivantes. De plus, une sécurité sur la puissance rayonnée stoppe le chauffage FCE, ce qui provoque une augmentation de la densité électronique, sur certaines décharges telles que la 47189.

En ce qui concerne les données spectroscopiques, on se limitera à la mesure de certaines raies majoritaires utilisables pour la simulation du terme source dans le programme ITC (voir Table E.2).

Ar	N
23.5 Å (Ar XIII)	247.2 Å (N IV)
192.2 Å (Ar VII)	266.196 Å (N V)
218.3 Å (Ar XII)	283.48 Å (N IV)
221 Å (Ar XV)	765.147 Å (N IV)
224.25 Å (Ar XII)	
243.6 Å (Ar XIV)	
257.4 Å (Ar XIV)	
703 Å (Ar V)	
709.5 Å (Ar V)	

TABLE E.2: Raies de l'argon et de l'azote mesurées par les spectromètres lors du choc 47191.

Certaines raies se distinguent des autres car elles correspondent à des transitions majoritaires au sein de l'ion. Par exemple, pour Ar XIV, la raie à 243.6 Å résulte de la transition $2s^22p^1 \rightarrow 2s^12p^2$. Pour l'azote (N IV), la raie à 765.147 Å est due à la transition $1s^22s^2 \rightarrow 1s^22s^12p^1$.

Sur cette campagne d'expérience, en raison des problèmes sur les diagnostics, le seul choc vraiment utilisable est le 47191. Nos calculs ont fait appel à de nombreuses données atomiques et nous ont permis d'étudier la sensibilité de nos résultats à ces données. Par ailleurs en parallèle des problèmes expérimentaux, une étude complète du transport n'a pu être faite pour certaines des données acquises en raison du comportement de l'Argon (migration lente dans le plasma). Cependant, il sera toujours possible de faire des comparaisons, à partir des profils de température et de densité, entre les données standard et celles données par les mesures d'échange de charge.

Bibliographie

- [1] R. Guirlet, D. Villegas, T. Parisot, C. Bourdelle, X. Garbet, F. Imbeaux, D. Mazon, D. Pacella, Nucl. Fusion **49**, 055007 (2009).
- [2] R. Guirlet, A. Sirinelli, T. Parisot, R. Sabot, J. F. Artaud, C. Bourdelle, X. Garbet, P. Hennequin, G. T. Hoang, F. Imbeaux, J. L. Ségui, D. Mazon and D. Villegas, Nucl. Fusion **50**, 095009 (2010).
- [3] ADAS, <http://www.adas.ac.uk/>.
- [4] M. G. Kendall, A. Stuart, The advanced theory of statistics **1** (Griffin,1943).
- [5] T. Parisot, Thèse de doctorat, Université de Provence, Septembre 2007.
- [6] D. Villegas, R. Guirlet, C. Bourdelle, G. T. Hoang, X. Garbet and R. Sabot, Phys. Rev. Lett. **105**, 035002 (2010).
- [7] D. Villegas, Thèse de doctorat, Université de Provence, Octobre 2010.
- [8] A. Bar-Shalom, M. Klapisch and J. Oreg, J. Quantit. Spectrosc. and Radiat. Trans. **71**, 169 (2001).
- [9] I. P. Grant, B. J. McKenzie, P. H. Norrington, D. F. Mayers and N. C. Pyper, Comput. Phys. Comm. **21**, 207 (1980).
- [10] B. H. Bransden, C. J. Joachain, Physics of Atoms and Molecules, Second edition (Pearson education limited, 2003).
- [11] S. Shippers, D. Bernhardt, A. Muller, C. Krantz, M. Grieser, R. Repnow, A. Wolf, M. Lestinsky, M. Hahn, O. Novotný and D. W. Savin, Phy. Rev. A **83**, 012711 (2011).
- [12] C. Gil, C. De Michelis, D. Elbeze, C. Fenzi, J. P. Gunn, F. Imbeaux, Ph. Lotte, D. Mazon, O. Meyer, M. Missirlian, Ph. Moreau, R. Reichle, R. Sabot, F. Saint-Laurent, J.-L. Segui, A. Simonin, J.-M. Travere, J.-C. Vallet, Tore Supra Team, Fusion Science and Technology **56**, 1219 (2009).
- [13] H. K. Chung, M. H. Chen, W. L. Morgan, Y. Ralchenko and R. W. Lee, High Energy Density Physics **1**, 3 (2001).
- [14] R. D. Cowan, The theory of atomic structure and spectra (University of California Press, 1981).
- [15] I. I. Sobel'man, Introduction to the Theory of Atomic Spectra (Pergamon Press, 1972).
- [16] M. S. Child, Molecular Collision Theory (2nd edition) (Dover Publication, 1984).
- [17] M. Busquet, High Energy Density Physics **3**, 48 (2007).
- [18] M. Klapisch, M. Busquet and A. Bar-Shalom, AIP Conf. Proc. **926**, 206 (2007).
- [19] W. Lotz, Zeitschrift für Physik **206**, 205 (1967).

- [20] H. R. Griem, Principles of Plasma Spectroscopy (Cambridge Univ. Press, 1997).
- [21] M. Klapisch and M. Busquet, High Energy Density Physics **9**, 428 (2013).
- [22] I. I. Sobel'man, L. A. Vainshtein, E. A. Yukov, Excitation of Atoms and Broadening of Spectral Lines, Springer Verlag Berlin Heidelberg New York (1972).
- [23] J. Oreg, W. H. Goldstein, A. Bar-Shalom and M. Klapisch, Phys. Rev. A **39**, 9, 4599 (1989).
- [24] K. W. Wenzel and D. J. Sigmar, Nuclear Fusion **30**, 6, 1117 (1990).
- [25] S. P. Hirshman and D. J. Sigmar, Nuclear Fusion **21**, 9, 1079 (1981).
- [26] C. Bourdelle, X. Garbet, F. Imbeaux, A. Casati, N. Dubuit, R. Guirlet and T. Parisot, Phys. of Plasmas **14**, number 11, 112501 (2007).

Conclusion générale

Dans ce travail, j'ai utilisé et adapté des méthodes de physique atomique qui m'ont permis d'étudier les spectres d'opacité et d'émissivité pour la fusion inertielle et les processus atomiques dans les plasmas de fusion magnétique.

Dans le domaine de la fusion par confinement inertiel, j'ai décrit trois méthodes de calcul des spectres d'émission ou d'opacité :

- une méthode détaillée permettant d'obtenir un profil spectral très précis.
- une méthode statistique permettant de traiter des structures composées d'un grand nombre de raies spectrales.
- une méthode hybride qui combine les deux méthodes ci-dessus et qui permet de traiter un spectre complexe et impliquant un grand nombre de transitions radiatives.

L'avantage de la troisième méthode est qu'elle est très économe en temps de calcul, sans sacrifier la précision. En se basant sur les conditions d'un chemin thermodynamique du Hohlraum (FCI), j'ai obtenu des *résultats détaillés* pour l'émissivité du carbone et détaillés ou statistiques pour l'or et le germanium. Un profil spectral dépend des paramètres plasma (température, densité) qui agissent sur les élargissements Doppler et collisionnel. L'effet Stark ionique reste négligeable pour les ions légers (C,...) car les électrons ne sont pas sur les couches de n élevé, mais a une importance pour certains ions lourds. Néanmoins, le calcul de l'effet Stark, de même que l'élargissement collisionnel, devient prohibitif lorsque le nombre de raies devient grand, ce qui justifie une approche hybride.

J'ai utilisé des méthodes statistiques pour obtenir le spectre en émission de l'or. Après une rapide comparaison des spectres détaillés fournis par le code PPP et avec ceux donnés par une approche statistique ou hybride, j'ai présenté l'opacité lié-lié qui a été calculée à l'aide d'un code hybride développé au CEA. L'approche hybride a été appliquée au calcul de l'opacité de deux dopants : germanium et silicium.

A la fin de ma thèse, j'ai commencé à m'intéresser à l'effet Zeeman dans les spectres de FCI. Des articles récents montrent que les instabilités hydrodynamiques créent des champs magnétiques intenses ($\in 100 - 1000$ T), d'où l'importance d'une étude de sensibilité des spectres d'opacité à leur présence. Nous projetons de calculer l'opacité dans des plasmas impliquant plusieurs dopants.

Dans le domaine de la fusion magnétique, j'ai développé une nouvelle base de données atomiques pour l'argon. Pour cela, j'ai utilisé le code HULLAC et j'ai comparé mes résultats à ceux du consortium ADAS, en vue d'une étude sur le transport des impuretés. Cette étude n'ayant encore jamais été faite, je me suis appuyé sur des expériences sur les machines Tore Supra et Asdex Upgrade, auxquelles j'ai participé au cours de ma thèse, pour paramétrer le domaine d'étude : température, densité configurations etc. Les objectifs étaient :

1. Comparaison des coefficients de taux $\langle\sigma v\rangle_i$ de divers processus entre mes calculs et ceux de ADAS (utilisant d'autres méthodes).
2. Comparaison des coefficients de taux généralisés entre ADAS et HULLAC. De plus, on peut injecter les données du premier objectif dans le modèle collisionnel-radiatif de ADAS pour faire d'autres comparaisons.
3. Utilisation de ces coefficients pour modéliser les coefficients de transport avec le code ITC. L'objectif final serait d'étudier la sensibilité du résultat de ITC aux données atomiques.

Ayant initié cette étude au milieu de ma thèse, je n'ai pu la finaliser. Dans un premier temps, en amont du calcul des coefficients de taux, j'ai dû configurer et déboguer le code HULLAC ; celui-ci n'ayant jamais été utilisé pour des calculs de ce type, nécessitant beaucoup de configurations pour une grande gamme de température. La suite de l'étude consista à développer la base de données pour l'argon. Les ions considérés sont définis par la gamme de température : $\text{Ar}^{7+} \rightarrow \text{Ar}^{18+}$. A l'heure actuelle, cette base est construite mais seules les données de l'ion Ar^{17+} ont été mises au format de comparaison avec ADAS. Ainsi, la première étape de comparaison des coefficients de taux a été faite pour l'ion Ar^{17+} . Les résultats entre les deux jeux de données sont proches bien qu'il y ait quelques différences. Ces divergences sont essentiellement dues à la méthode de calcul des taux dans HULLAC et au pas d'intégration en énergie de la simulation. Ces corrections sont faciles à corriger, le passage à l'étape de calcul avec un modèle CR est donc envisageable, bien que la mise au format ADAS pour tous les ions soit longue en raison du nombre de niveaux.

Les objectifs 2 et 3 n'ont pu être atteints, faute de temps. Mais l'étude de la sensibilité du transport aux données atomiques n'ayant jamais donné lieu à des calculs, la suite consisterait à finir de comparer toutes les données et à faire exécuter le code ITC avec les coefficients HULLAC. Dans la perspective d'expériences sur ITER, la communauté FCM est en attente de données sur le tungstène. C'est pourquoi nous voulons développer une base de données complète pour cet atome.

Remerciements

Préparer un doctorat est une expérience exceptionnelle et enrichissante sur les plans scientifique et humain. La thèse est un travail de longue haleine qui ne peut aboutir que grâce au soutien de collaborateurs. Je me rappellerai des périodes de questionnement et de doute, surtout en troisième année, que je n'ai franchies que grâce aux encouragements des gens de mon entourage. Je leur adresse mes sincères remerciements.

En premier lieu, je tiens à remercier particulièrement mon directeur Djamel, pour son soutien ainsi que pour toutes les discussions que nous avons eues sur l'orientation de ma thèse, les problèmes rencontrés, professionnels ou personnels.

Je remercie les rapporteurs Arnaud Bultel et Ioan Schneider pour leurs remarques et corrections qui m'ont permis de finaliser le manuscrit. Je remercie Annette Calisti pour son aide précieuse concernant les détails et point précis de fonctionnement du code PPP, et Rémy Guirlet qui accepta de mettre en place une collaboration visant à étudier le rôle de la physique atomique dans le transport des impuretés. Son accueil au CEA de Cadarache et sa patience m'ont permis de mettre en place ces travaux de recherche. Jean-Christophe Pain et Franck Gilleron m'ont aidé dans la compréhension des méthodes statistique et hybride et dans l'utilisation de ces dernières en vue du calcul d'opacité des dopants. Je les en remercie. J'espère poursuivre cette collaboration au cours de mon post-doctorat. Je remercie également Michel Busquet sans qui je n'aurais pu utiliser le code HULLAC, Claire et Jacques Bauche qui m'ont soutenu et éclairé de leurs conseils tout au long de cette thèse.

Je remercie Pierre Pillet de m'avoir accueilli au Laboratoire Aimé Cotton. Pierre Pillet et Jean-François Roch m'ont permis de travailler dans un environnement agréable et un contexte scientifique des plus stimulants. De manière plus large, je remercie l'ensemble du personnel du laboratoire, sans qui cette thèse n'aurait pu être menée à bien, et plus particulièrement Sylvie pour sa bonne humeur et ses "duels" dans les couloirs le matin.

Je pense aussi au fameux et furtif "groupe de midi bis". Merci à Jean-Louis pour son avis sur la soutenance, à Anne pour les corrections du manuscrit, à Florencia et Thierry pour les débats pendant l'heure du déjeuner. Je souhaite à Florencia tout le bonheur possible en Argentine.

Un grand merci aux thésards : Héloïse, pour les pauses où nous discutons, aux soirées que nous galérions à organiser avec les thésards et au goûter ; à Mickael, Aurore, Robert-Christopher et Isam pour les innombrables crises de rire et pauses café (y compris les weekends) pour se remonter le moral pendant la rédaction ; à Matthieu pour son optimiste jusqueboutiste communicatif et Jérôme, Citlali, Mélanie, Demis, Guyve, Julian, David, Vincent, Thomas, Romain, Floriane, Azer, Johann, Alexandre, Marie-Aude, Tarek, Syamsunder, Ruben, Ricardo... et tous les autres que j'aurais oubliés.

Je remercie également les amis du Master, Olivier, Sébastien, Claire qui ont toujours été présents malgré l'éloignement géographique. Un grand merci à Jordan, Axel, Arnaud, Laurène, Anne-sophie, Patrick, Xavier, Rodolphe.. mes amis de toujours qui m'ont suivi et soutenu tout au long de cette aventure.

Pour finir, un grand merci à mes parents, mes frères Emmanuel et Gaël, qui m'ont toujours encouragé depuis le début, ma belle soeur Isabelle qui supporte nos blagues de physicien/mathématicien depuis de longues années! ahah. Merci à toi. Je n'oublie pas mes grands parents qui m'ont apporté de la sérénité et du calme devant le travail colossal que représente la thèse.

Résumé

Titre : Propriétés radiatives des plasmas de fusion. Emissivité et opacité dans des structures atomiques complexes.

Cette thèse porte sur l'étude de l'émissivité et de l'opacité dans les plasmas de fusion inertielle (FCI), et des processus atomiques dans les plasmas de fusion magnétique (FCM). En FCI, nous avons étudié les spectres d'émissivité du Hohlraum de l'approche indirecte et d'opacité des dopants de l'ablateur. Leur connaissance permet d'améliorer la compression de la cible contenant le mélange deutérium-tritium (D-T) et ainsi favoriser les réactions de fusion. Nous avons caractérisé les spectres lié-lié de l'or, du carbone et du germanium au moyen de méthodes détaillées, qui s'avèrent coûteuses en temps de calculs lorsque le nombre de niveaux/ions augmente. Pour optimiser le temps de calcul, sans perdre en précision, une méthode hybride détaillée/statistique a fait l'objet d'une comparaison avec la méthode détaillée sur des cas tests. Cette approche a ensuite été appliquée au calcul de l'opacité totale (lié-lié, lié-libre, libre-libre) pour tous les états d'ionisation du germanium et du silicium. Les spectres obtenus sont ensuite comparés dans une large gamme d'énergies en vue d'optimiser la compression de la cible. En FCM, à partir d'expériences effectuées sur les tokamaks Tore Supra (CEA Cadarache) et ASDEX Upgrade (Max Planck Institut, Garching), nous avons construit une nouvelle base de données : sections efficaces, taux des processus, ... à l'aide du code HULLAC. Ceci permettra d'analyser des coefficients de transport. Le but de cette étude est la sensibilité aux données atomiques de la reconstruction des coefficients de transport par le code ITC. Pour le cas de l'argon, les sections efficaces de quelques processus sont présentées et les coefficients de taux sont comparés à ceux provenant du consortium ADAS.

Mots clefs : plasma, émissivité, opacité, dopants, superconfiguration, effet Stark, impureté, transport.

Abstract :

Title : Radiative properties of fusion plasmas. Emissivity and opacity in complex atomic structures.

The thesis is devoted on the study of emissivity and opacity in inertial confinement fusion plasmas (ICF), and on atomic processes in magnetic fusion plasmas (MCF). In ICF, we have studied the emissivity of the Hohlraum and the opacity of ablator's dopants in the indirect drive scheme. The knowledge of these quantities allows the improvement of the target compression and, as a consequence, the fusion reactions. We have characterized the bound-bound spectrum of gold, carbon and germanium with detailed line calculation (PPP code). Such calculations are time consuming and are thus restricted to moderate numbers of levels/ions. To optimize the time calculation without lack of precision, a hybrid approach statistical/detailed was compared with the detailed approach for test cases. Then the hybrid approach was applied to total opacity calculations (bound-bound, bound-free and free-free transitions) for each ionization state of germanium and silicon. The spectra are compared in a large temperature range in order to optimize the target compression. In MCF, from experiences carried out on Tore Supra (CEA Cadarache) and ASDEX Upgrade (Max Planck Institut, Garching) tokamak, we have provided new atomic data (cross sections, rates of processes) with the HULLAC code in order to analyze the transport coefficients. The aim of this study is the sensitivity of atomic data on the reconstruction of transport coefficients by the ITC code. For the argon case, the cross sections of some processes are presented and the rate coefficients are compared to those of ADAS consortium.

Keywords : plasma, emissivity, opacity, dopants, superconfiguration, Stark effect, impurity, transport.