

## **Modélisation des profils de raie dans les plasmas : PPP – nouvelle version**

A. Calisti<sup>1</sup>, S. Ferri<sup>1</sup>, C. Mossé<sup>1</sup> et B. Talin<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *PIIM Université de Provence, Centre Saint Jérôme, Case 232,  
13397 Marseille Cedex 20, France*

**Résumé.** Le code de calcul de profils de raie PPP a été développé à l'origine avec l'objectif de synthétiser les raies spectrales émises par les plasmas et ce pour n'importe quel émetteur et n'importe quelles conditions de plasmas. Les motivations de ce travail ont été d'une part le diagnostic et d'autre part les études de la dynamique non linéaire des charges dans les plasmas. Le code numérique basé sur des modèles originaux met en jeu des algorithmes qui réalisent le meilleur compromis entre précision et rapidité. En particulier, le mouvement des charges perturbatrices est pris en compte par le Modèle de Fluctuation de Fréquences qui transforme le profil statique en profil dynamique. Ce code a été sans cesse amélioré au cours des dix dernières années avec l'aide d'une technique de simulation numérique basée sur la méthode de dynamique moléculaire qui fournit des profils dits de référence.

### **1. INTRODUCTION**

Dans les plasmas, la formation des raies dans sa forme la plus sophistiquée peut fournir des renseignements sur l'état d'ionisation, les densités, les températures, etc. La mesure des profils de raies spectrales a été un sujet d'intérêt constant. Ces dernières années, des avancées expérimentales considérables ont été réalisées dans le domaine de la spectroscopie des ions multi chargés utilisée dans les plasmas étudiés pour la fusion par confinement inertiel (FCI) ou pour le développement des laser X. Une série de développements théoriques, nouveaux et performants, a dû suivre pour fournir les informations utiles aux diagnostics et à la compréhension des phénomènes physiques sous-jacents.

Trois mécanismes principaux affectent l'élargissement des raies d'émission d'ions complexes. L'élargissement Doppler produit par le mouvement thermique de l'ion émetteur est, en général, le mécanisme dominant dans les plasmas de basse densité avec des émetteurs de charge nette  $Z$  modérée. Lorsque  $Z$  augmente, l'émission spontanée augmente fortement comme  $Z^4$ , et l'élargissement naturel peut devenir plus important que l'élargissement Doppler. Pour des plasmas plus denses, en général, le champ électrique du plasma élargit les raies par effet Stark et cet élargissement peut alors dominer la forme de la raie. L'élargissement Stark des raies spectrales dans les plasmas résulte de l'interaction des degrés de liberté internes de l'émetteur avec les micro champs électriques ioniques et électroniques créés par le plasma. Pour résoudre ce problème, la formulation d'hypothèses simplificatrices majeures a été nécessaire : les ions et les électrons perturbateurs sont considérés comme des particules classiques, les ions sont corrélés mais immobiles et les électrons ne sont pas corrélés mais en mouvement. Depuis, par étapes, pour étendre le domaine de validité des modèles il a été nécessaire de dépasser ces contraintes en s'aidant des moyens de calcul actuels. Aujourd'hui on sait tenir compte du mouvement des ions et plus récemment des interactions entre les électrons. Cette évolution s'est faite pour répondre à celle des techniques de création et d'étude de plasmas de laboratoire. Ainsi, une approche plus pragmatique, donnant lieu à des modèles réalistes développés parallèlement aux méthodes de simulation numérique a vu le jour. La simulation des profils de raies étant un moyen d'investigation très performant mais limité, la stratégie poursuivie pendant ces dernières années a consisté à concevoir des modèles approchés permettant à la fois de reproduire les profils simulés, c'est-à-dire tenant compte des corrélations et du mouvement des charges, et d'étudier des émetteurs complexes. C'est avec ces contraintes qu'a été développé le modèle de fluctuation de fréquence (MFF) [1], qui a permis de mettre en œuvre des

programmes de calcul rapides et précis (code PPP) [2]. Ceux-ci sont destinés à la synthèse de profils spectraux pour l'interprétation d'expériences pour une gamme très étendue d'émetteurs et de conditions de plasma. Le code PPP est un outil de recherche et de diagnostic unique de l'effet Stark y compris par l'étude de l'émission des ions multiélectroniques dans les plasmas chauds et denses. Ce modèle a prouvé son efficacité à plusieurs reprises :

- il reproduit parfaitement les résultats de simulation numérique avec un gain de temps supérieur à 1000,
- il permet d'effectuer des calculs pour des transitions radiatives hors de portée des méthodes de simulation,
- il est utilisable sur un très large domaine de conditions de plasma ( $N_e = 10^{14} \text{cm}^{-3}$  pour les plasmas de tokamak et  $N_e > 10^{24} \text{cm}^{-3}$  pour les plasmas des expériences de fusion par confinement inertiel),
- il est suffisamment souple pour être modifié ou amélioré si besoin.

Après un rappel du formalisme des profils de raies, nous décrivons quelques applications du code PPP et mettons en évidence l'intérêt d'un tel code pour la communauté des physiciens des plasmas.

## 2. FORMALISME

La forme des raies spectrales émises par un émetteur quelconque plongé dans un bain perturbateur s'exprime couramment comme la transformée de Laplace de la fonction de corrélation  $C(t)$  du moment dipolaire [3] :

$$I(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Re} \int_0^{\infty} C(t) e^{i\omega t} dt.$$

Dans le formalisme de l'espace de Liouville  $C(t)$  prend une forme compacte :

$$C(t) = \langle \langle \vec{d}^* | \{U_1(t)\}_{\text{moy}} | \vec{d}\rho_0 \rangle \rangle = \langle \langle \vec{d}^* | U(t) | \vec{d}\rho_0 \rangle \rangle .$$

$\vec{d}$  est le moment dipolaire de la transition et  $\rho_0$  la matrice densité du système émetteur.  $U_1(t)$  l'opérateur d'évolution de l'émetteur est solution de l'équation stochastique suivante :

$$\begin{cases} \frac{dU_1(t)}{dt} = -iLU_1(t) \\ U_1(0) = I \end{cases}$$

avec  $L = L_0 + I(t)$ , où  $L_0$  est le Liouvillien de l'émetteur isolé et  $I(t)$  est une perturbation aléatoire représentant le bain thermique.  $U(t)$  est, alors, la moyenne fonctionnelle des  $U_1(t)$ .

Hors cas limites, il n'existe pas de solution analytique exacte à cette équation généralement résolue par des méthodes approchées, par exemple, la méthode du micro champ modèle (MMM) ou la simulation numérique.

Dans les plasmas, la perturbation de l'émetteur par le bain est associée au champ électrique,  $\vec{E}(t)$ , créée par les particules chargées, ions et électrons. Une première approximation consiste à séparer ce champ en deux composantes, la composante de basse fréquence,  $\vec{E}_i(t)$ , et la composante de haute fréquence,  $\vec{E}_e(t)$ , dues respectivement aux ions et aux électrons. Le traitement séparé des deux contributions simplifie la résolution de l'équation stochastique.

Les électrons, sont habituellement traités dans la limite des fluctuations rapides (limite impact) [4] en résolvant l'équation stochastique au second ordre par rapport au champ électrique électronique. Cette approximation est justifiée lorsque le temps de corrélation de la perturbation est très petit devant le temps de corrélation du dipôle de l'émetteur. Elle conduit à l'utilisation d'un opérateur phénoménologique de collisions électroniques,  $\Phi$ , dont les éléments diagonaux sont les largeurs homogènes électroniques

des raies. Certaines conditions de plasma ne correspondent pas à la limite des fluctuations rapides. La perturbation électronique est alors traitée par une méthode appropriée au régime intermédiaire entre l'impact et le statique. Nous verrons dans le paragraphe applications des exemples d'une telle situation. Dans la limite impact le Liouvillien prend la forme :

$$L(t) = L_0 + I_i(t) - i\Phi,$$

où  $I_i(t)$  est la contribution de la composante ionique qui, dans l'approximation dipolaire électrique, s'écrit :

$$I_i(t) = -\frac{1}{\hbar} \vec{D} \cdot \vec{E}_i(t)$$

avec  $\vec{D}$ , l'opérateur dipolaire et  $\vec{E}_i(t)$ , le champ électrique créé par les ions dans une configuration  $l$ .

L'opérateur d'évolution  $U(t)$  est la solution de l'équation stochastique suivante :

$$\begin{cases} \frac{dU_i(t)}{dt} = -i(L_0 - \frac{1}{\hbar} \vec{D} \cdot \vec{E}_i(t) - i\Phi)U_i(t) \\ U_i(0) = I \end{cases},$$

Une façon de résoudre ce problème est d'utiliser une méthode de simulation numérique. L'équation stochastique est résolue en intégrant pas à pas l'équation ci-dessus dans laquelle les champs électriques,  $\vec{E}_i(t)$ , sont obtenus par une méthode de Dynamique Moléculaire classique et en moyennant le résultat sur un très grand nombre de configurations. Cette méthode tient compte des corrélations entre particules chargées et fournit des profils de référence pour des systèmes émetteurs simples.

Le modèle de fluctuation de fréquence ne traite pas directement l'influence des fluctuations du micro champ ionique mais suppose que celles-ci induisent, à travers l'opérateur d'évolution, des fluctuations aléatoires de la fréquence du rayonnement émis. La mise en œuvre du modèle de fluctuation de fréquence comporte trois étapes :

- le profil est calculé dans l'approximation statique : l'effet du micro champ électrique, caractérisé par une fonction de distribution calculée par la méthode APEX [5], sur l'émetteur, se traduit par l'éclatement par effet Stark linéaire ou quadratique des niveaux d'énergie et chaque transition radiative initiale se décompose en plusieurs composantes Stark. Chacune de ces composantes a une largeur homogène, due à la relaxation par émission spontanée et par collisions électroniques,
- le résultat est décomposé en une somme de canaux radiatifs correspondant aux inhomogénéités qui forment le profil statique,
- on suppose alors que la fluctuation du champ perturbateur induit un mélange stochastique des canaux radiatifs représenté par un processus de Markov stationnaire paramétré par un taux,  $\nu$ , caractéristique des fluctuations collectives du micro champ ionique.

### 3. APPLICATIONS

La simulation numérique étant, à l'heure actuelle, un moyen d'obtenir des profils de référence pour tester les modèles, les profils de raies, obtenus avec le FFM, sont régulièrement comparés aux résultats de simulation numérique. Ces comparaisons et/ou celles faites avec les résultats expérimentaux lorsqu'ils existent, contribuent à l'amélioration et à la validation du modèle [6, 7], cf. figures 1 et 2.

#### 3.1 Élargissement Stark des raies de recombinaison di-électroniques de nombre quantique élevé

Grâce à ses performances, le code PPP a permis de conclure à la faisabilité de diagnostics de parties ultra-denses de plasmas laser (proche de la zone d'impact) basés sur l'élargissement Stark des raies de recombinaison di-électroniques optiquement fines [8, 9]. La Figure 3 (a) montre l'image X d'un

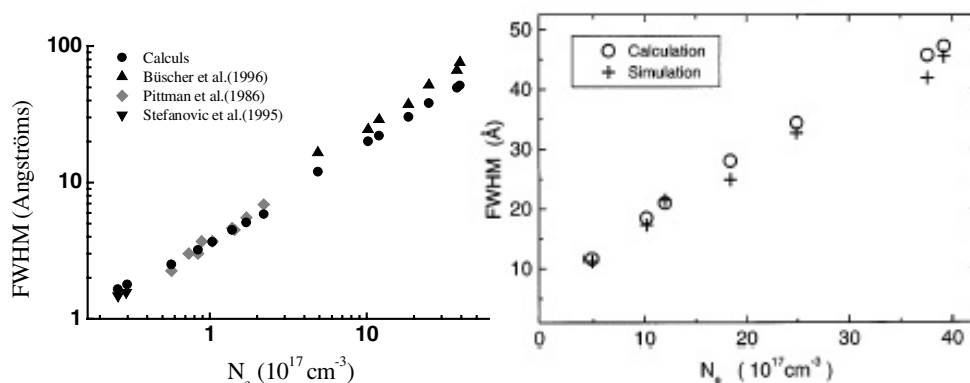


Figure 1. Raie Paschen  $\alpha$  de l'hélium hydrogénoïde.

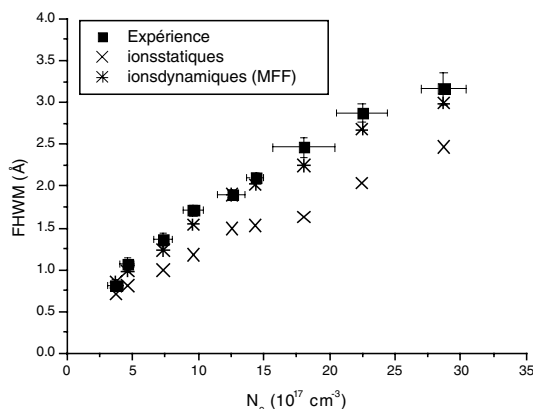
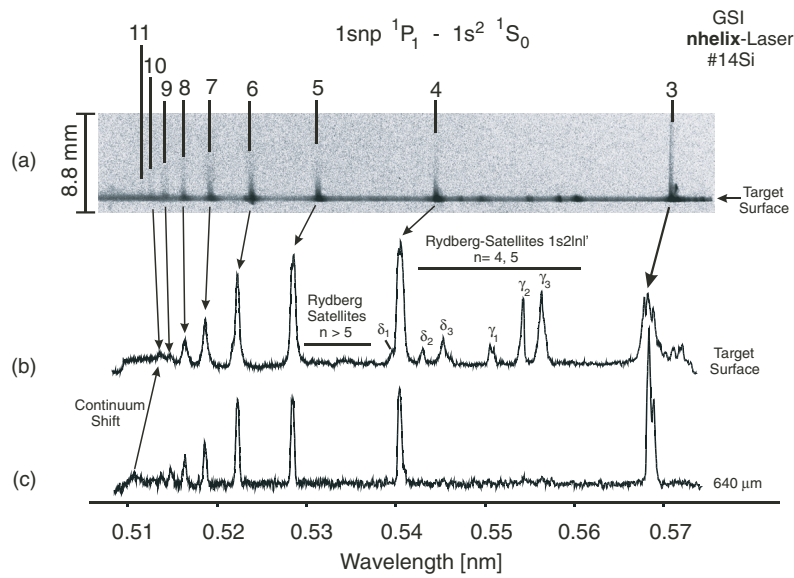


Figure 2. Raie Balmer  $\alpha$  de l'hélium hydrogénoïde observée dans le gaz liner pinch de Bochum.

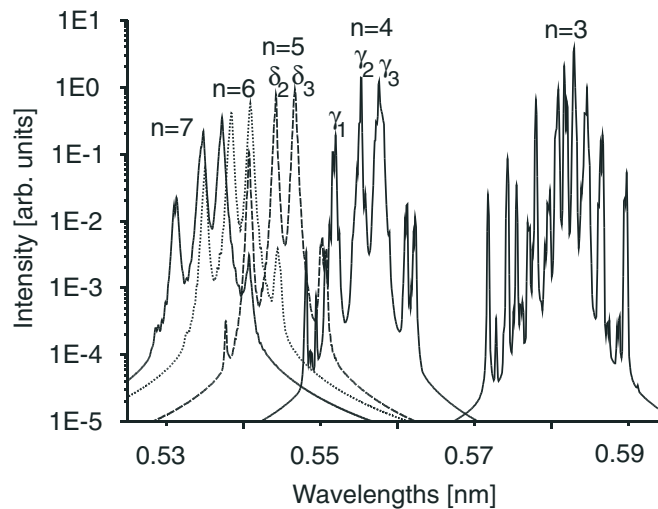
plasma de silicium obtenu lors d'une expérience réalisée au GSI de Darmstadt [10] et les figures 3 (b) et 3 (c) correspondent aux spectres d'émissions à des distances différentes de la cible. On observe parfaitement bien la série des raies de Rydberg de résonance  $1snp \ ^1P_1 - 1s^2$  jusqu'à  $n = 10$ . Et pour la première fois dans les plasmas denses, les transitions satellites  $1s2lnl' - 1s^2 2l''$  jusqu'à la limite de série. La comparaison de ces spectres, Fig. 3 (b) et 3 (c), démontre clairement que les transitions satellites sont presque entièrement confinées près de la surface de la cible sondant ainsi seulement des régions de hautes densités. On peut voir que des groupes de satellites sont bien résolus et particulièrement intenses :  $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$  et aussi  $\delta_2, \delta_3$ . Ces groupes (parmi d'autres) avec  $He_\gamma$  et  $He_\delta$  sont proposés pour un diagnostic étant donné que les satellites sont optiquement fins et que  $He_{\gamma,\delta}$  ont une épaisseur optique modérée. Ceci permet, premièrement un diagnostic en température basé essentiellement sur le mécanisme de recombinaison diélectronique et deuxièmement un diagnostic en densité utilisant les séries de satellites diélectroniques de  $n$  élevé pour une analyse de l'élargissement Stark.

L'analyse de l'élargissement Stark des satellites diélectroniques de  $n$  élevé est complexe à cause du très grand nombre de niveaux, de transitions et de couplages Stark mis en jeu.

Des calculs des profils Stark des transitions satellites  $1s2lnl' - 1s^2 2l''$  ont été faits, grâce au code PPP, pour  $n = 2$  jusqu'à  $n = 7$ , pour une gamme de densité électronique allant de  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  à  $10^{24} \text{ cm}^{-3}$



**Figure 3.** Spectres X résolus spatialement du Silicium montrant la série des raies de résonance héliumôides jusqu'à  $n = 10$  et les satellites diélectroniques associés.



**Figure 4.** Calcul d'élargissement Stark de la série  $1s2lnl' - 1s^2 2l''$  du Si avec  $N_e = 4.10^{20} \text{cm}^{-3}$ .

et pour des températures ionique et électronique telles que  $kT_e = kT_i = 350 \text{eV}$ . La figure suivante est une illustration de l'augmentation des largeurs avec  $n$  (nombre quantique principal).

La figure 5 montre l'importance des différents effets électroniques et ioniques sur le profil des raies satellites  $1s2l3l' - 1s^2 2l''$ . L'effet de dynamique des ions bien que peu important, existe. La prise en compte de l'effet Stark ionique est indispensable (comparaison des courbes en tirets et/ou traits pleins avec la courbe en pointillés).

Les comparaisons directes entre les données expérimentales et les résultats obtenus par le code PPP, figure 6, ont permis de déterminer une densité électronique de  $4.10^{20} \text{cm}^{-3}$ .

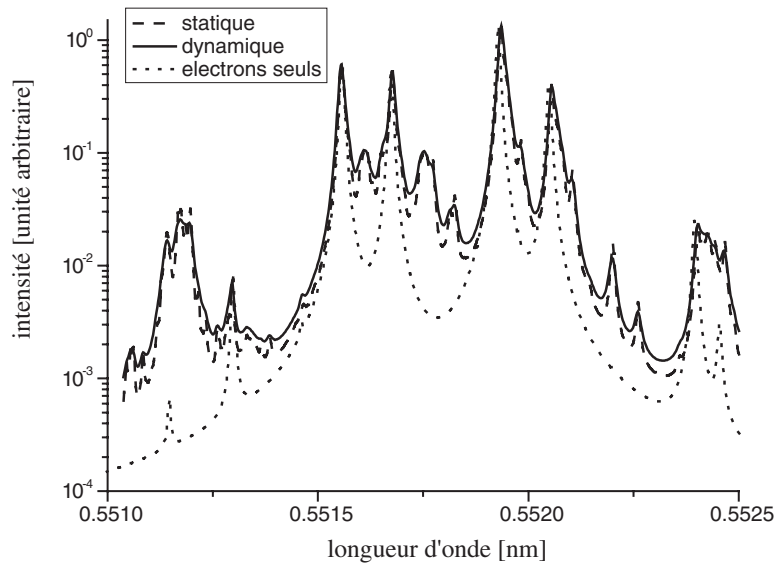


Figure 5. Profils Stark des transitions satellites  $n = 3$ .

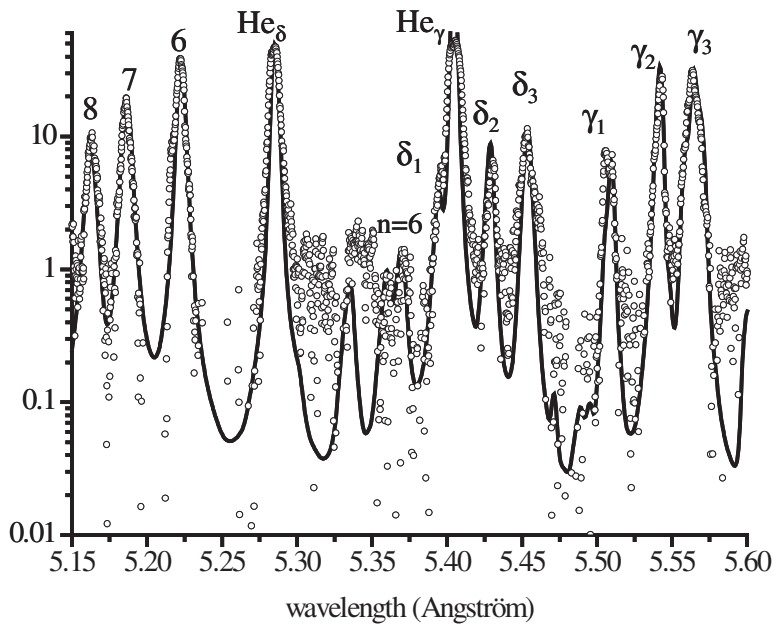


Figure 6. Comparaisons entre données expérimentales (ronds) et calculs PPP (ligne pleine) pour  $N_e = 4.10^{20} \text{ cm}^{-3}$ .

### 3.2 Élargissement électronique

L'élargissement Stark des raies spectrales de l'hydrogène par les particules chargées du plasma est un sujet étudié de longue date qui continue d'évoluer encore aujourd'hui. La détermination des densités électroniques à partir des largeurs des raies de Balmer de l'hydrogène étant un moyen de diagnostic établi, la raie Balmer alpha de l'hydrogène émise par les plasmas est une des raies spectrales les plus

étudiées tant sur le plan théorique qu'expérimental. Des mesures sont disponibles sur plusieurs ordres de grandeurs de densité ( $10^8$  à  $10^{19}$   $\text{cm}^{-3}$ ). Outre l'aspect diagnostic, ce large domaine de conditions fournit aux théories un très précieux banc d'essai.

L'investigation de la matière tiède et dense (Warm Dense Matter) à haute densité et faible température a fait apparaître des désaccords importants entre les théories standard et l'expérience. Il a été montré que certains désaccords sont dus au fait qu'un opérateur de collision électronique usuel n'est plus adapté dans ces conditions pour décrire correctement le profil de raie. Cette situation se produit quand les interactions avec les électrons se traduisent par une contribution majeure à l'élargissement des raies et quand les effets quasi-statiques électroniques sont importants.

Des profils de référence sont obtenus à l'aide de la méthode de simulation numérique appliquée simultanément aux ions et aux électrons. Cette méthode ne faisant appel à aucune des approximations faites dans les théories standard, fait le lien entre les modèles et les prédictions théoriques et entre les modèles et les expériences. Il est montré que pour certaines conditions de plasmas, le critère de validité de l'approximation d'impact pour les électrons n'est plus satisfait et des effets de collisions fortes simultanées se font sentir sur l'émetteur.

Une approche alternative à un opérateur de collision binaire est proposée, utilisant le FFM généralisé aux deux composantes du plasma. En effet, dans les conditions où l'approximation d'impact vient à ne plus être valable pour les électrons, la description des effets électroniques sur le profil de raie est en principe le même problème que celui de la dynamique des ions. Aussi, toute solution au problème ionique est aussi applicable aux électrons.

Les figures 7 montrent les dépendances en  $n$  (nombre quantique principal), en température et en densité de la largeur électronique des raies de la série de Balmer calculée d'une part par le modèle FFM et d'autre part par un modèle impact. Les théories montrent que dans la limite impact, la largeur de raie est proportionnelle à  $n^4$ , est proportionnelle à la densité et à l'inverse de la racine carré de la température alors que dans la limite statique, elle est proportionnelle à  $n^2$ , à la densité puissance  $2/3$  et est indépendante de la température. Les figures ci-dessus montrent clairement que lorsque les conditions de plasmas varient de l'impact au statique le modèle FFM possède dans tous les cas le bon comportement.

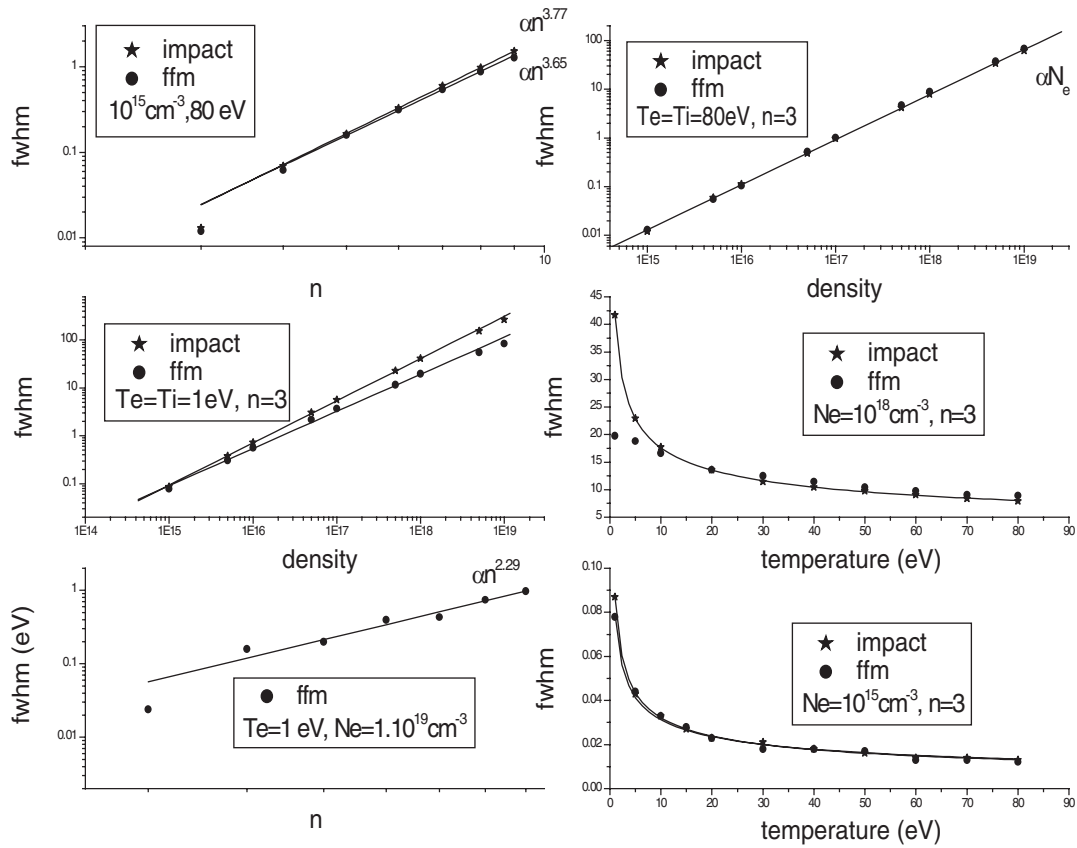
Le modèle FFM possède donc les bonnes limites et permet de ce fait de décrire l'effet des électrons dans les régimes impact et statique ainsi que dans les régimes intermédiaires.

La figure 8 montre la dépendance en température de la largeur totale de la raie Balmer alpha obtenue avec des calculs de simulation et avec le modèle FFM comparée aux résultats expérimentaux [11, 12, 13]. Le FFM et la simulation numérique donnent des résultats similaires qui ne coïncident pas avec les résultats expérimentaux, bien que la dépendance en température soit parfaitement reproduite.

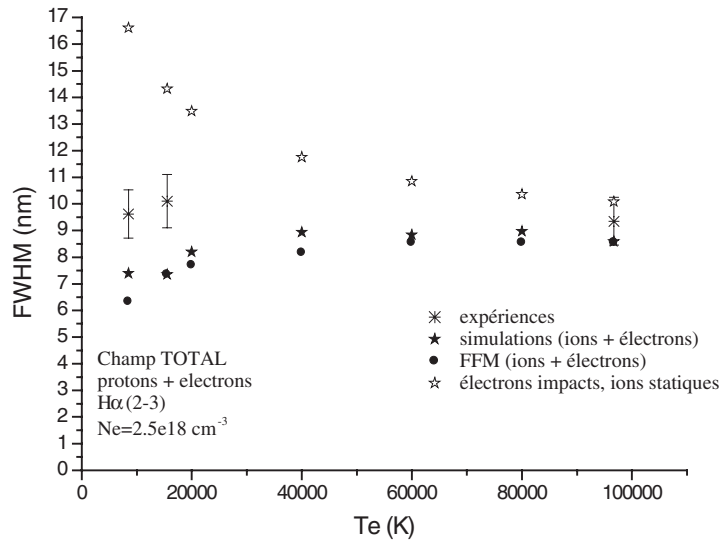
#### 4. CONCLUSION

Le programme de profils de raies (code PPP) que nous développons depuis une quinzaine d'années est un outil unique pour le diagnostic spectroscopique.

Plusieurs programmes permettant de constituer les données de physique atomique ainsi que des cinétiques de populations des ions multichargés ont été développés par le passé. Au contraire, à notre connaissance il n'existe que très peu d'outils analogues au code PPP. A partir des données atomiques et de population, il permet d'effectuer la synthèse de spectres de raies d'ions multichargés (de 1 à quelques milliers) soumis au micro champ du plasma, d'élargir les raies et faire "pousser" les raies interdites, de traiter correctement les satellites de recombinaison diélectronique etc. En fait, il existe aux Etats Unis le code TOTAL utilisé à Livermore, basé sur la version primitive de notre code et le code de l'Université de Floride, d'inspiration différente, utilisé par R. Mancini [14]. Dans son état actuel le code PPP est avant tout un outil de recherche fondamentale destiné à la spectroscopie fine et donc volontairement sophistiqué et très performant. Il occupe la "niche" laissée vide par les approches statistiques de type UTA.



**Figure 7.** Comportements en fonction de  $n$  (nombre quantique principal), de la température et de la densité des largeurs électroniques des raies de la série de Balmer calculées dans la théorie d'impact et avec le FFM.



**Figure 8.** Largeur de la raie Balmer  $\alpha$  en fonction de la température pour  $N_e = 2.510^{18} \text{ cm}^{-3}$ .



## Remerciements

L'élaboration dans sa forme finale et la distribution de la nouvelle version du code PPP a été partiellement financée par l'ILP.

## Références

- [1] B. Talin, A. Calisti, L. Godbert, R. Stamm et R. W. Lee, *Phys. Rev. A* 51, 1918 (1995).
- [2] A. Calisti, F. Khelifaoui, R. Stamm, B. Talin et R. W. Lee, *Phys. Rev. A* 42, 5433 (1990).
- [3] M. Baranger, « Atomic and Molecular Processes » (D. R. Bates, ed.), chapitre 13, Academic Press, New York (1962).
- [4] H. R. Griem, *Spectral Line Broadening by Plasmas*, Academic Press, New York and London (1974); *Principles of Plasma Spectroscopy*, Cambridge University Press (1997).
- [5] C. A. Iglesias, J. Lebowitz and D. McGowan, *Phys. Rev. A* 28, 1667 (1983).
- [6] L. Godbert-Mouret, T. Meftah, A. Calisti, R. Stamm, B. Talin, M. Gigosos, V. Cardenoso, S. Alexiou, R. W. Lee et L. Klein, *Phys. Rev. Lett.* 81, 5568 (1998).
- [7] Th. Wrubel, S. Büscher, H.-J. Kunze and S. Ferri, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 34, 461–468 (2001).
- [8] A. Calisti, F. B. Rosmej, B. Talin, C. Mossé, S. Ferri, M. Geissel, D. H. H. Hoffmann, A. Ya. Faenov, T. A. Pikuz. 16ème ICSLS, Conférence invitée, Berkeley juin 2002.
- [9] F. B. Rosmej, A. Calisti, R. Stamm, B. Talin, C. Mossé, S. Ferri, M. Geißel, D. H. H. Hoffmann, A. Ya. Faenov, and T. A. Pikuz, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, vol. 81, 1-4, 395 (2003).
- [10] F. B. Rosmej et al., *Phys. Rev. A* 63, 063409 (2001).
- [11] A. Escarguel, B. Ferhat, A. Lesage and J. Richou, *JQSRT* 64, 353 (2000).
- [12] S. A. Flih, E. Oks and Y. Vitel, *J. Phys. B.* 36, 283 (2003).
- [13] S. Büscher, Th. Wrubel, S. Ferri and H.-J. Kunze, *J. Phys. B.* 35, 2889 (2002).
- [14] L. A. Woltz and C. F. Hooper, *Phys. Rev. A* 38, 4766–4771 (1988).