

# INTERPRÉTATION ET ANALYSE DE RÉSULTATS EXPÉRIMENTAUX

Le code SCORCG permet l'analyse et l'interprétation de spectres obtenus à l'occasion d'expériences de spectroscopie plasma. En détaillant les faisceaux de transition, SCORCG peut non seulement lever les incertitudes sur la présence de certaines structures, mais aussi valider des approches statistiques. À travers plusieurs interprétations d'expériences, nous envisageons différents apports de SCORCG à l'analyse de résultats expérimentaux.

## 9.1 Spectroscopie plasma

Peu accessible en laboratoire, la spectroscopie plasma à l'équilibre thermodynamique local est primordiale dans l'étude des plasmas rencontrés aussi bien en astrophysique qu'en fusion par confinement inertiel.

### 9.1.1 Convolution de la transmission

Le diagnostic de la structure atomique des espèces présentes dans un plasma peut utiliser deux types de spectres :

- les spectres en émission, s'ils sont à l'équilibre thermodynamique local ;
- les spectres en transmission.

Les spectres en émission sont les plus faciles à obtenir, mais sont très difficiles à interpréter. En laboratoire, il est impossible d'obtenir un plasma homogène à l'É. T. L. Ceux en transmission facilitent l'interprétation, permettent d'accéder aux couches profondes et sont moins sensibles aux effets hors-É. T. L. que les spectres en émission.

On considère un milieu d'épaisseur  $l$  d'opacité spectrale  $\kappa(h\nu)$  et de densité  $\rho^1$ . L'opacité ne dépend que de  $\rho$ , et la dépendance est assez faible. La masse surfacique

---

<sup>1</sup>Mêmes notations que Sec. 1.3.2 dans cette section

$\rho l$ , en  $\text{cm}^2/\text{g}$ , est la quantité qui est le plus souvent considérée. La transmission est reliée à l'opacité via l'équation (1.48) p. 23 :

$$T(h\nu) = \frac{I}{I_0} = \frac{I(l, h\nu)}{I(0, h\nu)} = e^{-\tau(h\nu)}, \quad (9.1)$$

avec

$$\tau(h\nu) = \int_0^l \rho(x) \kappa_\nu(l) dx. \quad (9.2)$$

La double égalité traduit les chemins qui relient l'opacité, la transmission et l'intensité observée. Le spectre en transmission expérimentale est déterminé par rapport des deux intensités spectrales mesurées :

- l'intensité de référence  $I_{0,\text{exp}}$  provenant du backlighter sans passage dans le plasma ;
- l'intensité transmise  $I_{T,\text{exp}}$  du rayonnement du backlighter qui a traversé le plasma.

La transmission expérimentale brute  $T_{\text{exp}}^\circ$  s'écrit alors

$$T_{\text{exp}}^\circ(h\nu) = \frac{I_{T,\text{exp}}}{I_{0,\text{exp}}}. \quad (9.3)$$

La transmission théorique  $T_\Theta^\circ$ , elle, est déterminée par la seconde égalité, à savoir

$$T_\Theta^\circ(h\nu) = e^{-\tau(h\nu)} = e^{-\rho l \kappa(h\nu)}. \quad (9.4)$$

La seconde égalité, dite loi de Beer-Lambert, est vraie uniquement si le milieu est uniforme. Dans le cas général, la profondeur optique  $\tau(h\nu)$  est donnée formule (9.2).

Les spectrographes sont limités en précision : un photon d'énergie  $h\nu$  est mesuré comme ayant une énergie  $h\nu + \Delta h\nu$ , avec  $\Delta h\nu \ll h\nu$  variable aléatoire en énergie dont la distribution est donnée par  $\mathcal{W}_{\text{exp}}(\Delta h\nu)$ , appelée *erreur expérimentale*. La résolution instrumentale est le plus souvent donnée sous forme de  $\frac{\lambda}{\Delta\lambda}$ , où  $\lambda$  est la longueur d'onde. La conversion de  $\lambda$  à  $h\nu$  est aisée, car  $\frac{\lambda}{\Delta\lambda}$  est l'inverse d'une différentielle logarithmique, par conséquent

$$\frac{h\nu}{|\Delta(h\nu)|} = \frac{\lambda}{|\Delta\lambda|}. \quad (9.5)$$

Même si l'élargissement instrumental dépend de l'énergie spectrale, l'effet d'une faible variation de l'élargissement instrumental sur le spectre en transmission est peu discernable. Le considérer uniforme sur la fenêtre du calcul en transmission a des effets négligeables sur l'interprétation du spectre expérimental.

Les spectres expérimentaux à prendre en compte sont les produits de convolution  $\mathcal{W}_{\text{exp}} * I_{0,\text{exp}}$  et  $\mathcal{W}_{\text{exp}} * I_{T,\text{exp}}$ . En général, la distribution  $\mathcal{W}_{\text{exp}}$  suit une loi normale, et la FWHM, qui est égale à environ 2,355 fois l'écart-type, est appelée *largeur instrumentale*. Pour prendre en compte l'erreur expérimentale, la transmission expérimentale doit être exprimée comme le quotient des deux produits de convolution :

$$T_{\text{exp}}(h\nu) = \frac{\mathcal{W}_{\text{exp}} * I_{T,\text{exp}}}{\mathcal{W}_{\text{exp}} * I_{0,\text{exp}}} \quad (9.6)$$

Cependant, lors d'interprétations d'expériences, il n'est pas rare que des théoriciens effectuent la convolution suivante :

$$T_{\text{exp}}^*(h\nu) = \mathcal{W}_{\text{exp}} * \left( \frac{I_{T,\text{exp}}}{I_{0,\text{exp}}} \right), \quad (9.7)$$

le plus souvent parce qu'ils n'ont que la transmission brute à disposition, et ensuite prennent pour transmission  $T_{\text{exp}}^*(h\nu)$ . Cette opération conduit dans le cas général à une transmission fautive, en particulier si  $I_{0,\text{exp}}$  présente des variations brutales, notamment des raies d'émission [100]. Ce type de méthode ne donne des transmissions exploitables que si  $I_{0,\text{exp}}$  a une allure suffisamment lisse sur la fenêtre de calcul de transmission.

La transmission des spectres théoriques est issue de la convolution de l'expression  $\tau(h\nu)$  qui dépend de l'opacité spectrale :

$$T_{\Theta}(h\nu) = \mathcal{W}_{\text{exp}} * e^{-\tau(h\nu)}. \quad (9.8)$$

Nous avons vu Sec. 5.3.3 que l'erreur instrumentale devait être convoluée sur la transmission, sous peine de résultats faux en cas de saturation de la transmission, ce qu'il est impossible de savoir avant le calcul d'opacité.

### 9.1.2 Effet de la non-uniformité spatiale

Dans nos calculs de transmission, nous supposons que le milieu traversé par le rayonnement est homogène, de température et densité uniformes. La réalité des plasmas de laboratoire, en particulier ceux produits par laser, est qu'il existe une multitude de gradients à un instant  $t$  dans un plasma qui se détend. Ces gradients sont dus à l'inhomogénéité du chauffage du plasma, qui est inévitable en spectroscopie de transmission. Dans beaucoup d'expériences, le plasma n'est chauffé que d'un côté [54]. L'étude de l'inhomogénéité de la densité est facilitée par le fait que l'opacité  $\kappa_\nu$  dépend faiblement de  $\rho$ .

Dans l'axe  $z$  de propagation du rayonnement, l'inhomogénéité du faisceau ne peut jouer que sur la valeur de la profondeur optique  $\int_0^L \rho(x) dx$ . Par contre, sur le plan  $(x, y)$  perpendiculaire à l'axe de propagation du rayonnement, l'inhomogénéité du plasma se traduit par une profondeur optique dépendante de la position dans le plan, dans la section droite  $S$  du faisceau de photons. Soit  $\tau_\nu(x, y)$  la profondeur optique au point  $(x, y)$  de  $S$ . La transmission locale vaut  $e^{-\tau_\nu(x, y)}$ . La moyenne de cette transmission sur  $S$  nous donne la transmission du milieu :

$$T_\nu = \frac{1}{|S|} \iint_S e^{-\tau_\nu(x, y)} dx dy = \left\langle e^{-\tau_\nu(x, y)} \right\rangle_S. \quad (9.9)$$

La transmission dans un plasma inhomogène s'écrit donc comme la moyenne d'une exponentielle. L'inégalité de Jensen nous dit que

$$T_\nu = \left\langle e^{-\tau_\nu(x, y)} \right\rangle_S \geq e^{-\langle \tau_\nu(x, y) \rangle_S} \geq T_\nu^H, \quad (9.10)$$

où  $T_\nu^H$  est la transmission calculée en considérant le plasma homogène de profondeur optique  $\langle \tau_\nu(x, y) \rangle_S$  moyenne de la profondeur optique sur la section droite du faisceau.

On peut ainsi conclure que l'hypothèse du milieu homogène, avec  $\kappa$  et  $\rho L$  uniformes, sous-estime systématiquement la transmission du plasma. Il n'est donc pas

étonnant que les calculs théoriques donnent très souvent des transmissions plus faibles lors d'interprétations d'expériences.

Peu d'hypothèses peuvent être faites sur la distribution  $\tau_v(x, y)$  dans le cas général. La plupart des cibles dans les expériences de plasmas chauffés par laser sont composées d'une tranche de métal prise en sandwich entre deux tranches de matériau léger dont les zones de raies sont nettement distinctes des zones de raies du métal dont on veut étudier l'opacité. Le profil thermodynamique d'un plasma chauffé par laser peut se résumer à une zone chaude et plus ou moins dense entourée par une zone froide assez dense. Si elle est constituée du même élément que la zone chaude, la densité de la zone froide est supérieure.

Il est possible de donner des modèles simples d'inhomogénéité avec des hypothèses fortes sur  $\tau_v(x, y)$ . Si, par exemple, on suppose que, dans la section  $S$ , il y a une proportion  $c \in [0, 1]$  de cette section qui a une profondeur optique  $\frac{\tau_0}{c}$ , et une proportion  $1 - c$  qui a une profondeur optique 0, alors la profondeur optique moyenne est égale à  $\tau_0$ , mais la transmission totale vaut :

$$T = \frac{cS}{S} e^{-\tau_0/c} + (1 - c) e^0 = c T_0^{1/c} + (1 - c), \quad (9.11)$$

où  $T_0 = e^{-\tau_0}$  est la transmission du plasma s'il était homogène de profondeur optique  $\tau_0$ . Le terme  $(1 - c)$  fait apparaître un « plancher » dans la transmission, tandis que l'exposant  $1/c$  tend à accélérer la saturation de la transmission, d'où une allure « en créneaux » pour  $c$  petit.

Les simulations hydrodynamiques [54, 55, 101] nous montrent que, dans la zone chaude où le plasma est le plus homogène, il y a un gradient en densité qui peut être estimé constant si la section  $S$  n'est pas trop étendue. Autrement dit, le développement de Taylor à l'ordre 1 approche bien la profondeur optique,  $\vec{\nabla} \tau = (\nabla_x \tau, \nabla_y \tau)$ , et on peut écrire, en notant  $\vec{v} = (x, y)$  :

$$\tau_v(\vec{v}) = \tau_0 + \vec{\nabla} \tau \cdot \vec{v}. \quad (9.12)$$

Si  $S = [x_0, x_1] \times [y_0, y_1]$ , la transmission peut s'écrire :

$$T_v = \frac{S e^{-\tau_0}}{S} \int_{x_0}^{x_1} \int_{y_0}^{y_1} e^{-(\nabla_x \tau x + \nabla_y \tau y)} dx dy$$

$$T_v = T_0 \frac{e^{-\nabla_x \tau x_0} - e^{-\nabla_x \tau x_1}}{\nabla_x \tau} \frac{e^{-\nabla_y \tau y_0} - e^{-\nabla_y \tau y_1}}{\nabla_y \tau}. \quad (9.13)$$

Ces exemples – « trous » et gradients – permettent un début de modélisation de plasmas inhomogènes en densité.

### 9.1.3 Protocoles expérimentaux

Étant donné qu'il est impossible de produire des plasmas chauds homogènes et à l'É. T. L., le but des dispositifs expérimentaux est de tendre le plus près possible de ces conditions idéales. Le procédé général consiste, comme le montre Fig. 9.2, à chauffer de manière isochore<sup>2</sup> un échantillon de corps pur en un temps bref – de l'ordre de

<sup>2</sup>Le chauffage isochore traduit le fait que le dépôt d'énergie doit être beaucoup plus bref que la détente du plasma créé par le début du chauffage.

la nanoseconde –, à l'aide d'un rayonnement pénétrant. L'échantillon est porté à l'état de plasma, et ce plasma subit une expansion hydrodynamique où il se détend et se refroidit. C'est ce plasma en expansion qui est utilisé pour la mesure de spectroscopie en transmission. Deux types de dispositifs sont utilisés pour les expériences de spectroscopie.

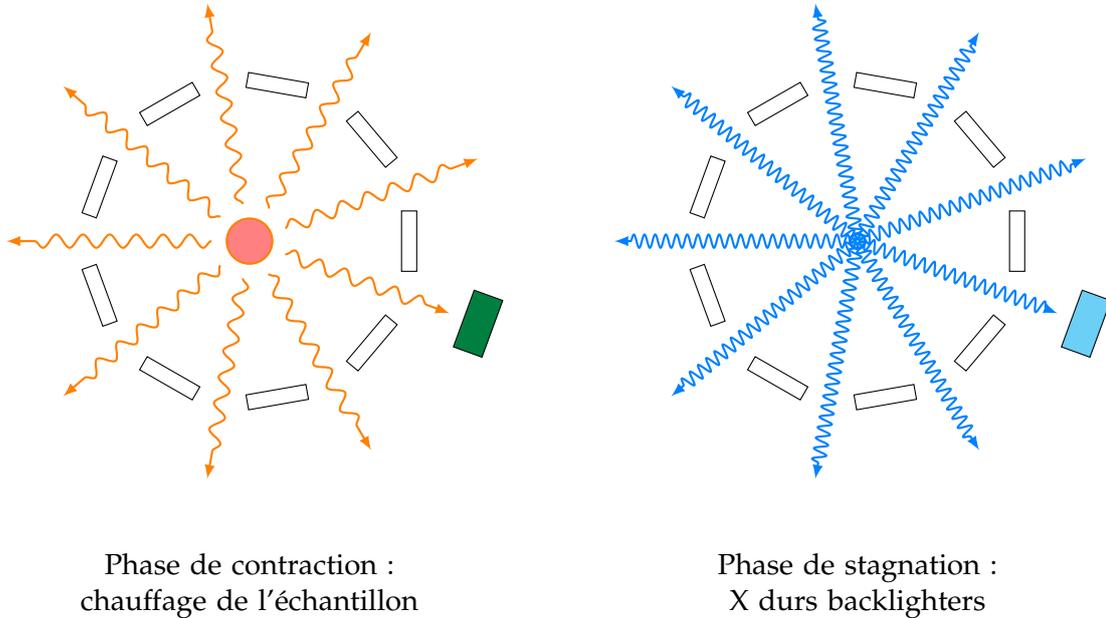


FIGURE 9.1 – Schéma d'un dispositif de type Z-pinch.

Le premier type est mis en œuvre dans les machines Z, dont celle de Sandia<sup>3</sup> est le plus grand représentant. Dans ce type d'installation, un plasma à haute température (>keV) est engendré par une décharge électrique de très forte intensité. L'effet *Z-pinch*, ou striction magnétique, « pince » le plasma sur l'axe central, ce qui le rend plus conducteur, augmente l'intensité du courant et chauffe le plasma jusqu'à des températures de plusieurs keV, voire au-delà. Dans la phase de pincement, un rayonnement X à une température de plusieurs centaines d'eV est émis par le plasma de Z-pinch, renforcé par le rayonnement à quelques dizaines d'eV créé par les parois de la cavité chauffées par cette source centrale. C'est l'addition des deux rayonnements qui chauffe l'échantillon et le fait passer à l'état de plasma. Lors de la phase de compression maximale du Z-pinch, ou stagnation, le rayonnement a une température de plusieurs keV et peut alors jouer le rôle de backlighter [56, 102]. Il faut cependant choisir le matériau de manière à éviter que des raies d'émission se trouvent dans la fenêtre spectrale.

Beaucoup plus utilisé [54, 80], le second dispositif tire parti de la capacité qu'a le rayonnement laser à concentrer une forte puissance ( $\sim 10^{12}$  W/cm<sup>2</sup>) dans un espace de l'ordre de quelques milliers de m<sup>3</sup> et un intervalle de temps de l'ordre de la nanoseconde. La concentration d'un rayonnement de cette intensité sur un échantillon entraîne la vaporisation instantanée de celui-ci à l'état de plasma dont la température peut atteindre plusieurs dizaines d'eV si l'énergie du faisceau laser est suffisante. Le plasma formé par ablation de l'échantillon se détend en quelques nanosecondes. Cependant, il est très difficile d'obtenir un chauffage homogène en attaque directe, y compris avec un seul faisceau. En général, l'attaque indirecte permet une distribution plus homogène

<sup>3</sup>Sandia National Laboratory (SNL), Albuquerque, US-NM.

du rayonnement. Le dispositif expérimental utilisé pour la campagne d'expériences menées au laboratoire d'utilisation des lasers intenses de l'École Polytechnique (Palaiseau, France) en 2008 [54, 55] est schématisé Fig. 9.2. C'est une cavité, dite *hohlraum*, qui reçoit l'impulsion laser. Des trous de trois côtés permettent le passage des différents rayonnements. Les parois en or sont vaporisées par le faisceau laser et émettent un rayonnement proche de celui d'un corps noir. L'échantillon, qui bouche partiellement l'un des trous, est porté à l'état de plasma chaud par ce rayonnement thermique.

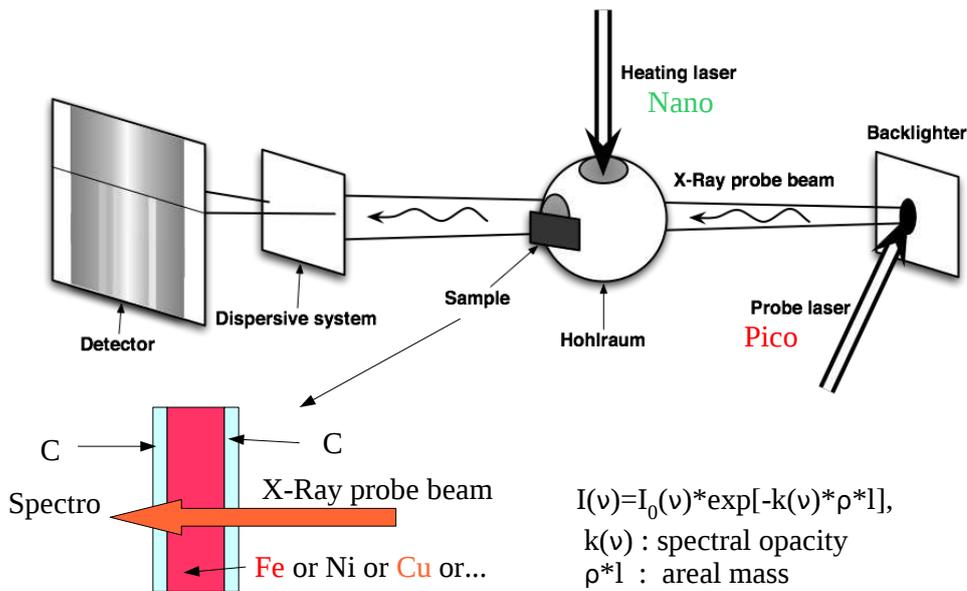


FIGURE 9.2 – Schéma du dispositif expérimental utilisé lors de la campagne d'expériences 2008 au LULI.

Pendant la détente du plasma, les mesures de spectroscopie peuvent avoir lieu. En spectroscopie de transmission, le backlighter est un rayonnement issu d'un plasma d'élément lourd chauffé par un laser picoseconde. Ce rayonnement émet généralement dans une gamme allant de plusieurs centaines d'électron-volt à plusieurs keV. Le rayonnement backlighter est perpendiculaire au faisceau laser incident dans la cavité. Il est déclenché au bout de 1,5 ns après le début du tir laser [54]. Il est très important que l'émission backlighter soit très brève afin que la variation en temps du plasma soit négligeable pendant la mesure.

La mesure d'une transmission spectrale nécessite deux mesures d'intensité spectrale : l'une provenant de la source du backlighter sans traversée du milieu à étudier, l'autre provenant de la source du backlighter et traversant le milieu. Il faut donc deux faisceaux séparés ayant même origine et même spectre en intensité en l'absence de milieu absorbant. La première solution est d'utiliser une lame séparatrice, qui sépare le faisceau backlighter en deux : cette solution est envisageable pour de l'XUV dont l'énergie est de l'ordre de 100 eV, mais pas les rayons X durs de l'ordre de 1 keV. La solution retenue pendant la campagne de 2008 au LULI est de placer l'échantillon dans l'axe, n'obstruant que partiellement l'ouverture nécessaire au backlighter.

Dans ce dernier cas, la solution généralement retenue est, soit de mesurer la sortie du backlighter, supposée isotrope par rapport à au moins un axe (cas des machines Z), soit d'utiliser un dispositif de miroirs sphériques rasants afin de dévier les X durs vers deux spectrographes, et de faire en sorte qu'un des faisceaux réfléchis ne passe pas à travers le plasma.

La dernière difficulté est de choisir le bon délai de mesure, c.-à-d. l'intervalle de temps entre le début de l'impulsion laser et le déclenchement du backlighter. Il doit être suffisamment tardif pour que l'échantillon soit assez chaud, mais pas trop car, outre le refroidissement de l'échantillon, sa détente finit, dans le cas du schéma Fig. 9.2 par obstruer complètement l'ouverture dont il n'est censé occuper qu'une partie. Le hohlraum doit être dimensionné de sorte que le plasma produit sous l'effet de l'impulsion laser principale ne fasse pas obstacle à la progression du rayonnement. On peut limiter les risques en choisissant un matériau de cavité qui ne présente pas de raie dans la fenêtre spectrale de mesure.

## 9.2 Spectres à résolution moyenne

La plupart des spectres en opacité présentent des résolutions de l'ordre de plusieurs centaines, ce qui signifie un pouvoir séparateur dans le spectre de l'ordre de plusieurs eV. Les spectres que nous présentons ici sont issus d'expériences où les plasmas sont créés par des lasers.

### 9.2.1 Campagne 2008 au LULI

L'installation LULI 2000, à l'École Polytechnique, abrite un laser de puissance. Elle est beaucoup utilisée pour la spectroscopie plasma, et le code SCORCG a été associé à l'exploitation des expériences des campagnes 2008 [54, 55, 103] et 2010 [104, 105].

La campagne 2008 était dédiée à l'opacité de couche  $L$  d'éléments de  $Z$  voisin de 30, en particulier le fer, le nickel, le cuivre et le germanium. Le premier élément joue un rôle central dans le calcul d'opacité en astrophysique, les deux derniers sont envisagés comme ablateurs en FCI. Le saut  $2p - 3d$  chez ces éléments est très intéressant, car, aux alentours de 20 eV et en allant du fer au germanium, la couche  $3d$  se remplit et la séparation spin-orbite devient suffisante pour que les deux sous-faisceaux relativistes montrent une séparation en dépit de l'élargissement configurationnel, issu de la multiplicité des états d'ionisation et d'excitation. L'ouverture de l'orbitale  $3p$  doit être prise en compte, elle a pour effet notable de « palmer » les structures d'absorption correspondant à chaque degré de charge [55]. La campagne 2010 était dédiée à l'étude de l'opacité de couche  $M$  pour ces éléments, mais les spectres expérimentaux font toujours l'objet d'intenses discussions [104].

L'un des spectres les plus intéressants produits au cours de la campagne 2008 est issu d'un tir sur du cuivre avec l'orbitale  $3p$  très peu ouverte et l'orbitale  $3d$  ouverte à moitié. Il fait apparaître très clairement les sous-structures relativistes des sauts  $2p - 3d$  et  $2p - 4d$ . Dans le calcul SCORCG dont les résultats sont présentés Fig. 9.3, toutes les orbitales jusqu'à  $4f$  sont individualisées et 300 supraconfigurations sont calculées. Toutes les transitions partant de la couche  $L$  et arrivant sur les couches  $M$ ,  $N$  et  $O$  sont relaxées.

Le calcul SCORCG confirme dans les grandes lignes ce qui a été observé Chap. 3 avec un modèle initial entièrement détaillé. L'interaction de sous-configurations relativistes a pour conséquence d'affaiblir la sous-structure d'énergie spectrale la plus éle-

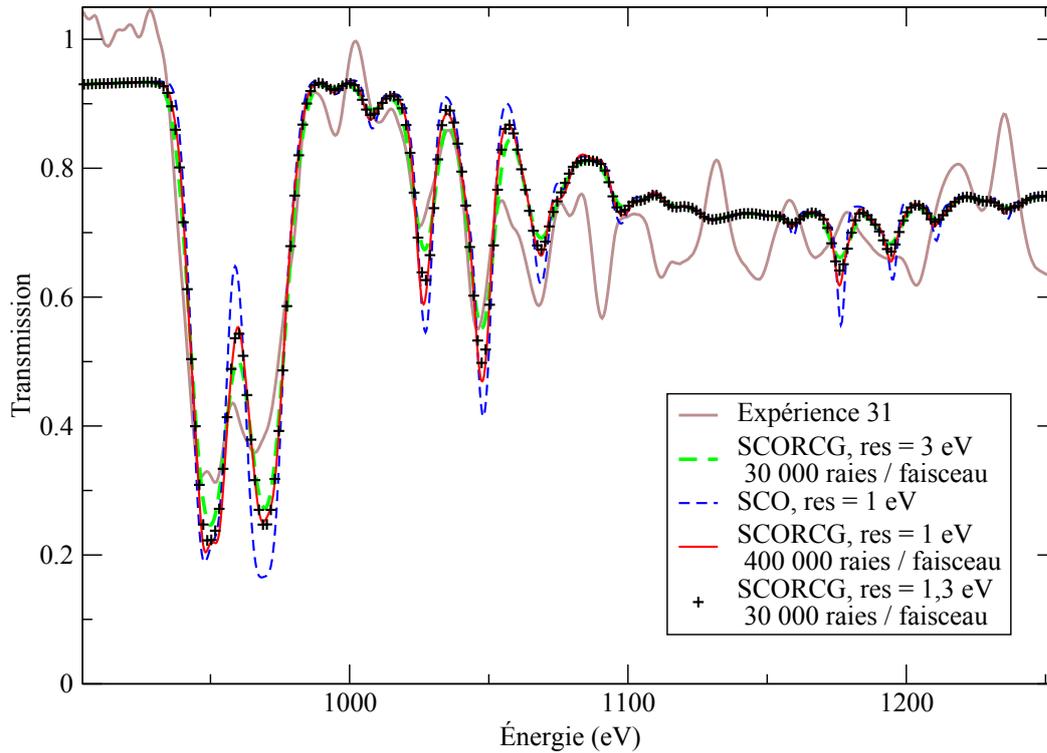


FIGURE 9.3 – Transmission du cuivre à 16 eV, 4 mg/cm<sup>3</sup> et avec une masse surfacique de 40 µg/cm<sup>2</sup>.

vée<sup>4</sup>  $2p_{1/2} - 3d_{3/2}$  [55, 106, 107, 108]. Trois calculs sont comparés : un calcul SCO, un calcul hybride SCORCG et un calcul SCORCG dont toutes les supraconfigurations non triviales ont été retirées. La comparaison Fig. 9.3 montre que la prise en compte des configurations à électrons de Rydberg – supracouche-chapeau non-vide – ne change pas le spectre de manière significative.

Le tir 25, pour lequel une comparaison entre spectres théoriques et expérience est présentée Fig. 9.4 a donné lieu à une exploitation dans laquelle l'opacité a été décomposée par état de charge. Cette décomposition illustre plusieurs effets du remplissage de la couche  $3d$  sur le calcul du spectre en opacité, et donc en transmission.

1. Les positions spectrales des structures associées aux différents sauts monoélectroniques, autrement dit les énergies moyennes des faisceaux de transition, sont une fonction croissante de l'ionisation. Cependant, la croissance est plus rapide pour les transitions  $2p - nl$  avec  $n \geq 4$  que pour les transitions  $2p - 3d$ . L'explication à ce phénomène est que l'ionisation correspond au remplissage de la couche  $3d$ , presque vide dans les plus hauts degrés d'ionisation du cuivre. L'effet d'écran d'un électron  $3d$  sur un électron  $nl$  est très faible pour  $n < 3$ , partiel pour  $n = 3$  et presque total (contribution proche de 1) pour les électrons sur les couches  $n \geq 4$ .
2. L'allure des transmissions Fig. 9.5 montre que le calcul d'opacité est presque entièrement statistique pour Cu IV tandis qu'il y a énormément de faisceaux détaillés dans la transmission de Cu x. Là aussi, c'est le remplissage de la sous-couche  $3d$  qui explique la prépondérance de la contribution de l'une ou l'autre des méthodes :

<sup>4</sup>Ou de longueur d'onde la plus basse Fig. 9.3.

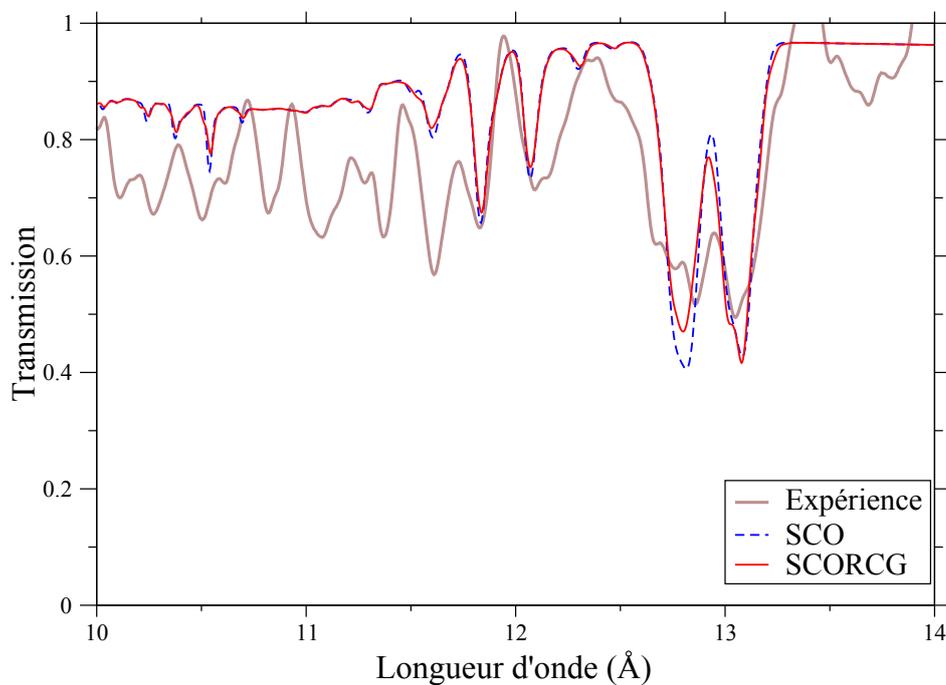


FIGURE 9.4 – Transmission du cuivre à 20 eV,  $4 \text{ mg/cm}^3$  et avec une masse surfacique de  $20 \text{ }\mu\text{g/cm}^2$ .

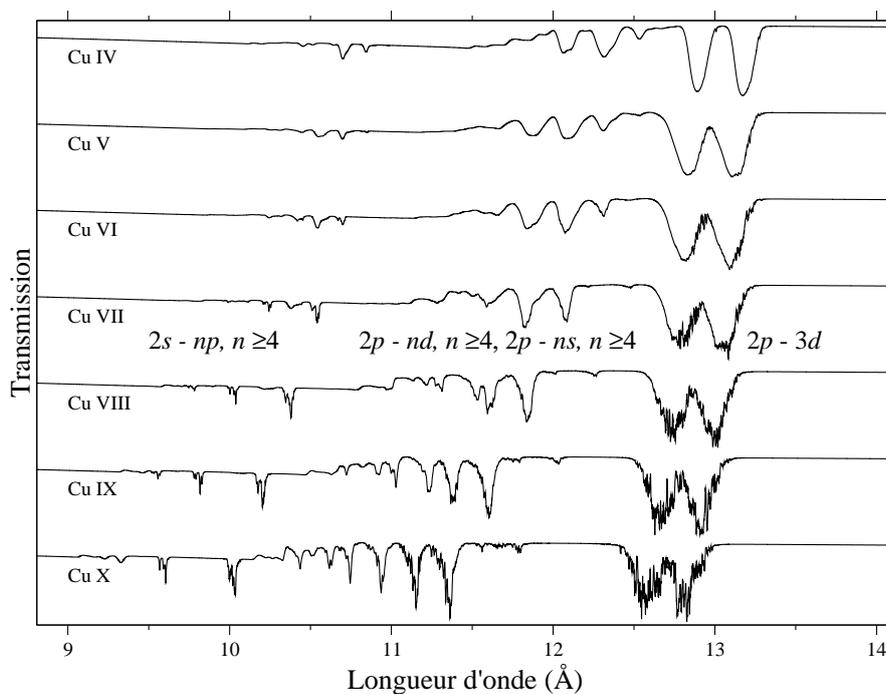


FIGURE 9.5 – Transmission du cuivre par état de charge à 20 eV et  $4 \text{ mg/cm}^3$ , en fonction de la longueur d'onde.

- détaillée dominante si l'orbitale  $3d$  est plutôt vide, comme avec Cu X, dont la configuration fondamentale est  $[\text{Ar}] 3d^2$  et les configurations excitées ont une couche  $3d$  pratiquement vide ;
- statistique dominante si l'orbitale  $3d$  est remplie à moitié, comme c'est le cas avec Cu V, dont la configuration fondamentale est  $[\text{Ar}] 3d^7$ , mais les configurations excitées ont plutôt 4 à 6 électrons dans la couche  $3d$ .

SCORCG nous permet de comparer les distributions ioniques obtenues par un calcul entièrement statistique et celles obtenues par un calcul hybride, comme le montre, sur l'expérience 25, Tab. 9.1. Bien que très faible, la distribution ionique est faiblement

Charge	Probabilité statistique	Probabilité hybride
3	0,31 %	0,3 %
4	5,78 %	5,66 %
5	31,28 %	30,91 %
6	47,66 %	47,89 %
7	14,40 %	14,66 %
8	0,56 %	0,57 %
Autres	0,01 %	0,01 %
$Z^*$	5,7175	5,7266

TABLE 9.1 – Distributions ioniques obtenues par SCORCG lors d'un calcul à 16 eV et 5 mg/cm<sup>3</sup>, en calcul totalement statistique et en calcul hybride.

influencée par le calcul hybride. Cependant, les états de plus faible charge sont sous-représentés dans le calcul hybride, tandis que les états de charge élevée sont plus abondants, ce qui a pour effet d'augmenter l'ionisation moyenne. Ceci est conforme aux observations faites Fig. 9.5 : les calculs statistiques dominent pour les états les moins ionisés, tandis que les calculs détaillés dominent pour les états les plus ionisés.

### 9.2.2 Bromure de sodium sur machine Z

Une expérience à Sandia publiée en 2003 sur un échantillon de bromure de sodium a permis l'obtention d'un spectre en transmission dans la fenêtre spectrale entre 1400 eV et 1900 eV, qui correspond à la zone d'excitation de la couche  $L$  des ions du brome [102].

On y retrouve des structures similaires à celles présentes dans les éléments de  $Z$  un peu inférieur que nous avons étudiés précédemment. En particulier, le traitement exact de l'ICR par RCG\* donne des résultats probants L'originalité du spectre expérimental, dans la partie des transitions  $2p - 3d$ , est la présence de *digitations*<sup>5</sup>, des petites structures qui apparaissent dans la transmission spectrale. Le spectre a été diagnostiqué à 50 eV en utilisant les raies de la couche  $K$  du sodium, et à 45 eV avec des calculs SCO [102]. La densité électronique est  $n_e = 2 \pm 1.10^{21} \text{ cm}^{-3}$  [102], ce qui correspond à la densité de 0,01 g/cm<sup>3</sup> que nous adoptons pour nos calculs. À l'aide d'une approche entièrement détaillée avec peu de configurations, une interprétation à 37 eV a été établie [53], dans les mêmes conditions de densité que les autres calculs.

Bien qu'ils reproduisent le spectre expérimental dans les grandes lignes, les spectres de ces deux premières interprétations ont des lacunes. Celui de SCO, outre qu'il restitue mal le rapport entre les deux sous-structures de la transition  $2p - 3d$ , montre des

<sup>5</sup>C'est le meilleur mot que j'ai trouvé pour désigner ces structures qui évoquent des « doigts » d'absorption.

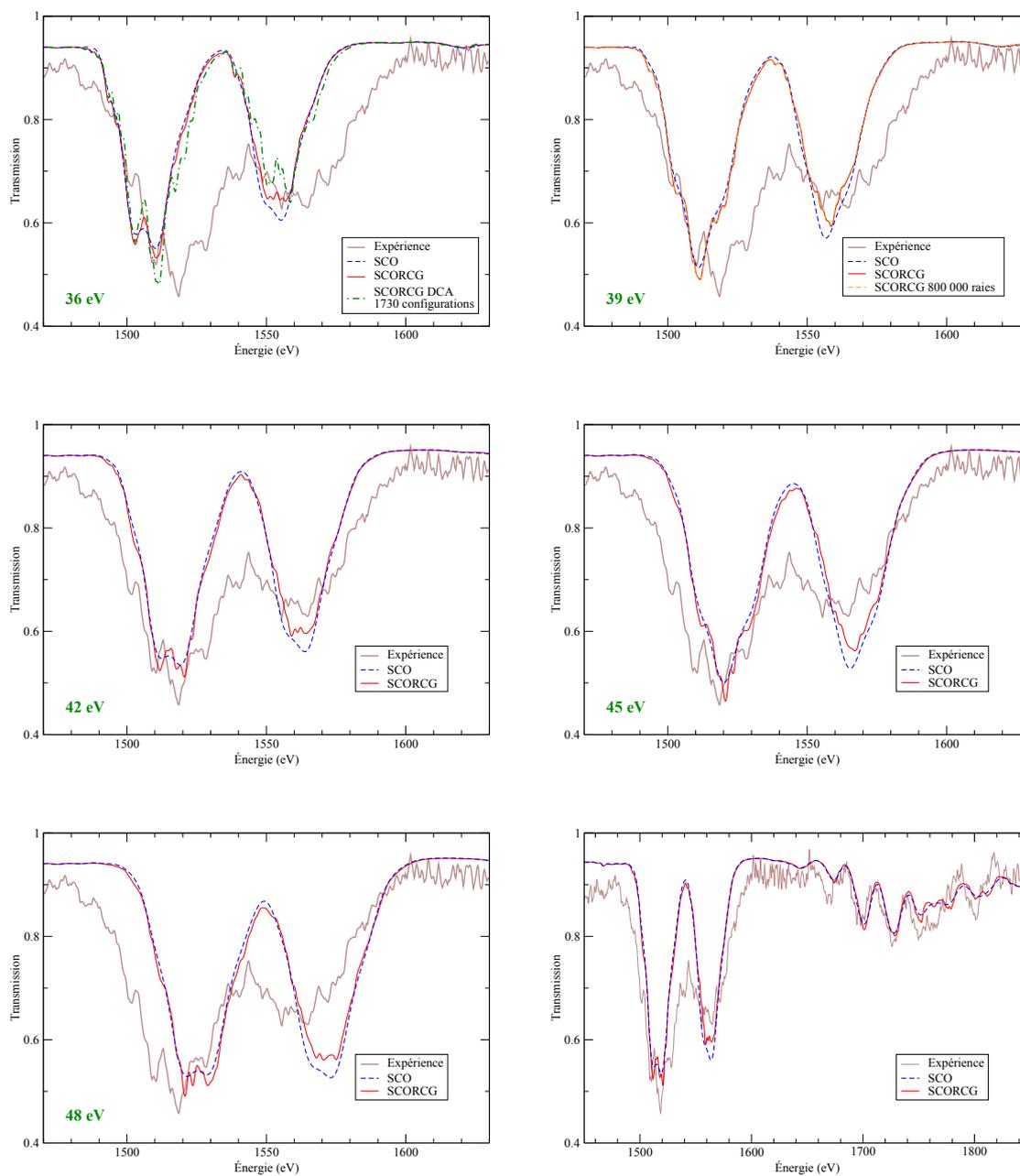


FIGURE 9.6 – Spectres en transmission dans la zone d'excitation  $2p - 3d$  SCO et SCORCG comparés au spectre expérimental à cinq températures différentes. Le calcul en bas à droite présente la totalité de la fenêtre spectrale à 42 eV, température de meilleure correspondance.

structures totalement lisses, avec très peu de digitations, c.-à-d. de petits trous en transmission. Le spectre de Jin et Yang [53] montre beaucoup plus de variations secondaires qui semblent bien s'accorder avec les digitations du spectre expérimental, ce qui indique qu'elles ont un sens physique et ne sont pas qu'un bruit de mesure. Mais les configurations que ces derniers ont sélectionnées pour leur calcul d'opacité sont limitées et les structures  $2p - 4d$  ne sont pas situées aux bonnes positions spectrales ni aux bonnes proportions. De plus, la température de leur calcul spectroscopique est 15 % plus basse que celle des calculs SCO et des diagnostics de profil de raie [102].

Nous avons entrepris de réinterpréter ce spectre expérimental avec SCORCG, en mode tout statistique, hybride et DCA, en supprimant toutes les supraconfigurations non triviales pour le dernier. Comparer les résultats du calcul statistique et ceux du calcul hybride permet de retrouver l'effet déjà connu du traitement de l'interaction de configuration relativiste. Le nombre de raies par faisceau a été limité à 100 000 dans les calculs hybrides, sauf un calcul à 800 000 raies par faisceau à 39 eV. Pour comparaison, un calcul DCA avec 1730 configurations et au plus 800 000 raies par faisceau est présenté pour  $T = 36$  eV. Tous les calculs ont été faits à une densité de  $0,01 \text{ g/cm}^3$ .

Les calculs SCO et SCORCG à 5 températures différentes, de 36 à 48 eV, sont présentés Fig. 9.6. Comme dans les interprétations plus anciennes [53, 102], les structures principales du spectre expérimental sont plus larges que celles provenant du calcul. Le spectre DCA avec 1730 configurations présente un rapport entre les deux sous-structures relativistes plus proche du spectre expérimental que les spectres produits par SCO et même celui produit par SCORCG, qui ne prend en compte l'ICR que sur les faisceaux détaillés. Les digitations du spectre expérimental, en particulier dans le sous-faisceau  $2p_{3/2} - 2p_{5/2}$  (énergie la plus basse) correspondent avec un décalage d'environ 2 eV à celles des spectres SCO et surtout SCORCG. Le meilleur accord avec l'expérience correspond à une température de 42 eV.

Les différents spectres en température et la reproduction partielle et complémentaire des digitations du spectre expérimental incitent à prendre en compte un gradient de température dans l'interprétation. De plus, le dispositif expérimental [102] cause une asymétrie dans le chauffage de l'échantillon, ce qui donne à ces gradients un sens physique clair. En toute rigueur, les gradients de température nécessitent des calculs d'opacité puis de transmission pour chaque température envisagée, puis une intégration sur la plage de température. Mais les spectres ont tendance à varier localement de manière linéaire, sur de petits intervalles de température, et un échantillonnage grossier – tous les quelques eV – donne des résultats intéressants. Nous proposons deux calculs en gradient Fig. 9.7, en utilisant les opacités suivantes :

- la somme des opacités à 36, 42 et 48 eV augmentée de 20% ;
- la somme des opacités à 36, 39, 42, 45 et 48 eV augmentée de 25%.

Le spectre expérimental est bien mieux reproduit par les calculs incluant les gradient que par les calculs à température unique. Toutes les digitations sont bien reproduites dans les deux sous-structures correspondant à la transition  $2p - 3d$ . Les différentes structures des transitions  $2p - 4l'$  sont également bien calquées sur le spectre expérimental, sauf vers 1800 eV où aucune interprétation n'a été concluante. Mais l'effet le plus remarquable, et le plus attendu dans ce genre de calcul, est le « comblement du trou » entre les deux sous-structures du saut  $2p - 3d$ . Notre approche incluant les gradients le comble mieux que n'importe quel code de calcul d'opacité à température unique. Nous comparons Fig. 9.8 la répartition des états de charge aux températures uniques et avec les deux gradients que nous avons proposés. La distribution ionique

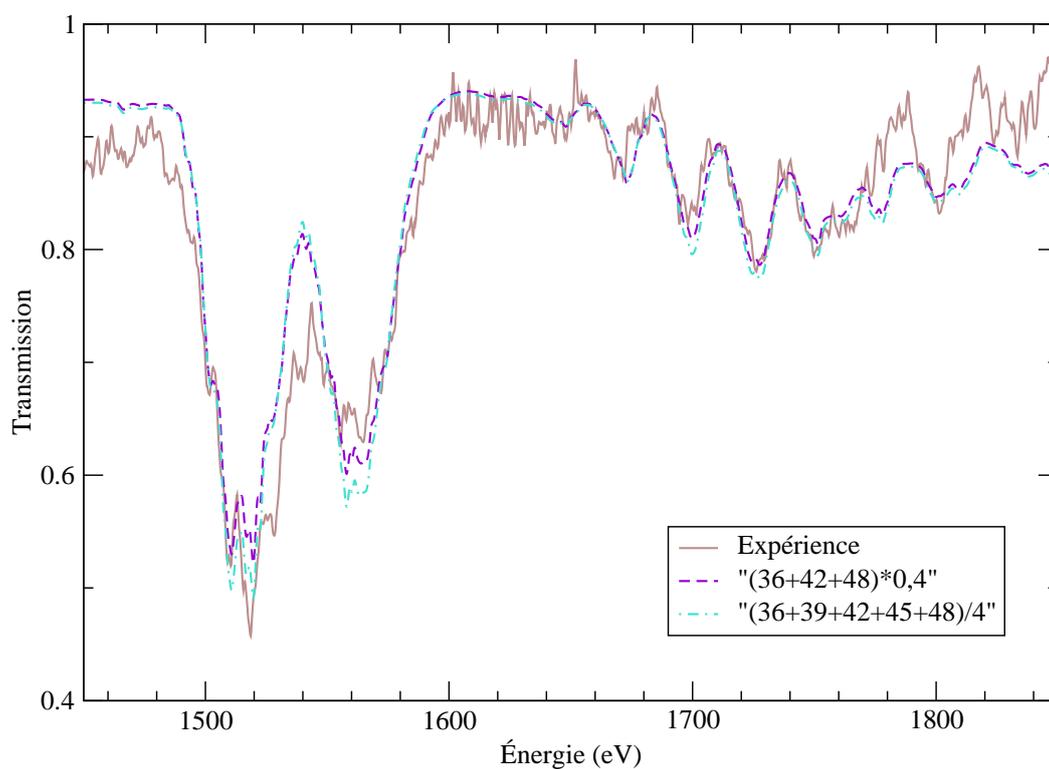


FIGURE 9.7 – Spectres en transmission issus de l'expérience de Bailey et des calculs en gradient à trois (violet) et cinq températures. Les spectres calculés par SCORCG ont été décalés de 1 eV vers la gauche.

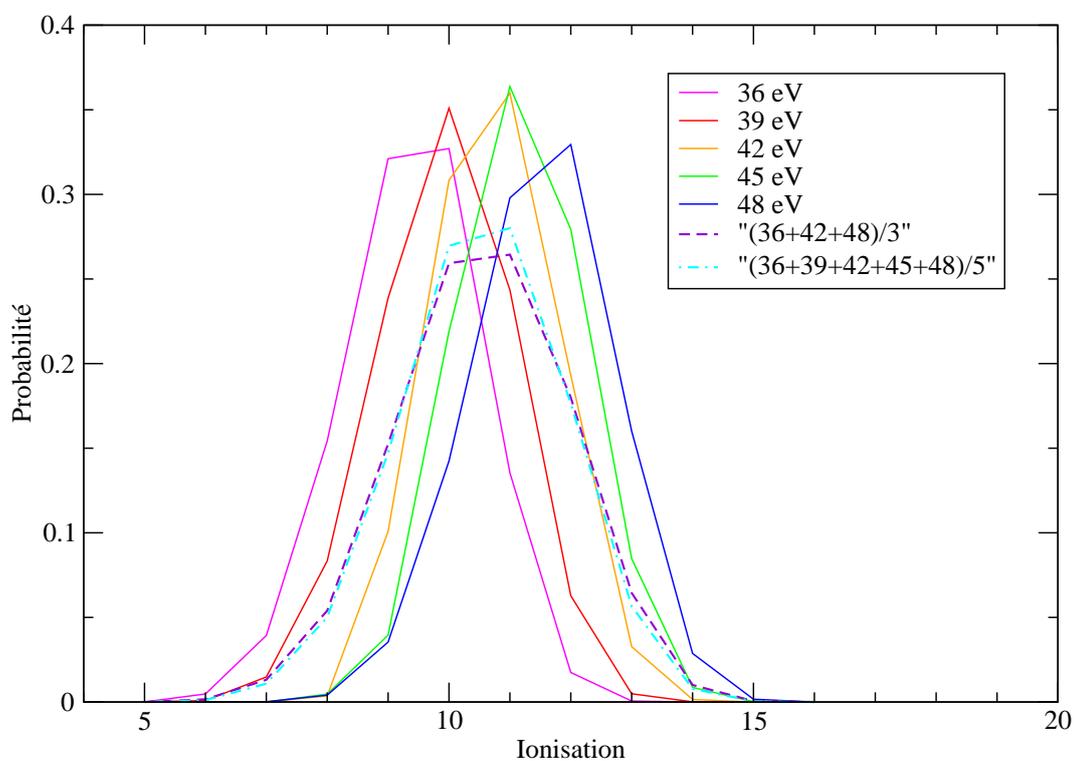


FIGURE 9.8 – Répartition des états de charge aux cinq températures, et dans les deux calculs de gradients effectués.

semble beaucoup plus large que ce que tous les codes d'opacité prévoient, ce qui nous amène à conclure qu'il y a un gradient de température de moyenne proche de 42 eV avec une extension de l'ordre de 6 eV de chaque côté.

### 9.2.3 Niobium de Perry

Le spectre de niobium issu de l'expérience de Perry est un spectre dont une assez bonne interprétation a déjà été donnée par le code STA [109]. C'est un exemple de spectre qui, au contraire du précédent, est bien interprété par les approches statistiques [109]. Le protocole expérimental est assez différent, puisque la transmission est obtenue par comparaison de deux intensités transmises dans deux directions perpendiculaires. Placé dans un hohlraum, l'échantillon est entouré uniformément d'une couche de matière plastique dite CH, ce qui permet d'y conserver une certaine uniformité en évitant des chocs trop forts à l'intérieur.

Nous avons essayé de le réinterpréter à l'aide de SCORCG, pour savoir si les accidents constatés dans la partie  $2p - n\ell'$ ,  $\ell' = s, d$  du spectre correspondent à des structures d'absorption détaillées. Interprété à une température de 47 eV et une densité de  $17 \text{ mg/cm}^3$ , le spectre de niobium présente une couche  $M$  presque totalement remplie lors d'un calcul à l'atome moyen, d'où des faisceaux  $2p - 3d$  très fortement séparés par le spin-orbite de l'orbitale  $2p$  et concentrés en une seule énergie, ce qui explique l'apparence très piquée et relativement faible de ces faisceaux. Quant aux faisceaux  $2p - n\ell'$ , ils présentent des structures plus complexes et, à la masse surfacique de  $1,5 \cdot 10^{-4} \text{ g/cm}^2$ , ont une transmission spectrale proche de  $1/2$ , ce qui permet les mesures les plus fiables [54].

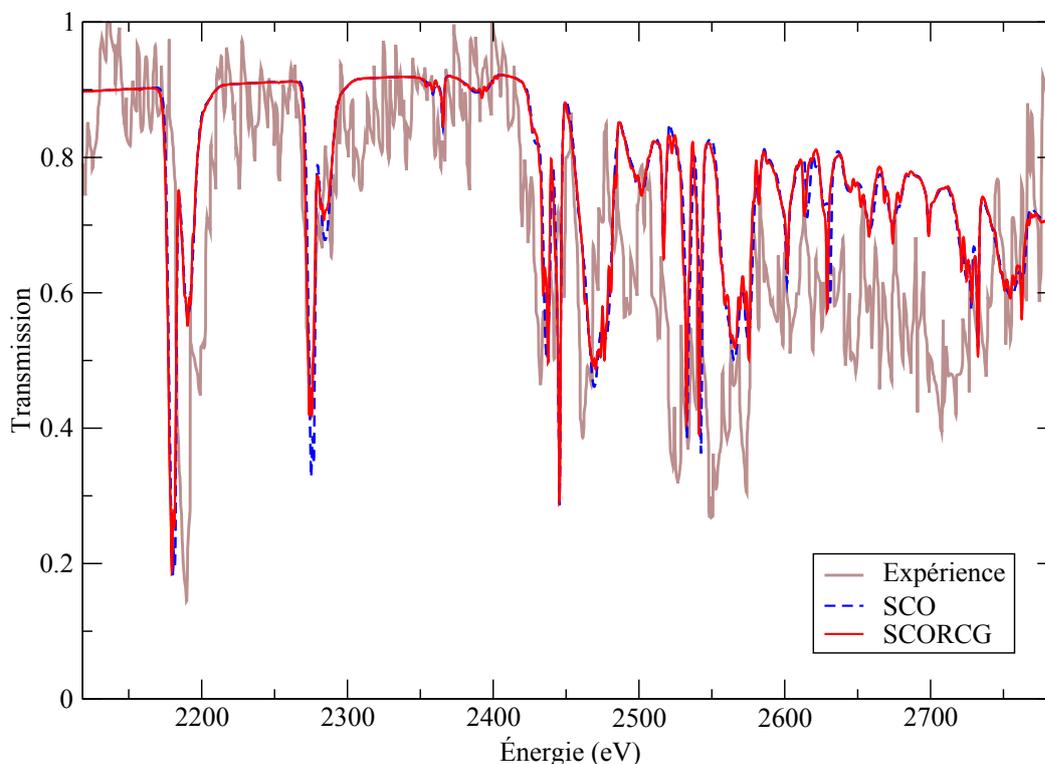


FIGURE 9.9 – Comparaison du niobium issu de l'expérience de Perry avec un calcul SCORCG à 47 eV,  $17 \text{ mg/cm}^3$  et avec une masse surfacique de  $150 \mu\text{g/cm}^2$ .

Cependant, malgré la relaxation des transitions, Fig. 9.9 montre que les structures d'absorption lié-lié correspondent mal, sur le spectre, entre calcul théorique et résultat expérimental. De plus, le calcul SCORCG semble surévaluer la transmission, autrement dit sous-évaluer la masse surfacique. Cet effet est dû à la présence d'aluminium entourant l'échantillon de niobium dans l'expérience, ainsi qu'au protocole de mesure de transmission [109]. Dans cette partie du spectre, l'opacité de l'aluminium est continue, la zone d'excitation de la couche K de l'aluminium se trouvant en-dessous de 2 keV. C'est sur la transition  $2p_{3/2} - 3d_{5/2}$  que la différence est la plus flagrante, avec un décalage de près de 10 eV : le minimum est à 2188 eV pour le spectre expérimental, 2179 eV pour le spectre théorique. Moins visible mais au moins aussi important, le décalage des structures d'absorption  $2p - nd$  est très variable, de moins de 5 eV pour les transitions les plus rouges de  $2p - 4d$  vers 2400 eV à plus de 20 eV pour les transitions les plus bleues vers 2700 eV. Ces décalages sont inversés par rapport aux sous-faisceaux  $2p_{3/2} - 3d_{5/2}$ . Seuls les sous-faisceaux  $2p_{1/2} - 3d_{3/2}$ , concentrés autour de 2275 eV, sont à des énergies spectrales quasiment identiques dans le spectre expérimental et le spectre théorique.

Ce fait nous incite donc à tenter une réinterprétation du spectre expérimental en appliquant une transformation affine à l'énergie spectrale :

$$hv \mapsto hv^\circ + k (hv - hv^\circ). \quad (9.14)$$

$hv^\circ$  est le point fixe de la transformation, et est compris dans notre réinterprétation entre 2250 eV et 2400 eV, et  $k$  est un coefficient compris entre 0,9 et 1. Les sous-faisceaux de la transition  $2p - 3d$  ont même position dans le spectre Fig. 9.10 pour  $hv^\circ \simeq 2280$  eV et  $k \simeq 0,92$ . Cependant, les structures d'absorption des transitions  $2p - n\ell'$  sont trop décalées vers le rouge pour ces valeurs de  $k$  et  $hv^\circ$ . Cette correspondance est fortement améliorée pour les transitions  $2p - n\ell'$  si le jeu de valeurs est légèrement modifié. C'est

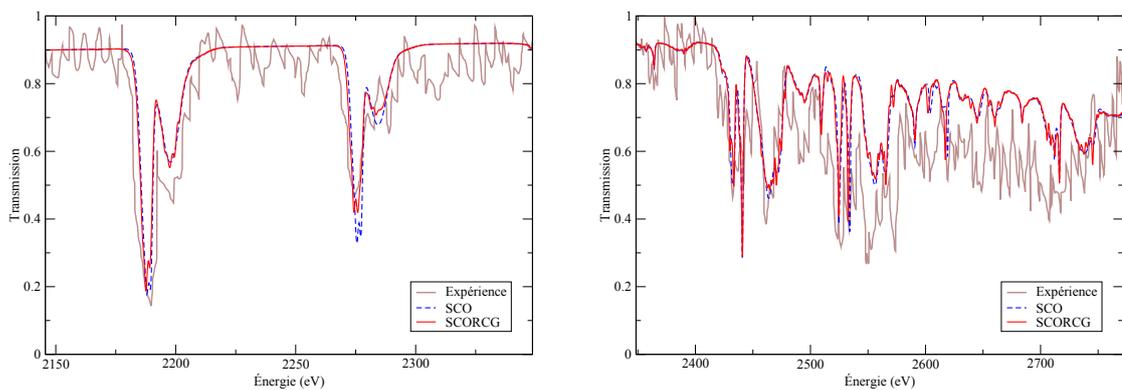


FIGURE 9.10 – Comparaison du spectre expérimental de niobium obtenu par Perry [109] avec des spectres théoriques pour lesquels l'énergie spectrale a été légèrement transformée.  $k = 0,92$ ,  $hv^\circ = 2280$  eV à gauche ;  $k = 0,96$ ,  $hv^\circ = 2360$  eV à droite.

le cas pour le spectre transformé avec  $hv^\circ \simeq 2380$  eV et  $k = 0,95$ . Cette étude pourrait être menée sur d'autres spectres, toutefois l'effet est particulièrement important sur ce spectre expérimental, et a déjà été observé avec SCO [27].

Après correction des décalages par transformation du spectre théorique, des structures du spectre expérimental se retrouvent dans le spectre hybride, mais pas dans le spectre statistique, en particulier aux alentours de 2450 eV.

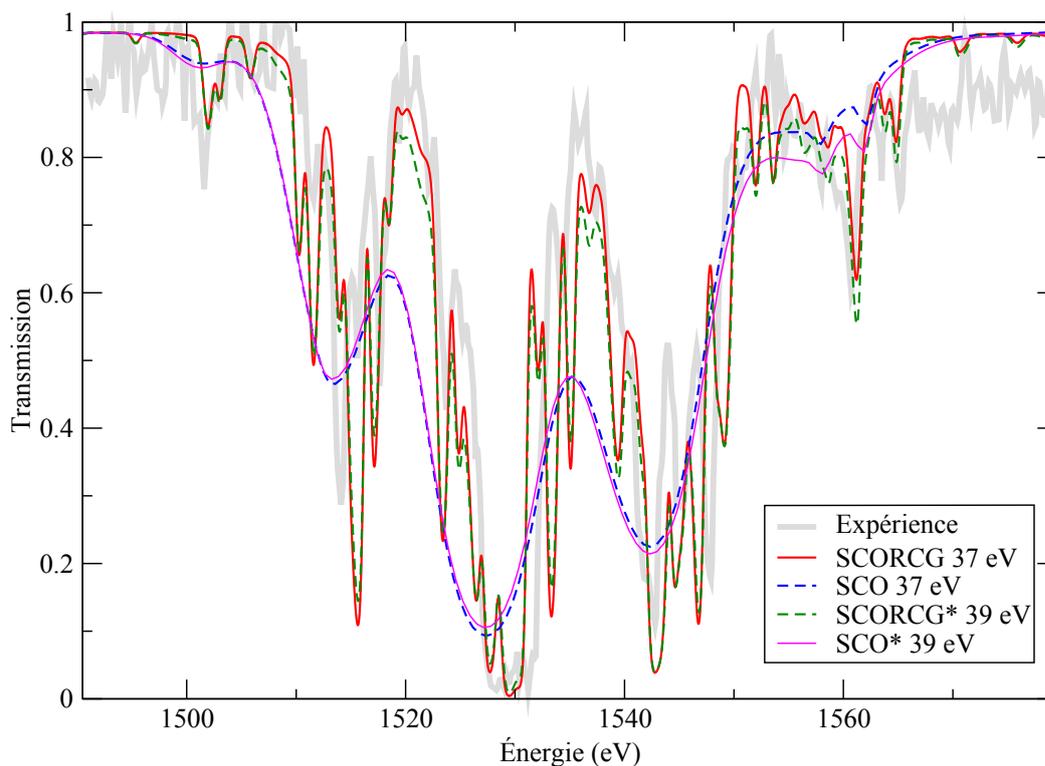


FIGURE 9.11 – Spectres en transmission de l'aluminium, avec l'expérience de Davidson, un calcul SCO et un calcul hybride à 37 eV et  $10^{-2}$  mg/cm<sup>3</sup>, avec une masse surfacique de  $54 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ . Les légendes avec astérisque indiquent des calculs sans prise en compte des effets de densité (interaction avec les électrons libres, cf Sec. 6.3.2).

### 9.3 Spectres présentant des effets de structure fine

L'intérêt de SCORCG réside dans la possibilité qu'il offre de pouvoir détailler des faisceaux de transition, permettant de mettre en évidence des structures liées à la forme de faisceaux résolus. Trois spectres expérimentaux en particulier sont bien mieux interprétés en calcul détaillé qu'en calcul statistique. Il s'agit de deux spectres d'aluminium [80, 110] à température modérée et d'un spectre de fer [56] à température élevée.

#### 9.3.1 Aluminium sur HELEN

L'expérience de Davidson [80] sur l'installation laser HELEN a permis l'obtention d'un spectre en transmission dans la zone d'excitation de la couche K de l'aluminium, aux alentours de 1600 eV. Relativement bien interprété par les outils statistiques, le spectre expérimental présente de nombreuses structures, comme si des faisceaux étaient résolus. Comprise entre 1460 et 1600 eV, la région spectrale correspondant à l'excitation  $1s - 2p$  est très riche en structures détaillées. De plus, l'interprétation à l'aide d'un code détaillé ou hybride est facilitée par une structure électronique simple, qui fait intervenir principalement les électrons de la couche  $2p$ . C'est ici le caractère automatique de SCORCG qui le rend très performant pour calculer en ligne l'opacité détaillée de l'aluminium.

Le spectre a été interprété à 40 eV [80]. Cette température a cependant été établie en négligeant l'interaction avec les électrons libres. En prenant en compte ces effets de den-

sité, loin d'être négligeables dans un plasma dont la densité est voisine de  $10^{-2} \text{ g/cm}^3$ , on voit Fig. 9.11 que la température de meilleure correspondance théorie/expérience est de 37 eV.

Les spectres hybride et expérimental ont une propriété remarquable : leurs zones de grande absorption sont bien plus séparées que celles du spectre statistique. Cet effet saisissant trouve son origine dans une caractéristique assez flagrante des faisceaux de transition de l'aluminium à 40 eV que nous avons observée Fig. 8.3 : ils sont plutôt platykurtiques. Autrement dit, les raies de la plupart des faisceaux se répartissent à l'intérieur d'un intervalle spectral bien délimité, et à l'extérieur de cet intervalle les raies sont rares et très faibles.

L'effet des faisceaux platykurtiques peut être correctement géré pour un élément léger comme l'aluminium en effectuant un maximum de calculs DLA. Mais pour des éléments de Z intermédiaire à la structure atomique plus complexe, ce calcul peut devenir très fastidieux voire ingérable. Cependant, si l'on sait calculer les moments d'ordre 3 et 4 des faisceaux de transition par des formalismes statistiques, la distribution de Pearson I, qui peut modéliser à l'ordre 4 les faisceaux platykurtiques, pourrait améliorer la modélisation statistique des faisceaux de transition dont le calcul détaillé est trop complexe.

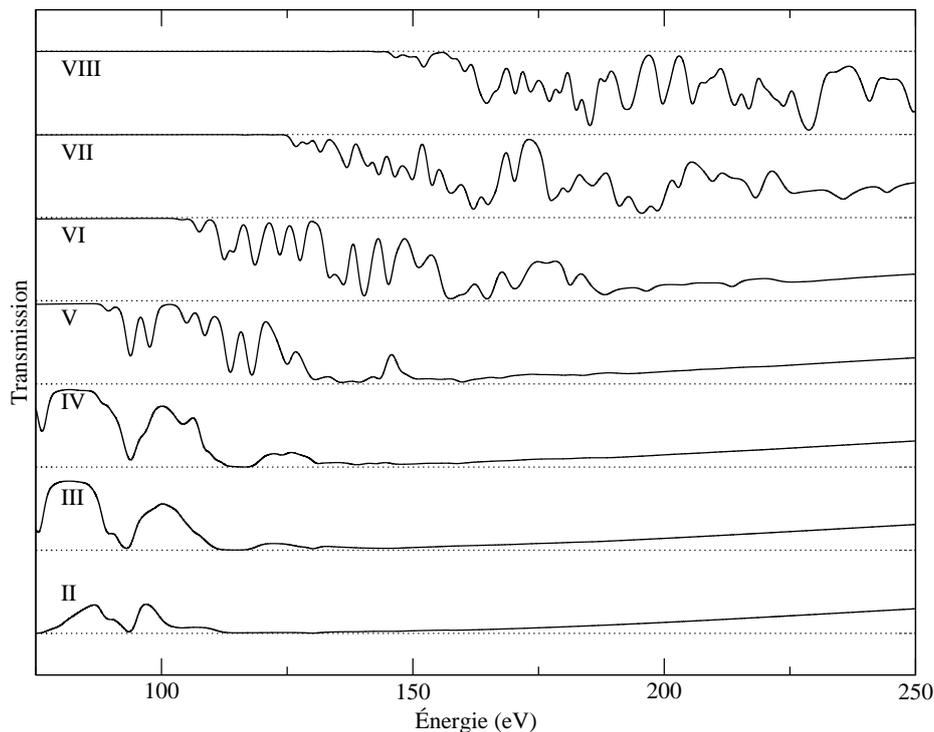


FIGURE 9.12 – Transmission des états de charge calculée sans pondération par la probabilité.

### 9.3.2 Aluminium sur le laser ASTERIX IV

L'expérience de WINHART et EIDMANN [110, 111] sur le laser ASTERIX IV<sup>6</sup> a produit un spectre en transmission dans la région d'excitation de la couche *L* de l'aluminium, aux alentours de 100 eV. Le laser a déposé 200 J en 0,4 ns à une longueur d'onde de 400 nm. ntre 18 et 22 eV. L'expérience a été comparée à des spectres théoriques issus de calculs sur OPAL [112] puis SCO [27] à une température de 22 eV et une densité de 10 mg/cm<sup>3</sup>.

Nous avons choisi de réinterpréter ce spectre avec SCORCG, car le spectre présente des structures d'absorption que les approches statistiques ne peuvent pas restituer. Dans nos calculs, la densité est de 10 mg/cm<sup>3</sup>, mais la température varie e Étrangement, comme le montrent les spectres en transmission Fig. 9.13, le spectre théorique à une température de 20 eV s'accorde bien moins avec le spectre expérimental que les spectres calculés à 18 et 22 eV. Le meilleur accord est obtenu à une température de 22 eV.

La transmission par états de charge tracée Fig. 9.12 montre que c'est l'aluminium ionisé 4 fois (*v* sur le graphique) qui explique pour l'essentiel la forme des structures aux alentours de 96 eV et 116 eV. Largement dominant à 18 eV, l'état d'ionisation *v* est mis en minorité par l'ion *vi*, qui cependant présente deux structures autour de 116 eV qui renforcent celles issues de la contribution de l'état d'ionisation *v*. La transmission ion par ion révèle l'effet de l'ouverture de l'orbitale *2p* à partir de l'ion *v*. Cette ouverture rend le spectre plus complexe, et décale la zone d'excitation vers le bleu, à cause de la disparition des électrons de l'orbitale *2p* dont l'effet d'écran sur les autres électrons *2p* est bien plus important que celui des électrons *3s*.

### 9.3.3 Fer sur machine Z

Un spectre de fer à haute température et d'excellente qualité a été produit à l'aide de la machine Z à Sandia National Laboratories [56]. Il présente des structures que seules des approches détaillées sont capables de restituer correctement. Le degré élevé d'ionisation du fer  $Z^* \simeq 16$  fait que les configurations sont plus simples qu'à température plus basse : la couche *3d* ne contient que des électrons excités.

Nous proposons, à la densité de 0,058 g/cm<sup>3</sup>, des interprétations à 150 eV, 155 eV et 160 eV La masse surfacique, pour tous les calculs en transmission, est de 20 μg/cm<sup>2</sup>. SCORCG reproduit très bien Fig. 9.14 l'ensemble des structures d'absorption du spectre expérimental, mais à des températures variables selon la structure envisagée. Ainsi, l'absorption entre 11,2 et 12,2 Å est très bien reproduite à 150 eV, ainsi que celle entre 14,7 et 15,4 Å. Entre 13,4 et 14,3 Å, la transmission est mieux reproduite à 155 eV, tandis que la structure d'absorption autour de 13 Å est mieux reproduite à une température de 160 eV. Vers 14,5 Å, un trou en absorption est mieux reproduit à 160 eV, tandis que la structure autour de 12,5 Å n'est reproduite par aucun des calculs.

Néanmoins, une modification de la distribution ionique à 150 eV permet d'obtenir un accord bien meilleur avec l'expérience, ce que montre le spectre de Fig. 9.15.

<sup>6</sup>Max-Planck-Institut für Quantenoptik, Garching, Allemagne.

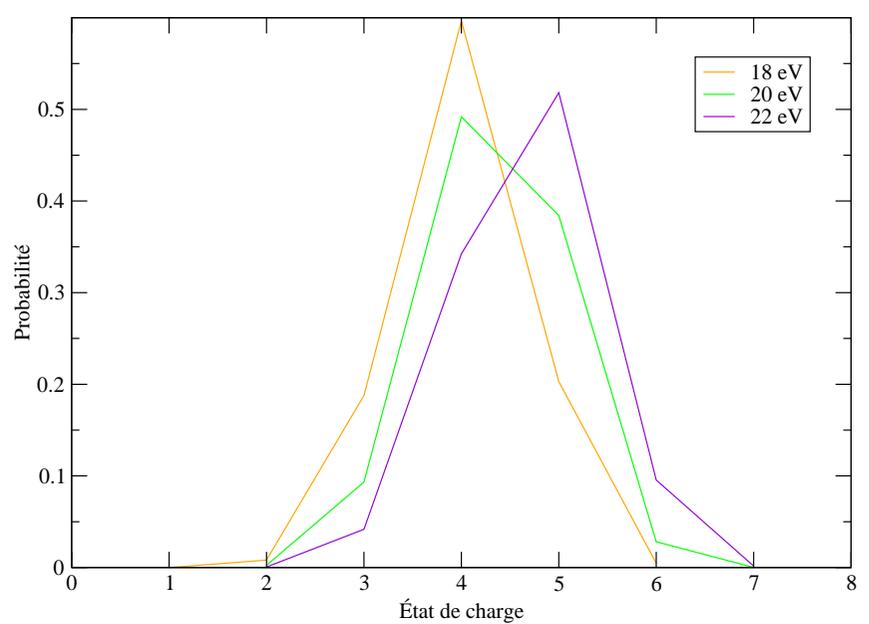
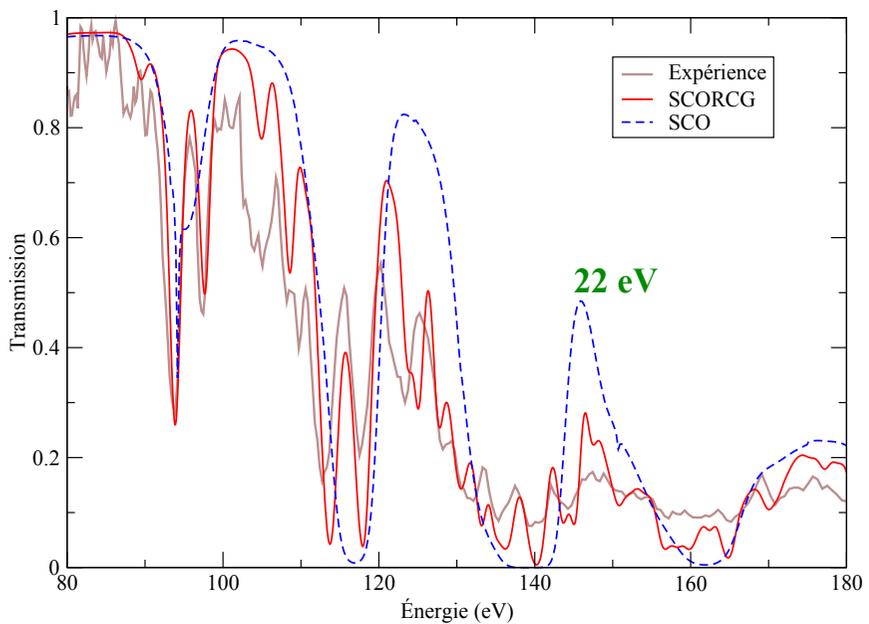
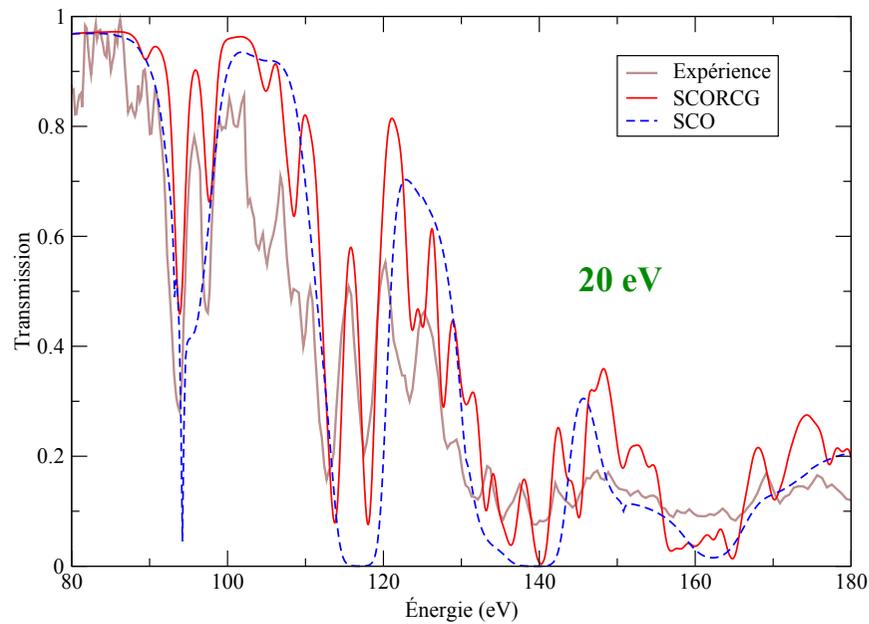
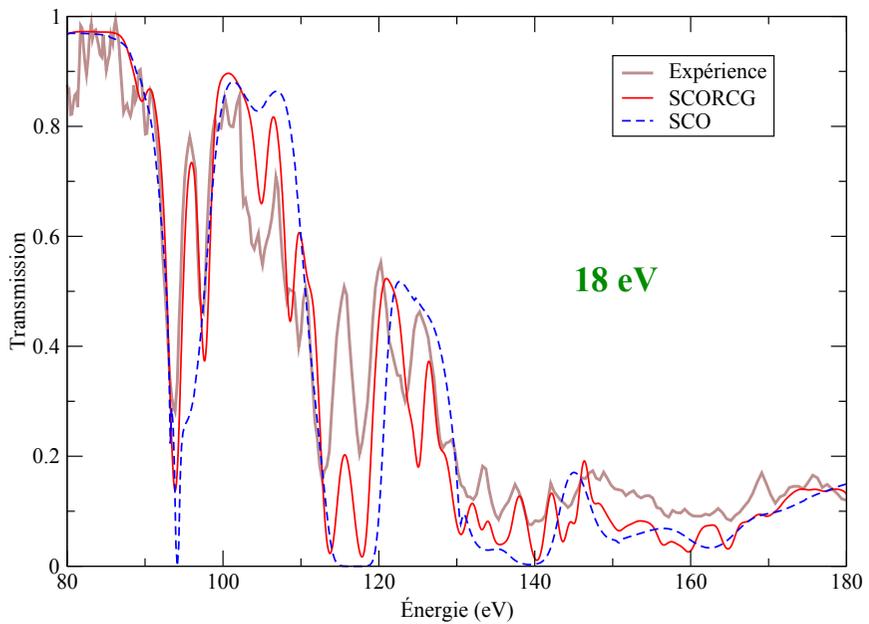


FIGURE 9.13 – Comparaison du spectre expérimental avec des spectres théoriques. Le diagramme en bas à droite représente la distribution ionique.

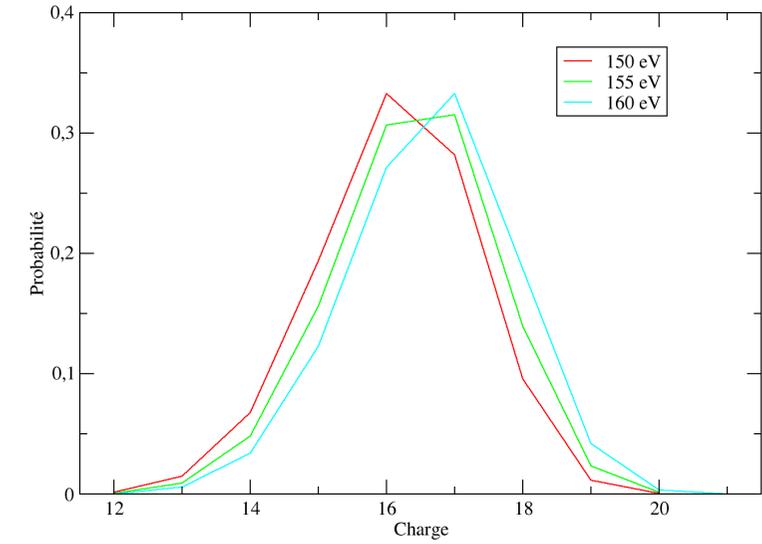
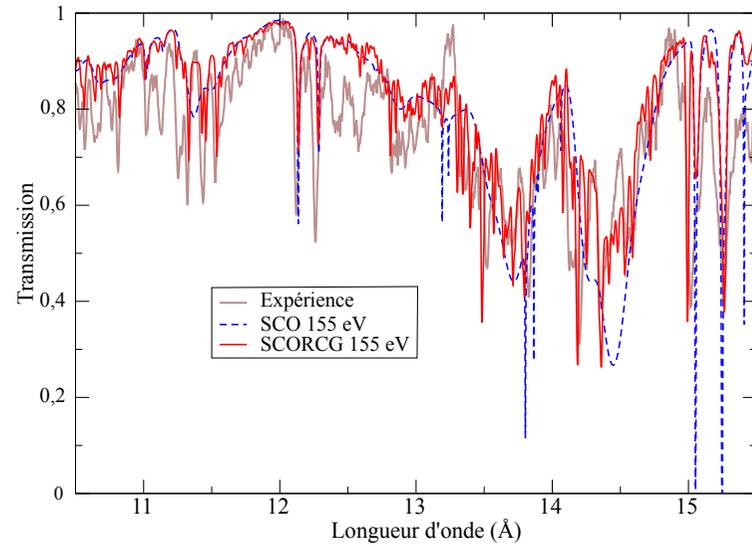
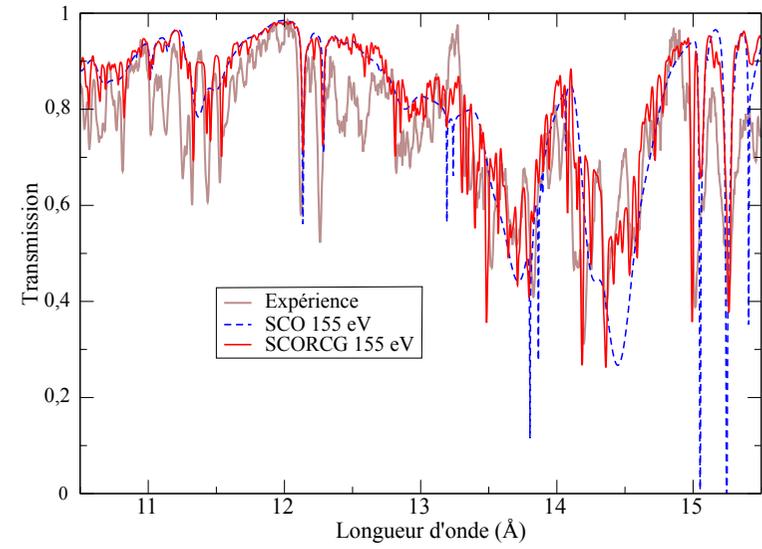
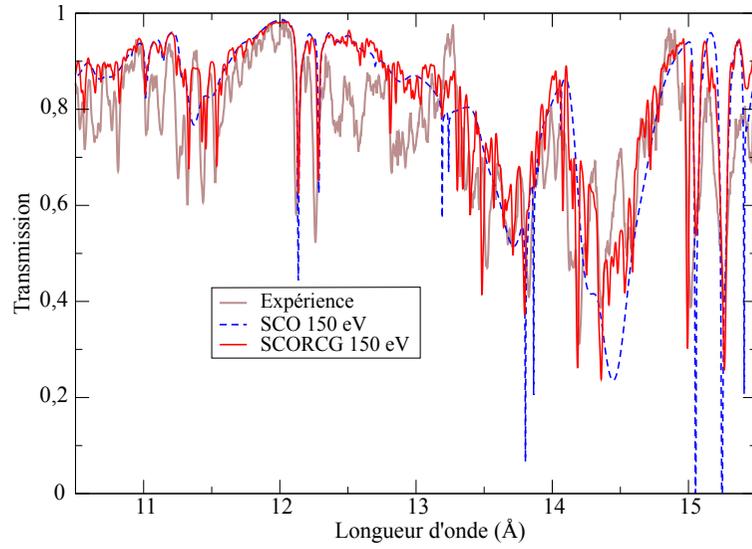


FIGURE 9.14 – Comparaison du spectre en transmission obtenu par l'équipe de J. BAILEY à Sandia [56] avec des calculs SCORCG à une densité de  $0,058 \text{ g/cm}^3$ , et des températures de 150, 155 et 160 eV.

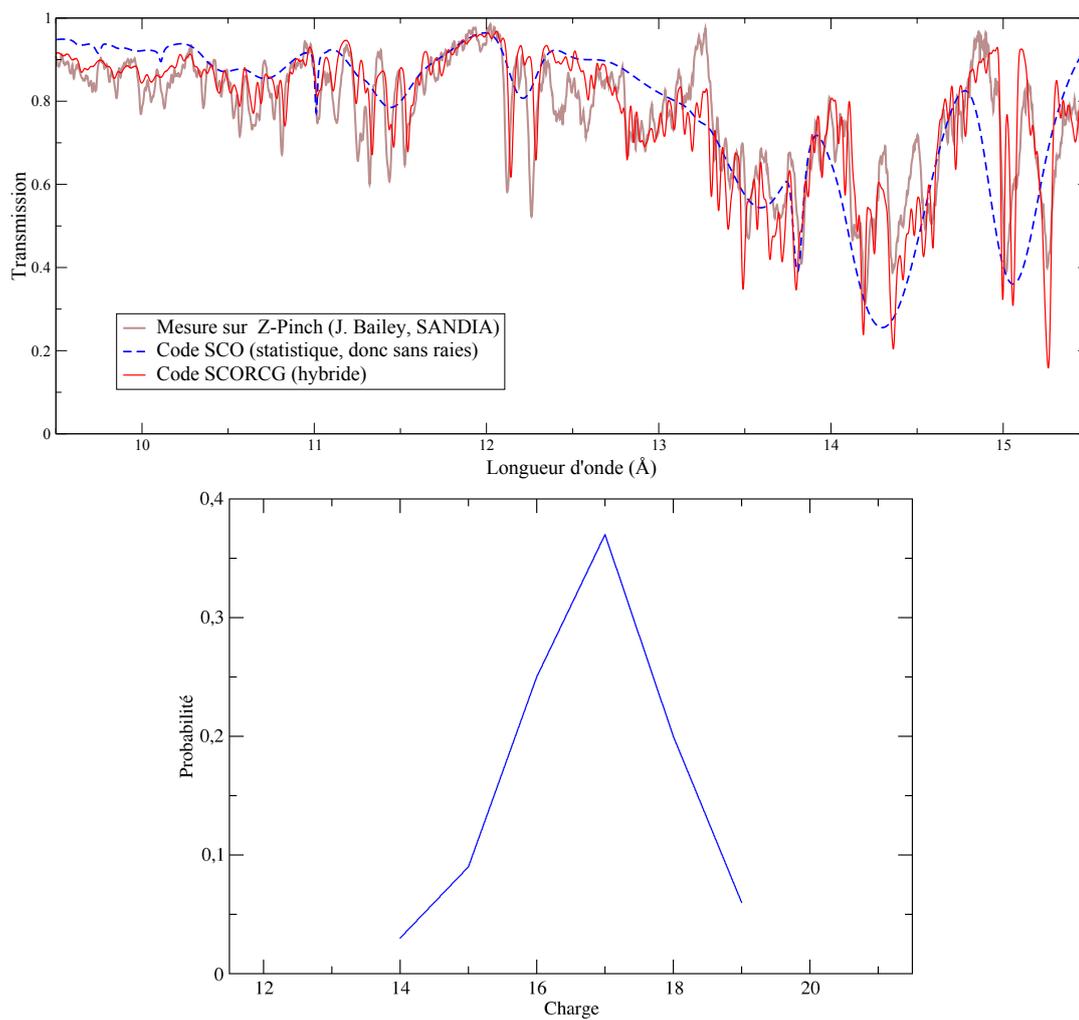


FIGURE 9.15 – Comparaison du spectre expérimental avec un calcul SCO ion par ion recombéné avec une distribution ionique légèrement modifiée.



# CONCLUSION

Le but de cette thèse a été de développer une nouvelle approche du calcul des propriétés radiatives des plasmas chauds en tenant compte de l'environnement plasma. Le modèle que nous avons développé permet le calcul des spectres de photoabsorption en associant, au sein d'un même formalisme, méthodes détaillées et statistiques de spectres de raies dans le plasma à l'équilibre thermodynamique local. Après avoir démontré le bien-fondé théorique et la faisabilité pratique de ce modèle, nous l'avons mis en œuvre dans le code de calcul appelé SCORCG. Dans ce modèle, les fonctions d'onde utilisées pour le calcul de toutes les transitions, y compris détaillées, prennent en compte l'effet de l'environnement plasma.

Un des grands problèmes auxquels nous avons été confrontés pendant la thèse a été d'assurer la cohérence thermodynamique entre les objets traités avec des méthodes détaillées et ceux traités avec des méthodes statistiques. En effet, selon la finesse avec laquelle le plasma et les espèces qu'il contient sont décrits, les fonctions de partition des configurations sont altérées, tout comme les quantités qui en découlent comme les probabilités des espèces présentes dans le plasma. Un arbitrage a donc été nécessaire pour garantir un maximum de cohérence dans les calculs.

Une fois développé, notre modèle hybride a été utilisé, d'une part pour confrontation à des spectres expérimentaux déjà interprétés par d'autres approches du calcul d'opacité, d'autre part pour interprétation de spectres d'absorption obtenus par des équipes d'expérimentateurs avec lesquelles nous collaborons. Les spectres théoriques obtenus montrent un meilleur accord avec les résultats expérimentaux que les interprétations faites avec d'autres modèles qui n'effectuent que des calculs statistiques, et sont capables d'effectuer des calculs difficilement accessibles aux modèles entièrement détaillés. Par rapport aux approches détaillées, un des intérêts de l'approche hybride est d'apporter une vérification de la sélection des configurations pertinentes, et d'assurer une prise en charge de manière globale des faisceaux trop complexes pour être détaillés. Par rapport aux approches statistiques, le calcul hybride est capable de révéler l'existence de structures d'absorption que ces dernières ne peuvent pas décrire et, par exemple, d'étudier l'interaction de sous-configurations relativistes.

SCORCG est plus qu'un outil de calcul d'opacité à l'équilibre thermodynamique local assurant un passage progressif entre deux approches complémentaires. La nouveauté du problème abordé, en particulier la gestion de calculs détaillés massifs et du grand nombre de raies qui en est issu, fait de ce code un véritable « laboratoire numérique » pour vérifier la modélisation des spectres de plasmas complexes. Nous avons établi une condition suffisante de coalescence des faisceaux de transition dans le modèle d'élargissement de raies que nous avons utilisé ainsi que des formules d'estimation de leur complexité. L'amélioration des approches statistiques envisagée permettra de remédier au problème des différentes formes de faisceaux pas forcément bien restitués par des approches statistiques fondées sur le calcul de moyenne et de variance.

Cependant, notre modèle de calcul peut encore être amélioré sur plusieurs points. L'interaction des sous-configurations relativistes appartenant à une configuration non-relativiste est prise en compte, mais l'interaction générale de configurations n'est pas incluse. Cette dernière peut avoir un effet important sur l'opacité des plasmas, par exemple dans des applications astrophysiques. Une autre amélioration de la modélisation des faisceaux de transition serait de prendre en compte les moments d'ordre supérieur à 2 dans les approches statistiques, notamment l'asymétrie et le kurtosis. La

modélisation du spectre lié-libre reste pour l'instant statistique, mais peut être améliorée par des calculs en partie détaillés. La physique des profils de raie a été abordée partiellement dans la thèse. Nous faisons l'hypothèse que les profils de raies sont des fonctions de Voigt et identiques pour chaque raie d'un même faisceau de transition. L'effet des profils de raies sur des spectres non-résolus est souvent faible, et des approches très simplifiées de calcul de l'élargissement des raies donnent des résultats satisfaisants. Cependant, dans le cas de spectres très résolus, la modélisation des profils de raies nécessite des formules plus élaborées que les celles utilisées pour l'instant dans SCORCG.

# BIBLIOGRAPHIE

- [1] A. DEVDARIANI, E. DALIMIER, et P. SAUVAN, *International Journal of Spectroscopy* **2010**, 812471 (2010).
- [2] V. E. FORTOV, *Extreme States of Matter : on Earth and in the Cosmos*, FizMathLit, 2008.
- [3] R. KIPPENHAHN et A. WEIGERT, *Stellar structure and evolution*, Astronomy and astrophysics library, Springer-Verlag, 1994.
- [4] A. WEISS, *The Life of a Star*, Notes on lectures, 1997.
- [5] Y. ZEL'DOVICH et Y. RAIZER, *Physics of Shock Waves and High Temperature Hydrodynamic Phenomena*, Academic, New York, 1966.
- [6] S. ICHIMARU, *Reviews of Modern Physics* **54**, 1017 (1982).
- [7] D. SALZMANN, *Atomic Physics in Hot Plasmas*, Oxford University Press (New York), 1998.
- [8] R. D. COWAN, *The Theory of Atomic Structure and Spectra*, The Regents of the University of California, 1981.
- [9] G. FAUSSURIER, *Traitement statistique des propriétés spectrales à l'équilibre thermodynamique local dans le cadre du modèle hydrogénique écranté*, Thèse de doctorat, École Polytechnique, 1996.
- [10] B. F. ROZSNYAI, *Physical Review A* **5**, 1137 (1972).
- [11] T. BLENSKI et B. CICHOCKI, *Physical Review E* **75**, 056402 (2007).
- [12] R. PIRON et T. BLENSKI, *Physical Review E* **83**, 026403 (2011).
- [13] T. BLENSKI, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **99**, 84 (2006).
- [14] J.-C. PAIN, *Sur la physique atomique des ions dans les plasmas en présence de l'écrantage*, Thèse de doctorat, Université de Paris-Sud XI Orsay, 2002.
- [15] O. PEYRUSSE, *Quelques éléments pour le calcul des opacités de Z faibles à modérés*.
- [16] B. F. ROZSNYAI, *Physical Review A* **43**, 3035 (1991).
- [17] S. ROSSELAND, *Monthly Notices of Royal Astronomical Society* **84**, 525 (1924).
- [18] P. GOLDREICH et D. A. KEELEY, *Astrophysical Journal* **212**, 243 (1977).
- [19] A. S. BRUN, S. TURCK-CHIÈZE, et J. P. ZAHN, *The Astrophysical Journal* **525**, 1032 (1999).
- [20] S. TURCK-CHIÈZE, S. COUVIDAT, et L. PIAU, *EAS Publications Series* **17**, 149 (2005).
- [21] A. EDDINGTON, *The Observatory* **40**, 290 (1917).

- [22] E. CONDON et G. A. SHORTLEY, *The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge University Press, 1935.
- [23] I. I. SOBELMAN, *Introduction to the theory of atomic spectra*, New York : Pergamon, 1972.
- [24] J.-L. BASDEVANT et J. DALIBARD, *Mécanique quantique*, Les Éditions de l'École Polytechnique, 2000.
- [25] H. HOPF, *Annals of Mathematics* **42**, 22 (1941).
- [26] C. KASSEL, *Christian Kassel : Quantum Groups (Graduate Texts in Mathematics)*., Springer-Verlag, 1998.
- [27] F. PERROT, T. BLENSKI, et A. GRIMALDI, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **58**, 845 (1997).
- [28] H. IYETOMI et S. ICHIMARU, *Physical Review A* **34**, 433 (1986).
- [29] G. RACAH, *Physical Review* **61**, 186 (1942).
- [30] G. RACAH, *Physical Review* **62**, 438 (1942).
- [31] R. XU et Z. DAI, *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics* **39**, 3221 (2006).
- [32] F. GILLERON et J.-C. PAIN, *High Energy Density Physics* **5**, 320 (2009).
- [33] A. BAR-SHALOM, M. KLAPISCH, et J. OREG, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **71**, 169 (2001).
- [34] M. F. GU, *Canadian Journal of Physics* **86**, 675 (2008).
- [35] M. KLAPISCH, *The Parametric Potential, a Method for the Computation of Atomic Wavefunctions*, Thèse de doctorat, Université Paris XI Orsay, 1969.
- [36] M. KLAPISCH, *Computer Physics Communications* **2**, 239 (1971).
- [37] F. J. ROGERS, B. G. WILSON, et C. A. IGLESIAS, *Physical Review A* **38**, 5007 (1988).
- [38] S. MABONG, G. MAYNARD, et K. KATSONIS, *Laser and Particle Beams* **14**, 575 (1996).
- [39] S. MABONG, *Détermination d'un potentiel paramétrique type OPAL d'ions lourds multichargés. Application à la fusion inertielle*, Thèse de doctorat, Université Paris XI Orsay, 1996.
- [40] J. C. SLATER, *Physical Review* **36**, 57 (1930).
- [41] E. CLEMENTI et D. L. RAIMONDI, *Journal of Chemistry and Physics* **38**, 2686 (1963).
- [42] T. BLENSKI, A. GRIMALDI, et F. PERROT, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **65**, 91 (2000).
- [43] T. BLENSKI, A. GRIMALDI, et F. PERROT, *Un programme de calcul d'opacité par la méthode des superconfigurations*, Commissariat à l'énergie atomique, 1995.

- [44] V. M. KLECHKOVSKI, *Soviet Physics - JETP* **14**, 334 (1962).
- [45] P. ZEEMAN, *Nature* **55 (1424)**, 347 (1897).
- [46] P. ZEEMAN, *Philosophical Magazine* **43**, 226 (1897).
- [47] P. ZEEMAN, *Philosophical Magazine* **44**, 55 (1897).
- [48] R. D. COWAN, *Programs RCN Mod 36 / RCN2 (Mod 36)*, Los Alamos National Laboratory, 1993.
- [49] R. D. COWAN, *Program RCG Mod 11 : calculation of atomic energy levels and spectra*, Los Alamos National Laboratory, 1993.
- [50] J. I. LANGFORD, *Journal of Applied Crystallography* **11**, 10 (1978).
- [51] V. N. F. (trad. D. P. GROSSMAN), *Uspekhi Matematicheskikh Nauk* **7 :1 (47)**, 211 (1952).
- [52] C. A. IGLESIAS, V. SONNAD, B. G. WILSON, et J. I. CASTOR, *High Energy Density Physics* **5**, 97 (2009).
- [53] F. JIN et J. YUAN, *Physical Review E* **72**, 016404 (2005).
- [54] G. LOISEL, P. ARNAULT, S. BASTIANI-CECCOTTI, T. BLENSKI, T. CAILLAUD, J. FARIAUT, W. FÖLSNER, F. GILLERON, J.-C. PAIN, M. POIRIER, C. REVERDIN, V. SILVERT, F. THAIS, S. TURCK-CHIÈZE, et B. VILLETTE, *High Energy Density Physics* **5**, 173 (2009).
- [55] T. BLENSKI, G. LOISEL, M. POIRIER, F. THAIS, P. ARNAULT, T. CAILLAUD, J. FARIAUT, F. GILLERON, J.-C. PAIN, Q. PORCHEROT, C. REVERDIN, V. SILVERT, B. VILLETTE, S. BASTIANI-CECCOTTI, S. TURCK-CHIÈZE, W. FOELSNER, et F. DE GAUFRIDY DE DORTAN, *High Energy Density Physics* **7**, 320 (2011).
- [56] J. E. BAILEY, G. A. ROCHEAU, C. A. IGLESIAS, J. ABDALLAH, J. J. MACFARLANE, I. GOLOVKIN, P. WANG, R. C. MANCINI, P. W. LAKE, T. C. MOORE, M. BUMP, O. GARCIA, et S. MAZEVET, *Physical Review Letters* **99**, 265002(4) (2007).
- [57] L. H. THOMAS, *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* **23**, 542 (1927).
- [58] R. P. FEYNMAN, N. METROPOLIS, et E. TELLER, *Physical Review* **75**, 1561 (1949).
- [59] R. M. MORE, K. H. WARREN, D. A. YOUNG, et G. B. ZIMMERMAN, *Physics of Fluids* **31**, 3059 (1988).
- [60] R. M. MORE, *Advances in Atomic and Molecular Physics* **21**, 305 (1985).
- [61] Q. PORCHEROT, G. FAUSSURIER, et C. BLANCARD, *High Energy Density Physics* **6**, 76 (2010).
- [62] C. BAUCHE-ARNOULT, J. BAUCHE, et M. KLAPISCH, *Physical Review A* **20**, 2424 (1979).
- [63] C. BAUCHE-ARNOULT, J. BAUCHE, et M. KLAPISCH, *Physical Review A* **25**, 2641 (1982).

- [64] R. KARAZIJA, *Sums of Atomic Quantities and Mean Characteristics of Spectra (en russe)*, 1991.
- [65] R. KARAZIJA, *Lithuanian Journal of Physics* **35**, 155 (1995).
- [66] C. BAUCHE-ARNOULT, J. BAUCHE, et M. KLAPISCH, *Physical Review A* **31**, 2248 (1985).
- [67] A. BAR-SHALOM, J. OREG, W. H. GOLDSTEIN, D. SHVARTS, et A. ZIGLER, *Physical Review A* **40**, 3183 (1989).
- [68] A. BAR-SHALOM, J. OREG, et M. KLAPISCH, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **58**, 427 (1997).
- [69] O. PEYRUSSE, *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics* **33**, 4303 (2000).
- [70] O. PEYRUSSE, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **71**, 571 (2001).
- [71] F. GILLERON et J.-C. PAIN, *Physical Review E* **69**, 056117 (2004).
- [72] J. OREG, A. BAR-SHALOM, et M. KLAPISCH, *Physical Review E* **55**, 5875 (1997).
- [73] F. JIN, T. HUANG, Y. DING, Z. ZHENG, et J. YUAN, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **111**, 78 (2010).
- [74] M. S. DIMITRIJEVIĆ et N. KONJEVIĆ, *Astronomy and Astrophysics* **172**, 345 (1987).
- [75] B. ROZSNYAI, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **17**, 77 (1977).
- [76] S. B. HANSEN, J. BAUCHE, C. BAUCHE-ARNOULT, et M. F. GU, *High Energy Density Physics* **3**, 109 (2007).
- [77] J. L. W. V. JENSEN, *Nyt Tideskrift for Matematik* **16B**, 49 (1905).
- [78] J. L. W. V. JENSEN, *Acta Mathematica* **30**, 175 (1906).
- [79] S. MAZEVET et J. ABDALLAH, *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics* **39**, 3419 (2006).
- [80] S. J. DAVIDSON, J. M. FOSTER, C. C. SMITH, K. A. WABURTON, et S. J. ROSE, *Applied Physics Letters* **52**, 847 (1987).
- [81] J. M. FOSTER, D. J. HOARTY, C. C. SMITH, P. A. ROSEN, S. J. DAVIDSON, S. J. ROSE, T. S. PERRY, et F. J. D. SERDUKE, *Physical Review Letters* **67**, 3255 (1991).
- [82] D. HOARTY, C. BENTLEY, B. CROWLEY, S. DAVIDSON, S. GALES, P. GRAHAM, J. HARRIS, C. IGLESIAS, S. JAMES, et C. SMITH, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **99**, 283 (2006).
- [83] B. TALIN, A. CALISTI, L. GODBERT, R. STAMM, et R. W. LEE, *Physical Review A* **51**, 1918 (1995).
- [84] A. CALISTI, F. KHELFAOUI, R. STAMM, B. TALIN, et R. W. LEE, *Physical Review A* **42**, 5433 (1990).

- [85] A. CALISTI, S. FERRI, et C. MOSSÉ, *Journal de Physique IV France* **138**, 95 (2006).
- [86] J. BAUCHE et C. BAUCHE-ARNOULT, *Journal of Physics B : Atomic and Molecular Physics* **20**, 1659 (1987).
- [87] J. BAUCHE et P. COSSÉ, *Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics* **28**, 1411 (1997).
- [88] G. RACAH, *Physical Review* **63**, 367 (1943).
- [89] G. RACAH, *Physical Review* **69**, 1352 (1949).
- [90] W. H. PRESS, S. A. TEUKOLSKY, W. T. WETTERLING, et B. P. FLANNERY, *Fortran Numerical Recipes*, Cambridge University Press, 1992.
- [91] J. ABDALLAH, D. KILCREASE, N. MAGEE, S. MAZEVET, P. HAKEL, et M. SHERILL, *High Energy Density Physics* **3**, 309 (2007).
- [92] M. KLAPISCH et M. BUSQUET, *High Energy Density Physics* **5**, 105 (2009).
- [93] M. KLAPISCH et M. BUSQUET, *High Energy Density Physics* **7**, 98 (2011).
- [94] J. A. GAFFNEY et S. J. ROSE, *High Energy Density Physics* **7**, 240 (2011).
- [95] C. E. PORTER et R. G. THOMAS, *Physical Review* **104**, 483 (1956).
- [96] J. BAUCHE, C. BAUCHE-ARNOULT, J.-F. WYART, P. DUFFY, et M. KLAPISCH, *Physical Review A* **44**, 5707 (1991).
- [97] M. G. KENDALL et A. STUART, *Advanced Theory of Statistics*, volume 1, Hafner, 69.
- [98] S. B. HANSEN, J. BAUCHE, et C. BAUCHE-ARNOULT, *High Energy Density Physics* **7**, 1574 (2011).
- [99] F. GILLERON, J.-C. PAIN, Q. PORCHEROT, J. BAUCHE, et C. BAUCHE-ARNOULT, *High Energy Density Physics* **7**, 277 (2011).
- [100] C. A. IGLESIAS, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **99**, 295 (2006).
- [101] J. FILEVICH, J. J. ROCCA, E. JANKOWSKA, E. C. HAMMARSTEN, K. KANIZAY, M. C. MARCONI, S. J. MOON, et V. N. SLYAPTSEV, *Physical Review E* **67**, 056409(6) (2003).
- [102] J. E. BAILEY, P. ARNAULT, T. BLENSKI, G. DEJONGHE, O. PEYRUSSE, J. J. MACFARLANE, R. C. MANCINI, M. E. CUNEO, D. S. NIELSEN, et G. A. ROCHAU, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **81**, 31 (2003).
- [103] Q. PORCHEROT, J.-C. PAIN, F. GILLERON, et T. BLENSKI, *High Energy Density Physics* **7**, 234 (2011).
- [104] D. GILLES, S. TURCK-CHIÈZE, G. LOISEL, L. PIAU, J.-E. DUCRET, M. POIRIER, T. BLENSKI, F. THAIS, C. BLANCARD, P. COSSÉ, G. FAUSSURIER, F. GILLERON, J.-C. PAIN, Q. PORCHEROT, J. GUZIK, D. KILCREASE, N. MAGEE, J. HARRIS, M. BUSQUET, F. DELAHAYE, C. J. ZEIPPEN, et S. BASTIANI-CECCOTTI, *High Energy Density Physics* **7**, 312 (2011).

- [105] S. TURCK-CHIÈZE, G. LOISEL, D. GILLES, L. PIAU, C. BLANCARD, T. BLENSKI, M. BUSQUET, T. CAILLAUD, P. COSSÉ, F. DELAHAYE, G. FAUSSURIER, J. FARRIAUT, F. GILLERON, J. GUZIK, J. HARRIS, D. KILCREASE, N. MAGEE, J.-C. PAIN, Q. PORCHEROT, M. POIRIER, G. SOULLIER, C. ZEIPPEN, S. BASTIANI-CECCOTTI, C. REVERDIN, V. SILVERT, F. THAIS, et B. VILLETTE, *Astrophysics and Space Science* **336**, 103 (2011).
- [106] A. BAR-SHALOM, J. OREG, et W. H. GOLDSTEIN, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **51**, 27 (1994).
- [107] A. BAR-SHALOM, J. OREG, M. KLAPISCH, et T. LEHECKA, *Physical Review E* **59**, 3512 (1999).
- [108] F. GILLERON, J. BAUCHE, et C. BAUCHE-ARNOULT, *Journal of Physics B : Atomic and Molecular Physics* **40**, 3057 (2007).
- [109] T. S. PERRY, P. T. SPRINGER, D. F. FIELDS, D. R. BACH, F. J. D. SERDUKE, C. A. IGLESIAS, F. J. ROGERS, J. K. NASH, M. H. CHEN, B. G. WILSON, W. H. GOLDSTEIN, B. ROZSNYAI, R. A. WARD, J. D. KILKENNY, R. DOYAS, L. B. DA SILVA, C. A. BACK, et R. CAUBLE, *Physical Review E* **54**, 5617 (1996).
- [110] K. EIDMANN, A. BAR-SHALOM, SAEMANN, et G. WINHART, *Europhysics Letters* **44**, 459 (1998).
- [111] G. WINHART, K. EIDMANN, C. A. IGLESIAS, et A. BAR-SHALOM, *Physical Review E* **53**, R1132 (1996).
- [112] F. J. ROGERS, F. J. SWENSON, et C. A. IGLESIAS, *Astrophysical Journal* **456**, 902 (1996).
- [113] M. S. DIMITRIJEVIĆ et N. KONJEVIĆ, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **24**, 451 (1980).
- [114] M. S. DIMITRIJEVIĆ et N. KONJEVIĆ, *Astronomy and Astrophysics* **163**, 297 (1986).
- [115] J. J. OLIVERO et R. L. LONGBOTHUM, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **17**, 233 (1977).
- [116] H. WANG et J. ZHOU, *Journal of Applied Crystallography* **38**, 830 (2005).
- [117] J.-C. PAIN, F. GILLERON, J. BAUCHE, et C. BAUCHE-ARNOULT, *High Energy Density Physics* **5**, 294 (2009).
- [118] F. GILLERON, J.-C. PAIN, J. BAUCHE, et C. BAUCHE-ARNOULT, *Physical Review E* **77**, 026708 (2008).