

Table des matières

Table des matières	v
Introduction	ix
1 Cadre de l'étude	1
1.1 Matière dense et tiède	2
1.1.1 Paramètres plasma	2
1.1.2 Warm Dense Matter	5
1.1.3 Intérêt et défis	5
1.2 Diffusion Thomson X	8
1.2.1 Principe	8
1.2.1.1 Régime de diffusion	10
1.2.1.2 Diffusion sur un ensemble de particules identiques	13
1.2.1.3 Diffusion sur un plasma	15
1.2.1.4 Les limites de cette description qualitative	16
1.2.1.5 Terminologie	16
1.2.2 Pertinence pour la WDM	17
1.2.3 État de l'art	19
1.2.3.1 Diffusion Thomson à basse énergie (radio-visible-UV)	19
1.2.3.2 Diffusion Thomson dans le domaine X	19
2 DTX - Théorie	25
2.1 Principe	26
2.1.1 Diffusion par un électron isolé	26
2.1.1.1 Diffusion Thomson classique	26
2.1.1.2 Diffusion Compton	31
2.1.1.3 Cas général : Klein-Nishina	32
2.1.2 Diffusion par un plasma	32
2.1.2.1 Facteur de structure électronique	33
2.2 Expression du FSE	38
2.2.1 Approche de Chihara	38
2.2.2 Modèle de matière	47
2.3 Modèle Gregori	48
2.3.1 Terme électronique	48
2.3.1.1 Réponse linéaire	48

2.3.1.2	Expressions de la fonction diélectrique électronique	52
2.3.2	Terme ionique	54
2.3.2.1	Écrantage linéaire	54
2.3.2.2	Équations intégrales	56
2.3.2.3	OCP écranté	58
2.3.2.4	Facteur de forme ionique	60
2.4	SCAALP	62
2.5	Dynamique moléculaire quantique	65
3	Expériences	69
3.1	Lithium	72
3.1.1	Objectif	72
3.1.2	Dispositif expérimental	72
3.1.2.1	Conditions laser	72
3.1.2.2	Cibles	75
3.1.2.3	Diagnostics	77
3.1.3	Résultats expérimentaux préliminaires ; détermination des conditions plasma sondées	84
3.2	Polystyrène	93
3.2.1	Objectifs	93
3.2.2	Dispositif expérimental	93
3.2.2.1	Conditions laser	94
3.2.2.2	Cibles	95
3.2.2.3	Diagnostics	96
3.2.3	Analyse des résultats	102
4	Comparaison des modèles	109
4.1	Lithium	110
4.1.1	Préliminaire	110
4.1.2	Contributions négligeables.	111
4.1.2.1	Contribution lié-libre	112
4.1.2.2	Constantes d'écran	113
4.1.3	Modèles linéaires et SOCP	114
4.1.3.1	Adjonction d'un modèle d'ionisation	119
4.1.3.2	Mesure indépendante de la température	119
4.1.3.3	Analyse des barres d'erreur	122
4.1.4	Atome Moyen	128
4.1.5	Dynamique moléculaire quantique	129
4.2	Plastique	136
4.2.1	Aspects du traitement multi-composantes	136
4.2.1.1	Expression multi-composantes du terme élastique du fac- teur de structure	136
4.2.1.2	Utilisation de la dynamique moléculaire quantique	137

4.2.1.3	Ionisation	140
4.2.2	Inhomogénéité du plasma sondé	141
4.2.3	Utilisation en tant que diagnostic (ρ, T)	143
4.2.4	Comparaison des modèles	147
4.2.4.1	Domaine de validité	147
4.2.4.2	Ionisation	148
4.2.4.3	Longueur de corrélation	149
5	Conclusion	153
5.1	Bilan	154
5.1.1	Outils de modélisation	154
5.1.2	Moyens expérimentaux	155
5.1.3	Analyse des données	155
5.2	Perspectives	156
5.2.1	Expérimentales	156
5.2.2	Modélisation	158
A	Modèle de mélange	161
A.1	Expression multi-composantes du facteur de structure électronique	162
A.1.1	Utilisation pour la description de différents états de charge	168
	Bibliographie	169

Introduction

Ce travail de thèse prend place dans le cadre des études sur les plasmas denses, qui s'intéressent au comportement de la matière lorsqu'elle est soumise à des conditions extrêmes de densité et de température. La *diffusion Thomson X* qui fait l'objet spécifique de cette étude est une technique expérimentale qui a pour objectif de mesurer certaines propriétés de ces plasmas fortement corrélés. Les quelques paragraphes qui suivent ont pour ambition d'éclairer le contexte de ces travaux et d'en présenter l'intérêt.

Les plasmas denses

On parle de plasma dense lorsque la matière est suffisamment comprimée pour que les effets collectifs, liés aux interactions entre les particules, aient un effet sur son comportement. On parle aussi de plasmas non-idéaux, fortement couplés, ou encore de plasmas corrélés. Une définition quantitative ainsi que la description du comportement de la matière dans ce type de régime attendra le chapitre suivant. Mais si l'on ambitionne de se pencher sur la physique des plasmas denses, commençons donc par nous demander pourquoi. Les objectifs poursuivis sont en réalité multiples.

Astrophysique

Une première motivation est la description et la modélisation des systèmes physiques dans lesquels de telles conditions sont effectivement rencontrées. S'il s'agit dans notre environnement naturel (la surface de la Terre) de conditions relativement exotiques, il n'en est néanmoins pas moins vrai que les plasmas denses sont très présents si l'on élargit notre champ d'investigation au-delà de la surface de la Terre. Il s'agit typiquement d'objets astrophysiques tels que les étoiles ou les intérieurs planétaires. On lit inmanquablement dès les premières lignes d'un ouvrage traitant des plasmas que cet état de la matière représente 99% de la matière hadronique dans l'univers. Quelle que soit la précision réelle de cette affirmation, il est certainement intéressant d'en proposer ici une autre : 95% de cette matière constitue les planètes, les étoiles et les astres compacts [1], c'est-à-dire des plasmas denses. Les figures 1 et 2 en représentent de bons exemples : le Soleil et les deux principales planètes géantes du

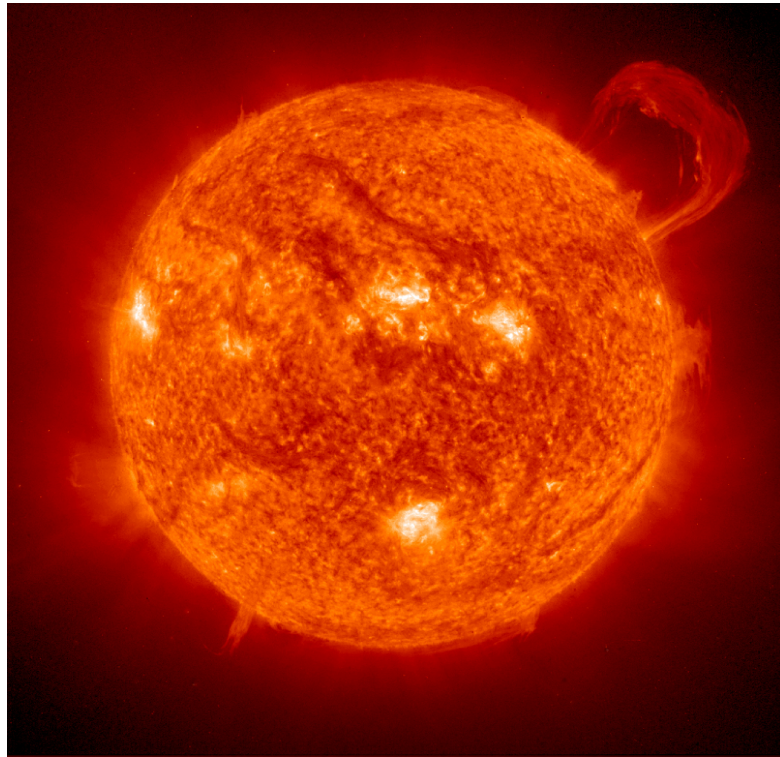
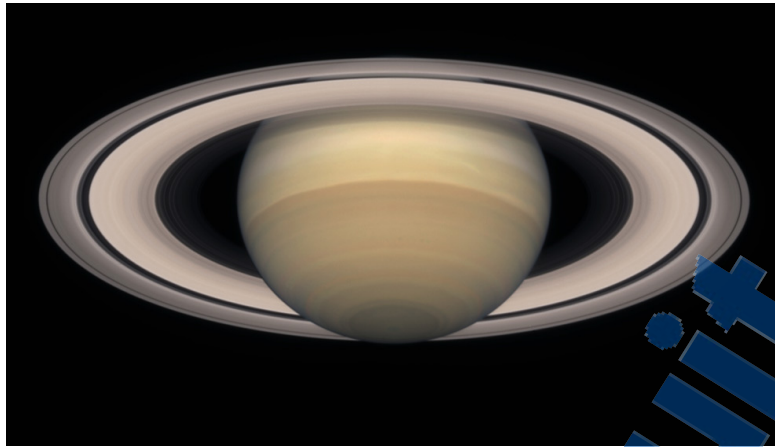


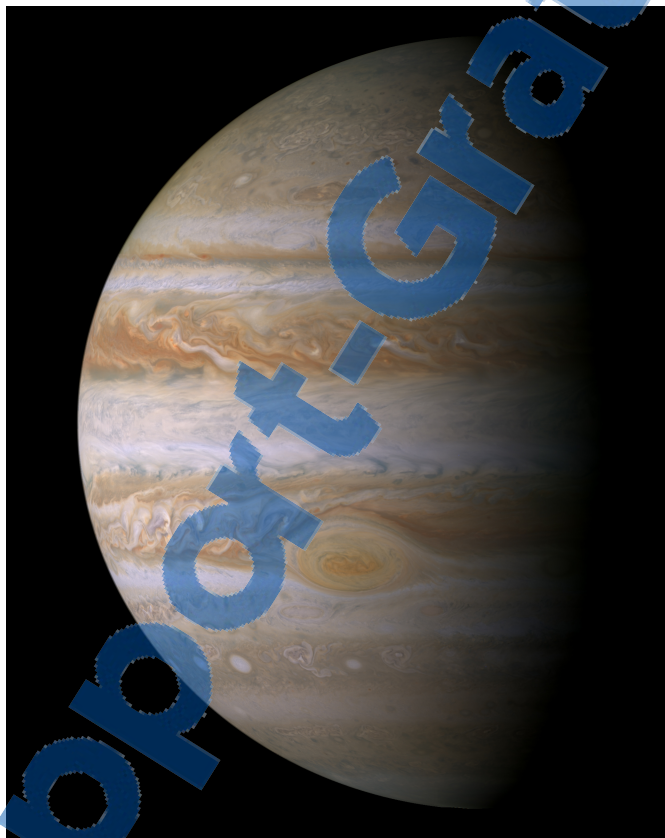
FIGURE 1 – Un premier exemple de plasma “dense et chaud” dans notre voisinage : le Soleil, ici observé dans l’extrême ultraviolet par l’instrument EIT de l’observatoire solaire spatial SOHO (ESA & NASA)

système solaire, Jupiter et Saturne, représentant à eux trois plus de 99,98% de la masse du système solaire. Dans le cas de Jupiter on évalue la pression du coeur à 40 Mbar et la température à quelques 10 000 K [2] (cf. figure 3). Comme on le verra au chapitre suivant, il s’agit là de conditions tout particulièrement contraignantes pour la description théorique de la structure interne de ces objets ou les simulations. Or pour des objets astrophysiques les investigations sont nécessairement limitées par les distances qui nous en séparent, l’impossibilité d’effectuer des observations directes non plus que de faire varier les conditions expérimentales à la guise de l’observateur.

Nous verrons plus loin que l’on sait dorénavant reproduire ou approcher en laboratoire certaines de ces conditions. Les physiciens ont ainsi gagné accès à un nouveau champ expérimental, rapidement baptisé *astrophysique de laboratoire*, où l’on est véritablement passé du domaine de l’observation à celui de l’expérimentation. Prenons l’exemple de notre étoile, le Soleil. Les modèles actuellement employés pour décrire sa structure et son évolution reposent sur un certain nombre de propriétés de la matière dense qui le constitue ainsi que leurs relations. On peut citer les conductivités thermique et électrique, l’opacité spectrale, les taux de collision, les propriétés magnétiques, la relation de dépendance entre différents para-



(a) Saturne entourée de ses anneaux, immortalisée par le télescope spatial Hubble (NASA)



(b) Jupiter et sa grande tache rouge, vu depuis la sonde Cassini (NASA)

FIGURE 2 – Autres exemples de plasmas denses (et *tièdes*) dans le système solaire : les intérieurs des géantes gazeuses.

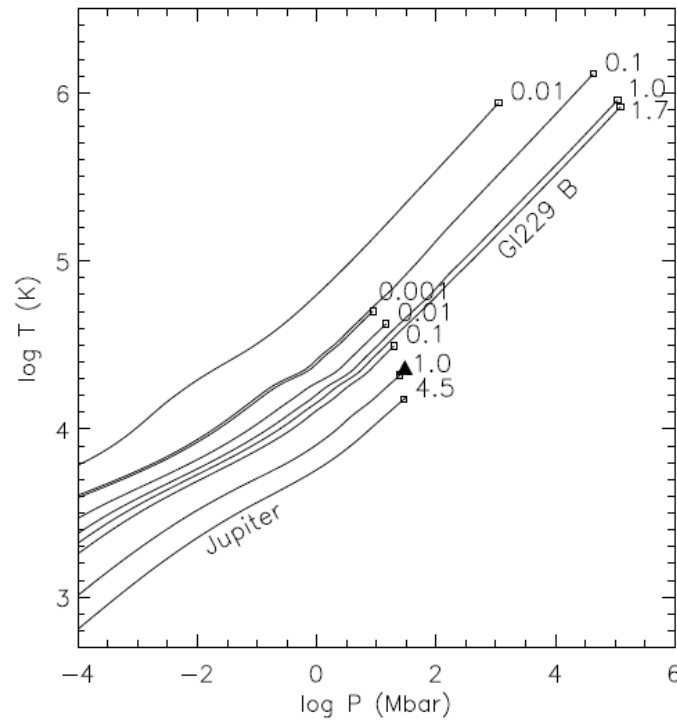


FIGURE 3 – Profils température-pression estimés pour Jupiter et la naine Brune GI 229 B [3]. Les chiffres représentent l'âge de l'astre en milliards d'années.

mètres thermodynamiques (appelée équation d'état) et bien d'autres. La valeur de ces grandeurs est souvent évaluée à l'aide de simulations numériques dont les résultats dépendent naturellement des modèles théoriques employés, des nécessaires simplifications introduites ainsi que des algorithmes choisis. Considérons le cas de l'opacité spectrale, qui évalue le taux d'absorption du rayonnement par un élément en fonction de la longueur d'onde considérée. Un calcul détaillé de cette grandeur doit prendre en compte tous les aspects de l'interaction rayonnement-matière et donc l'ensemble des taux de transition entre les innombrables niveaux électroniques. Cela requiert l'utilisation conjointe de modèles de physique atomique subtiles et de traitement statistiques raffinés. La confiance que l'on place en de telles méthodes, au vu de leur complexité, doit nécessairement être conditionnée par la comparaison avec des données expérimentales. Or de telles données d'opacité spectrale obtenues en laboratoire sont depuis peu disponibles [4] et permettent de "caler" les codes informatiques, de pointer leurs insuffisances ou au contraire de valider leur résultats. Cela a pour effet direct un affinement des modèles de la physique solaire, et un approfondissement de la compréhension que l'on a de notre étoile.

En ce qui concerne les planètes géantes, les équations d'état à haute pression de leurs constituants (hydrogène et hélium principalement), ont une influence cruciale sur leur structure

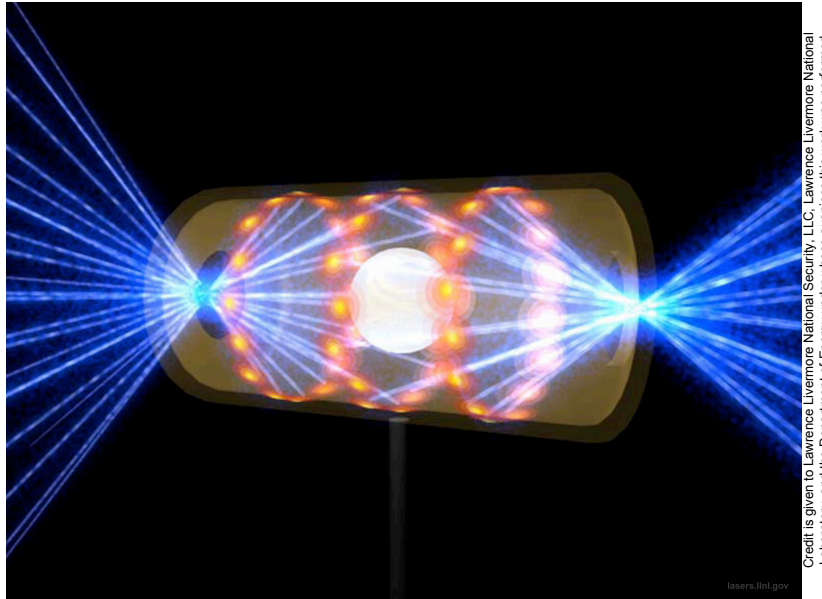


FIGURE 4 – Un exemple de plasma dense en laboratoire. Représentation d’une expérience de fusion par confinement inertiel. Une cavité en or convertit l’énergie de plusieurs impulsions laser UV en rayonnement X thermique irradiant une bille de combustible pour la faire imploser. (National Ignition Facility)

interne. L’occurrence de transitions de phase détermine ainsi la présence ou non d’un cœur solide, la présence de phases métalliques conditionne les mécanismes de génération du champ magnétique... Remonter à la structure interne d’un tel astre à partir des observations requiert donc une bonne connaissance de ces équations d’état. Or on est aujourd’hui dans la situation où les différentes estimations de ces équations d’état [5, 6] peuvent être comparées à des observables mesurées en laboratoire telles que la conductivité électrique [7] ou la compressibilité [8, 9].

Sciences de la fusion contrôlée

Par ailleurs, une bonne connaissance de la physique des plasmas denses est motivée par les percées technologiques que l’on espère en retirer et relève ainsi plutôt de la physique appliquée. Impossible ici de ne pas évoquer le problème de l’énergie. Voici près de soixante ans que l’idée d’utiliser la fusion nucléaire contrôlée pour produire de l’énergie a germé. Les études dans ce cadre ont été nombreuses et les espoirs de voir aboutir rapidement ces recherches sur des solutions industrielles ont été déçus. Pourtant un examen objectif des travaux réalisés jusqu’à aujourd’hui révèle que les progrès furent constants. Avec le recul nous pouvons affirmer que nous partions effectivement de très loin, tant les défis technologiques

sont importants et notre connaissance des phénomènes physiques concernés lacunaire. Au début du 21^e siècle, il n'est pas nécessaire de s'attarder sur les défis et les intérêts colossaux que représente la problématique de l'énergie, mais simplement de remarquer l'attention toute particulière et renouvelée que suscitent les projets de recherche à long terme dans ce domaine. Il suffit pour cela d'évoquer le coût consenti par les états dans ce domaine pour les grands équipements tel que ITER (*International Thermonuclear Experimental Reactor*), NIF (*National Ignition Facility*) ou LMJ (*Laser MegaJoule*). Mais revenons aux plasmas denses. Une façon très simple de montrer le lien avec l'astrophysique évoquée quelques lignes plus haut est de rappeler simplement que la fusion nucléaire est la source d'énergie du Soleil et des autres étoiles. Un exposé général sur la fusion serait ici parfaitement superflu. Il suffit de mentionner que le principal défi à relever est de confiner un combustible dans des conditions où les réactions de fusion auront effectivement lieu. Dans le cas des étoiles, ce confinement est d'origine gravitationnel, solution inapplicable à petite échelle sur Terre. Les stratégies alors imaginées pour réaliser la fusion en laboratoire sont de deux types. Le premier est le confinement magnétique, consistant à piéger un combustible peu dense ($n \sim 10^{15} \text{ cm}^{-3}$) dans un champ magnétique à la topologie complexe puis de le chauffer ($T \sim 10^8 \text{ K}$). Il s'agit d'une voie prometteuse mais hors sujet ici vu les densités considérées. L'autre, sur laquelle va se porter notre attention, envisage d'induire des réactions de fusion dans un combustible comprimé à des milliers de fois la densité du solide pendant un temps très court, de l'ordre de la nanoseconde. On parle de fusion par confinement inertiel (FCI). Les méthodes de compression envisagées varient dans les détails mais l'idée principale est d'irradier une cible avec un rayonnement extrêmement intense pour en provoquer l'implosion. La figure 4 illustre une des configurations envisagées, dite attaque indirecte, dans laquelle une bille de combustible de dimensions millimétriques est placée dans une cavité en or. Plusieurs dizaines de faisceaux laser déposent alors une énergie de l'ordre du mégajoule dans un temps très bref (quelques nanosecondes) dans les parois internes. Le rayonnement X thermique émis par la cavité ainsi chauffée irradie la bille dont les couches externes subissent une détente rapide. Le reste de la cible, par réaction, subit une accélération centripète et est comprimé. Cet objectif, dont on ne sait aujourd'hui avec certitude s'il sera technologiquement réalisable et économiquement viable, ne pourra qu'être réalisé moyennant une profonde connaissance des lois de comportement du combustible sur la plage de valeurs des paramètres (couvrant plusieurs ordres de grandeur) qui séparent son état solide et froid initial ($\rho \sim 10^0 \text{ g.cm}^{-3}$, $T \sim 10^2 \text{ K}$) jusqu'à son état chaud et comprimé final ($\rho \sim 10^3 \text{ g.cm}^{-3}$, $T \sim 10^5 \text{ K}$) (voir la figure 1.2 du chapitre suivant). Là encore, un tel objectif requiert des données expérimentales précises pour valider modèles théoriques et simulations numériques qui sont massivement employées.

Modèles et données expérimentales

On a donc vu certaines des motivations qui font de l'étude des plasmas denses un domaine très actif. On verra que les modèles théoriques utilisés pour décrire leur comportement sont souvent utilisés à la limite de leur domaine de validité, faute de mieux. Ceci est tout particulièrement vrai dans le régime dit de la *matière dense et tiède* - ou plus communément *Warm*

Dense Matter (WDM), un type particulier de plasma dense qui sera décrit en détail dans le chapitre suivant.

Les mesures en laboratoire dans ce régime ont donc un double rôle :

- Valider les modèles théoriques utilisés : ainsi qu'il en va partout ailleurs en physique, les modèles théoriques construits pour décrire les phénomènes d'intérêt doivent être confirmés par l'expérience.
- Obtenir des données expérimentales pour des applications mentionnées précédemment (mesure d'un point d'équation d'état, diagnostic des conditions du combustible sur des expériences d'implosion...)

Une de ces techniques de mesure, la *diffusion Thomson X* (DTX), relativement récente et prometteuse, fait l'objet de cette thèse. Une de ses spécificités est que l'interprétation des données expérimentales qu'elle fournit nécessite un modèle théorique au préalable. On voit donc bien que dans ce cas les deux points mentionnés ci-dessus sont intriqués.

Objectifs de la thèse

L'objectif principal de ce travail est d'examiner les fondements sur lesquels reposent l'utilisation de la DTX comme diagnostic pour la WDM. Il se compose essentiellement de trois parties :

- Un examen des modèles théoriques utilisés pour la description d'une part du plasma WDM, et d'autre part du processus de diffusion, et des limites de validité associées.
- Une partie expérimentale. Des expériences de DTX ont été menées sur différentes installations laser dans les régimes d'intérêt.
- Une partie numérique et d'analyse des résultats. Un code a été développé pour permettre l'analyse des spectres DTX expérimentaux à partir de différents modèles.

L'ambition est ainsi d'apporter un regard critique sur cette technique prometteuse qui est d'ores et déjà utilisée comme diagnostic dans nombre d'expériences, et d'affiner l'interprétation des données qu'elle fournit.

Plan de la Thèse

L'organisation du manuscrit est la suivante :

Dans le premier chapitre, nous évoquerons plus en détail le problème des diagnostics plasmas, la place qu'occupe la DTX et l'état de l'art. Seront aussi examinés les problèmes spécifiques posées par la WDM pour le diagnostic.

Dans le chapitre 2, le problème de la description théorique de la diffusion dans un plasma dense sera abordé. Le calcul de la section efficace de diffusion sera développé en portant une attention particulière aux hypothèses effectuées. Nous évoquerons également les fondements des différents modèles de matière utilisés, du plasma idéal au modèle *ab initio* en passant par les modèles d'atome moyen. Ces modèles sont employés pour extraire des quantités fondamentales pour le calcul de la section efficace.

Dans le troisième chapitre, nous nous tournerons vers l'aspect expérimental de ce travail. Parmi les différentes expériences réalisées, les deux que nous décrirons sont des expériences de DTX sur des cibles choquées par laser, et qui portent comme nous le verrons sur différents aspects de cette technique. L'une sur du lithium, est résolue en énergie, l'autre sur des cibles de plastique est résolue en angle. Pour chacune d'entre elles, les techniques expérimentales mises en oeuvre seront expliquées en détail.

Au cours du chapitre 4, l'analyse des résultats expérimentaux obtenus en utilisant différents modèles présentés dans le chapitre 2 sera présentée. Les résultats obtenus pour chaque cas de figure seront comparés et discutés. Une analyse quantitative de l'influence du modèle utilisé pour interpréter les résultats sera menée.

Une dernière partie, enfin, tirera un bilan de ce travail et les conclusions générales. Les perspectives relatives aux travaux futurs seront exposées.

Chapitre

1

Cadre de l'étude

Sommaire

1.1	Matière dense et tiède	2
1.1.1	Paramètres plasma	2
1.1.2	Warm Dense Matter	5
1.1.3	Intérêt et défis	5
1.2	Diffusion Thomson X	8
1.2.1	Principe	8
1.2.1.1	Régime de diffusion	10
1.2.1.2	Diffusion sur un ensemble de particules identiques . . .	13
1.2.1.3	Diffusion sur un plasma	15
1.2.1.4	Les limites de cette description qualitative	16
1.2.1.5	Terminologie	16
1.2.2	Pertinence pour la WDM	17
1.2.3	État de l'art	19
1.2.3.1	Diffusion Thomson à basse énergie (radio-visible-UV) .	19
1.2.3.2	Diffusion Thomson dans le domaine X	19

1.1 Matière dense et tiède

1.1.1 Paramètres plasma

Paramètre de couplage On considère un plasma (défini comme un ensemble de particules chargées interagissant via des forces coulombiennes) comme idéal si l'énergie cinétique moyenne par particule \mathcal{K} est supérieure à l'énergie moyenne d'interaction coulombienne par particule \mathcal{V} .

En effet si l'on considère un plasma gazeux à basse densité, on peut adopter une description de type gaz parfait : les particules du plasma passent la majorité de leur temps sur des trajectoires balistiques entre deux collisions et les interactions à plusieurs particules sont rares¹. A mesure que l'on comprime un tel plasma, le temps moyen entre deux collisions diminue jusqu'à devenir comparable au temps d'interaction. Parallèlement, l'énergie moyenne d'interaction coulombienne augmente pour devenir comparable puis supérieure à l'énergie cinétique moyenne. La dynamique du système change alors radicalement, l'effet des interactions à plusieurs corps devient important et le plasma est dit non-idéal.

Le critère d'idéalité peut donc s'écrire

$$\Gamma \equiv \frac{\mathcal{V}}{\mathcal{K}} \ll 1 \quad (1.1)$$

Le paramètre sans dimension Γ est communément appelé *paramètre de couplage*.

Examinons l'expression de \mathcal{V} et \mathcal{K} , afin de définir les frontières entre les différents régimes existants.

Énergie d'interaction coulombienne moyenne Pour un plasma comportant N particules de charge q_i l'énergie coulombienne moyenne par particule s'écrit

$$\mathcal{V} = \frac{1}{N} \sum_{i < j} \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \quad (1.2)$$

où r_{ij} est la distance entre les deux particules indicées i et j .

1. Il faut cependant mentionner les limites de cette analogie : la thermodynamique du plasma faiblement couplé n'est pas celle du gaz parfait du fait du caractère à longue portée de l'interaction coulombienne. Les particules se meuvent dans le champ autocohérent généré par l'ensemble des autres particules, ce qui entraîne la divergence de certaines quantités thermodynamiques [1] (libre parcours moyen, second coefficient du Viriel...) si l'on ne prend pas en compte les effets d'écrantage.

Afin de simplifier les expressions obtenues dans ce paragraphe tout en gardant une signification physique claire pour les grandeurs exprimées, nous considérerons désormais un plasma constitué de N particules d'une seule espèce de charge q et de masse m , occupant un volume total V , de densité numérique moyenne $n = N/V$. On parle couramment d'OCP, de l'anglais *one component plasma*².

On peut vérifier que pour N particules homogènement réparties dans un volume V , on a

$$\frac{1}{N} \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}} \underset{N \rightarrow \infty}{=} \frac{1}{r_{WS}} \quad (1.3)$$

où r_{WS} , appelé rayon de Wigner-Seitz, est le rayon de la sphère contenant en moyenne une seule particule : $\frac{4\pi}{3} r_{WS}^3 = \frac{V}{N} = n^{-1}$. On a ainsi pour un OCP

$$\mathcal{V} = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r_{WS}} \propto n^{1/3} \quad (1.4)$$

Énergie cinétique moyenne En ce qui concerne l'évaluation de l'énergie cinétique moyenne par particule, il convient de distinguer deux cas, suivant que le plasma obéit à une statistique classique ou quantique. Dans le premier cas, elle est par définition, proportionnelle à la température

$$\mathcal{K} = \mathcal{K}_c = \frac{3}{2} k_B T \quad (1.5)$$

dans le second il s'agit de l'énergie de Fermi³ :

$$\mathcal{K} = \mathcal{K}_q \simeq E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3} \quad (1.6)$$

On peut donc définir deux expressions pour le paramètre de couplage : l'une valable pour les plasmas classiques, l'autre pour le cas quantique :

2. Il faudrait en toute rigueur introduire un fond continu neutralisant de densité de charge égale et opposée à la densité de charge moyenne de la population considérée. Nous passerons sous silence dans ce chapitre de généralités une telle complication, qui n'apporte pas d'éclairage du point de vue de la physique.

3. On a $\mathcal{K}_q = \frac{3}{5} E_F$ à $T = 0$ K. Pour $T > 0$ K, l'énergie cinétique est obtenue pour un gaz d'électrons libres non relativistes en intégrant la fonction de distribution de Fermi-Dirac : $\mathcal{K} = \frac{1}{N} \int_0^\infty \epsilon f_{FD}(\epsilon) d\epsilon$ ($f_{FD}(\epsilon) = g(\epsilon) \left(e^{\frac{\epsilon - E_F}{k_B T}} + 1 \right)^{-1}$, $g(\epsilon)$ est la dégénérescence de l'état d'énergie ϵ et E_F tel que $\int_0^\infty f_{FD}(\epsilon) d\epsilon = 1$). On montre cependant que la transition classique-dégénéré est abrupte, ainsi dès que $\Lambda \gtrsim 1$ (voir paragraphe suivant) la relation à $T = 0$ K est une bonne approximation. Nous ne cherchons de plus ici que des ordres de grandeur pour caractériser les différents régimes.

$$\begin{aligned}\Gamma_C &= \frac{\mathcal{V}}{\mathcal{K}_\mathcal{E}} \propto T^{-1} n^{1/3} \\ \Gamma_Q &= \frac{\mathcal{V}}{\mathcal{K}_\mathcal{Q}} \propto n^{-1/3}\end{aligned}\quad (1.7)$$

En considérant la dépendance en densité et température de ces grandeurs, on constate que dans le cas d'une statistique classique un plasma sera idéal pourvu qu'il soit assez chaud ou suffisamment dilué. En revanche du fait de la dépendance en $n^{2/3}$ de l'énergie de Fermi, un plasma obéissant à la statistique de Fermi-Dirac sera paradoxalement d'autant plus idéal qu'il sera dense. La dépendance en température a alors disparu.

Comme Γ_Q ne dépend que de la densité, on définit souvent un autre paramètre sans dimension qui lui est simplement proportionnel et qui correspond au rayon de Wigner-Seitz en unité de rayon de Bohr $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} \simeq 53 \text{ pm}$:

$$r_s \equiv \frac{r_{WS}}{a_0} \propto \Gamma_Q. \quad (1.8)$$

Le critère d'idéalité dans ce cas est donc $r_s \ll 1$.

Paramètre de dégénérescence Reste donc à déterminer le critère de validité de chacune de ces formules. Celui-ci est donné par un autre paramètre sans dimension Λ , appelé *paramètre de dégénérescence*, mesurant l'importance des effets quantiques dans le plasma. On sait que l'on ne peut plus considérer une population de particules comme classiques lorsque les fonctions d'onde des particules individuelles commencent à se recouvrir spatialement. Pour une population de particules à la température T , il s'agit donc de comparer la distance interparticulaire moyenne r_{WS} à la longueur d'onde thermique de de Broglie λ_{dB} , et l'on définit

$$\Lambda \equiv \frac{\lambda_{dB}}{r_{WS}}. \quad (1.9)$$

Les effets quantiques sont donc à considérer lorsque $\Lambda \gtrsim 1$, alors que l'on peut considérer le plasma comme classique si $\Lambda \ll 1$. En remplaçant dans l'expression précédente la longueur d'onde thermique de de Broglie par son expression $\lambda_{dB} = \frac{\hbar}{\sqrt{2\pi m k_B T}}$, on trouve sans surprise que le paramètre de dégénérescence est lié au rapport de l'énergie cinétique thermique à l'énergie de Fermi :

$$\Lambda \propto \sqrt{\frac{\mathcal{K}_\mathcal{Q}}{\mathcal{K}_\mathcal{E}}} \quad (1.10)$$

Paramètre relativiste Afin de compléter cette image, on peut également introduire un dernier paramètre sans dimension ϵ , défini comme le rapport de l'énergie cinétique moyenne par particule \mathcal{K} à l'énergie de masse d'une particule $E_0 = mc^2$ pour quantifier le caractère relativiste du plasma. Les effets relativistes sont à prendre en compte si

$$\epsilon = \frac{\mathcal{K}}{E_0} > 1 \quad (1.11)$$

On aura par conséquent, de même que dans le cas du paramètre de couplage Γ , deux expressions, ϵ_Q ou ϵ_C selon que le plasma est dégénéré ou pas. Dans les conditions qui nous intéresseront par la suite on aura toujours $\epsilon \ll 1$ et nous ne considérerons jamais d'effets relativistes.

On pourra trouver une bonne discussion sur les paramètres plasma et leur signification dans [10].

1.1.2 Warm Dense Matter

Utilisons ces paramètres plasma pour localiser les différents régimes existant dans un plan densité-température. La figure 1.1 représente un tel plan en échelle logarithmique. On y distingue plusieurs zones, séparées des droites représentant le lieu des points $\Lambda = 1$, $\Gamma_Q = 1$, $\Gamma_C = 1$, $\epsilon_Q = 1$ et $\epsilon_C = 1$. On constate que le plan est divisé en 2 parties par la droite $\Lambda = 1$ correspondant aux plasmas classiques ou dégénérés. La région triangulaire des plasmas non-idéaux pour lesquels $\mathcal{V} > \mathcal{K}$, se trouve à cheval sur cette séparation.

Le domaine WDM est par définition la partie la plus chaude de cette région, avec des températures de l'ordre de $T \sim 10^0 - 10^2$ eV et des densités massiques $\rho \sim 10^{-1} - 10^1 \rho_0$, ρ_0 étant la densité du solide.

1.1.3 Intérêt et défis

Le figure 1.2 est identique à la figure 1.1, où les différents régimes plasma ont été remplacés par les zones occupées par des échantillons de plasmas naturels ou artificiels. On retrouve le fait que la très grande majorité du diagramme qui couvre pourtant 10 ordres de grandeur en température et 30 en densité, est occupée par différents phénomènes astrophysiques, les gaz neutres et les solides. Ces derniers sont circonscrits aux températures inférieures à quelques milliers de kelvins et aux densités inférieures à celles des solides (typiquement quelques 10^{22} atomes par centimètre cube donc quelques 10^{23} électrons par centimètre cube au maximum dans les métaux).

Ce qu'il faut ici retenir, c'est la position intermédiaire du régime WDM entre les solides et les plasmas denses correspondant aux conditions de la fusion par confinement inertiel. Par

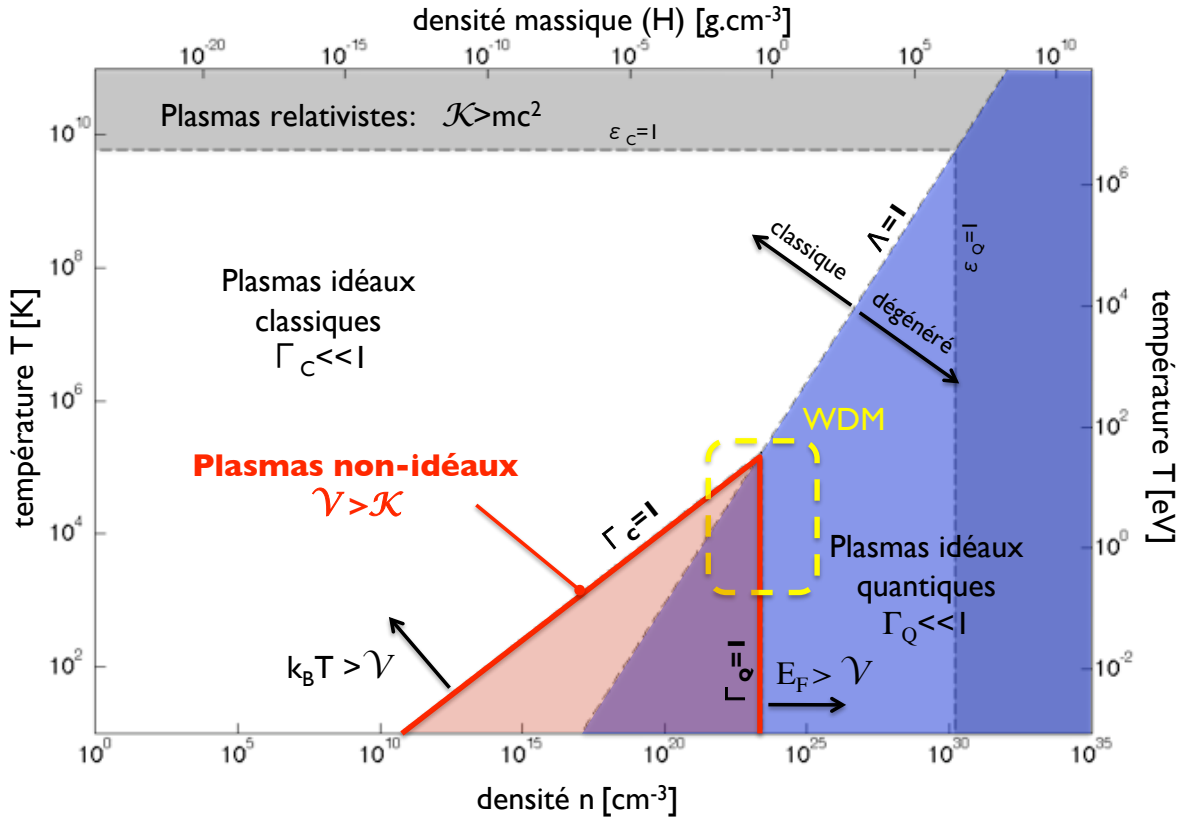


FIGURE 1.1 – Diagramme température-densité d'un OCP. Les différents régimes sont délimités par les valeurs des paramètres plasmas sans dimension. L'échelle de densité massique est obtenue en supposant un plasma d'hydrogène entièrement ionisé (ce qui n'est pas vrai à basse densité et température).

ailleurs, si l'isentrope solaire est trop chaude pour relever du domaine WDM, on voit que les astres compacts plus froids telles que les géantes gazeuses et les naines brunes recoupent très largement cette région.

Après avoir défini le régime WDM et constaté comme indiqué en introduction son importance dans les thématiques de FCI et les astres denses et froids, tentons d'expliquer en quoi son étude représente un véritable défi, tant du point de vue expérimental que sur le plan théorique.

Il est assez aisé de comprendre pourquoi cette région du diagramme de phase pose des problèmes pour être décrite de manière unifiée. La figure 1.1 met bien en évidence la position d'interface occupée par cet état de la matière : la zone en question est délimitée vers les basses températures par les solides et les liquides, vers les hautes températures et basses densités par les plasmas classiques idéaux, vers les hautes densités par les liquides de Fermi idéaux

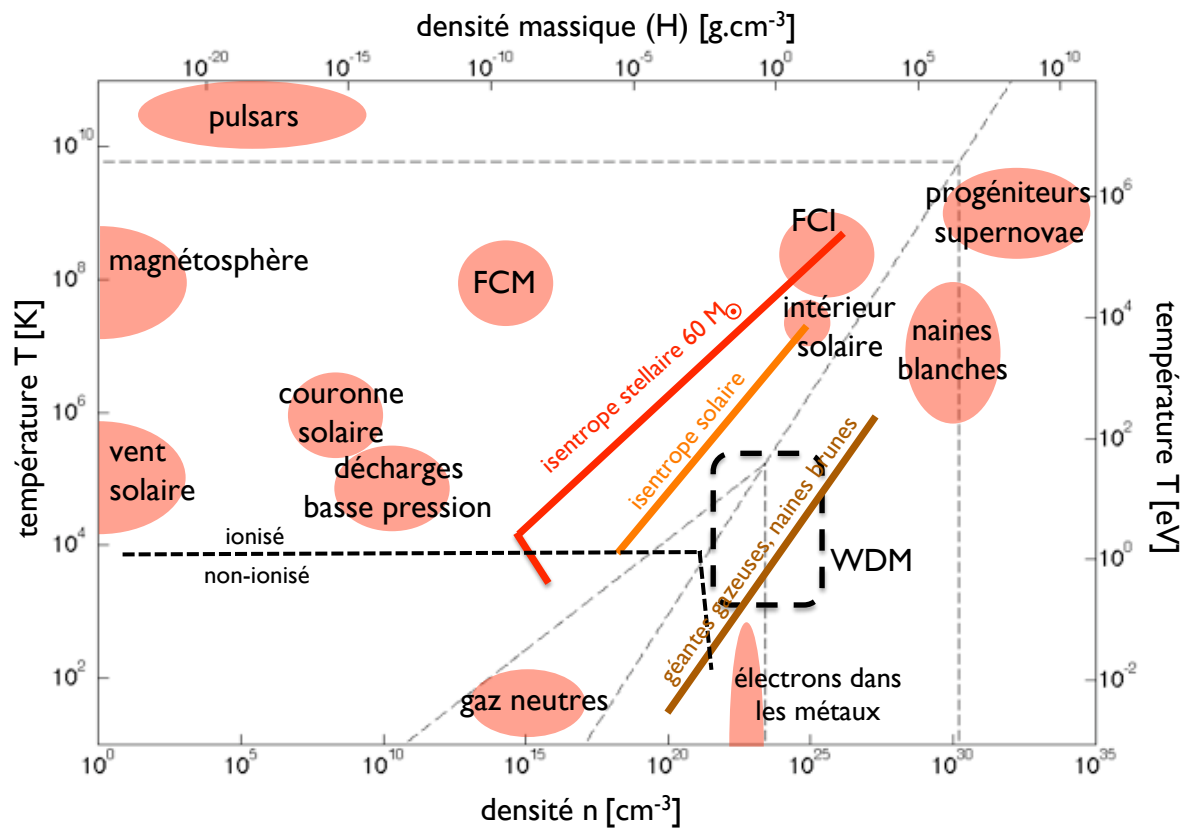


FIGURE 1.2 – Quelques plasmas naturels ou artificiels et la place du domaine WDM.

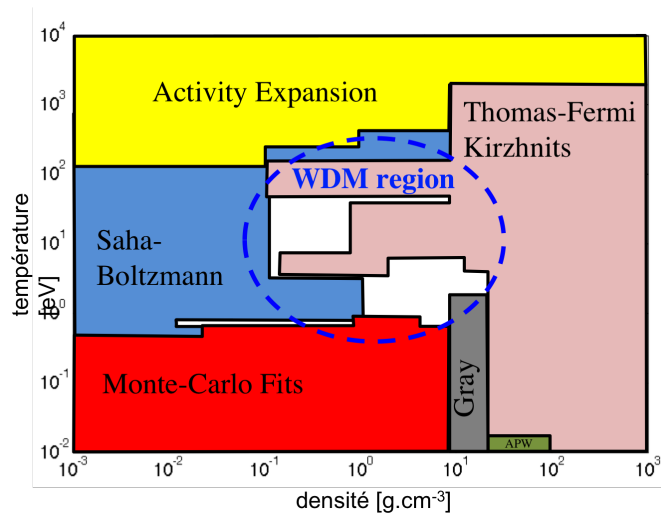


FIGURE 1.3 – Modèles employés dans la base de données SESAME pour l'équation d'état du cuivre dans le plan densité-température, ainsi que la région correspondant à la WDM.

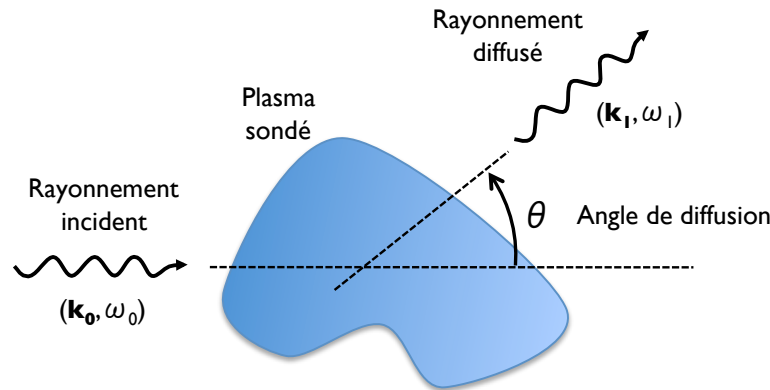


FIGURE 1.4 – Schéma de principe d'une expérience de diffusion.

(en ce qui concerne les électrons - les ions du fait de leur masse importante resteront classiques) et vers les basses températures et faibles densités les plasmas fortement non idéaux.

Ces difficultés apparaissent clairement à l'examen de la figure 1.3, qui fait figurer toujours dans le même plan température-densité, les différents modèles utilisés pour établir la base de données d'équation d'état SESAME [11] pour le cuivre. On constate bien que les limites de validité de la plupart des modèles employés sont dans la région qui nous intéresse. Les points d'équation d'état pour les conditions correspondant aux zones blanches sont obtenus par interpolation, faute de mieux.

On comprend alors pourquoi les outils théoriques sont empruntés tantôt à la physique de la matière condensée, théorie des liquides ou des solides, tantôt à la physique des plasmas.

1.2 Diffusion Thomson X

Nous n'aborderons pas dans cette partie les calculs détaillés liés à la DTX, auxquels est consacré le chapitre suivant. L'objectif est ici d'exposer simplement le principe de la diffusion Thomson, les grandeurs plasma que l'on peut espérer mesurer par ce moyen, et l'intérêt d'utiliser des sondes X lorsque l'on s'intéresse au régime WDM. Seront également présentés les résultats expérimentaux les plus notables obtenus à ce jour.

1.2.1 Principe

Le principe d'une expérience de diffusion est illustré sur la figure 1.4. Un rayonnement sonde (mais les conclusions de cette partie s'appliquent également à un faisceau de particules)

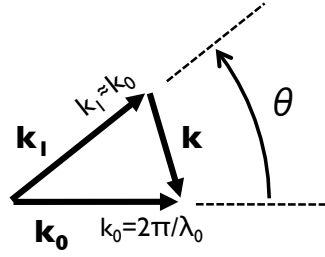


FIGURE 1.5 – Conservation de l'impulsion.

idéalement monochromatique et caractérisé par un vecteur d'onde et une fréquence angulaire (\mathbf{k}_0, ω_0) est incident sur un volume de plasma à sonder. Le rayonnement diffusé est caractérisé par (\mathbf{k}_1, ω_1) . L'angle θ formé entre les vecteurs d'onde initial et final est l'*angle de diffusion*. On a en général $\omega_1 \neq \omega_0$, soit à cause du décalage Doppler lié au mouvement du diffuseur, soit du fait du caractère non élastique de l'interaction (effet Compton, photoexcitation d'un électron lié, ...).

Il faut dès maintenant préciser que l'ensemble des méthodes utilisées ici pour l'étude de la diffusion ne sont valables que si le rayonnement incident n'interagit que *faiblement* avec le plasma. Autrement dit, le faisceau sonde ne modifie pas notablement l'état de l'échantillon à sonder, ce qui est cohérent avec le fait que l'on projette de mesurer des grandeurs liées à l'état de l'échantillon. Ceci implique entre autres que le plasma est quasiment transparent au faisceau sonde, que les diffusions multiples sont improbables, et que les interactions sont quasi-élastiques. Cette dernière affirmation se traduit par le fait que dans la relation exprimant la conservation de l'énergie au cours de la diffusion, $\omega_0 = \omega + \omega_1$, on a

$$\omega \ll \omega_0 \text{ donc } \omega_1 \approx \omega_0 \quad (1.12)$$

L'énergie cédée au diffuseur par le photon incident $E = \hbar\omega$, est très faible par rapport à son énergie initiale. De façon équivalente, puisque $|\mathbf{k}_i| = \frac{2\pi}{\lambda_i} = \frac{\omega_i}{c}$, $i = 1, 0$, on a :

$$|\mathbf{k}_0| \approx |\mathbf{k}_1| \quad (1.13)$$

Cette dernière équation implique une relation univoque entre la quantité de mouvement cédée au diffuseur $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} = \hbar(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_1)$ et l'angle de diffusion θ (voir figure 1.5)

$$k = 2k_0 \sin(\theta/2) = \frac{4\pi}{\lambda_0} \sin(\theta/2) \quad (1.14)$$

Les deux grandeurs \mathbf{k}_1 et ω_1 caractérisant le rayonnement diffusé fournissent donc deux variables expérimentales pour l'analyser : l'angle de diffusion θ et le décalage en énergie ω du

photon sortant. Par conséquent les deux types de signaux expérimentaux auxquels on s'intéressera sont des *spectres résolus en énergie* $I(\omega)$ et des *spectres résolus en angle* $I(\theta)$.

Notons que l'on pourrait en théorie augmenter la quantité d'information en s'intéressant également à la polarisation étant donné que l'état complet du photon est décrit par ⁴ $(\mathbf{k}, \omega, \hat{\mathbf{e}})$ où $\hat{\mathbf{e}}$ est la direction du champ électrique. Des expériences récentes [12] de spectroscopie d'émission utilisent en effet la polarisation des raies d'émission d'un plasma [13] pour analyser l'anisotropie de la fonction de distribution de vitesse de la population d'électrons chauds dans le cadre des études sur l'allumeur rapide. Dans le cas de la diffusion cependant, le signal mesuré est souvent trop faible par rapport au niveau de bruit pour envisager de le séparer encore en ses deux composantes de polarisation. Par ailleurs aucune étude n'a mis en lumière le bénéfice que l'on pourrait retirer d'une telle mesure.

Plongées dans le champ du faisceau incident, les particules chargées individuelles du milieu sont accélérées et rayonnent. Rappelons que la puissance rayonnée P_r par une particule de charge e subissant l'accélération γ s'écrit $P_r = 2e^2\gamma^2/3c^3$. Soumis à la même force, l'amplitude des accélérations subies par les deux types de particules chargées du plasma, électrons et noyaux atomiques, sera donc dans le rapport de leurs masses $m_n/m_e \geq 10^3$. Le rapport des puissances rayonnées sera quant à lui proportionnel au carré de ce facteur $P_r^e/P_r^n > 10^6$, et l'on pourra toujours considérer que ce sont les électrons qui diffusent. La dynamique de ces électrons détermine les caractéristiques du rayonnement qu'ils émettent. Ainsi à l'échelle du plasma, les fluctuations de charge liées au mouvement des électrons sont la variable pertinente pour décrire la diffusion.

1.2.1.1 Régime de diffusion

Comme on l'a dit, le rayonnement est diffusé par les fluctuations de charge dans le plasma sondé. Ces fluctuations peuvent être de deux types :

- De nature *particulaire*, ou individuelles (correspondant au mouvement thermique des particules).
- De nature *collective* (les ondes de Langmuir, par exemple, correspondent à des modes d'oscillation collectifs du plasma à sa fréquence de résonance ω_p).

Bien entendu les deux types de fluctuation coexistent, mais possèdent des échelles de temps et de longueur différentes. Il s'agira pour les exemples précédents respectivement de la fréquence de collision ν_c et du libre parcours moyen l_c en ce qui concerne le mouvement thermique, de la fréquence plasma ω_p et de la longueur $\frac{v_{th}}{\omega_p}$ pour les ondes électrostatiques.

On a l'habitude de définir pour une configuration expérimentale donnée, un paramètre sans dimension α appelé *paramètre de diffusion*, quantifiant la nature collective ou non des fluctuations à l'origine de la diffusion. Par définition ⁵

4. Notation : l'emploi d'un caractère gras surmonté d'un chapeau désigne un vecteur unité.

5. Les indices choisis pour λ_p et λ_s se réfèrent respectivement à *probe* et *screening*, afin d'essayer d'adopter la notation la plus répandue, et non *plasma* et *sonde*, ce qui aurait la signification inverse.

$$\alpha \equiv \frac{\text{échelle de longueur caractéristique de la sonde}}{\text{échelle de longueur caractéristique du milieu}} = \frac{\lambda_P}{\lambda_S} \quad (1.15)$$

Essayons de préciser la signification de ces dimensions.

Échelle de longueur de la sonde λ_P : La longueur au numérateur dans 1.15, caractéristique de la sonde, correspond à la longueur d'onde de la perturbation du milieu c'est-à-dire $\lambda_P = \frac{2\pi}{k}$, où $k = |\mathbf{k}|$ est la norme de l'impulsion cédée au diffuseur. D'après l'équation 1.14 :

$$\lambda_P = \frac{\lambda_0}{2 \sin(\theta/2)} \quad (1.16)$$

λ_P correspond à la résolution spatiale avec laquelle on sonde le plasma. Elle dépend de la géométrie choisie et de l'énergie du rayonnement incident, et est à ce titre une variable expérimentale importante.

Échelle de longueur du milieu diffuseur λ_S : Les deux types de réponse du plasma, particulaire ou collective, sont déterminées par la comparaison de λ_P à une échelle de longueur caractéristique du plasma. Afin d'estimer cette longueur, reprenons l'analyse qualitative tirée de [14].

Nous supposons toujours un OCP, neutralisé par un fond continu rigide. Si l'on considère un sous-volume δV de ce plasma, la probabilité $P(N)$ de trouver N particules dans δV est une gaussienne centrée autour de la valeur moyenne $\bar{N} = n\delta V$ (à la condition $N - \bar{N} \ll \bar{N}$) [15].

$$P(N) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\bar{N}}} \exp \left[-\frac{(N - \bar{N})^2}{2\bar{N}} \right] \quad (1.17)$$

L'expression 1.17 ne prend pas en compte l'effet des forces coulombiennes entre les particules : elle est celle qui s'appliquerait à un gaz parfait. Elle décrit des fluctuations de nature uniquement statistiques. La correction à apporter à P_N pour tenir compte des interactions entre particules chargées peut être estimée à partir de l'énergie coulombienne V_N liée aux fluctuations du nombre de particules $(N - \bar{N})$ dans le volume δV . En suivant le même raisonnement que dans le paragraphe 1.1.1, on obtient

$$V_N = \frac{e^2 (N - \bar{N})^2}{4\pi\epsilon_0 r_{\delta V}} \quad (1.18)$$

où $r_{\delta V}$ est le rayon de la sphère de volume δV , c'est-à-dire $4\pi r_{\delta V}^3/3 = \delta V$. Dans l'ensemble canonique (où l'état thermodynamique est paramétré par le nombre de particules N , le volume V et la température $T = 1/\beta k_B$), la probabilité de trouver le système dans la configuration microscopique α est $P(V, \beta, N; \alpha) = \exp(-\beta \mathcal{H}(\alpha)) / \mathcal{Q}(V, \beta, N)$ où $\mathcal{H}(\alpha)$ est l'hamiltonien du système dans la configuration α , et $\mathcal{Q}(V, \beta, N)$ la fonction de partition correspondant aux paramètres thermodynamiques. Si l'on ajoute un terme V_N à l'hamiltonien pour tenir compte des interactions, on aura un facteur multiplicatif supplémentaire $\exp(-\beta V_N)$ dans l'expression de la probabilité élémentaire et l'on obtient

$$P(N) \propto \exp \left[-\frac{(N - \bar{N})^2}{2\bar{N}} \left(1 + \frac{2\bar{N}e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{\delta V} k_B T} \right) \right] \quad (1.19)$$

La correction coulombienne à l'expression purement statistique des fluctuations dépend donc de la comparaison du terme $\frac{2\bar{N}e^2}{4\pi\epsilon_0 k_B T}$ par rapport à l'unité. En substituant l'expression de $\bar{N} = \delta V$, on fait apparaître le rapport de la longueur de Debye $\lambda_D = \left(\frac{\epsilon_0 k_B T}{ne^2} \right)^{1/2}$ à la taille du sous-volume considéré

$$\frac{2\bar{N}e^2}{4\pi\epsilon_0 k_B T} = \frac{2}{3} r_{\delta V}^2 \frac{ne^2}{\epsilon_0 k_B T} \sim \frac{r_{\delta V}^2}{\lambda_D^2} \quad (1.20)$$

La longueur caractéristique recherchée est donc également la *longueur d'écrantage*, distance sur laquelle la polarisation induite dans le plasma par un champ extérieur annule celui-ci.

Notons que l'on s'est ici intéressé à un plasma maxwellien, mais l'on peut tenir le même raisonnement dans un plasma dégénéré en remplaçant $k_B T$ par l'énergie de Fermi E_F . La longueur de Debye est alors remplacée par la *longueur de Thomas-Fermi* λ_{TF} qui s'écrit

$$\lambda_{TF} = \sqrt{\frac{\epsilon_0 E_F}{6\pi n e^2}} \quad (1.21)$$

La conclusion de ces quelques lignes est que lorsque l'on s'intéresse à des distances caractéristiques plus petites que la longueur d'écrantage λ_S ($\lambda_S = \lambda_D$ ou λ_{TF}), les fluctuations de densité d'origine coulombienne sont négligeables par rapport à celles d'origine statistique, et le plasma possède un comportement particulier. Dans le cas inverse le terme coulombien est prépondérant, les écarts à la densité moyenne n sont moins probables et le plasma répond plutôt comme un milieu continu, un fluide chargé.

Paramètre α Ayant défini les deux longueurs caractéristiques, on peut donc exprimer le comportement du paramètre de diffusion en fonction des paramètres plasma. Cette expression dépend de la valeur du paramètre de dégénérescence Λ :

$$\begin{aligned} \text{pour } \Lambda < 1, \quad \lambda_S = \lambda_D \quad \text{et} \quad \alpha &= \alpha_C \propto n^{1/2} T^{-1/2} \\ \text{pour } \Lambda > 1, \quad \lambda_S = \lambda_{TF} \quad \text{et} \quad \alpha &= \alpha_Q \propto n^{1/6}. \end{aligned} \quad (1.22)$$

1.2.1.2 Diffusion sur un ensemble de particules identiques

Ayant défini ce que l'on entend par régime de diffusion, analysons maintenant les signaux expérimentaux que l'on peut attendre dans les différents cas de figure, ainsi que les grandeurs que l'on peut espérer mesurer dans chacune des configurations.

En régime particulaire Dans ce régime, la réponse d'un ensemble de particules est la somme des réponses individuelles. Considérons pour le moment la dispersion en fréquence d'un rayonnement incident monochromatique par le décalage Doppler. Selon nos hypothèses de régime de diffusion faible, chaque photon diffusé ne l'est qu'une seule fois et la fréquence après diffusion classique sur une particule chargée de vitesse \mathbf{v} (avec $|\mathbf{v}| \ll c$) est :

$$\omega_1 = \omega_0 + \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{v} \quad (1.23)$$

Si l'on suppose une distribution maxwellienne de vitesses à la température T ($f(v) = n / (v_{th} \sqrt{\pi})^3 \exp(-v^2 / v_{th}^2)$, $v_{th}^2 = 2k_B T / m$), le nombre de particules δN telles que $\omega < \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{v} < \omega + \delta\omega$ est

$$\delta N = \frac{2\pi k_B T}{m} \delta\omega \exp\left(-\frac{m(\omega / k_1)^2}{2k_B T}\right) \quad (1.24)$$

L'intensité du signal diffusé $I(\omega)$ d'énergie comprise entre ω et $\omega + \delta\omega$ étant proportionnelle à δN , le spectre en énergie est également une maxwellienne, de largeur proportionnelle à $\sqrt{T/m}$. Le principe est identique si la distribution de vitesse gaussienne de Maxwell est remplacée par une distribution parabolique de Fermi-Dirac. Le spectre alors obtenu, appelé spectre à une particule, est représenté sur la figure 1.6. Le fait que le signal obtenu ne dépende pas de k est caractéristique du régime particulaire (et du fait que la distribution est isotrope). Pour une distribution de vitesse quelconque, le signal diffusé possède l'allure de la projection de la fonction de distribution de vitesse sur la direction de diffusion. Pour un plasma à l'équilibre thermodynamique, la résolution spectrale de ce signal donne donc accès à la température du plasma.

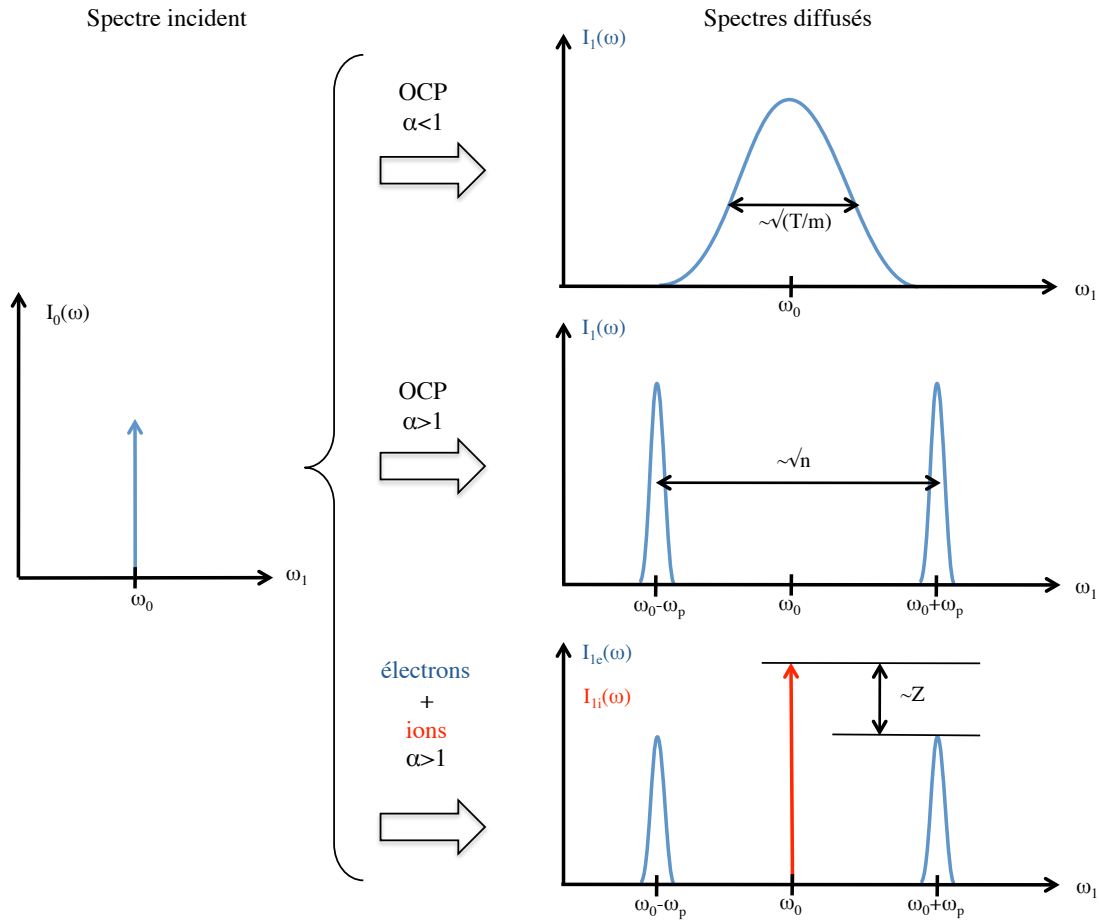


FIGURE 1.6 – Allure de spectres diffusés dans différents cas simples idéaux. Principe de la détermination de quelques grandeurs physiques.

En régime collectif Comme on l'a vu précédemment, si le paramètre de diffusion $\alpha \gtrsim 1$, le plasma possède une réponse de type fluide et ce sont les modes collectifs qui diffusent le rayonnement. Supposons qu'il s'agisse d'ondes de Langmuir dont la relation de dispersion bien connue est :

$$\omega^2 = \omega_p^2 + \frac{3}{2} (k v_{th})^2 \quad (1.25)$$

Le diffusion sur les ondes plasma nous donnera donc, dans ce cas, un spectre dit collectif, doté de deux composantes aux fréquences $\omega = \pm \sqrt{\omega_p^2 + \left(\frac{v_{th}}{k}\right)^2} \simeq \pm \omega_p$ (dites composantes *Stokes* et *anti-Stokes*) tel que représenté sur la deuxième partie de la figure 1.6.

En remarquant que l'expression de la fréquence de résonance plasma

$$\omega_p = \sqrt{\frac{ne^2}{\epsilon_0 m}} \quad (1.26)$$

fait apparaître la densité, la mesure de la position de ces résonances par rapport au rayonnement incident constitue donc une mesure de la densité de particules.

1.2.1.3 Diffusion sur un plasma

Considérons l'image naïve d'un plasma constitué d'un mélange d'ions de charge Ze de densité n_i et d'électrons de charge e et de densité $n_e = Zn_i$. On suppose de plus que ces deux populations ne se 'voient' pas (le système électron-ion est faiblement couplé). Les considérations du paragraphe précédent s'appliquent donc également aux deux populations. Néanmoins du fait de la grande différence de masse individuelle entre électrons et ions, on aura systématiquement

$$\frac{T}{m_e} \gg \frac{T}{m_i} \text{ et } \omega_{pe} \gg \omega_{pi} \quad (1.27)$$

La partie du spectre diffusé associée aux ions sera toujours 'tassée' autour de $\omega = 0$ par rapport à celle relative aux électrons. La résolution des spectromètres actuels ne permet d'ailleurs pas d'accéder expérimentalement à la partie ionique du spectre.

Le signal lié aux ions sera donc dans la pratique équivalent à une diffusion élastique et se signalera par un pic à $\omega = 0$ (on parle de pic de Rayleigh, en référence à la diffusion de Rayleigh en régime élastique). Le dernier spectre de la figure 1.6 schématise l'allure d'un tel spectre, dans le cas où la réponse électronique est collective ($\alpha \gtrsim 1$).

L'intensité du signal diffusé par chaque population reste proportionnelle au nombre de diffuseurs. Par conséquent le rapport des intensités totales associées aux électrons et aux ions

$$\frac{I_e}{I_i} \propto \frac{n_e}{n_i} = Z \quad (1.28)$$

est directement proportionnel au degré d'ionisation Z du plasma. Un tel spectre peut donc constituer une mesure de ce paramètre.

1.2.1.4 Les limites de cette description qualitative

On vient de voir que les spectres attendus dans diverses configurations peuvent constituer une mesure de paramètres plasma importants : n , T , Z . Néanmoins le modèle que nous avons adopté ici du plasma est bien entendu excessivement naïf :

- Les ions ne possèdent pas tous le même état de charge mais possèdent une certaine distribution dépendant de la température, conformément à l'équation de Saha, si l'équilibre thermodynamique local est atteint.
- La séparation du plasma en électrons libres et en ions n'est pas évidente. Un plasma peut présenter des électrons du continuum très résonnants et principalement localisés autour d'un ion sans pour autant être liés. D'autres électrons peuvent au contraire être liés à plusieurs ions dans des états de types moléculaires.
- Les deux points précédents impliquent que la définition de l'ionisation moyenne, en général notée Z^* , est très délicate. Nous reviendrons sur ce point.
- Par conséquent les électrons et les ions ne peuvent bien entendu pas être considérés comme deux systèmes non couplés. Les phénomènes d'écrantage sont liés à des déplacements de charge et jouent donc manifestement un rôle dans la diffusion.

Il n'existe pas à ce jour d'approche vraiment unifiée pour décrire la diffusion Thomson dans un plasma dense qui réponde à l'ensemble de ces problèmes. Les modèles existants seront décrits en détail dans le chapitre suivant.

1.2.1.5 Terminologie

Ouvrons ici une parenthèse à propos de la terminologie employée. La multiplicité des phénomènes associés à la diffusion de rayonnement ou de particules, étudiés au cours des décennies, a conduit à l'attribution de différents noms de baptême correspondant à des régimes particuliers. Les phénomènes qui nous intéressent relèvent de plusieurs de ces régimes traditionnels, il n'a pas donc semblé inutile de faire ici un bref rappel sur le vocabulaire couramment utilisé.

- Lorsque l'on s'intéresse à la diffusion élastique d'un photon sur une particule de dimensions faibles vis-à-vis de la longueur d'onde, on parle de *diffusion Rayleigh*. Sa section efficace est isotrope et varie comme λ^{-4} . C'est cette forte dépendance en λ qui diffuse plus efficacement la lumière solaire aux petites longueurs d'onde et qui donne sa couleur bleue à l'atmosphère vue du sol.
- Dans le même cas, mais pour des centres diffuseurs possédant une taille importante devant la longueur d'onde utilisée, on parle de *diffusion de Mie*. Sa section efficace est anisotrope et ne dépend pas de λ . Elle correspond à la diffusion de lumière visible par un milieu colloïdal, tel les nuages et qui les fait apparaître blancs.
- Lorsque l'on considère la diffusion d'un photon suffisamment énergétique pour qu'il cède une part notable de son énergie au diffuseur (effet Compton), on parle de *diffusion Compton*.

- Dans la limite des photons de basses énergies, la diffusion devient élastique et on parle de *diffusion Thomson*.
- Si au contraire, l'énergie du photon est très importante (grande devant la masse au repos de l'électron), on parle de diffusion de *Klein -Nishina*.
- On parle également de *diffusion Thomson* pour désigner la diffusion incohérente (c'est-à-dire en régime non collectif) sur une population de particules libres.
- Dans le cas de la diffusion inélastique de rayonnement dans un milieu, on parle de *diffusion Raman*. La diffusion cohérente sur des modes acoustiques du milieu est appelée *diffusion Brillouin*.
- On peut enfin citer la *diffusion de Rutherford*, qui correspond au cas d'une particule chargée diffusée par une autre.

Dans le cas de la diffusion de photons X sur un plasma dense, la diffusion sur les ions est élastique, celle sur les électrons libres inélastique, en régime collectif ou particulaire suivant la géométrie de l'expérience et les paramètres plasma. La terminologie à utiliser est donc *a priori* incertaine. L'usage récent [16] a consacré l'appellation *diffusion Thomson X*, que nous avons adoptée dans ce manuscrit.

1.2.2 Pertinence pour la WDM

Les considérations abordées au paragraphe précédent et en particulier les équations 1.22 sont illustrées sur la figure 1.7. Celle-ci reprend encore une fois le plan densité-température, avec le lieu des point $\alpha = \text{cte}$, pour les trois valeurs $\alpha = 0, 1$ (régime non-collectif), $\alpha = 0,3$ et $\alpha = 1$ (régime collectif) et pour deux valeurs de la longueur d'onde de la sonde : $\lambda_0 = 100 \text{ nm}$ (sonde ultra-violette $E_0 \sim 11 \text{ eV}$) et $\lambda_0 = 0,1 \text{ nm}$ (sonde X, $E_0 \sim 12 \text{ keV}$). Les courbes sont tracées en supposant une géométrie de rétrodiffusion, c'est-à-dire $\theta = 180^\circ$. Pour une configuration expérimentale donnée (longueur d'onde de la sonde et angle de diffusion fixés), on a une relation entre les conditions sondées (n_e, T) et le régime de diffusion α . On constate qu'avec des sondes X ($\lambda \sim 1 \text{ \AA}$) on peut sonder en géométrie de diffusion arrière le *domaine correspondant à la WDM dans des régimes de diffusion collectifs* ($\alpha \gtrsim 1$).

Afin de se placer dans un régime favorable à la diffusion, il faut comme on l'a précisé, vérifier que le plasma est quasi-transparent au rayonnement. Dans un plasma une condition nécessaire pour que cela soit réalisé est que la longueur d'onde utilisée doit être telle que la densité électronique attendue soit inférieure à la densité critique. Pour des matériaux de numéro atomique Z_A faible ou moyen, autour la densité du solide et avec une ionisation moyenne compatible avec une température de 10 eV , on trouve des densités électroniques de l'ordre de $5.10^{22-23} \text{ cm}^{-3}$. En prenant le fit de More [17] on obtient les degrés d'ionisation et donc les densités électroniques suivantes à $(\rho_0, 10 \text{ eV})$: $n_e^{Li^{1.4+}} = 6,25.10^{22} \text{ cm}^{-3}$, $n_e^{C^{2.2+}} = 2,50.10^{23} \text{ cm}^{-3}$, $n_e^{Al^{3+}} = 1,81.10^{23} \text{ cm}^{-3}$. Cette gamme de densités correspond à des densités critiques pour des énergies de photon $E_0 (n_c = 10^{23} \text{ cm}^{-3}) \sim 10 \text{ eV}$. On voit donc qu'on ne

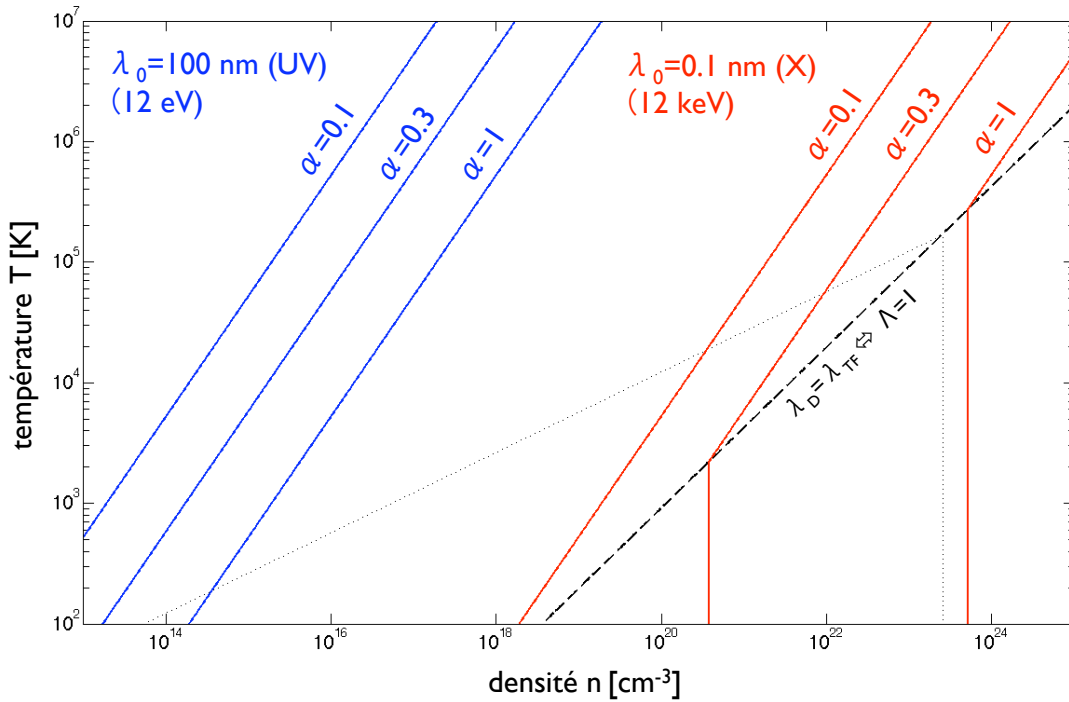


FIGURE 1.7 – Conditions sondées en fonction de λ et α . La région triangulaire correspondant aux plasma non idéaux ainsi que la droite $\Lambda = 1$ (c'est-à-dire $\lambda_{TF} = \lambda_D$) sont indiquées.

peut plus travailler avec des sondes UV dans le domaine WDM. En revanche, $n_c(E_0 = 1 \text{ keV}) \sim 10^{27} \text{ cm}^{-3}$, ce qui est bien supérieur aux densités attendues.

Mais il faut également vérifier que les autres processus d'interaction rayonnement-matière (photoexcitation, photoabsorption, Bremsstrahlung inverse...) ne rendent pas le matériau opaque. Essayons de nous en faire une idée en considérant la transmission de quelques matériaux en fonction du numéro atomique Z_A . La figure 1.8 représente le coefficient de transmission d'échantillons de $10 \mu\text{m}$ d'épaisseur, solides froids, pour des éléments de numéro atomique faible (lithium, carbone) à moyen (aluminium) et élevé (or), en fonction de l'énergie des photons. On constate que la gamme 1keV-10keV convient à des matériaux de numéro atomique faible à moyen. Sonder des matériaux plus lourds demandera des sondes plus énergétiques. Cependant le terme de la section efficace de diffusion correspondant aux transitions lié-libre devient vite prédominant. Lorsque Z_A augmente on s'éloigne alors vite de l'image simple donnée dans ce chapitre pour l'interprétation d'un spectre diffusé.

En résumé, les matériaux de numéro atomique faible à moyen relevant du régime WDM tel que défini en début de chapitre, pourront être sondés, en régime collectif, ou non-collectif, avec des sondes X d'énergie de 1 à 10 keV.

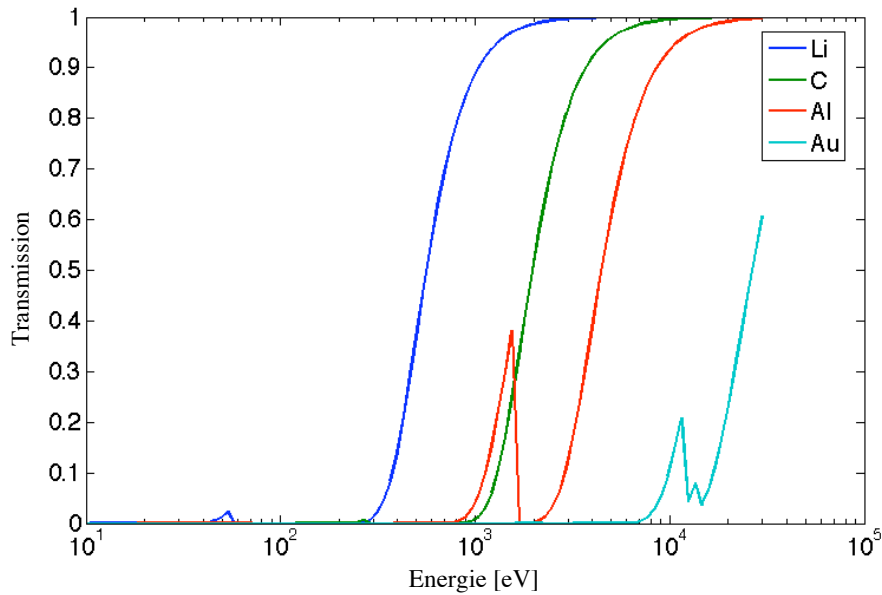


FIGURE 1.8 – Transmission d’une feuille d’épaisseur $10\mu\text{m}$ pour différents matériaux ($Z = 3, 6, 13, 79$) en fonction de l’énergie du photon. Ces transmissions sont estimées pour le matériau froid à la densité du solide [18, 19].

1.2.3 État de l’art

1.2.3.1 Diffusion Thomson à basse énergie (radio-visible-UV)

Les premières expériences de diffusion incohérente des plasmas gazeux mesurant la température ionique par l’élargissement Doppler du signal datent de la fin des années 50 avec l’observation de la diffusion d’ondes radar par l’ionosphère [20]. Elles ont été suivies par de nombreux travaux théoriques par Salpeter et d’autres au cours des deux décennies suivantes [21, 22, 23, 24, 25]. Les bases de la diffusion par les fluctuations de densité électronique dans un plasma ont ainsi été posées. L’arrivée des lasers dans les laboratoires au cours des années 60 a considérablement facilité la mise en place de la diffusion Thomson comme diagnostic plasma. Après les premiers succès (entre autre [26]), cette technique est rapidement devenue le moyen de déterminer en routine température et densité électroniques [27]. Divers régimes ont pu être explorés : diffusion en régime collectif résolvant les satellites électroniques prédits par Salpeter [28, 29], diffusion sur un plasma non-idéal [30].

1.2.3.2 Diffusion Thomson dans le domaine X

L’extension de ces techniques au régime des plasmas denses et donc à l’utilisation de sources X en vue d’expériences de diffusion résolues angulairement [34, 35] ou spectralement [16] a

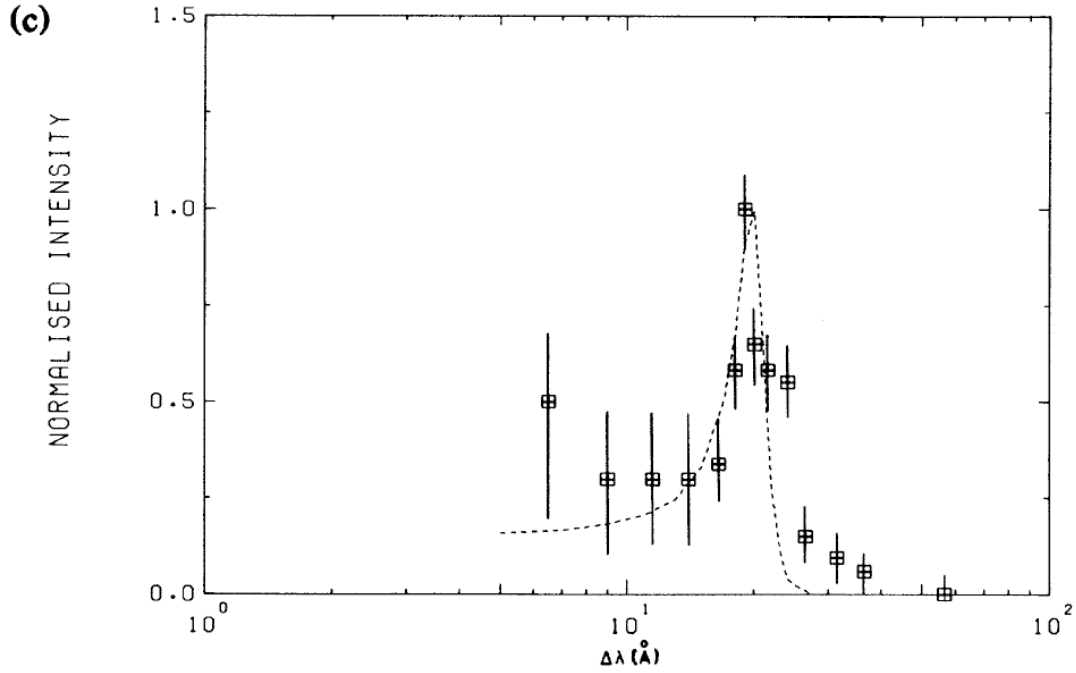


FIGURE 1.9 – Spectre obtenu par diffusion d'un laser vert (526nm) sur un plasma non idéal de césium en régime collectif $\alpha \approx 1.7$ [30]. A ces densités ($n_e \approx 3.10^{16} \text{ cm}^{-3}$), le plasma électronique est classique ($\Lambda \ll 1$).

fait l'objet d'études préliminaires dès le début des années 90. Depuis une dizaine d'années, les laboratoires nationaux américains (essentiellement le Lawrence Livermore National Laboratory) ont lancé un programme de recherche sur la DTX afin de disposer de diagnostic plasma pour leur programme de fusion par confinement inertiel. La première mesure DTX, résolue spectralement, a été effectuée en régime non-collectif et publiée en 2003 par Glenzer [31]. Le milieu diffuseur était un plasma de béryllium à la densité du solide chauffé radiativement. Le spectre incident était donné par la raie de fluorescence He- α d'une cible secondaire de titane ($E_0 = 4.75 \text{ keV}$). Les données correspondantes sont reproduites sur la figure 1.10. Divers succès ont ensuite été obtenus sur des matériaux de numéro atomique faible comme le carbone [36] ou moyen comme l'aluminium [37]. La première observation d'effets fortement non-idéaux liés au fort couplage entre les ions du plasma a été réalisée au LULI sur de l'aluminium choqué [32, 33] (voir figure 1.11). Glenzer a publié, en 2007 [38], les premiers résultats (voir la figure 1.12) de DTX en régime collectif avec l'observation du mode électronique (plasmon). D'autres matériaux légers comme le lithium ont également été sondés avec succès [39]. Cette dernière expérience est l'une de celles réalisées au cours de cette thèse, nous y reviendrons donc dans les chapitres consacrés aux travaux expérimentaux et à l'analyse des données.

Parallèlement à ces travaux expérimentaux, on a assisté au cours de ces dernières années à de

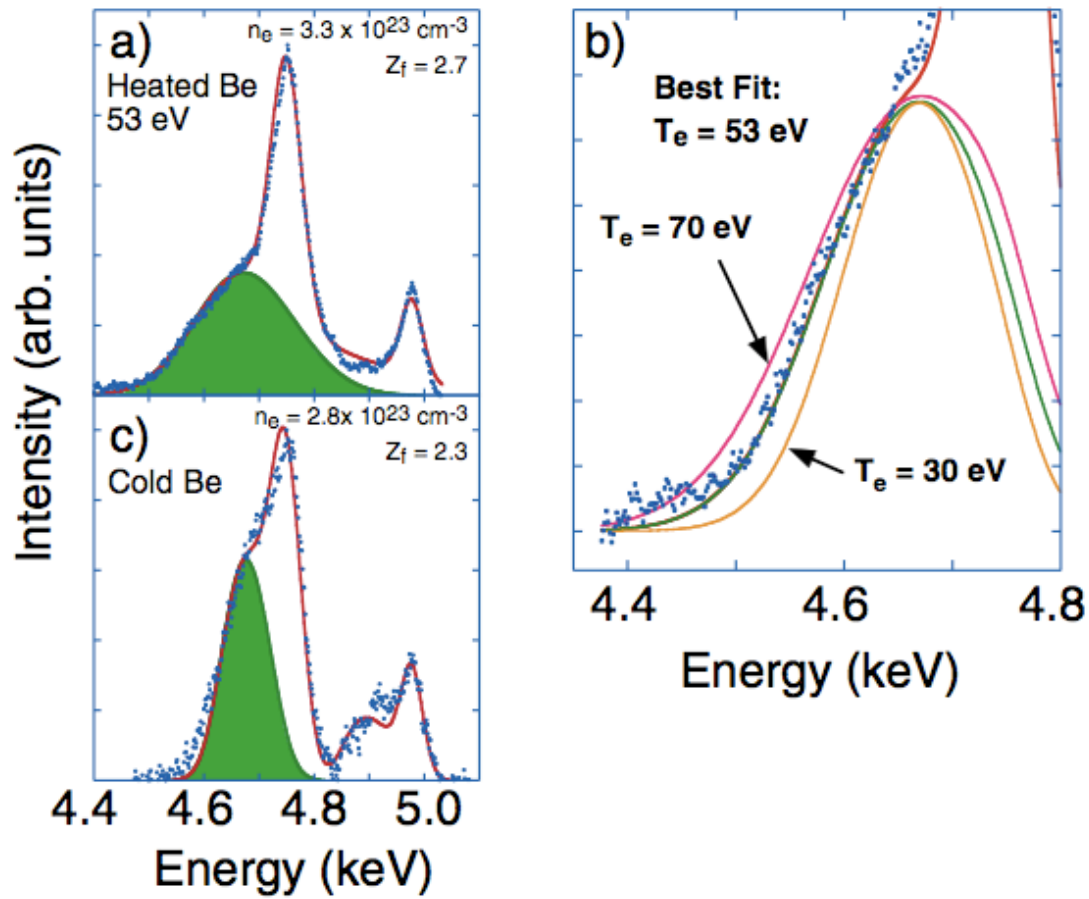


FIGURE 1.10 – Premier signal DTX résolu spectralement, provenant d’un plasma de béryllium à la densité du solide porté à 30 eV [31].

très nombreuses avancées sur les plans théoriques et numérique. Les premières publications traitant de l’interaction de photons de haute énergie avec des électrons remontent à la première moitié du XX^{ème} siècle avec bien entendu les travaux de Compton [40]. Par la suite les divers aspects de la diffusion X sur des populations d’électrons libres ou liés ont été examinées [41, 42, 43]. Les travaux et publications de Chihara sur les métaux liquides [44, 45] sont à l’origine de la formulation actuellement utilisée pour la section efficace de diffusion dans un plasma dense, impliquant comme on le verra dans le prochain chapitre, la séparation des électrons du plasma en plusieurs populations. Gregori a été le premier à reprendre ces travaux théoriques pour en faire un modèle exploitable par les expérimentateurs ([46], puis [47, 48, 49] pour divers raffinements). On assiste actuellement à une très forte activité dans le domaine, avec des publications fréquentes (sur le calcul des facteurs de structure [50] ou des profils de résonance plasmon dans les plasmas fortement corrélés [51]...), si bien qu’une bibliographie exhaustive serait plutôt encombrante ici. Un regard sur les dates de publication

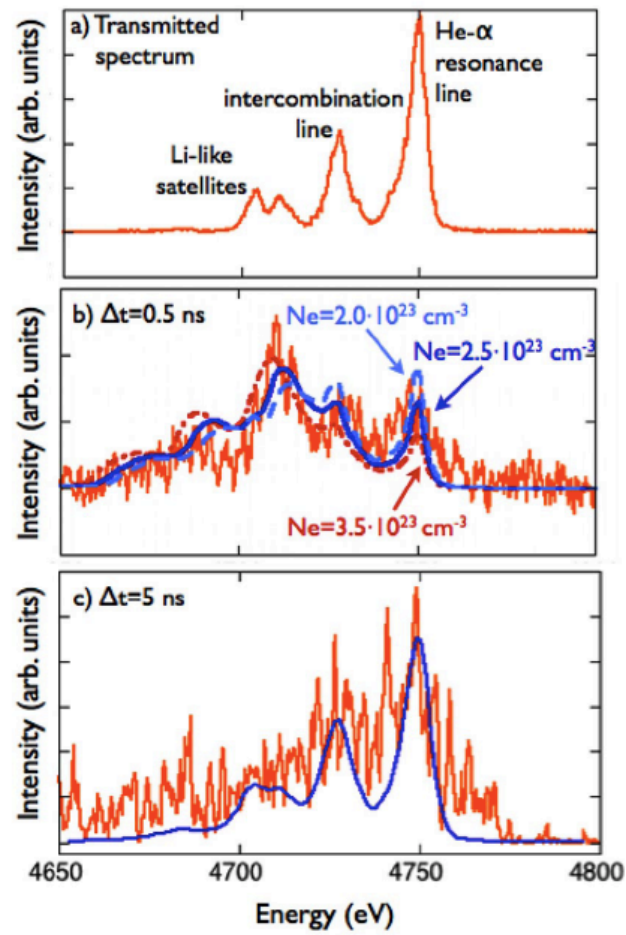


FIGURE 1.11 – Première observation d'effets liés au fort couplage (suppression du pic élastique) dans un plasma d'aluminium choqué par laser. [32, 33]

des derniers articles de cette brève bibliographie devrait convaincre le lecteur de l'actualité brûlante du domaine.

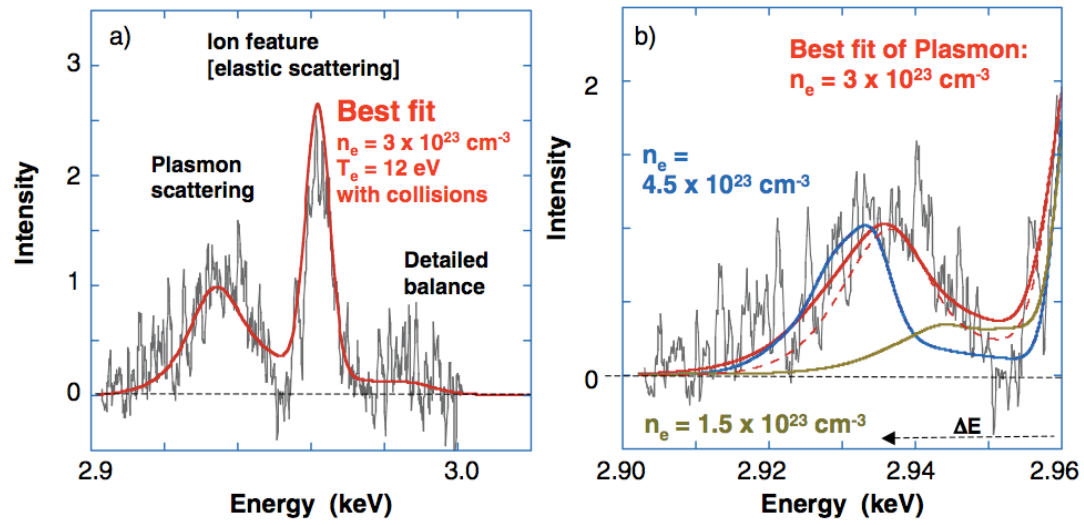


FIGURE 1.12 – Spectre DTX en régime collectif ($\alpha \sim 1.6$). Observation du mode collectif électronique (plasmon).

Diffusion Thomson X - Éléments de théorie

Sommaire

2.1	Principe	26
2.1.1	Diffusion par un électron isolé	26
2.1.1.1	Diffusion Thomson classique	26
2.1.1.2	Diffusion Compton	31
2.1.1.3	Cas général : Klein-Nishina	32
2.1.2	Diffusion par un plasma	32
2.1.2.1	Facteur de structure électronique	33
2.2	Expression du FSE	38
2.2.1	Approche de Chihara	38
2.2.2	Modèle de matière	47
2.3	Modèle Gregori	48
2.3.1	Terme électronique	48
2.3.1.1	Réponse linéaire	48
2.3.1.2	Expressions de la fonction diélectrique électronique	52
2.3.2	Terme ionique	54
2.3.2.1	Écrantage linéaire	54
2.3.2.2	Équations intégrales	56
2.3.2.3	OCP écranté	58
2.3.2.4	Facteur de forme ionique	60
2.4	SCAALP	62
2.5	Dynamique moléculaire quantique	65

Ce chapitre est consacré à la présentation des différents éléments de théorie nécessaires à la compréhension de la diffusion Thomson X. Les divers modèles physiques employés dans le code développé ATHOS (*Analyser for THOmson Scattering data*) et ceux utilisés pour l'analyse des données expérimentales sont également exposés.

Le démarche adoptée est de rappeler les aspects fondamentaux du processus de diffusion par une particule unique, avant de passer à la diffusion par un plasma, pour introduire la notion fondamentale de facteur de structure. L'expression du facteur de structure électronique dans un plasma se basant sur une séparation de la population entre électrons libres et liés sera alors détaillée pour aboutir à son expression sous la forme de la somme d'un terme électronique, d'un terme ionique et d'un terme inélastique. Les trois dernières sections seront enfin consacrées à la présentation des différents modèles physiques utilisés pour calculer ces termes : modèle quasi-analytique de Gregori, modèle de type pseudo-atome neutre SCAALP, et la dynamique moléculaire quantique.

2.1 Principe de la diffusion Thomson X

2.1.1 Diffusion par un électron isolé

2.1.1.1 Diffusion Thomson classique

Puissance rayonnée. Considérons tout d'abord le cas d'une particule chargée unique et libre, dans un référentiel où elle est initialement au repos. Conformément aux remarques du chapitre précédent, il s'agira toujours d'un électron, dont on note la charge e et la masse au repos m_e . On suppose que celui-ci diffuse un photon d'état d'énergie, d'impulsion et de polarisation $(\hbar\omega_0, \hbar\mathbf{k}_0, \hat{\mathbf{e}}_0)$ vers l'état $(\hbar\omega_1, \hbar\mathbf{k}_1, \hat{\mathbf{e}}_1)$. Les différentes grandeurs et les angles utilisés dans le texte sont définis sur la figure 2.1.

Une particule chargée couplée à une onde électromagnétique subit une accélération $\dot{\mathbf{v}}$ et perd donc de l'énergie par rayonnement. La puissance élémentaire dP rayonnée dans la direction $\hat{\mathbf{n}}$ à travers un élément de surface à la distance R soutenant un angle solide $d\Omega$ est donnée par la projection du vecteur de Poynting \mathbf{S} dans cette direction (voir par exemple [52]) :

$$dP = (R^2 d\Omega \hat{\mathbf{n}}) \cdot \mathbf{S}, \quad (2.1)$$

avec

$$\mathbf{S} = \frac{1}{\mu_0} \mathbf{E} \times \mathbf{B}. \quad (2.2)$$

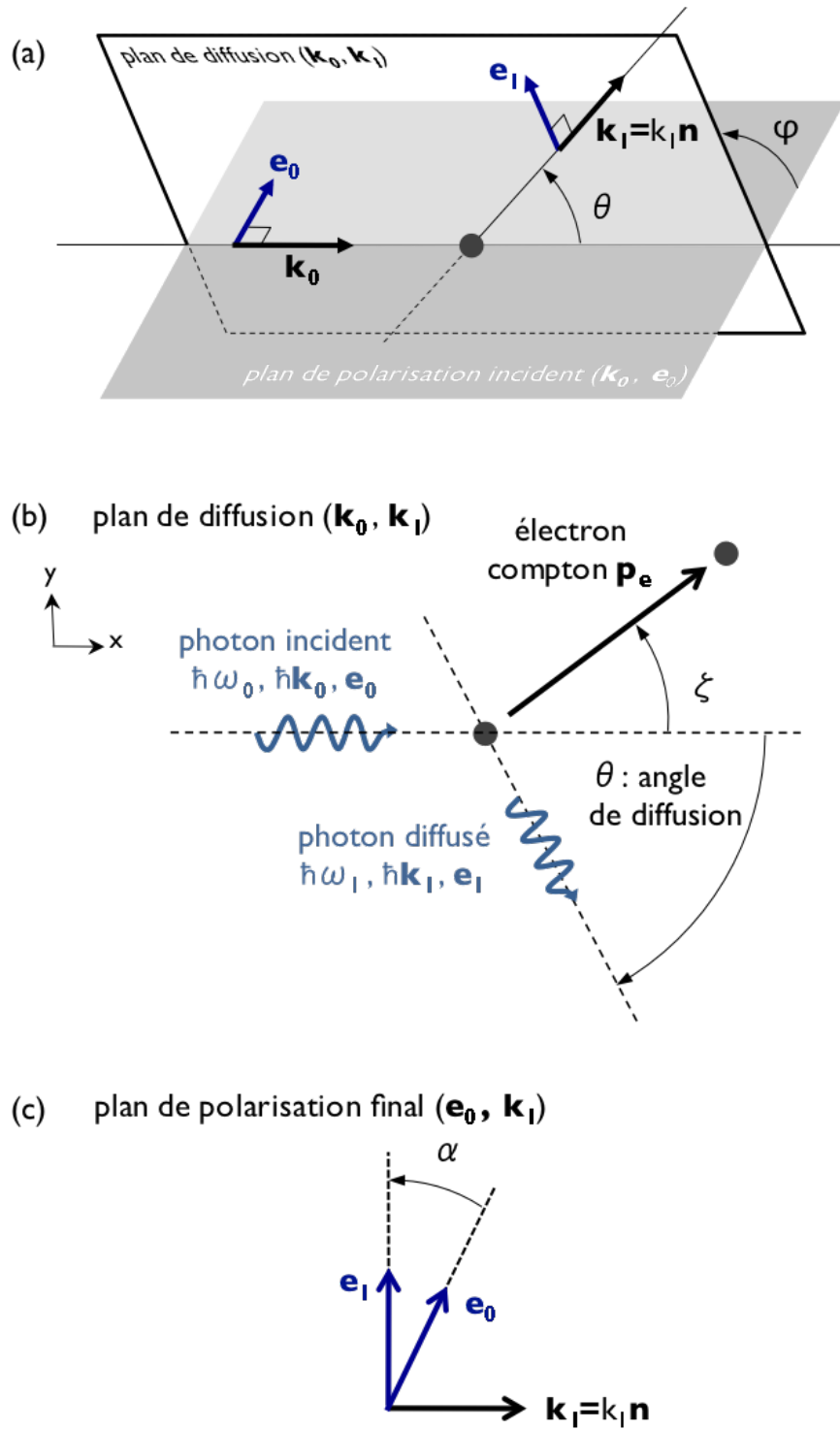


FIGURE 2.1 – Aspects géométriques du processus de diffusion, définition des angles.

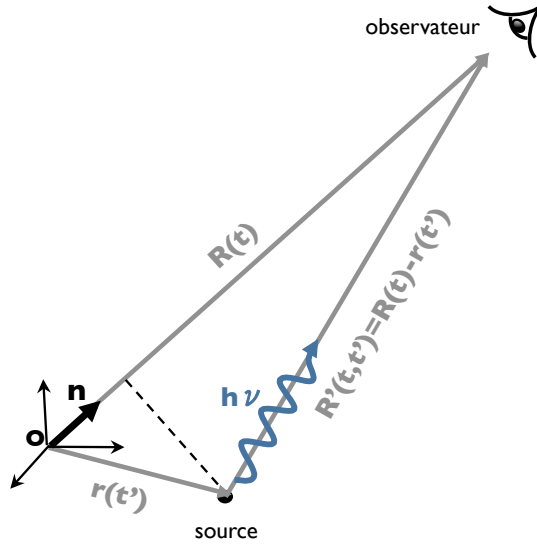


FIGURE 2.2 – Coordonnées utilisées.

\mathbf{E} et \mathbf{B} sont les champs électrique et magnétique rayonnés par la charge en mouvement, et qui sont donc solutions de l'équation de propagation :

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = -\frac{1}{\epsilon_0 c^2} \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t} \quad (2.3)$$

dont le terme source fait apparaître la densité de courant associée à cette seule charge en mouvement $\mathbf{J} = e\mathbf{v}(t') = e c \boldsymbol{\beta}(t')$. La solution de cette équation au temps t et à la position \mathbf{R} est une fonction de la vitesse et de la position de l'électron au temps t' . Les coordonnées utilisées sont définies sur la figure 2.2. Si l'observateur est à une distance $|\mathbf{R}|$ grande par rapport à l'amplitude du mouvement de la source $|\mathbf{r}|$ on peut faire l'approximation suivante : $t' \simeq t - \frac{R - \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{r}}{c}$. L'équation (2.3) admet pour solution :

$$\mathbf{E}(\mathbf{R}', t) = \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \frac{(\hat{\mathbf{n}} - \boldsymbol{\beta}(t'))(1 - \beta(t')^2)}{(1 - \hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\beta}(t'))^3 R'^2} + \frac{e}{4\pi c \epsilon_0} \frac{\hat{\mathbf{n}} \times \{(\hat{\mathbf{n}} - \boldsymbol{\beta}(t')) \times \boldsymbol{\beta}(t')\}}{(1 - \hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\beta}(t'))^3 R'}, \quad (2.4)$$

et le champ magnétique associé est donné par :

$$\mathbf{B}(\mathbf{R}', t) = \frac{1}{c} \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{E}(\mathbf{R}', t). \quad (2.5)$$

La même hypothèse $\mathbf{r} \ll \mathbf{R}$ permet d'écrire $\mathbf{E}(\mathbf{R}, t) \simeq \mathbf{E}(\mathbf{R}', t)$, donc

$$\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}} = \frac{\epsilon_0 c}{2} \mathbf{E}^2, \quad (2.6)$$

et

$$\frac{dP}{d\Omega} = R^2 \frac{\epsilon_0 c}{2} \mathbf{E}^2. \quad (2.7)$$

Si l'on reporte dans (2.7) l'expression du champ électrique (2.4), et que l'on suppose l'électron non relativiste ($\beta \ll 1$), on obtient pour la puissance rayonnée par unité d'angle solide la formule dite de *Larmor* :

$$\frac{dP}{d\Omega} = \frac{e^2}{16\pi^2 \epsilon_0 c^3} |\hat{\mathbf{n}} \times (\hat{\mathbf{n}} \times \dot{\mathbf{v}})|^2 \quad (2.8)$$

On relie alors simplement l'accélération $\dot{\mathbf{v}}$ de l'électron au champ électrique de l'onde plane incidente $\mathbf{E}_0 = E_0 \cos(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r} - \omega_0 t) \hat{\mathbf{e}}_0$ en écrivant son équation du mouvement non relativiste :

$$m_e \dot{\mathbf{v}} = e \mathbf{E}_0 = e E_0 \cos(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r} - \omega_0 t') \hat{\mathbf{e}}_0, \quad (2.9)$$

d'où

$$\frac{dP}{d\Omega} = \frac{e^4 E_0^2}{16\pi^2 \epsilon_0 c^3 m_e^2} |\hat{\mathbf{n}} \times (\hat{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{e}}_0)|^2 \cos^2(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r} - \omega_0 t'). \quad (2.10)$$

La quantité mesurée expérimentalement est la moyenne temporelle (dénnotée par la barre horizontale au dessus de la variable) de cette puissance instantanée :

$$\frac{d\bar{P}}{d\Omega} = \frac{e^4 E_0^2}{32\pi^2 \epsilon_0 c^3 m_e^2} |\hat{\mathbf{n}} \times (\hat{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{e}}_0)|^2 = r_0^2 \frac{c E_0^2}{2} |\hat{\mathbf{n}} \times (\hat{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{e}}_0)|^2 \quad (2.11)$$

où l'on a introduit le rayon classique de l'électron r_0 :

$$r_0 = \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 m_e c^2} \simeq 2.82 \times 10^{-13} \text{ cm} \quad (2.12)$$

Section efficace. On peut exprimer cette grandeur en terme de section efficace différentielle, c'est-à-dire le rapport de la puissance moyenne rayonnée par unité d'angle solide $d\bar{P}/d\Omega$, à la puissance incidente par unité de surface P_0/A (c'est-à-dire la moyenne de la norme du vecteur de Poynting : pour une onde plane $P_0/A = |\mathbf{S}_0| = \frac{\epsilon_0 c}{2} E_0^2$). On peut simplifier un peu l'expression obtenue en remarquant l'identité vectorielle suivante (voir figure 2.1-c) : $|\hat{\mathbf{n}} \times (\hat{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{e}}_0)|^2 = (\hat{\mathbf{e}}_0 \cdot \hat{\mathbf{e}}_1)^2$.

Cette section efficace est appelée section efficace de Thomson, et décrit la diffusion élastique du rayonnement par un électron libre non relativiste.

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{Th}} = r_0^2 (\hat{\mathbf{e}}_0 \cdot \hat{\mathbf{e}}_1)^2 \quad (2.13)$$

Si le rayonnement incident n'est pas polarisé, on moyenne le résultat obtenu sur l'angle azimutal φ :

$$(\hat{\mathbf{e}}_0 \cdot \hat{\mathbf{e}}_1)^2 = \cos^2(\alpha) = 1 - \sin^2(\theta) \cos^2(\varphi) \quad (2.14)$$

$$\langle (\hat{\mathbf{e}}_0 \cdot \hat{\mathbf{e}}_1)^2 \rangle_\varphi = (1 + \cos(\theta)) / 2 \quad (2.15)$$

et

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{Th, NP}} = r_0^2 \frac{1 + \cos(\theta)}{2}, \quad (2.16)$$

l'indice NP signifiant non polarisé. Si la source est effectivement polarisée (tel qu'un laser à électrons libres pour le cas d'une source X), l'angle φ doit être pris en compte. Dans le cas de nos expériences (sources X K_α et Lyman- α) le degré de polarisation n'est pas quantifié et les sources sont simplement supposées isotropes, de sorte que l'angle azimutal n'interviendra plus par la suite.

On définit également au passage, en intégrant cette grandeur sur 4π , la section efficace de diffusion Thomson classique totale σ_T :

$$\sigma = \int d\Omega \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{Th}} = \frac{8\pi}{3} r_0^2 = \sigma_T \quad (2.17)$$

dont la valeur numérique pour l'électron est

$$\sigma_T \simeq 6.65 \times 10^{-25} \text{ cm}^2 = 0.67 \text{ barn} \quad (2.18)$$

2.1.1.2 Diffusion Compton

Lorsque l'énergie $\hbar\omega$ échangée¹ par le photon cesse d'être négligeable devant l'énergie de masse de l'électron diffuseur $m_e c^2$, l'impulsion $\hbar k_0 = h/\lambda_0$ du photon incident ne peut plus être négligée dans le bilan de quantité de mouvement. Une première correction importante au résultat précédent doit alors être apportée. En indiquant toujours 0 et 1 les états avant et après diffusion, la conservation de l'impulsion (en projection sur les axes x et y de la figure 2.1) et de l'énergie s'écrivent² :

$$\begin{aligned}\frac{h}{\lambda_0} &= \frac{h}{\lambda_2} \cos(\theta) + p_e \cos(\xi) \\ 0 &= \frac{h}{\lambda_2} \sin(\theta) - p_e \sin(\xi)\end{aligned}$$

$$\frac{hc}{\lambda_0} + m_e c^2 = \frac{hc}{\lambda_1} + \sqrt{p_e^2 c^2 + m_e^2 c^4} \quad (2.19)$$

où l'on a appelé \mathbf{p}_e la quantité de mouvement acquise par l'électron, et où les angles utilisés sont définis sur la figure 2.1. Étant donné que l'on mesure les propriétés du photon, on travaille généralement avec les grandeurs qui le concernent : l'impulsion et l'énergie qu'il a gagnées, respectivement définies par

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} = \hbar \mathbf{k}_1 - \hbar \mathbf{k}_0 = -\mathbf{p}_e \quad (2.20)$$

et

$$\hbar\omega = \hbar\omega_1 - \hbar\omega_0, \quad (2.21)$$

Avec $|\hbar\omega| \simeq p_e c$. En éliminant p_e^2 entre les équations de conservation, on peut écrire des relations entre quantités échangées. En particulier l'augmentation de la longueur d'onde du photon qui est le *décalage Compton* :

$$\lambda_C = \lambda_1 - \lambda_0 = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos(\theta)) \quad (2.22)$$

1. Dans le cas de la diffusion d'un photon par un électron initialement au repos, ce dernier ne peut céder d'énergie cinétique et la quantité $\hbar\omega$, définie comme l'énergie *gagnée* par le photon, est toujours négative. Tel ne sera pas le cas lorsqu'il s'agira de la diffusion par une population électronique possédant une température ; $\hbar\omega$ possédera alors un signe quelconque.

2. On peut s'étonner de l'emploi ici de formules relativistes, puisque l'on a supposé auparavant l'électron non relativiste. Un calcul non relativiste aboutit cependant à une expression beaucoup moins élégante et compacte (et moins précise) pour l'expression du décalage Compton λ_C (voir équation 2.22).

et le rapport des énergies :

$$\frac{h\nu_1}{h\nu_0} = \frac{k_1}{k_0} = \frac{1}{1 + \frac{h\nu_0}{m_e c^2} (1 - \cos(\theta))} \quad (2.23)$$

Un calcul quantique de la section efficace de diffusion pour une particule sans spin [40] aboutit à la section efficace différentielle de diffusion Compton :

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{Compton}} = r_0^2 \left(\frac{k_1}{k_0} \right)^2 (\hat{\mathbf{e}}_0 \cdot \hat{\mathbf{e}}_1)^2. \quad (2.24)$$

2.1.1.3 Cas général : Klein-Nishina

Notons que le calcul effectué par Compton reste une approximation à basse énergie et n'est pas valable pour des énergies grandes devant l'énergie de masse du diffuseur. La formulation complète du problème quantique conduit à la section efficace de *Klein – Nishina*, valable dans le cas général [53] :

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{KN}} = \frac{r_0^2}{2} \left(\frac{k_1}{k_0} \right)^2 \left(\frac{k_0}{k_1} + \frac{k_1}{k_0} + \cos^2(\theta) - 1 \right) \quad (2.25)$$

Dans les cas qui nous intéressent on aura toujours $hc/\lambda_0 < m_e c^2 \simeq 511 \text{ keV}$, nous n'aurons jamais à utiliser la formulation générale.

2.1.2 Diffusion par un plasma

Nous avons donc vu les formules élémentaires décrivant la diffusion d'un photon par une particule chargée libre unique. Il s'agit maintenant d'étendre le domaine de validité à un plasma, c'est-à-dire un ensemble de particules chargées.

On se limite aux hypothèses suivantes :

- Seuls les électrons sont supposés diffuser.
- Le plasma est non relativiste et pour tous les diffuseurs $v/c \ll 1$
- La dimension caractéristique du plasma est petite devant la distance à la laquelle on mesure le rayonnement diffusé. L'angle de diffusion θ est ainsi constant pour tout le volume de plasma.
- Le plasma est quasiment transparent au rayonnement incident (en particulier $\omega_0 \gg \omega_{pe}$) et son volume est suffisamment petit pour que nous n'ayons pas à considérer des diffusions multiples. L'intensité du rayonnement incident est identique sur tout le volume diffuseur.

- L'intensité incidente est suffisamment faible pour que l'état du plasma ne soit pas perturbé.

En supposant ces conditions réunies, on peut certainement appliquer le raisonnement de la section précédente à chacun des électrons du plasma, puis sommer les champs électriques rayonnés individuels pour trouver le champ électrique total : $E_1^{tot} = \sum_i E_{1,i}$. On écrit donc la puissance rayonnée par unité d'angle solide par le plasma comme

$$\frac{dP}{d\Omega} = R^2 \frac{\epsilon_0 c}{2} E_1^{tot2} = R^2 \frac{\epsilon_0 c}{2} \sum_i E_{1,i} \cdot \sum_j E_{1,j}, \quad (2.26)$$

où les indices i et j parcourent l'ensemble des N électrons. En réarrangeant les termes de façon à regrouper les champs rayonnés par les particules identiques, on fait clairement apparaître 2 contributions :

$$\frac{dP}{d\Omega} = NR^2 \frac{\epsilon_0 c}{2} E_1^2 + R^2 \frac{\epsilon_0 c}{2} \sum_{i \neq j} E_{1,i} \cdot E_{1,j}. \quad (2.27)$$

Cette dernière expression permet de pointer la différence entre les régimes de diffusion cohérente ($\alpha > 1$) et incohérente ($\alpha < 1$).

- Le premier terme, faisant apparaître N fois la puissance moyenne rayonnée par un électron unique (équation 2.7), correspondra à la partie dite incohérente du spectre. Les effets collectifs en sont absents, et on voit que seules les propriétés liées à la fonction de distribution à une particule (telle que la distribution thermique des vitesses) seront impliquées.
- Le second terme contient les interférences entre les champs rayonnés par les électrons individuels. Pour une distribution totalement aléatoire, cette contribution est nulle en moyenne puisque pour chaque terme on pourra toujours en trouver un de phase opposée avec lequel il s'annulera. Si au contraire il existe des corrélations de position et/ou de vitesse entre les électrons du plasma (polarisation autour des ions, ondes plasmas, apparition d'une structure ordonnée...), les interférences peuvent être constructives pour certaines valeurs de (\mathbf{k}, ω) . Ce terme peut alors devenir majoritaire (le cas extrême étant la diffusion de Bragg sur les sites atomiques dans un solide cristallin).

2.1.2.1 Facteur de structure électronique

L'étape suivante consiste à relier les sections efficaces de diffusion obtenues aux fluctuations de densité électronique dans le plasma.

La fonction de distribution microscopique à N particules peut s'écrire pour la population électronique, où la particule indicée i est affectée des coordonnées $\mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i$:

$$F_e(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)) \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_i(t)) \quad (2.28)$$

fonction à partir de laquelle est définie la densité électronique locale dépendante du temps en intégrant sur les vitesses :

$$\rho_e(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{v} F_e(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \quad (2.29)$$

Les fluctuations temporelles et spatiales sont toujours considérées en termes de fréquence et de vecteur d'onde, c'est-à-dire que l'on travaille avec les composantes de Fourier définies par la transformation :

$$\rho_e(\mathbf{k}, \omega) = \int d\mathbf{r} \int dt \rho_e(\mathbf{r}, t) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} = \mathcal{F}_{\mathbf{r}} \mathcal{F}_t [\rho_e(\mathbf{r}, t)]. \quad (2.30)$$

On note respectivement $\mathcal{F}_{\mathbf{r}}$ et \mathcal{F}_t les opérateurs correspondant aux transformations de Fourier par rapport à la variable d'espace \mathbf{r} et à la variable temporelle t . Ces quantités étant définies, on peut maintenant écrire le champ électrique total rayonné à la position \mathbf{R} et au temps t en fonction de la distribution électronique microscopique :

$$\begin{aligned} E_1^{tot}(\mathbf{R}, t) &= \sum_i E_{1,i}(\mathbf{R}, t) \\ &= \int d\mathbf{v} \int d\mathbf{r} F_e(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \mathbf{E}_1(\mathbf{R}, t). \end{aligned} \quad (2.31)$$

On a vu dans la section précédente que la puissance moyenne rayonnée par unité d'angle solide s'écrit :

$$\frac{d\bar{P}}{d\Omega} = R^2 \frac{\epsilon_0 c}{2} \overline{|E_1^{tot}(\mathbf{R}, t)|^2}. \quad (2.32)$$

Cette moyenne temporelle est caractérisée par la résolution temporelle τ du détecteur utilisé, qui pour nous, comparée aux échelles de temps microscopiques est virtuellement infinie.

$$\frac{d\bar{P}}{d\Omega} = R^2 \frac{\epsilon_0 c}{2} \frac{1}{\tau} \int_{-\tau/2}^{+\tau/2} dt |E_1^{tot}(\mathbf{R}, t)|^2 \quad (2.33)$$

On sait que cette moyenne temporelle est indépendante de τ si elle vérifie $\tau > \tau_{corr}$, où τ_{corr} est le temps de cohérence des fluctuations dans le système. On définit alors la fonction intermédiaire :

$$E_{1,\tau}^{tot}(\mathbf{R}, t) = \begin{cases} E_1^{tot}(\mathbf{R}, t) & \text{si } |t| < \tau/2 \\ 0 & \text{si } |t| > \tau/2 \end{cases} \quad (2.34)$$

de manière à pouvoir écrire

$$\frac{d\bar{P}}{d\Omega} = R^2 \frac{\epsilon_0 c}{2} \frac{1}{\tau} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left| E_{1,\tau}^{tot}(\mathbf{R}, t) \right|^2, \quad (2.35)$$

et de passer à une intégrale sur ω grâce au théorème de Parseval :

$$\frac{d\bar{P}}{d\Omega} = R^2 \frac{\epsilon_0 c}{2} \frac{1}{\tau} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \left| E_{1,\tau}^{tot}(\mathbf{R}, \omega) \right|^2 \quad (2.36)$$

Le but étant d'aboutir à une fonction de l'énergie pour la section efficace, on définit la différentielle double $d^2\bar{P}/d\Omega d\omega$ qui vérifie

$$\frac{d\bar{P}}{d\Omega} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{d^2\bar{P}}{d\Omega d\omega} \quad (2.37)$$

et donc

$$\begin{aligned} \frac{d^2\bar{P}}{d\Omega d\omega} &= R^2 \frac{\epsilon_0 c}{4\pi} \frac{1}{\tau} \left| E_{1,\tau}^{tot}(\mathbf{R}, \omega) \right|^2 \\ &= R^2 \frac{\epsilon_0 c}{4\pi} \frac{1}{\tau} \left| \mathcal{F}_t \left[E_{1,\tau}^{tot}(\mathbf{R}, t) \right] \right|^2 \\ &= R^2 \frac{\epsilon_0 c}{4\pi} \frac{1}{\tau} \left| \int dt E_{1,\tau}^{tot}(\mathbf{R}, t) e^{-i\omega t} \right|^2. \end{aligned}$$

En utilisant l'équation 2.31, on peut maintenant écrire le champ électrique total en fonction de la densité et des champs individuels

$$\frac{d^2\bar{P}}{d\Omega d\omega} = R^2 \frac{\epsilon_0 c}{4\pi} \frac{1}{\tau} \left| \int dt d\mathbf{v} d\mathbf{r} F_e(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t') E_{1,\tau}(\mathbf{R}, t) e^{-i\omega t} \right|^2 \quad (2.38)$$

$$\frac{d^2\bar{P}}{d\Omega d\omega} = R^2 \frac{\epsilon_0 c}{4\pi} \frac{1}{\tau} \left| \int dt d\mathbf{r} \rho_e(\mathbf{r}, t') E_{1,\tau}(\mathbf{R}, t) e^{-i\omega t} \right|^2 \quad (2.39)$$

$$\frac{d^2 \bar{P}}{d\Omega d\omega} = R^2 \frac{\epsilon_0 c}{4\pi} \frac{1}{\tau} \left| \int dt d\mathbf{r} \frac{d\tilde{\omega}}{2\pi} \frac{d\tilde{\mathbf{k}}}{(2\pi)^3} \rho_e(\tilde{\mathbf{k}}, \tilde{\omega}) e^{-i(\tilde{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{r} - \tilde{\omega} t')} \mathbf{E}_{1,\tau}(\mathbf{R}, t) e^{-i\omega t} \right|^2. \quad (2.40)$$

Comme on l'a vu, si $\beta \ll 1$ l'équation (2.4) se réduit à

$$\mathbf{E}_1(\mathbf{R}, t') = \frac{r_0}{R} E_0 \cos(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r} - \omega_0 t') [\hat{\mathbf{n}} \times (\hat{\mathbf{n}} \times \hat{\mathbf{e}}_0)] \quad (2.41)$$

et le temps retardé

$$\omega_1 t' \simeq \omega_1 t - \frac{\omega_1 R}{c} + \frac{\omega_1}{c} \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{r} = \omega_1 t - \frac{\omega_1 R}{c} + \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r} \quad (2.42)$$

En reportant (2.41) et (2.42) dans (2.40) on obtient :

$$\frac{d^2 \bar{P}}{d\Omega d\omega} = \frac{\epsilon_0 c}{4\pi} \frac{1}{\tau} r_0^2 E_0^2 \left| \int dt d\mathbf{r} \frac{d\tilde{\omega}}{2\pi} \frac{d\tilde{\mathbf{k}}}{(2\pi)^3} \rho_e(\tilde{\mathbf{k}}, \tilde{\omega}) [\exp(i\mathcal{A}_+) + \exp(i\mathcal{A}_-)] \right|^2 (\hat{\mathbf{e}}_1 \cdot \hat{\mathbf{e}}_0)^2,$$

où les facteurs exponentiels sont les suivants :

$$\mathcal{A}_{\pm} = [\tilde{\omega} - (\omega_1 \pm \omega_0)] t - [\tilde{\mathbf{k}} - (\mathbf{k}_1 \pm \mathbf{k}_0)] \cdot \mathbf{r} - \frac{\omega_1}{c} R. \quad (2.43)$$

L'intégration sur les variables \mathbf{r} et t donne des distributions de Dirac $\delta(\tilde{\omega} - (\omega_1 \pm \omega_0))$ et $\delta(\tilde{\mathbf{k}} - (\mathbf{k}_1 \pm \mathbf{k}_0))$ ce qui rend celles en $\tilde{\omega}$ et $\tilde{\mathbf{k}}$ immédiate.

$$\frac{d^2 \bar{P}}{d\Omega d\omega} = \frac{\epsilon_0 c}{4\pi} \frac{1}{\tau} r_0^2 E_0^2 \left| \rho_e(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_0, \omega_1 - \omega_0) + \rho_e(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_0, \omega_1 + \omega_0) \right|^2 (\hat{\mathbf{e}}_1 \cdot \hat{\mathbf{e}}_0)^2 \quad (2.44)$$

$$\frac{d^2 \bar{P}}{d\Omega d\omega} = \frac{P_0}{A} \frac{1}{\tau} \frac{r_0^2}{2\pi} \left| \rho_e(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_0, \omega_1 - \omega_0) + \rho_e(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_0, \omega_1 + \omega_0) \right|^2 (\hat{\mathbf{e}}_1 \cdot \hat{\mathbf{e}}_0)^2 \quad (2.45)$$

Le rapport P_0/A a été défini page 30. Reste enfin à prendre la moyenne statistique (dénnotée par les crochets) du résultat sur l'ensemble canonique ici considéré :

$$\left\langle \frac{d^2 \bar{P}}{d\Omega d\omega} \right\rangle = \frac{P_0}{A} \frac{r_0^2}{2\pi} \frac{N}{\tau V} \left\langle \frac{|\rho_e(\mathbf{k}, \omega)|^2}{\rho} \right\rangle (\hat{\mathbf{e}}_1 \cdot \hat{\mathbf{e}}_0)^2 \quad (2.46)$$

qui a été écrite sous cette forme pour faire apparaître la densité spectrale des fluctuations de densité électronique³ $S_{ee}^{tot}(\mathbf{k}, \omega)$ ou *facteur de structure dynamique* (FSD), défini par

$$S_{ee}^{tot}(\mathbf{k}, \omega) \equiv \lim_{\tau, V \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau V} \left\langle \frac{|\rho_e(\mathbf{k}, \omega)|^2}{\rho} \right\rangle, \quad (2.47)$$

où la limite exprime le passage à la limite thermodynamique.

Il est à noter que la densité spectrale d'une grandeur correspond à la transformée de Fourier de sa fonction d'autocorrélation (théorème de *Wiener*). $S(\mathbf{k}, \omega)$ correspond donc bien, dans l'espace de Fourier, à une mesure des corrélations (temporelles et spatiales) dans les fluctuations de densité électronique.

On aboutit enfin à l'expression de la section efficace, en divisant par P_0/A :

$$\frac{d^2 \sigma}{d\Omega d\omega} = \frac{r_0^2}{2\pi} N S_{ee}^{tot}(\mathbf{k}, \omega) (\hat{\mathbf{e}}_1 \cdot \hat{\mathbf{e}}_0)^2 \quad (2.48)$$

Avant d'aller plus loin nous pouvons faire trois remarques :

- Les propriétés temporelles et spatiales du plasma sont contenues dans le terme $S_{ee}^{tot}(\mathbf{k}, \omega)$.
- La section efficace de diffusion est proportionnelle à $S_{ee}^{tot}(\mathbf{k}, \omega)$.
- On rappelle que la variation d'impulsion est liée à l'angle de diffusion par $k = |\mathbf{k}| = \frac{4\pi}{\lambda_0} \sin(\theta/2)$

On peut donc d'ores et déjà comprendre l'intérêt d'un spectre de diffusion Thomson comme diagnostic. En effet si un volume de plasma uniforme diffuse un rayonnement monochromatique et que l'on est capable de résoudre angulairement et/ou en énergie la lumière diffusée, nous pouvons alors avoir accès à la fonction $S_{ee}^{tot}(k \text{ ou } \theta, \omega)$. Reste donc à relier cette fonction aux grandeurs que l'on désire mesurer : les paramètres macroscopiques du plasma, température et densité.

3. L'exposant *tot* signifie qu'il s'agit du facteur de structure correspondant à la totalité des électrons du plasma, pour éviter toute confusion avec S_{ee} le facteur de structure des seuls électrons libres, qui sera défini plus loin.

CQFR : Nous venons de voir que la section efficace de diffusion par une particule chargée, dans la plage d'énergie qui nous intéresse, est donnée par la formule de Compton.

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{Compton}} = r_0^2 \left(\frac{k_1}{k_0}\right)^2 (\hat{\mathbf{e}}_0 \cdot \hat{\mathbf{e}}_1)^2 = \left(\frac{k_1}{k_0}\right)^2 \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{Th}} \quad (2.49)$$

Dans le cas d'une collection de diffuseurs, comme dans un plasma, l'interférence entre les différents champs rayonnés donne lieu naturellement à la séparation de la section efficace en un terme de diffusion incohérent, et un terme de diffusion cohérent. Leur amplitude relative définit le régime de diffusion.

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{plasma}} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{incohérent}} + \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{cohérent}} \quad (2.50)$$

Enfin, il est apparu que lorsque l'on relie les champs rayonnés aux fluctuations de densité électronique, la section efficace obtenue est simplement multipliée par la densité spectrale de fluctuations de densité électronique, ou facteur de structure électronique $S_{ee}^{tot}(k, \omega)$:

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega}\right)_{\text{plasma}} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{Th}} \frac{k_1}{k_0} S_{ee}^{tot}(k, \omega) \quad (2.51)$$

C'est un résultat primordial mais inutilisable tel quel si l'on garde à l'esprit que l'objectif est d'utiliser les spectres diffusés pour remonter à des paramètres plasmas. Nous allons donc entreprendre dans les parties suivantes d'exprimer ce facteur de structure électronique à l'aide d'expressions calculables et dépendantes des paramètres plasma.

2.2 Expression du facteur de structure électronique

Nous allons dans cette section dériver l'expression proposée par J. Chihara ([44] par exemple, et les références que l'on peut y trouver) pour $S_{ee}^{tot}(\mathbf{k}, \omega)$. C'est sur cette dernière que se fondent les modèles utilisés de DTX dans les plasmas, et par là l'interprétation des données expérimentales.

2.2.1 Approche de Chihara

Cette approche est initialement basée sur une étude des métaux liquides. Elle repose sur une séparation *a priori* entre électrons libres et électrons liés dans le plasma. Le plasma décrit est supposé posséder N atomes d'une seule espèce chimique de numéro atomique Z_A . Chaque

ion y possède Z_b (b pour *bound*) électrons liés et Z_f (f pour *free*) électrons libres. Le plasma étant globalement neutre, on a évidemment $Z_A = Z_b + Z_f$.

Pour analyser les corrélations spatio-temporelles de fluctuation de densité dans le plasma, on utilise la fonction dite de Van Hove G_{ee} , qui est la fonction de corrélation entre la densité électronique en (\mathbf{r}_0, t_0) et celle en $(\mathbf{r}_0 + \mathbf{r}, t_0 + t)$, normalisée par la densité moyenne $\rho = \langle \rho_e(\mathbf{r}, t) \rangle$:

$$G_{ee}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}, t_0, t) = \frac{1}{\rho} C_{\rho_e \rho_e}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}, t_0, t) = \frac{1}{\rho} \langle \rho_e(\mathbf{r}_0 + \mathbf{r}, t_0 + t) \rho_e(\mathbf{r}_0, t_0) \rangle. \quad (2.52)$$

Pour un système homogène (resp. à l'équilibre), une moyenne statistique ne dépend pas explicitement de la coordonnée \mathbf{r}_0 (resp. de l'instant t_0) choisie. On définit la fonction $G_{ee}(\mathbf{r}, t)$ des deux seules variables \mathbf{r} et t comme la moyenne de $G_{ee}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}, t_0 = 0, t)$ sur le volume du plasma :

$$\begin{aligned} G_{ee}(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{V} \int d\mathbf{r}_0 G_{ee}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0 + \mathbf{r}, t) \\ &= \frac{1}{V\rho} \langle \rho_e(\mathbf{r}_0 + \mathbf{r}, t_0 + t) \rho_e(\mathbf{r}_0, t_0) \rangle \int d\mathbf{r}_0 \\ &= \frac{1}{\rho} \langle \rho_e(\mathbf{r}, t) \rho_e(\mathbf{0}, 0) \rangle. \end{aligned}$$

On appelle fonction intermédiaire de diffusion $I_{ee}(\mathbf{k}, t)$ la transformée de Fourier spatiale de $G_{ee}(\mathbf{r}, t)$

$$I_{ee}(\mathbf{k}, t) = \mathcal{F}_{\mathbf{r}} [G_{ee}(\mathbf{r}, t)] = \int G_{ee}(\mathbf{r}, t) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r}. \quad (2.53)$$

Un peu d'algèbre permet d'exprimer $I_{ee}(\mathbf{k}, t)$ comme fonction des composantes de Fourier de la densité $\rho_e(\mathbf{k}, t)$:

$$\begin{aligned}
I_{ee}(\mathbf{k}, t) &= \int d\mathbf{r} G_{ee}(\mathbf{r}, t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \\
&= \frac{1}{V} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}_0 G_{ee}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0 + \mathbf{r}, t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \\
&= \frac{1}{N} \left\langle \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}_0 \rho_e(\mathbf{r}_0 + \mathbf{r}, t) \rho_e(\mathbf{r}_0, 0) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right\rangle \\
&= \frac{1}{N} \left\langle \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}_0 \int d\mathbf{k}_1 \rho_e(\mathbf{k}_1, t) e^{-i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k})\cdot(\mathbf{r} + \mathbf{r}_0)} \right. \\
&\quad \left. \int d\mathbf{k}_2 \rho_e(\mathbf{k}_2, 0) e^{-i(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k})\cdot\mathbf{r}_0} \right\rangle \tag{2.54}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{N} \left\langle \int d\mathbf{k}_1 \int d\mathbf{k}_2 \rho_e(\mathbf{k}_1, t) \rho_e(\mathbf{k}_2, 0) \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}_1) \right\rangle \\
&= \frac{1}{N} \langle \rho_e(\mathbf{k}, t) \rho_e(-\mathbf{k}, 0) \rangle \\
&= \frac{1}{N} \langle \rho_e(\mathbf{k}, t) \rho_e^*(\mathbf{k}, 0) \rangle, \tag{2.55}
\end{aligned}$$

où l'astérisque désigne la conjugaison complexe.

Introduisons maintenant la séparation en électrons liés et libres dans la densité électronique totale à une particule dépendante du temps :

$$\begin{aligned}
\rho_e(\mathbf{r}, t) &= \sum_{i=1}^{NZ_A} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)) = \sum_{i=1}^{NZ_f} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)) + \sum_{j=1}^{NZ_b} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j(t)) \\
&= \rho_f(\mathbf{r}, t) + \rho_b^0(\mathbf{r}, t),
\end{aligned}$$

ce qui définit les quantités $\rho_f(\mathbf{r}, t)$ et $\rho_b^0(\mathbf{r}, t)$, densités partielles d'électrons libres et liés, respectivement (l'emploi de l'exposant 0 est justifié ci après). La densité totale s'écrit dans l'espace réciproque

$$\rho_e(\mathbf{k}, t) = \sum_{i=1}^{NZ_A} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i(t)) = \rho_f(\mathbf{k}, t) + \rho_b^0(\mathbf{k}, t). \tag{2.56}$$

La position $\mathbf{r}_{j\alpha}(t)$ d'un électron lié indicé j est écrite relativement à $\mathbf{R}_\alpha(t)$, celle de son ion indicé α : $\mathbf{r}_{j\alpha}(t) = \tilde{\mathbf{r}}_{j\alpha}(t) + \mathbf{R}_\alpha(t)$, de sorte que $\tilde{\mathbf{r}}_{j\alpha}(t)$ est sa position dans le référentiel de l'ion et la densité électronique liée prend la forme :

$$\rho_b^0(\mathbf{k}, t) = \sum_{\alpha=1}^N \left(\sum_{j=1}^{Z_b} \exp(i\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{r}}_{j\alpha}(t)) \right) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_\alpha(t)). \tag{2.57}$$

On invoque alors l'approximation de Born-Oppenheimer, selon laquelle la dynamique des électrons est découplée de celle des ions du fait du grand rapport de masses. Autrement dit, les mouvements électroniques prennent place sur une échelle de temps τ_{elec} bien plus courte que celle liée aux mouvements ioniques τ_{ion} . Cela permet de considérer une échelle de temps intermédiaire τ_{moy} , telle que $\tau_{\text{elec}} \ll \tau_{\text{moy}} \ll \tau_{\text{ion}}$, sur laquelle la densité électronique est approximée par sa valeur moyenne :

$$\rho_b(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{\tau_{\text{moy}}} \int_{t-\tau_{\text{moy}}/2}^{t+\tau_{\text{moy}}/2} \rho_b^0(\mathbf{k}, t') dt', \quad (2.58)$$

ce qui justifie l'emploi de l'exposant 0, afin de différencier les deux quantités. On fait donc l'approximation :

$$\rho_b(\mathbf{k}, t) \simeq \sum_{\alpha=1}^N \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_\alpha(t)) \int_{t-\tau_{\text{moy}}/2}^{t+\tau_{\text{moy}}/2} \sum_{j=1}^{Z_b} \exp(i\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{r}}_{j\alpha}(t')) dt', \quad (2.59)$$

où l'on a sorti de l'intégrale le facteur faisant intervenir les seules coordonnées ioniques car $\tau_{\text{moy}} \ll \tau_{\text{ion}} \sim \left(\frac{1}{R_\alpha} \frac{dR_\alpha}{dt} \right)^{-1}$.

On définit la transformée de Fourier de la densité ionique dépendante du temps :

$$\rho_I(\mathbf{k}, t) \equiv \sum_{\alpha=1}^N \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_\alpha(t)), \quad (2.60)$$

ainsi que le *facteur de forme ionique* (FFI), c'est-à-dire la moyenne statistique de la densité électronique liée à un ion :

$$f_I(\mathbf{k}) \equiv \left\langle \sum_{j=1}^{Z_b} \exp(i\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{r}}_{j\alpha}(t)) \right\rangle = \int_{t-\tau_{\text{moy}}/2}^{t+\tau_{\text{moy}}/2} \sum_{j=1}^{Z_b} \exp(i\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{r}}_{j\alpha}(t')) dt'. \quad (2.61)$$

Le FFI est aussi égal à la moyenne temporelle de $\sum_{j=1}^{Z_b} \exp(i\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{r}}_{j\alpha}(t))$ puisque $\tau_{\text{elec}} \ll \tau_{\text{moy}}$, et par ailleurs ne dépend pas de l'ion considéré. Finalement $\rho_b(\mathbf{k}, t)$ s'écrit simplement

$$\rho_b(\mathbf{k}, t) = f_I(\mathbf{k}) \rho_I(\mathbf{k}, t), \quad (2.62)$$

c'est-à-dire que la densité électronique liée totale est, dans l'espace réciproque, simplement le produit de la densité ionique totale par la densité électronique liée moyenne pour un ion.

En développant l'expression 2.55 de $I_{ee}(\mathbf{k}, t)$ on voit apparaître quatre termes :

$$I_{ee}(\mathbf{k}, t) = \underbrace{\langle \rho_b(\mathbf{k}, t) \rho_b^*(\mathbf{k}, 0) \rangle}_{(a)} + \underbrace{\langle \rho_f(\mathbf{k}, t) \rho_b^*(\mathbf{k}, 0) \rangle}_{(b_1)} + \underbrace{\langle \rho_b(\mathbf{k}, t) \rho_f^*(\mathbf{k}, 0) \rangle}_{(b_2)} + \underbrace{\langle \rho_f(\mathbf{k}, t) \rho_f^*(\mathbf{k}, 0) \rangle}_{(c)} \quad (2.63)$$

que l'on va exprimer à partir de plusieurs fonctions intermédiaires de diffusion représentant diverses corrélations spatio-temporelles dans le plasma :

- $F_{ee}(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{Z_f N} \langle \rho_f(\mathbf{k}, t) \rho_f^*(\mathbf{k}, 0) \rangle$ représente l'autocorrélation de la densité des électrons libres c'est-à-dire les modes collectifs électroniques.
- $F_{eI}(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{\sqrt{Z_f N}} \langle \rho_I(\mathbf{k}, t) \rho_f^*(\mathbf{k}, 0) \rangle$ représente la corrélation entre densité ionique et densité d'électrons libres. Ce terme décrit donc en particulier le phénomène d'écrantage des ions par les électrons.
- $F_{II}(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\beta=1}^N \langle \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_\alpha(t) - \mathbf{R}_\beta(0))] \rangle$ représente l'autocorrélation de la densité ionique : c'est la mesure de l'organisation structurale des ions du plasma.
- $F_S(\mathbf{k}, t) = \langle \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_\alpha(t) - \mathbf{R}_\alpha(0))] \rangle$ (S pour *self*) est la fonction d'autocorrélation de la position d'un ion, et représente les échelles de temps et d'espace caractéristiques des mouvements d'un ion du plasma.
- $F_{ce}(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{Z_b} \langle \rho_b(\mathbf{k}, t) \rho_b^*(\mathbf{k}, 0) \rangle$, (ce pour *core électrons*, électrons de coeur) où $\rho_{b,\alpha}(\mathbf{k}, t) = \sum_{j=1}^{Z_b} \exp(i\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{r}}_{j\alpha}(t))$ représente la densité électronique liée à l'ion α . Le modèle du plasma ne comportant qu'une seule espèce et un seul état d'ionisation, tous les ions sont identiques et on a pour $\alpha \neq \beta$ $\langle \rho_{b,\alpha}(\mathbf{k}, t) \rho_{b,\alpha}^*(\mathbf{k}, 0) \rangle = \langle \rho_{b,\beta}(\mathbf{k}, t) \rho_{b,\beta}^*(\mathbf{k}, 0) \rangle$ et on oubliera dorénavant l'indice désignant l'ion considéré. Cette fonction représente donc l'autocorrélation de la densité des électrons liés dans un ion. Cette quantité sera reliée aux éventuelles transitions lié-lié ou lié-libre que les électrons de coeur peuvent subir lors du processus de diffusion.

Nous pouvons maintenant nous attacher à exprimer les différents termes ((a), (b₁), (b₂) et (c)) de l'expression $I_{ee}(\mathbf{k}, t)$ dans 2.63. Tout d'abord :

$$\begin{aligned}
(a) &= \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\beta=1}^N \left\langle \left(\sum_{j=1}^{Z_b} \exp(i\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{r}}_{j\alpha}(t)) \right) \left(\sum_{k=1}^{Z_b} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{r}}_{k\beta}(0)) \right) \right. \\
&\quad \left. \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_\alpha(t) - \mathbf{R}_\beta(0))] \right\rangle \\
&\simeq \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\beta=1}^N \left\langle \left(\sum_{j=1}^{Z_b} \exp(i\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{r}}_{j\alpha}(t)) \right) \left(\sum_{k=1}^{Z_b} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{r}}_{k\beta}(0)) \right) \right\rangle \\
&\quad \langle \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_\alpha(t) - \mathbf{R}_\beta(0))] \rangle.
\end{aligned}$$

Une autre hypothèse faite à ce stade du calcul est que les trajectoires des électrons liés à des ions distincts sont statistiquement indépendantes, et que par conséquent on peut écrire :

$$\begin{aligned}
\forall \alpha \neq \beta, \quad &\left\langle \left(\sum_{j=1}^{Z_b} \exp(i\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{r}}_{j\alpha}(t)) \right) \left(\sum_{k=1}^{Z_b} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{r}}_{k\beta}(0)) \right) \right\rangle \\
&\simeq \left\langle \left(\sum_{j=1}^{Z_b} \exp(i\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{r}}_{j\alpha}(t)) \right) \right\rangle \left\langle \left(\sum_{k=1}^{Z_b} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{r}}_{k\beta}(0)) \right) \right\rangle
\end{aligned}$$

On a donc pour le premier terme

$$\begin{aligned}
(a) &= \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\beta=1}^N \left\langle |f_I(\mathbf{k})|^2 \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_\alpha(t) - \mathbf{R}_\beta(0))] \right\rangle \\
&\quad - \sum_{\alpha=1}^N |f_I(\mathbf{k})|^2 \langle \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_\alpha(t) - \mathbf{R}_\alpha(0))] \rangle \\
&\quad + \sum_{\alpha=1}^N \left\langle \left(\sum_{j=1}^{Z_b} \exp(i\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{r}}_{j\alpha}(t)) \right) \left(\sum_{k=1}^{Z_b} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{r}}_{k\alpha}(0)) \right) \right\rangle \\
&\quad \langle \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_\alpha(t) - \mathbf{R}_\alpha(0))] \rangle \\
&= N |f(\mathbf{k})|^2 F_{II}(\mathbf{k}, t) \\
&\quad - N |f_I(\mathbf{k})|^2 F_S(\mathbf{k}, t) \\
&\quad + N Z_b F_{ce}(\mathbf{k}, t) F_S(\mathbf{k}, t).
\end{aligned}$$

En ce qui concerne les termes (b_i), on a :

$$\begin{aligned}
(b_2) &= N\sqrt{Z_f F_{eI}}(\mathbf{k}, t) f_I(\mathbf{k}) \\
&= \left\langle \sum_{\alpha=1}^N \sum_{i=1}^{NZ_f} \exp \left[i\mathbf{k} \cdot \left(\mathbf{R}_\alpha(t) - \mathbf{r}_i^f(0) \right) \right] \right\rangle \\
&= \left\langle \mathcal{F}_{\mathbf{r}} \left[\sum_{\alpha=1}^N \sum_{i=1}^{NZ_f} \delta \left[\mathbf{r} - \left(\mathbf{R}_\alpha^s(t) - \mathbf{r}_i^f(0) \right) \right] \right] \right\rangle.
\end{aligned}$$

(b_2) est la moyenne de la transformée de Fourier d'une fonction f de \mathbf{r} et t . Comme le système est supposé homogène, f est une fonction paire de \mathbf{r} et donc sa transformée est réelle et $(b_2) = (b_2)^*$. D'autre part, à l'équilibre le système est stationnaire, et $\langle f \rangle$ est invariant par une translation de $-t$:

$$(b_2) = \langle \rho_f(\mathbf{k}, -t) \rho_b^*(\mathbf{k}, 0) \rangle = \langle \rho_f(\mathbf{k}, t) \rho_b^*(\mathbf{k}, 0) \rangle = (b_1). \quad (2.64)$$

Enfin, le dernier terme est simplement par définition :

$$(c) = Z_f N F_{ee}(\mathbf{k}, t). \quad (2.65)$$

Ce qui nous permet d'obtenir pour la fonction intermédiaire de diffusion totale :

$$\begin{aligned}
I^{tot}(k, t) &= N |f_I(k)|^2 F_{II}(k, t) + N \left[Z_b F_{ce}(k, t) - |f_I(k)|^2 \right] F_S(k, t) \\
&\quad + Z_f N F_{ee}(k, t) + 2N\sqrt{Z_f F_{eI}}(k, t) f_I(k).
\end{aligned}$$

On peut noter que pour les cas qui nous intéressent le système est isotrope et les fonctions ne dépendent que de la norme du vecteur d'onde : $k = |\mathbf{k}|$. On travaillera dorénavant avec la variable scalaire.

De même le facteur de structure dynamique $S_{ee}^{tot}(k, \omega)$ est la transformée de Fourier temporelle de la fonction de diffusion intermédiaire.

$$S_{ee}^{tot}(k, \omega) = \mathcal{F}_t [I_{ee}(k, t)] = \frac{1}{2\pi N} \int I_{ee}(k, t) e^{i\omega t} dt, \quad (2.66)$$

Les FSD partiels correspondant aux diverses fonctions de diffusion intermédiaires définies plus haut sont obtenus de la même manière, avec des notations évidentes. Ainsi,

$$S_{ee}^{tot}(k, \omega) = |f_I(k)|^2 S_{II}(k, \omega) + Z_b \int_{-\infty}^{+\infty} S_{ce}(k, \omega - \omega') S_S(k, \omega') d\omega' \\ - |f_I(k)|^2 S_S(k, \omega) + Z_f S_{ee}(k, \omega) + 2\sqrt{Z_f} S_{eI}(k, \omega) f_I(k).$$

Cette expression peut être encore simplifiée en définissant un FSD alternatif $\tilde{S}_{ce}(k, \omega)$ pour les électrons de coeur à partir de la corrélation entre les variations de densité relativement à leur valeur moyenne $\delta\rho_b(k, t) = \rho_b(k, t) - \langle\rho_b(k, t)\rangle = \rho_b(k, t) - f_I(k)$. Cette nouvelle fonction $\tilde{S}_{ce}(k, \omega)$ peut être écrite en fonction de $S_{ce}(k, \omega)$:

$$\tilde{S}_{ce}(k, \omega) = \frac{1}{2\pi Z_b} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \delta\rho_b(k, t) \delta\rho_b^*(k, 0) \rangle \exp(i\omega t) dt \quad (2.67)$$

$$= S_{ce}(k, \omega) - \frac{|f_I(k)|^2}{Z_b} \delta(\omega), \quad (2.68)$$

ce qui inséré dans les expression du FSD électronique total nous mène à :

$$S_{ee}^{tot}(k, \omega) = |f_I(k)|^2 S_{II}(k, \omega) + Z_b \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{S}_{ce}(k, \omega - \omega') S_S(k, \omega') d\omega' \\ + Z_f S_{ee}(k, \omega) + 2\sqrt{Z_f} S_{eI}(k, \omega) f_I(k). \quad (2.69)$$

On fait maintenant usage des relations :

$$S_{ee}(k, \omega) = \frac{|\rho(k)|^2}{Z_f} S_{II}(k, \omega) + S_{ee}^0(k, \omega) \quad (2.70)$$

$$S_{eI}(k, \omega) = \frac{\rho(k)}{\sqrt{Z_f}} S_{II}(k, \omega) \quad (2.71)$$

où $\rho(k)$ est une densité de charge électronique telle que $\int \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = Z_f$ (c'est-à-dire qu'elle écranterait exactement la charge nette d'un ion), définie relativement à la *fonction de corrélation directe* électron-ion $C_{eI}(k)$ [44, 54]. Voir annexe ?.

En insérant A.17 et A.18 dans 2.69 puis en regroupant les termes, on obtient l'expression finale de $S_{ee}^{tot}(k, \omega)$, où du moins la forme sous laquelle elle est habituellement utilisée :

$$\begin{aligned}
S_{ee}^{tot}(k, \omega) = & [f_I(k) + \rho(k)]^2 S_{II}(k, \omega) + Z_f S_{ee}^0(k, \omega) \\
& + Z_b \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{S}_{ce}(k, \omega - \omega') S_S(k, \omega') d\omega'. \quad (2.72)
\end{aligned}$$

$S_{ee}^{tot}(k, \omega)$ s'exprime sous forme de la somme de trois termes. Résumons-en la signification.

- $S_{elas}(k) = [f_I(k) + \rho(k)]^2 S_{II}(k, \omega)$: *Le terme ionique*. On parle également de terme élastique car en pratique on peut considérer que $S_{II}(k, \omega) \simeq S_{II}(k) \delta(\omega)$ (le facteur de structure ionique *statique* étant bien entendu défini par $S_{II}(k) = \int S_{II}(k, \omega) d\omega$), la dynamique des ions correspondant à des fréquences trop basses pour être résolue expérimentalement. Dans cette limite on voit que la seule contribution se trouve à $\omega = 0$: le photon n'échange donc pas d'énergie et la diffusion est élastique. Il s'agit de la diffusion sur les électrons qui suivent dynamiquement le mouvement des ions et qui dans cette limite basse fréquence se répartissent en deux populations, dont les densités moyennes, pour chaque ion, s'écrivent :
 - $f_I(k)$: les électrons énergétiquement liés aux ions
 - $\rho(k)$: les électrons libres, ici caractérisés par leur densité d'équilibre pour une configuration ionique donnée, c'est-à-dire piquée autour des ions. $\rho(k)$ écrante la charge résiduelle $Z_A - Z_b$, de manière à ce que l'ensemble forme un *pseudo atome neutre* (NPA)
 Ces deux contributions sont multipliées par le facteur de structure ionique statique $S_{II}(k)$. Ce dernier est lié à la fonction de distribution de paire ion-ion $g_{II}(r)$ par $S(k) = 1 + \rho \int \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) g_{II}(r) d\mathbf{r}$, et représente donc le degré d'ordre dans la structure ionique.
- $S_{elec}(k, \omega) = Z_f S_{ee}^0(k, \omega)$: *Le terme électronique*. Il représente la partie haute-fréquence des fluctuations de densité des électrons libres (la partie basse fréquence correspondant aux électrons polarisés $\rho(k)$, cf. équation 2.90). Cette séparation entre haute-fréquence et basse-fréquence correspond au découplage fait plus haut entre les échelles de temps de la dynamique électronique τ_{elec} et ionique τ_{ion} .
- $S_{trans}(k, \omega) = Z_b \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{S}_{ce}(k, \omega - \omega') S_S(k, \omega') d\omega'$: *Le terme inélastique*. Il fait apparaître les fluctuations de densité $\tilde{S}_{ce}(k, \omega - \omega')$ dans le cortège électronique d'un ion dues à d'éventuelles transitions excitées par le photon incident, modulées par le mouvement propre de l'ion $S_S(k, \omega)$. Notons que pour les mêmes raisons que précédemment, $S_S(k, \omega) \simeq \delta(\omega)$ et on écrit $S_{trans}(k, \omega) \simeq Z_b \tilde{S}_{ce}(k, \omega)$.

CQFR : La séparation *a priori* entre électrons libres et électrons liés dans le plasma, puis l'analyse des corrélations de position entre ces deux populations d'électrons et celle des ions permet d'aboutir à une formulation relativement simple et compacte du FSD électronique total. Il apparaît trois contributions au sens physique clair : terme ionique, terme électronique et terme inélastique.

$$S_{ee}^{tot}(k, \omega) = [f_I(k) + \rho(k)]^2 S_{II}(k, \omega) + Z_f S_{ee}^0(k, \omega) + Z_B \tilde{S}_{ce}(k, \omega) \quad (2.73)$$

Les hypothèses faites sont les suivantes :

- les ions sont tous de la même espèce et possèdent le même état de charge
- découplage de la dynamique électrons/ions
- découplage entre les électrons liés à différents ions (on ignore par exemple d'éventuels états moléculaires)

On peut noter que cette analyse est faite avec un formalisme classique (définition de trajectoires pour les électrons...) mais que les hypothèses portent réellement sur la dynamique du système. On aurait également pu faire une analyse dans un cadre quantique avec des fonctions d'ondes pour décrire les densités électroniques.

L'expression obtenue pour le FSD reste essentiellement formelle et nous allons maintenant voir comment calculer les différentes grandeurs qui y figurent.

2.2.2 Modèle de matière

Afin de rendre ce modèle effectif, il nous faut disposer de plusieurs grandeurs :

- une ionisation moyenne équivalente Z^* . On posera alors $Z_f = Z^*$ et $Z_b = Z_A - Z^*$.
- la partie haute-fréquence de la réponse dynamique des électrons libres $S_{ee}^0(k, \omega)$
- le facteur de forme ionique $f_I(k)$
- la densité d'électrons polarisés $\rho(k)$
- le facteur de structure statique du système ionique $S_{II}(k)$
- éventuellement un modèle pour le comportement des électrons liés $\tilde{S}_{ce}(k, \omega)$

La donnée de l'ensemble de ces paramètres peut être obtenue via différents modèles physiques. On appellera le choix d'un modèle particulier le *modèle de matière* choisit pour décrire le plasma. La façon de calculer ces différentes grandeurs possède naturellement une influence sur les spectres de diffusion simulés.

Les sections suivantes seront dévolues à la présentation de trois types de modèles que nous avons utilisés pour exploiter les données expérimentales.

- Le premier, qui constitue notre point de départ est celui développé par G. Gregori [46]. Il est aujourd'hui largement utilisé dans la littérature pour interpréter les données. Il exploite pour une large part (mais pas entièrement) des formules analytiques, produisant des spectres de façon quasi instantanée sur un ordinateur personnel.

- Un modèle numérique d'*atome moyen*, SCAALP, calculant les densités électroniques de façon complètement quantique et prenant en compte la structure ionique via un modèle de référence paramétré, ajusté de façon variationnelle.
- Un modèle de *dynamique moléculaire quantique* ou QMD (pour *quantum molecular dynamics*) qui fait le moins d'hypothèses physiques mais en contrepartie très coûteux en temps de calcul.

L'idée étant bien sûr que les modèles les plus complexes mais peu maniables servent de banc d'essai pour les modèles les plus simples.

2.3 Modèle Gregori

Détaillons donc dans cette section les modèles utilisés ainsi que les hypothèses et approximations réalisées pour aboutir à une expression calculable de chacun des trois termes de FSD électronique total.

2.3.1 Terme électronique

L'expression de la réponse électronique peut se faire dans le cadre du formalisme de la réponse linéaire.

2.3.1.1 Réponse linéaire

Fonctions de Réponse. La réponse linéaire consiste à caractériser le comportement du plasma par une classe de fonctions décrivant la variation d'une grandeur physique lorsque le plasma est soumis à une perturbation extérieure. Il s'agit d'un traitement essentiellement perturbatif, visant à décrire les fluctuations de faible amplitude au voisinage d'une situation d'équilibre.

On appelle A une observable du système et φ_{ext} un champ externe auquel on applique une perturbation : $\delta\varphi_{ext}(\mathbf{r}, t)$, induisant une variation de A : $\delta A(\mathbf{r}, t)$. Si, en absence de perturbation, le système est à l'équilibre, on a $A(\mathbf{r}, t) = A_0 + \delta A(\mathbf{r}, t)$, et $\varphi_{ext}(\mathbf{r}, t) = \varphi_{ext}^0 + \delta\varphi_{ext}(\mathbf{r}, t) = \delta\varphi_{ext}(\mathbf{r}, t)$. La variation de A peut être exprimée à partir de l'amplitude de la perturbation au moyen de la dérivée fonctionnelle :

$$\delta A(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^t \frac{\delta A[\varphi_{ext}(\mathbf{r}, t)]}{\delta\varphi_{ext}(\mathbf{r}, t')} \delta\varphi_{ext}(\mathbf{r}, t') dt'. \quad (2.74)$$

Par définition, la fonction de réponse linéaire est la quantité

$$R_{A\varphi_{ext}}(\mathbf{r}, t, t') = R_{A\varphi_{ext}}(\mathbf{r}, t - t') = \left[\frac{\delta A}{\delta \varphi_{ext}}(\mathbf{r}, t - t') \right]_0, \quad (2.75)$$

où la dérivée fonctionnelle $\frac{\delta A}{\delta \varphi_{ext}}$ est évaluée à l'équilibre (donc pour $\varphi_{ext}(\mathbf{r}, t) = \varphi_{ext}^0 = 0$) qui est un état stationnaire de sorte que $R_{A\varphi_{ext}}$ n'est fonction que de la différence $t - t'$. Dans le domaine spectral, on a :

$$\delta A(\mathbf{k}, \omega) = R_{A\varphi_{ext}}(\mathbf{k}, \omega) \delta \varphi_{ext}(\mathbf{k}, \omega). \quad (2.76)$$

et la réponse du système est simplement proportionnelle à la perturbation.

On peut par ailleurs relier par une fonction de réponse linéaire deux observables du plasma : si l'application de la perturbation $\delta \varphi_{ext}^A$ se traduit par l'apparition d'un terme supplémentaire dans l'hamiltonien $\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{ext}(t)$ décrivant l'évolution de l'observable $A(\mathbf{r})$ tel que

$$\mathcal{H}_{ext}(t) = - \int d\mathbf{r} A(\mathbf{r}) \delta \varphi_{ext}^A(\mathbf{r}, t), \quad (2.77)$$

(c'est-à-dire que A et φ_{ext}^A sont un couple de variables conjuguées, tel que polarisation et champ électrique par exemple), alors on définit alors la fonction de réponse linéaire $R_{BA}(\mathbf{k}, \omega)$ entre une autre observable quelconque B et A par :

$$\delta B(\mathbf{k}, \omega) = R_{BA}(\mathbf{k}, \omega) \delta \varphi_{ext}^A(\mathbf{k}, \omega). \quad (2.78)$$

C'est cette relation que nous allons utiliser par la suite pour exprimer la fonction de réponse densité-densité.

Examinons maintenant le lien qui existe en fonction de réponse et facteur de structure.

Théorème de fluctuation-dissipation. On considère deux quantités physiques A et B dans un plasma à l'équilibre thermodynamique, donc homogène et stationnaire. Leur fonction de corrélation

$$C_{AB}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \langle B(\mathbf{r} + \mathbf{r}_0, t + t_0) A(\mathbf{r}_0, t_0) + A(\mathbf{r}_0, t_0) B(\mathbf{r} + \mathbf{r}_0, t + t_0) \rangle, \quad (2.79)$$

ici écrite dans le cas général où A et B ne commutent pas, donne dans l'espace de Fourier une densité spectrale de fluctuations (que nous avons appelée facteur de structure dynamique dans le cas où A et B désignent tous deux la densité électronique) :

$$S_{AB}(\mathbf{k}, \omega) = \mathcal{F}_t \mathcal{F}_r [C_{AB}(\mathbf{r}, t)]. \quad (2.80)$$

Le théorème de *fluctuation-dissipation* [15, 55], établit un lien formel pour n'importe quel système statistique à l'équilibre thermodynamique à la température T , entre d'une part la fonction de réponse linéaire $R_{AB}(\mathbf{k}, \omega)$ liant deux observables A et B , et d'autre part la densité spectrale de fluctuations à l'équilibre entre ces mêmes grandeurs $S_{AB}(\mathbf{k}, \omega)$:

$$S_{BA}(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{i\hbar}{2\pi} \frac{1}{1 - \exp(-\hbar\omega/k_B T)} [R_{BA}(\mathbf{k}, \omega) - R_{AB}(-\mathbf{k}, -\omega)]. \quad (2.81)$$

Fonction de réponse linéaire densité-densité. On voit donc que l'on peut obtenir une expression pour le FSD des électrons libres en termes de fonctions de réponse densité-densité en écrivant le théorème de fluctuation-dissipation pour $A = B = \rho_f(\mathbf{k}, \omega)$. L'opposé de la fonction de réponse linéaire densité-densité correspondante est parfois appelée *susceptibilité* ou *polarisabilité* $\chi(\mathbf{k}, \omega) = -R_{\rho_f \rho_f}(\mathbf{k}, \omega)$. D'autre part la définition de la fonction de réponse entraîne que $R_{AB}(-\mathbf{k}, -\omega) = R_{AB}^*(\mathbf{k}, \omega)$ si $\omega \in \mathbb{R}$. On a donc

$$S_{ee}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\hbar}{2\pi} \frac{1}{1 - \exp(-\hbar\omega/k_B T)} 2\text{Im}[\chi(\mathbf{k}, \omega)] \quad (2.82)$$

Il faut noter que l'on emploie très souvent la *fonction de réponse diélectrique* des électrons $\varepsilon(\mathbf{k}, \omega)$ plutôt que leur susceptibilité $\chi(\mathbf{k}, \omega)$ dans l'équation précédente. Établissons donc le lien entre les deux fonctions.

Fonction diélectrique. Si l'on applique une perturbation au potentiel électrostatique externe $\Phi_{ext}(\mathbf{k}, \omega)$ auquel est soumis le plasma, les perturbations de densité induites $\rho_{ind}(\mathbf{k}, \omega) = \delta\rho_f(\mathbf{k}, \omega)$ provoquent à leur tour une variation du potentiel électrostatique qui s'écrit $\Phi_{ind}(\mathbf{k}, \omega) = v(k)\rho_{ind}(\mathbf{k}, \omega)$. $v(k) = -e/\epsilon_0 k^2 = \mathcal{F}_r[\frac{-e}{4\pi\epsilon_0 r}]$ est la transformée de Fourier du potentiel électrostatique d'un électron.

Par définition, la fonction de réponse diélectrique $\varepsilon(\mathbf{k}, \omega)$ relie le potentiel électrostatique total $\Phi(\mathbf{k}, \omega) = \Phi_{ind}(\mathbf{k}, \omega) + \Phi_{ext}(\mathbf{k}, \omega)$ au potentiel appliqué par :

$$\Phi(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\Phi_{ext}(\mathbf{k}, \omega)}{\varepsilon(\mathbf{k}, \omega)}, \quad (2.83)$$

de sorte qu'elle exprime la façon dont le plasma écran une perturbation électrostatique. On en déduit immédiatement

$$\Phi_{ind}(\mathbf{k}, \omega) = \left(\frac{1}{\epsilon(\mathbf{k}, \omega)} - 1 \right) \Phi_{ext}(\mathbf{k}, \omega). \quad (2.84)$$

Par ailleurs le potentiel se couple aux variations de densité afin de donner

$$\mathcal{H}_{ext}(t) = - \int d\mathbf{r} (-e\rho_{ind})(\mathbf{r}, t) \Phi_{ext}(\mathbf{r}, t), \quad (2.85)$$

c'est-à-dire que la variation de densité ρ_{ind} est conjuguée avec $-e\Phi_{ext}(\mathbf{r}, t)$. On peut donc écrire la fonction de réponse linéaire suivante :

$$\rho_{ind}(\mathbf{k}, \omega) = R_{\rho_{ind}, -e\Phi_{ext}}(\mathbf{k}, \omega) (-e\phi_{ext}(\mathbf{k}, \omega)), \quad (2.86)$$

puis, en utilisant la relation entre $\rho_{ind}(\mathbf{k}, \omega)$ et $\phi_{ext}(\mathbf{k}, \omega)$ ainsi que l'équation 2.84,

$$R_{\rho_{ind}, -e\Phi_{ext}}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{ev(k)} \left(\frac{1}{\epsilon(\mathbf{k}, \omega)} - 1 \right). \quad (2.87)$$

Les équations 2.78 et 2.86 permettent enfin d'écrire la fonction de réponse densité-densité :

$$R_{\rho_{ind}\rho_{ind}}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\rho_{ind}(\mathbf{k}, \omega)}{\rho_{ind}(\mathbf{k}, \omega)} R_{\rho_{ind}, -e\Phi_{ext}}(\mathbf{k}, \omega) \quad (2.88)$$

d'où la relation suivante entre susceptibilité $\chi(\mathbf{k}, \omega) = -R_{\rho_{ind}\rho_{ind}}(\mathbf{k}, \omega)$ et fonction diélectrique $\epsilon(\mathbf{k}, \omega)$:

$$\chi(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{V(k)} \left(1 - \frac{1}{\epsilon(\mathbf{k}, \omega)} \right). \quad (2.89)$$

On a simplement noté dans cette équation $V(k) = -ev(k)$, l'énergie potentielle d'interaction coulombienne entre deux électrons.

On a finalement l'expression du FSD électronique en fonction de la fonction diélectrique :

$$S_{ee}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{1 - \exp(-\hbar\omega/k_B T)} \frac{\hbar}{\pi V(k)} \text{Im} \left[\frac{1}{\epsilon(\mathbf{k}, \omega)} \right]. \quad (2.90)$$

Les relations (équivalentes) assez générales 2.90 et 2.82 permettent d'introduire plusieurs niveaux d'approximation dans la description diélectrique du plasma au moyen de différentes expressions pour $\epsilon(\mathbf{k}, \omega)$ ou $\chi(\mathbf{k}, \omega)$. Examinons maintenant les plus utilisées.

2.3.1.2 Expressions de la fonction diélectrique électronique

La fonction diélectrique électronique (ou la susceptibilité) est obtenue formellement en résolvant l'équation de mouvement pour les excitations de fluctuation de densité, dans le formalisme de la seconde quantification (voir par exemple [55]). Les fluctuations de densité à l'équilibre sont ensuite obtenues en prenant la moyenne statistique. L'équation du mouvement est cependant fondamentalement non-linéaire vis-à-vis des fluctuations de densité, et on ne peut par conséquent pas définir de fonction de réponse linéaire de densité sans la linéariser.

Approximation de Hartree-Fock. L'approximation la plus brutale consiste à négliger tous les termes d'interaction coulombienne dans l'hamiltonien du système. Ce que l'on décrit est alors la dynamique du gaz d'électrons *libres*, et la polarisabilité obtenue est⁴

$$\chi^0(\mathbf{k}, \omega) = \frac{2}{\hbar} \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{f(\mathbf{p} + \hbar\mathbf{k}/2) - f(\mathbf{p} - \hbar\mathbf{k}/2)}{\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}/m_e - \omega - i\nu}, \quad (2.91)$$

où f est la fonction de distribution en impulsion des électrons à l'équilibre, c'est-à-dire la fonction de Fermi-Dirac $f(\mathbf{p}) = \frac{1}{\exp[(p^2/2m_e - \mu)/k_B T] + 1}$. Ici μ est le potentiel chimique qui normalise f , et $\nu \rightarrow 0^+$. La fonction diélectrique correspondante est, conformément à 2.89 :

$$\epsilon^0(\mathbf{k}, \omega) = [1 + V(k)\chi^0(\mathbf{k}, \omega)]^{-1}. \quad (2.92)$$

On note, malgré la supposition de l'absence d'interactions coulombiennes dans le plasma, la présence du potentiel coulombien $V(k)$ dans l'expression de $\epsilon^0(\mathbf{k}, \omega)$. En effet la fonction diélectrique est définie à partir de la réponse du plasma à un potentiel électrostatique extérieur, c'est cette interaction qu'exprime la présence de $V(k)$.

Approximation de la phase aléatoire (ou RPA, pour *random phase approximation*). La RPA va plus loin et considère les interactions coulombiennes dans le plasma d'électrons, en se limitant toutefois au seul terme linéaire, c'est-à-dire l'interaction entre les électrons et le champ correspondant à la densité moyenne de tous les autres. Dans ces conditions la résolution de l'équation du mouvement mène aux expressions suivantes de la polarisabilité et de la fonction diélectrique :

4. NB : On trouve régulièrement dans la littérature ([56] par exemple) une définition alternative de la polarisabilité comme l'opposé de la fonction de réponse densité de charge-densité de charge. Dans ce cas, l'expression 2.91 est affectée d'un facteur e^2 supplémentaire. Les conventions choisies ici sont celles adoptées dans [55].

$$\chi^{\text{RPA}}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\chi^0(\mathbf{k}, \omega)}{1 - V(k)\chi^0(\mathbf{k}, \omega)} \quad (2.93)$$

$$\epsilon^{\text{RPA}}(\mathbf{k}, \omega) = 1 - V(k)\chi^0(\mathbf{k}, \omega). \quad (2.94)$$

On peut noter que l'on récupère bien la polarisabilité du gaz d'électrons libres si on fait $V(k) = 0$.

Plus loin que la RPA. Si l'on prend en compte dans l'équation du mouvement les termes représentant l'interaction non-linéaire des fluctuations de densités entre elles, on ne peut naturellement plus définir de fonction de réponse linéaire entre le potentiel et la densité électronique. Une méthode permettant de traiter le cas où des interactions fortes entrent en jeu existe cependant [57] tout en gardant une description diélectrique du milieu. On montre en effet que si l'on remplace les expressions 2.93 et 2.94, par les suivantes

$$\chi^{\text{LFC}}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\chi^0(\mathbf{k}, \omega)}{1 - V(k)(1 - G(\mathbf{k}, \omega))\chi^0(\mathbf{k}, \omega)}, \quad (2.95)$$

$$\epsilon^{\text{LFC}}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1 + V(k)(G(\mathbf{k}, \omega) - 1)\chi^0(\mathbf{k}, \omega)}{1 + V(k)G(\mathbf{k}, \omega)\chi^0(\mathbf{k}, \omega)} \quad (2.96)$$

il existe toujours une fonction $G(\mathbf{k}, \omega)$ (habituellement appelée *correction de champ local*), qui permet d'assurer que la fonction χ^{LFC} définie par 2.95 est bien la fonction de réponse de densité du plasma.

On peut remarquer que cette méthode consiste simplement à remplacer $V(k)$ par $\tilde{V}(k) = V(k)(1 - G(\mathbf{k}, \omega))$, c'est-à-dire à considérer que le potentiel d'interaction n'est plus coulombien mais est renormalisé par l'ensemble des interactions à N-corps. On note par ailleurs que la description RPA est retrouvée en choisissant $G(\mathbf{k}, \omega) = 0$.

L'équation 2.95 est une solution exacte au problème général, mais complètement formelle puisque la méthode ne donne pas d'expression pour la correction de champ local. Ce potentiel renormalisé $\tilde{V}(k)$ est susceptible de dépendre lui-même de la densité, là réside la non-linéarité du problème. On a donc simplement déplacé le problème en cachant la difficulté dans l'évaluation de la fonction G , mais en conservant l'avantage d'une formulation de type réponse linéaire. Néanmoins, on peut améliorer l'expression RPA de ϵ ou χ en trouvant des approximations pour G dans des domaines de validité limités. Les approximations les plus fréquentes consistent à négliger la dépendance en fréquence $G(\mathbf{k}, 0) \simeq G(\mathbf{k}, \omega)$ (approximation dite de *champ local statique*), à interpoler les limites $G(k \rightarrow 0)$ et $G(k \rightarrow \infty)$ imposées

par les règles de somme, puis à réintroduire si nécessaire un comportement en fréquence *ad hoc*. Un bon nombre de publications [47, 51, 58, 59, 60, 61, 62, 63] portent sur le sujet de l'évaluation de $G(k, \omega)$.

CQFR : La partie correspondant aux électrons libres du FSD est donc calculable (en combinant les équations 2.89, 2.90, 2.91 et 2.95) pour un plasma électronique sous les hypothèses suivantes :

- le plasma électronique est à l'équilibre thermodynamique à la température T_e (utilisation du théorème de fluctuation-dissipation)
- le plasma est non relativiste (utilisation d'un formalisme diélectrique qui suppose que les interactions sont de nature électrostatique)
- il est légitime de linéariser l'équation du mouvement pour les fluctuations de densité (RPA).

Bien que l'on se place dans le cadre du formalisme de la réponse linéaire, on peut en principe obtenir des corrections pour décrire la réponse électronique à fort couplage si l'on connaît une expression satisfaisante de $G(\mathbf{k}, \omega)$, au moins dans la plage $(\Delta \mathbf{k}, \Delta \omega, \Delta \rho, \Delta T)$ qui nous intéresse.

2.3.2 Terme ionique

L'évaluation du terme ionique suppose la connaissance :

- du facteur de structure statique (FSS) ion-ion $S_{II}(k)$, ou de manière équivalente la fonction de distribution de paire $g_{II}(r)$
- les densités électroniques liées $f_I(k)$ et polarisées $q(k)$

Le modèle de référence que nous décrivons ici comporte lui même plusieurs niveaux de raffinement dans l'évaluation du FSS ionique, qui ont tous été utilisés dans ce travail et que nous présentons donc brièvement dans les trois parties suivantes :

- un modèle d'écrantage basé sur la réponse linéaire.
- deux modèles basés sur l'approche des équations intégrales de la théorie des liquides :
 - un modèle HNC multicomposantes, qui n'est pas intégré dans ATHOS mais qui a été utilisé pour l'analyse des données.
 - une solution analytique du FSS pour OCP de sphères dures chargées dans l'approximation MSA (pour *Mean Spherical Approximation*, voir partie 2.3.2.2) comme système de référence, puis introduction de la réponse électronique séparément.

2.3.2.1 Écrantage linéaire

L'approximation de Born-Oppenheimer nous a permis de traiter les corrélations entre les fluctuations de densité des électrons libres comme s'il s'agissait d'un plasma isolé, sans faire

intervenir les ions. Ici nous devons prendre en compte la polarisation des électrons autour des ions et il nous faut par conséquent considérer un plasma à deux composantes.

Le formalisme de la réponse linéaire tel que nous l'avons décrit dans la section précédente se généralise [64] sans difficulté autre que la lourdeur des expressions obtenues à des plasmas à plusieurs composantes. Ici nous en aurons deux, les électrons et les ions. On définit dans ce cas des fonctions de réponse linéaires en densité entre les espèces $\chi_{rs}(k, \omega) = -R_{\rho_r \rho_s}(k, \omega)$, qui s'écrivent dans l'approximation RPA :

$$\begin{aligned}\chi_{ee}(k, \omega) &= \chi_e^0(k, \omega) (1 - v_I(k) \chi_I^0(k, \omega)) / D \\ \chi_{II}(k, \omega) &= \chi_I^0(k, \omega) (1 - v_e(k) \chi_e^0(k, \omega)) / D \\ \chi_{eI}(k, \omega) &= v_{eI}(k) \chi_e^0(k, \omega) \chi_I^0(k, \omega) / D\end{aligned}\quad (2.97)$$

avec

$$D = (1 - v_{II}(k) \chi_I^0(k, \omega)) (1 - v_{ee}(k) \chi_e^0(k, \omega)) - v_{eI}^2(k) \chi_e^0(k, \omega) \chi_I^0(k, \omega) \quad (2.98)$$

et où les χ_α^0 et $v_{\alpha\beta}$ ($\alpha, \beta = e, I$) sont respectivement les polarisabilités libres pour l'espèce α et les potentiels d'interaction entre les espèces α et β . Reste à injecter ces expressions dans 2.90 pour obtenir les facteurs de structure. Tel quel, le calcul serait impraticable, mais il faut noter que nous n'avons besoin que des facteurs de structure statiques, obtenus à partir des FSD en intégrant sur les fréquences :

$$S_{\alpha\beta}(k) = \int S_{\alpha\beta}(k, \omega) d\omega. \quad (2.99)$$

Ce qui apparaît comme une complication supplémentaire permet en fait d'aller plus loin, en appliquant à l'équation 2.90 les relations de Kramers-Kronig⁵ qui permettent de calculer l'intégrale 2.99 de façon explicite, tel que détaillé dans [55] :

5. **Relations de Kramers-Kronig.** Pour une fonction F de la variable complexe, analytique dans le demi-plan supérieur (ce qui est une propriété des fonctions de réponse linéaire, qui sont causales), les relations suivantes sont vérifiées :

$$\begin{aligned}\operatorname{Re}[F(\omega)] &= \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\operatorname{Im}[F(\omega')]}{\omega' - \omega} d\omega' \\ \operatorname{Im}[F(\omega)] &= -\frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\operatorname{Re}[F(\omega')]}{\omega' - \omega} d\omega'\end{aligned}$$

où \mathcal{P} désigne la valeur principale de Cauchy.

$$S_{\alpha\beta}(k) = -\frac{k_B T}{\sqrt{n_\alpha n_\beta}} \chi_{\alpha\beta}(k, 0) \quad (2.100)$$

où n'interviennent plus que les polarisabilités évaluées en $\omega = 0$. Connaissant par ailleurs [65] l'expression des polarisabilités libres à fréquence nulle : $\chi_\alpha^0(k, 0) = -\frac{n_\alpha}{k_B T}$, la résolution du système 2.97 devient possible.

Arkhipov et al. [66] ont fait le calcul en prenant comme potentiel d'interaction des potentiels proposées par Deutsch [67], renormalisés aux petits rayons pour tenir compte des effets de diffraction quantique et donc prendre en compte la nature quantique des électrons malgré le caractère classique du calcul :

$$v_{\alpha\beta}(r) = \frac{q_\alpha q_\beta}{4\pi\epsilon_0 r} [1 - \exp(-r/\lambda_{\alpha\beta})] + \delta_{\alpha e} \delta_{\beta e} k_B T \ln 2 \exp\left(-\frac{r^2}{\lambda_{ee}^2 \pi \ln 2}\right). \quad (2.101)$$

q_α est la charge électrique de l'espèce α et $\lambda_{\alpha\beta} = \hbar / \sqrt{2\pi\mu_{\alpha\beta} k_B T}$ la longueur d'onde thermique de de Broglie (avec $\mu_{\alpha\beta} = m_\alpha m_\beta / (m_\alpha + m_\beta)$).

Le résultat est excessivement encombrant, mais néanmoins analytique (voir [66]). On obtient la densité $\rho(k)$ via $S_{eI}(k, \omega) = \frac{\rho(k)}{\sqrt{Z_F}} S_{II}(k, \omega)$ [54].

On dispose alors d'un jeu de FSS analytiques, décrivant l'écrantage linéaire dans un plasma classique à deux composantes. Il s'agit donc essentiellement d'un modèle de type Debye-Hückel.

2.3.2.2 Équations intégrales

Une autre voie pour obtenir les fonctions de distribution et facteurs de structure est celle communément employée en théorie des liquides. La méthode adoptée est d'obtenir des équations intégrales pour les fonctions de distribution, puis de faire des approximations pour pouvoir les résoudre. Cette approche permet de rendre compte de la structure de milieux très corrélés tels que les liquides, ce que ne permet pas la théorie linéaire.

Écrivons les relations fondamentales pour un OCP. Ornstein et Zernicke ont établi [68] que la fonction de corrélation spatiale à deux particules dans un fluide peut se décomposer en deux parties : une partie directe ne faisant intervenir que les deux particules considérées, l'une indirecte où interviennent les corrélations existant via l'influence des autres particules du plasma.

$$h(\mathbf{r}) = \underbrace{c(\mathbf{r})}_{\text{partie directe}} + \underbrace{\rho \int c(\mathbf{r}) h(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}'}_{\text{partie indirecte}} \quad (2.102)$$

On appelle *fonction de corrélation totale* la fonction $h(\mathbf{r}) = g(\mathbf{r}) - 1$, où $g(\mathbf{r})$ est toujours la fonction de distribution de paire. On appelle naturellement *fonction de corrélation directe* le premier terme $c(\mathbf{r})$ ⁶. Le second terme s'exprime sous la forme d'un produit de convolution entre $c(\mathbf{r})$ et $h(\mathbf{r})$. L'équation 2.102 est la *relation d'Ornstein-Zernicke*.

La seconde relation fondamentale fait intervenir le potentiel d'interaction à deux corps $v(\mathbf{r})$ en relation avec les fonctions de distribution directe et totale :

$$g(\mathbf{r}) + 1 = \exp \left[-\beta v(\mathbf{r}) + h(\mathbf{r}) - c(\mathbf{r}) + B(\mathbf{r}) \right] \quad (2.103)$$

Cette relation est exacte, mais on remarque la présence d'un terme supplémentaire, le terme de *bridge* $B(\mathbf{r})$ qui représente une série infinie d'intégrales à grand nombre de dimensions sur des produits de $h(\mathbf{r})$ que l'on ne sait pas manipuler directement [69].

Le système à deux inconnues ($c(\mathbf{r})$ et $h(\mathbf{r})$) formé par les deux équations 2.102 et 2.103 permet donc d'obtenir les propriétés structurales d'un fluide à partir des ses propriétés microscopiques : $v(\mathbf{r})$, à la condition d'ajouter à notre système une équation de fermeture portant sur l'expression de $B(\mathbf{r})$. Les plus fréquentes sont :

- Approximation HNC (pour *hypernetted-chain*, parfois traduit par développement en essais). Elle consiste simplement à fixer $B(\mathbf{r}) = 0$, c'est-à-dire que la fonction de distribution de paire s'écrit

$$g(\mathbf{r}) = \exp \left(-\beta v(\mathbf{r}) \right) \exp \left(h(\mathbf{r}) - c(\mathbf{r}) \right). \quad (2.104)$$

Cette approximation donne lieu à l'équation HNC :

$$\log [g(\mathbf{r})] + \beta v(\mathbf{r}) = \rho \int [g(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - 1] (g(\mathbf{r}') - 1 - \log [g(\mathbf{r}')] - \beta v(\mathbf{r}')) d\mathbf{r}'$$

- Approximation de Percus-Yevick [70]. Une linéarisation de la deuxième exponentielle dans l'expression HNC de $g(\mathbf{r})$ conduit

$$g(\mathbf{r}) = \exp \left(-\beta v(\mathbf{r}) \right) (1 + h(\mathbf{r}) - c(\mathbf{r})), \quad (2.105)$$

6. Le lien est fait avec la physique statistique en notant la définition de la fonction de corrélation directe comme dérivée fonctionnelle de l'énergie libre en excès fluide par rapport à la densité

$$c(\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = -\beta \frac{\delta \mathcal{F}^{\text{ex}}[n(\mathbf{r})]}{\delta n(\mathbf{r}_1) \delta n(\mathbf{r}_2)}$$

qui insérée dans le relation d'Ornstein-Zernicke donne l'équation de Percus-Yevick :

$$e^{\beta v(r)} (g(r) + 1) = 1 + \rho \int [g(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - 1] (1 - e^{\beta v(r')}) g(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (2.106)$$

Alors que l'approximation HNC est adaptée à des potentiels à longue portée, l'approximation de Percus et Yevick décrit bien les systèmes interagissant via des forces très répulsives à courte portée, de type sphères dures. Diverses autres approximations ont été décrites, par exemple en interpolant entre ces limites [71]. On peut trouver une discussion complète de la précision de ces différentes approximations dans [69].

Composantes multiples. L'approche des équations intégrales et l'utilisation de la relation de fermeture HNC s'accommodent très bien d'une généralisation à des plasmas à plusieurs composantes [72] :

$$\begin{aligned} h_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) &= h_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) + \sum_{\gamma} \rho_{\gamma} \int c_{\alpha\gamma}(\mathbf{r}) h_{\gamma\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \\ c_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) &= -\beta v_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) + h_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) - \log(h_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) + 1) \end{aligned}$$

Ce système d'équation n'admet pas de solution analytique, et doit être résolu numériquement. Il s'agit même alors d'un problème complexe, la forte non-linéarité des équations posant des problèmes très sérieux de convergence. Des travaux récents [50] montrent la possibilité de résoudre numériquement les équations HNC à plusieurs composantes pour calculer les fonctions de distribution de plasmas à des densités proches de celle du solide, pour différents potentiels d'interaction. Ce modèle relativement général a été utilisé (voir chapitre 4) dans l'interprétation des données expérimentales sur le plastique (donc plusieurs espèces ioniques), pour valider l'utilisation d'un modèle négligeant les interactions entre espèces.

2.3.2.3 OCP écranté

Le deuxième modèle possible, intégré au code ATHOS, pour calculer les FSS ioniques en tenant compte des corrélations est celui publié dans [49]. Il se base sur la détermination de la structure ionique d'un OCP de référence, puis la prise en compte dans un second temps de l'effet d'écrantage des électrons.

Les différents OCP sont caractérisés par un potentiel d'interaction de paire $v(r)$ entre les ions, (éventuellement doté d'un paramètre, tel que le diamètre de sphère dure σ dans les deux premiers ci dessous), et possèdent un fond rigide neutralisant pour décrire les électrons. On peut citer :

- le système de sphères dures :

$$v_{\text{HS}}(r) = \begin{cases} 0 & \text{si } r > \sigma \\ \infty & \text{si } r < \sigma \end{cases}$$

- le système de sphères dures chargées :

$$v_{\text{CHS}}(r) = \begin{cases} e^2/4\pi\epsilon_0 r & \text{si } r > \sigma \\ \infty & \text{si } r < \sigma \end{cases}$$

- l'OCP coulombien :

$$v_{\text{C}}(r) = e^2/4\pi\epsilon_0 r \quad (2.107)$$

Le système d'équations {Ornstein-Zernicke + relation de fermeture} admet des solutions analytiques pour certains types d'OCP. C'est par exemple le cas pour un système de sphères dures dans l'approximation de Percus-Yevick [70]. C'est également le cas du système de sphères dures chargées, si l'on utilise une relation de fermeture spéciale nommée approximation sphérique moyenne [73] (MSA, pour *mean spherical approximation*) :

$$\begin{cases} g(r) = 0 & \text{si } r < \sigma \\ c(r) = -\beta v(r) & \text{si } r > \sigma \end{cases} \quad (2.108)$$

On peut noter que le système CHS-MSA coïncide avec HS-PY si l'on fait $v(r) = 0$ pour $r > \sigma$.

C'est le système de sphères dures chargées, dans l'approximation MSA qui va nous servir d'OCP de référence. Encore une fois l'expression obtenue pour $S_{II}(k)$ est très encombrante⁷ [74] mais complètement analytique donc parfaitement adaptée à un traitement numérique rapide.

Armés d'un modèle pour décrire l'écrantage des ions par les électrons on peut alors introduire la correction correspondant à la polarisation du fond neutralisant. Les détails de cette procédure proposée par Galam et Hansen sont développés dans [75]. Dans le cas d'un faible couplage électron-ion ($\Gamma_{ei} < 1$), un traitement perturbatif permet d'exprimer le FSS résultant comme :

$$S_{II}(k) = \frac{S_{II}^{OCP}(k)}{1 + \delta\varphi(k)S_{II}^{OCP}(k)} \quad (2.109)$$

7. NB : Pour l'expression exacte de $S_{II}(k)$ dans l'approximation CHS-MSA, se reporter à l'article original de Singh [74] plutôt qu'au plus récent [49] qui comporte quelques erreurs de recopie.

où l'on a introduit $\delta v(k) = \delta v(k) \times n_I / k_B T$ qui dénote la différence entre le potentiel d'interaction écranté et celui non écranté :

$$\delta v(k) = \tilde{v}(k) - v(k) = v(k) \left(\frac{1}{\epsilon(k, 0)} - 1 \right). \quad (2.110)$$

Pour faire le lien avec la réponse linéaire présentée plus haut, on peut vérifier que cela revient formellement à introduire une correction de champ local statique dans l'OCP : $G(k) = 1/\epsilon(k, 0)$.

2.3.2.4 Facteur de forme ionique

La dernière grandeur à calculer afin d'avoir une expression complète du terme élastique est le facteur de forme ionique. Rappelons qu'il s'agit de la transformée de Fourier de la densité moyenne d'électrons liée à un ion $f_I(\mathbf{k}) = \mathcal{F}_r \langle \rho_b(\mathbf{r}) \rangle$. Le point de vue classique adopté plus haut nous avait amené à écrire $\rho_b(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^{Z_b} \delta(\mathbf{r} - \tilde{\mathbf{r}}_{j\alpha}(t))$, mais s'il l'on veut réellement calculer ce terme il faut bien entendu faire intervenir les fonctions d'onde pour les états liés et $\rho_b(\mathbf{r}) = \sum_{nlm} \Psi_{nlm}^*(\mathbf{r}) \Psi_{nlm}(\mathbf{r})$.

Il faut noter que les fonctions d'onde ne sont pas celles de l'ion isolé mais doivent tenir compte des effets de plasma, c'est-à-dire de l'environnement constitué par les ions et électrons environnants. Ceux-ci peuvent modifier l'énergie des orbitales et faire disparaître les plus externes (phénomène d'ionisation par pression). On voit qu'un calcul quantique rigoureux, déjà potentiellement complexe pour un ion isolé, l'est d'autant plus dans le cas d'un plasma. Il doit être mené de façon auto-cohérente avec celui de la structure du plasma, et tenir compte des effets de température et de densité.

L'objectif étant ici d'obtenir tout d'abord une expression analytique ou calculable facilement de façon numérique (et avant d'aborder des méthodes plus rigoureuses dans les parties 2.4 puis 2.5), une approche simple consiste à :

- Négliger les effets de plasma. Plus précisément, on fixe de façon arbitraire l'ionisation moyenne Z^* , et on choisit de décrire le plasma par un ion moyen unique comportant $Z_b = Z_A - Z^*$ électrons liés. On introduit de ce fait un degré de liberté qui n'existe pas physiquement dans le système, puisque l'ionisation moyenne dépend implicitement des paramètres thermodynamiques du plasma.
- Considérer que l'ion de charge Z^* est isolé.
- Calculer sa structure électronique au moyen d'un modèle hydrogénique écranté (voir ci-dessous), analytique.

Modèle hydrogénique écranté. L'atome le plus simple, l'hydrogène, étant le seul qui se prête à des calculs analytiques de structure électronique, les physiciens ont développé dès les débuts de la physique atomique des approches pour s'attaquer à des atomes plus complexes. L'une d'entre elles consiste à découpler les électrons liés, et à considérer que chacun évolue dans un potentiel de type hydrogénique, l'effet de tous les autres électrons se résumant à écranter le potentiel du noyau de sorte que l'électron considéré ne voie qu'une charge nucléaire $Z_A - z_{scr}$. On montre que l'écrantage z_{scr} pour une orbitale donnée o dépend des remplissages des différentes orbitales et d'un jeu de constantes d'écran universelles (ne dépendant pas de l'élément considéré) $\{\sigma_{o,o'}\}$, liant les orbitales deux-à-deux. Au premier ordre, les constantes d'écran ne dépendent cependant que du nombre quantique principal n , comme celles $\{\sigma_{n,n'}\}$ calculées par Pauling et Sherman [76]. Plus récemment un modèle plus raffiné [77] a fourni des constantes d'écran $\{\sigma_{nl,n'l'}\}$ avec une dépendance en fonction du nombre quantique orbital l , qui sont celles que nous utilisons.

Fonctions d'onde hydrogéniques. Ne reste plus alors qu'à utiliser les fonctions d'onde hydrogéniques, que l'on sait calculer exactement [76]. En regroupant les orbitales électroniques en sous-couches (l et n fixés) et en notant p_{nl} le nombre d'électrons dans la sous-couche (n, l) , on a : $f_I(\mathbf{k}) = \sum_{n,l} p_{nl} f_{nl}(k)$,

$$\begin{aligned} f_{1s}(k) &= \frac{1}{(1 + x_{1s}^2)^2} \\ f_{2s}(k) &= \frac{(1 - 2x_{2s}^2)(1 - x_{2s}^2)}{(1 + x_{2s}^2)^4} \\ f_{2p}(k) &= \frac{1 - x_{2p}^2}{(1 + x_{2p}^2)^4} \\ &\dots \end{aligned}$$

et où $x_{n,l}$ est le vecteur d'onde réduit qui dépend de la sous-couche via la constante d'écran correspondante :

$$x_{n,l} = k \frac{a_0/2}{Z_A - z_{scr,(n,l)}}. \quad (2.111)$$

$a_0 = \frac{\hbar^2 \epsilon_0}{\pi m_e e^2}$ est le rayon de Bohr.

Un autre problème soulevé par cette approche est qu'elle ne précise pas *a priori* les occupations $p_{n,l}$ des sous-couches. Lorsque cette approche a été utilisée, nous avons toujours rempli les sous-couches "de bas en haut", c'est-à-dire par énergie croissante.

CQFR : Nous disposons donc de trois modèles effectifs pour calculer le FSS ionique :

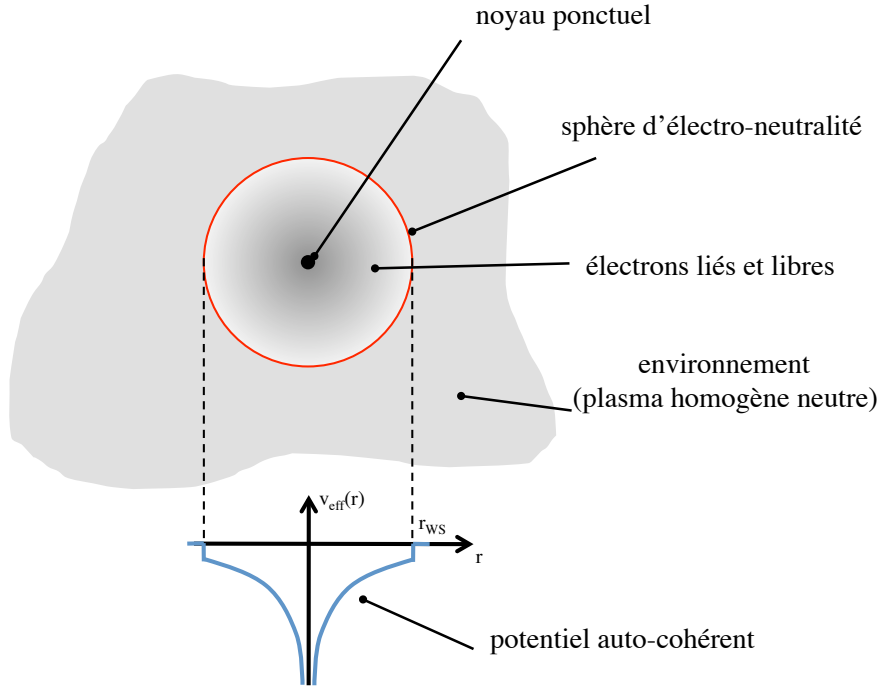
- le premier est issu de la théorie linéaire et fait usage de la RPA. Il rend compte de l'écrantage linéaire mutuel des fluides électroniques et ioniques.
- le second, non intégré à ATOHS, est un code résolvant les équations HNC à plusieurs composantes avec des potentiels semi-classiques.
- le troisième, OCP écranté, considère un OCP de sphères dures chargées, pour lesquelles les équations intégrales possèdent une solution dans l'approximation MSA. Un tel modèle est capable de rendre compte des corrélations de position entre les ions. L'effet des électrons est introduit par la suite, mais cette approche fait l'hypothèse d'un faible couplage électron-ion ($\Gamma_{ei} < 1$).

Le facteur de forme ionique, quant à lui, est calculé via un modèle hydrogénique écranté, utilisant des fonctions d'onde hydrogéniques d'ions isolés.

2.4 Modèle d'atome moyen SCAALP

Atome moyen. Les modèles d'atome moyen ont été développés dans le but de calculer des équations d'état dans une large plage de paramètres et en particulier dans la région intermédiaire entre les modèles de plasma basse densité idéaux (Debye-Hückel) et haute densité (Thomas-Fermi). Ils ont en commun de calculer une structure électronique moyenne pour les ions, en adoptant une représentation simplifiée de l'influence du reste du plasma, qualifié d'environnement. Les calculs sont effectués en adoptant l'hypothèse d'une symétrie sphérique pour le problème. Il s'agit par conséquent de modèles fondamentalement mono-dimensionnels, incapables de décrire d'éventuels effets multi-centres, tels que l'apparition d'états moléculaires dans le plasma.

Sphère ionique. Le plus simple parmi cette classe de modèle, est celui de la sphère ionique de Liberman [78], dont le principe est schématisé sur la figure 2.3. Un noyau atomique ponctuel est placé à l'origine des coordonnées, au centre d'une sphère de rayon $r_{WS} = (4\pi\rho_i/3)^{-1/3}$ (le rayon de Wigner-Seitz est le rayon de la sphère ionique moyenne) qui divise l'espace en deux parties. Au-delà de sa surface l'environnement est décrit par un plasma homogène et neutre, une densité de charge uniforme positive est neutralisée par une densité de charge égale et opposée représentant respectivement les ions et les électrons. A l'intérieur de la sphère ionique, la structure électronique est calculée dans un potentiel auto-cohérent, en résolvant une équation de Schrödinger ou de Dirac avec un hamiltonien à un électron, dans un potentiel qui simule l'influence de tous les autres électrons. Les états liés et libres sont alors peuplés selon la statistique de Fermi-Dirac en imposant la neutralité globale à l'intérieur de la sphère ionique.

FIGURE 2.3 – Principe du modèle d'atome moyen de type *sphère ionique*.

Dans ce modèle les contraintes imposées par l'environnement sont donc très simplifiées : la densité du plasma impose la taille de la sphère de neutralité, laquelle impose les conditions aux limites pour le calcul de la structure électronique.

Pseudo-atome neutre. SCAALP (*Self-Consistent Approach for Astrophysical and Laboratory Plasmas*, [79]) est un modèle du même type qui inclut une description plus fine de l'environnement. Il s'appuie sur la notion de *pseudo-atome neutre* (NPA, pour *Neutral Pseudo Atom*). Dans ce cadre le plasma est décrit par une collection effective classique de NPA qui interagissent via un potentiel $\phi(\mathbf{r})$. Chaque NPA possède la même densité électronique $\rho_e(\mathbf{r})$ et la même structure électronique (orbitales $\varphi_n(\mathbf{r})$ et énergies ε_n). Cette structure est toujours obtenue comme solution de l'équation de Schrödinger à un électron $\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 + v_{\text{eff}}(\mathbf{r})\right]\varphi_n(\mathbf{r}) = \varepsilon_n\varphi_n(\mathbf{r})$, dans un potentiel effectif $v_{\text{eff}}(\mathbf{r})$. Encore une fois, la densité électronique du NPA est obtenue en peuplant cette structure selon la statistique de Fermi-Dirac : $\rho_e(\mathbf{r}) = \sum_n \frac{|\varphi_n(\mathbf{r})|^2}{1 + e^{\beta(\varepsilon_n - \mu)}}$. La contrainte de neutralité du NPA fixe la valeur du potentiel chimique μ , via $\int_0^{r_{\text{en}}} \rho_e(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = Z$. Le rayon d'électro-neutralité r_{en} est en général fixé à r_{WS} , mais il s'agit en fait d'un paramètre libre du modèle.

Si l'on définit $v_{\text{at}}(\mathbf{r})$, le potentiel d'interaction électrostatique entre un électron en \mathbf{r} et un NPA centré à l'origine

$$\nu_{\text{at}}(\mathbf{r}) = -\frac{Ze^2}{|\mathbf{r}|} + \int e^2 \frac{\rho_e(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}', \quad (2.112)$$

le potentiel d'interaction $\Phi(\mathbf{r})$ entre un NPA à l'origine et un en \mathbf{r} est alors donné par

$$\Phi(\mathbf{r}) = -Z\nu_{\text{at}}(\mathbf{r}) + \int \rho_e(\mathbf{r}')\nu_{\text{at}}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) d\mathbf{r}' + 2E_X(\mathbf{r}). \quad (2.113)$$

Les deux premiers termes correspondent respectivement à l'interaction du noyau et des électrons du premier NPA avec le second. Le troisième terme est une contribution d'échange entre les électrons des deux NPA.

La spécificité du modèle est ici introduite en écrivant (sous l'approximation de Born-Oppenheimer) l'énergie libre totale par NPA fonction de $F^{\text{ex}}([\eta])$, $U^{\text{ex}}([\eta])$ et $g([\eta], \mathbf{r})$, les énergie libre en excès, énergie interne en excès, et fonction de distribution de paire d'un système ionique de référence, dépendant d'un jeu de paramètres $[\eta]$. On montre que l'on a

$$F_{\text{tot}} = F_I^{\text{id}} + F^{\text{ex}}([\eta]) - U^{\text{ex}}([\eta]) + \frac{\rho_i}{2} \int g([\eta], \mathbf{r})\Phi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + F_e, \quad (2.114)$$

où F^{id} est l'énergie libre par ion du gaz parfait, et F_e l'énergie libre par ion des électrons (qui s'exprime en fonction de ρ_e).

A l'équilibre thermodynamique local, F_{tot} est minimale par rapport à $[\eta]$ et ρ_e , les autres paramètres étant constants. Ce couple de conditions se traduit par

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_{\text{tot}}}{\partial [\eta]} &= 0 \\ \frac{\delta F_{\text{tot}}}{\delta \rho(\mathbf{r})} &= 0, \end{aligned}$$

équations qui déterminent respectivement le jeu de paramètres effectif $[\eta_{\text{eff}}]$ ainsi que le potentiel effectif ν_{eff} qui minimisent F_{tot} .

Reste donc à choisir le système ionique de référence. Ce choix est fortement limité par la nécessaire connaissance pour celui-ci de formules analytiques pour $F^{\text{ex}}([\eta])$, $U^{\text{ex}}([\eta])$ et $g([\eta], \mathbf{r})$. De plus pour des raisons de temps de calcul on se limite à des systèmes à un paramètre η . Cela réduit le choix aux systèmes déjà évoqués des sphères dures et de l'OCP.

Ionisation moyenne. Un des avantages de ce modèle de matière par rapport au modèle de référence est qu'il lève l'arbitraire du choix de Z^* , puisque la structure et la population électronique sont calculées en fonction des autres données du problème. Néanmoins, même munis de la structure électronique, la définition de l'ionisation moyenne reste sujette à caution. Nous avons considéré deux possibilités :

- le plus naturel est de définir Z^* comme le nombre moyen d'électrons énergétiquement libre ($\varepsilon_n > 0$) par ion.
- on peut également définir Z^* à partir de la densité électronique au niveau le rayon de la sphère de neutralité. Il a été constaté que la valeur calculée des paramètres de transport de la WDM déduit de choix particulier de Z^* , est plus proche des valeurs expérimentales.

En définitive il apparaît, comme l'ont noté Dharma-Wardana et Perrot [80], que Z^* , n'étant pas directement une observable, n'a pas de sens physique bien défini mais dépend de la grandeur mesurée. Z^* est essentiellement la quantité moyenne par noyau d'électrons qui participent à un processus donné (conductivité, diffusion, ...) dans des conditions données (échelle spatiale, échelle temporelle, énergie, ...). On a par la suite adopté la première définition, plus naturelle, pour interfacer le modèle de matière SCAALP avec le modèle de référence de DTX.

CQFR : Le modèle SCAALP permet de calculer la structure électronique dans un formalisme de champ moyen. La méthode utilise un système ionique de référence paramétré, que l'on ajuste variationnellement pour minimiser l'énergie libre du plasma. Le potentiel ν_{eff} vu par les électrons est calculé de façon auto-cohérente.

Les principales limitations du modèle sont :

- le caractère monodimensionnel.
- le choix limité et arbitraire des systèmes de référence ioniques utilisés.
- l'absence de traitement des mélanges.

Le modèle fournit une densité électronique $\rho_e(\mathbf{r})$ par NPA, constitué d'électrons liés et d'électrons libres, ainsi que la fonction de distribution de paire (donc le facteur de structure statique) du système de référence. Son utilisation élimine également le paramètre libre Z_F . Nous disposons donc de tous les éléments pour calculer le terme ionique du facteur de structure électronique total.

Le modèle ne dit cependant rien sur la dynamique électronique, et ne fournit donc pas d'expression pour le terme électronique.

2.5 Dynamique moléculaire quantique

La dynamique moléculaire quantique (DMQ), ou dynamique moléculaire *ab initio*, est une méthode de simulation numérique de la dynamique d'un système d'électrons et d'ions.

On considère N ions de coordonnées \mathbf{R}_i et de charge q_i dans un boîte périodique. De même que dans la dynamique moléculaire traditionnelle (classique) les trajectoires ioniques $\mathbf{R}_i(t)$ sont évaluées en intégrant les équations du mouvement à l'aide de forces déterminées à chaque pas de temps. La différence essentielle est que ces forces sont évaluées à partir d'un traitement quantique rigoureux de la structure électronique, ce qui permet en particulier de décrire les phénomènes complexes prenant place dans les plasmas WDM : ionisation, polarisation, formation ou de rupture liaison....

Théorie de la fonctionnelle de la densité. La description de la structure électronique se base sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT, pour *density functional theory*). On montre qu'à température nulle, la densité électronique $n_e(\mathbf{r})$ est celle qui minimise l'énergie totale du système [81]. Cela permet de travailler avec la densité électronique à la place de la fonction d'onde complète du système à n -corps. C'est pourquoi la DFT fournit un outil précieux pour effectuer des calculs sur les systèmes complexes. Dans la formulation de Kohn et Sham ([82]), la densité est exprimée en termes d'états propres mono-électroniques $n_e(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^n |\psi_i(\mathbf{r})|^2$. Dans ces conditions, l'énergie totale, écrite comme une fonctionnelle de la densité électronique, prend la forme :

$$E[n_e(\mathbf{r})] = E_K[n_e(\mathbf{r})] + E_{ee}[n_e(\mathbf{r})] + E_{ext}[n_e(\mathbf{r})] + E_{XC}[n_e(\mathbf{r})], \quad (2.115)$$

où $E_K[n_e(\mathbf{r})]$ est l'énergie cinétique du gaz électronique, $E_{ee}[n_e(\mathbf{r})]$ l'énergie d'interaction coulombienne électronique, $E_{ext}[n_e(\mathbf{r})]$ le potentiel extérieur dans lequel évoluent les électrons (celui des ions). $E_{XC}[n_e(\mathbf{r})]$ enfin, appelée fonctionnelle d'échange-corrélation, comprend tout le reste, c'est-à-dire la différence entre l'énergie du système réel et celui, fictif, composé d'électrons indépendants.

Les équations sont jusque là exactes et c'est ici que l'on introduit des approximations car l'expression de $E_{XC}[n_e(\mathbf{r})]$ est inconnue. Une approximation très utilisée est d'employer le résultat utilisé pour un gaz d'électrons homogène, et de le généraliser en l'employant avec la densité inhomogène $n_e(\mathbf{r})$ (LDA, pour *local density approximation*). Des fonctionnelles d'échange-corrélation peuvent aussi être construites [83], en prenant en compte le gradient local de densité $E_{XC}[n_e(\mathbf{r}), \nabla n_e(\mathbf{r})]$. On parle alors d'approximation GGA (*generalized gradient approximation*). Une fois une expression choisie pour $E_{XC}[n_e(\mathbf{r})]$, l'application de la condition $\frac{\partial E[n_e(\mathbf{r})]}{\partial n_e(\mathbf{r})}$ conduit à un jeu d'équations de Schrödinger pour les fonctions d'onde électroniques individuelles $\psi_i(\mathbf{r})$:

$$\left(-\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) \right) \psi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \psi_i(\mathbf{r}). \quad (2.116)$$

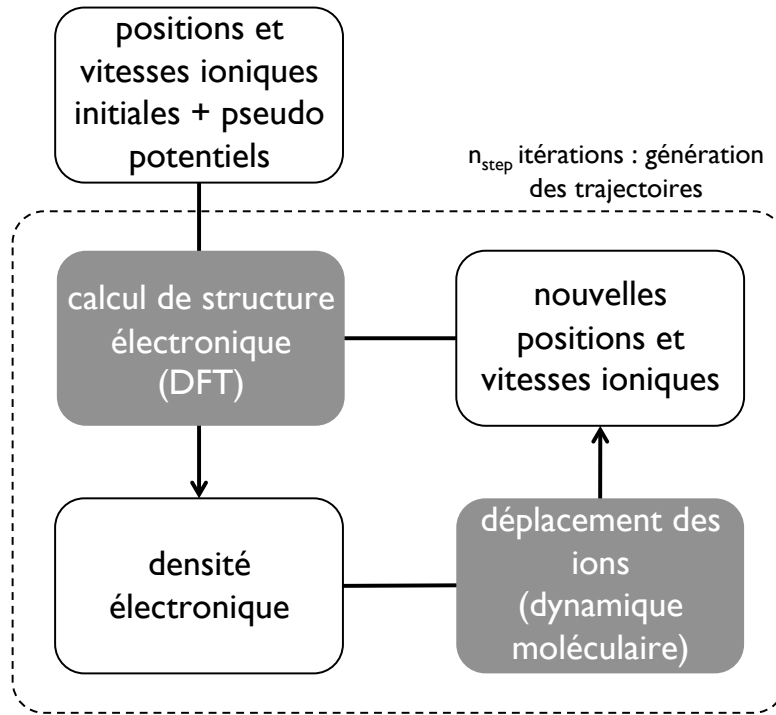


FIGURE 2.4 – Synoptique d'un code DMQ.

Ce sont les équation de Kohn-Sham. On voit que tout se passe comme si les électrons individuels évoluaient dans un potentiel effectif $V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + V_{ee}(\mathbf{r}) + V_{XC}(\mathbf{r})$, où les potentiels extérieurs, d'interaction électronique et d'échange-corrélation sont respectivement :

$$V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) = - \sum_{i=1}^N \frac{q_i e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|}, \quad V_{ee}(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' \frac{e^2 n(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad \text{et} \quad V_{XC}(\mathbf{r}) = \frac{\delta E_{XC}[n(\mathbf{r})]}{\delta n(\mathbf{r})}.$$

Enfin, pour traiter le cas $T > 0$, on remplace l'énergie totale par l'énergie libre du système électronique.

DMQ. La dynamique moléculaire quantique permet donc de générer les trajectoires ioniques en alternant les pas de dynamique moléculaire et ceux de structure électronique, comme indiqué sur la figure 2.4. A chaque pas de calcul, pour une configuration ionique donnée, la structure électronique $n_e(\mathbf{r})$ est calculée. Les forces s'exerçant sur les ions sont alors obtenues via

$$\mathbf{F}_i(\mathbf{r}) = - \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} E[n(\mathbf{r}), \{\mathbf{R}\}] \quad (2.117)$$

ou d'autres formulations des équations du mouvement (méthode de Car-Parinello[84] par exemple, voir [85]). Les ions sont alors propagés et une nouvelle étape de calcul de structure électronique est réalisée avec les positions ioniques mises à jour.

Afin de minimiser le temps de calcul, les électrons dont on sait qu'il possèdent une énergie de liaison suffisamment importante n'interviennent pas dans la dynamique et sont figés dans les pseudo potentiels ioniques.

Les trajectoires ioniques obtenues permettent d'évaluer la fonction de corrélation de paire et donc le facteur de structure ionique, comme expliqué dans le chapitre 4.

ABINIT. Le code de DMQ utilisé pour nos simulation est ABINT (programme ouvert, code et documentation peuvent être trouvés sur [86]).

Chapitre

3

Expériences

Sommaire

3.1	Lithium	72
3.1.1	Objectif	72
3.1.2	Dispositif expérimental	72
3.1.2.1	Conditions laser	72
3.1.2.2	Cibles	75
3.1.2.3	Diagnostics	77
3.1.3	Résultats expérimentaux préliminaires ; détermination des conditions plasma sondées	84
3.2	Polystyrène	93
3.2.1	Objectifs	93
3.2.2	Dispositif expérimental	93
3.2.2.1	Conditions laser	94
3.2.2.2	Cibles	95
3.2.2.3	Diagnostics	96
3.2.3	Analyse des résultats	102

Cette partie est dédiée à la description de deux expériences de diffusion Thomson X dans le régime WDM réalisées au cours de ce travail de thèse. Commençons en guise de préambule par des remarques s'appliquant à chacune d'entre elles.

Obtention de l'échantillon à sonder. Dans les deux expériences, l'échantillon sondé est un matériau initialement solide (de masse volumique ρ_0), respectivement le lithium et le plastique, porté aux conditions désirées au moyen d'une compression dynamique : une onde de choc. Cette dernière est obtenue par irradiation uniforme de la surface de l'échantillon par un ou plusieurs faisceaux laser intenses ($I_{\text{laser}}\lambda^2 \sim 10^{13-15} \text{ W.cm}^{-2}\mu\text{m}^2$). La surface de la cible, chauffée et ionisée, se détend rapidement dans le vide, perpendiculairement à la surface initiale (phénomène d'ablation). En réaction, une onde de choc se propage dans la direction opposée, c'est-à-dire vers l'intérieur de la cible, en aval de laquelle la matière est comprimée et chauffée (voir figure 3.1). On obtient ainsi un état de plasma transitoire dont les caractéristiques sont déterminées par les conditions laser et les relations de Rankine-Hugoniot. Nous verrons que les paramètres laser choisis pour les cas décrits nous permettent d'atteindre le régime WDM, plus précisément $\rho \approx \rho_0$ et $T \approx 1 \text{ eV}$. Nous n'avons pas jugé nécessaire de faire ici de rappel sur la physique des chocs, qui est un domaine bien balisé et richement documenté ([2, 87] par exemple).

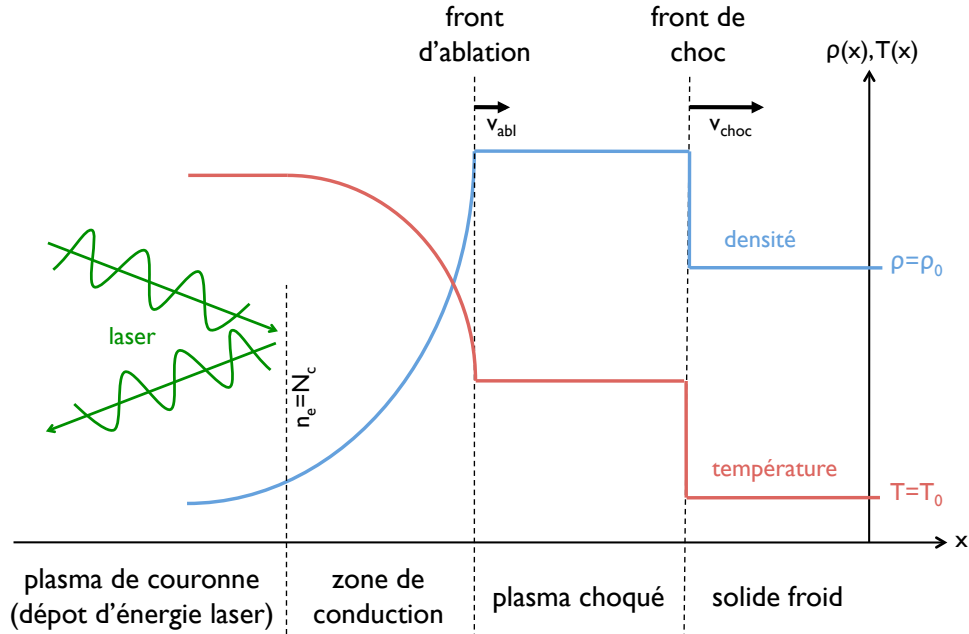


FIGURE 3.1 – Allure des courbes de densité massique et de température en fonction de la profondeur pour une cible solide irradiée par une impulsion laser intense ($I_{\text{laser}}\lambda^2 \sim 10^{13-15} \text{ W.cm}^{-2}\mu\text{m}^2$). Les paramètres laser sont choisis pour que le plasma de la zone sous choc relève du régime WDM.

Obtention de la sonde X. De la même façon, dans chacune des deux expériences décrites ici, la source X utilisée pour sonder l'échantillon fut obtenue par l'interaction d'une impulsion laser avec une cible secondaire. C'est dans le régime d'interaction laser-matière utilisé pour la génération de la sonde X que réside l'une des principales différences entre les deux expériences. Pour la première, une impulsion "longue" de type 100J, 1 ns génère une émission de la raie Lyman- α du chlore ($E = 2960$ eV). Pour la seconde en revanche, une impulsion "courte" 100J 1 ps permet d'obtenir une émission de la raie K- α du cuivre ($E = 8048$ eV). La durée d'émission X étant sensiblement égale à la durée d'impulsion laser dans chacun des cas, la seconde nous offre une résolution temporelle de la mesure, apportant une amélioration significative des résultats. Les mécanismes de génération des X impliqués sont différents dans chacun des cas.

- Dans le régime d'interaction correspondant à une impulsion laser nanoseconde ($I_{\text{laser}} \lambda^2 \approx 10^{13-15} \text{ W.cm}^{-2} \mu\text{m}^2$), le mécanisme prédominant de transfert de l'énergie laser vers la cible est l'absorption collisionnelle (ou *Bremsstrahlung* inverse). Les collisions subies par les électrons oscillant dans le champ laser tendent à redistribuer aléatoirement leurs vitesses, ce qui entraîne un transfert d'énergie du champ laser vers l'énergie d'agitation thermique des électrons. Les électrons chauffés transfèrent alors leur énergie aux ions sur une échelle de temps correspondant à la fréquence de collision électron-ion, et la température obtenue détermine les états d'ionisation présents dans le plasma. Cette structure électronique détermine à son tour la nature du spectre de rayonnement thermique émis. Les transitions lié-lié, en particulier, donnent lieu à un spectre de raies. La raie Lyman- α correspond à la transition $2p \rightarrow 1s$ en absence d'autres électrons liés. On estime le niveau d'ionisation obtenu pour une température donnée à partir de l'équation de Boltzmann, qui implique qu'un ion de potentiel d'ionisation E_i sera présent pour $E_i \approx 3k_B T_e$ où T_e est la température électronique. Ainsi dans un plasma de chlore pour obtenir une fraction significative d'ions dans l'état Cl XVII ($E_{\text{ClXVII}} = 3,6$ keV), il faut des températures de l'ordre de 1 à 2 keV, obtenue dans la région sous-dense du plasma (couronne). Cette émission cesse lorsque le plasma se refroidit, sur une échelle de temps de la centaine de picosecondes. La durée d'émission de la source obtenue est donc de l'ordre de grandeur de celle de l'impulsion laser (ns).
- Pour les régimes d'interaction plus intenses obtenus dans le régime picoseconde ($I_{\text{laser}} \lambda^2 > 10^{16-21} \text{ W.cm}^{-2} \mu\text{m}^2$), les mécanismes jouant un rôle dans le couplage de l'impulsion laser avec le plasma ou la cible solide (absorption résonante, chauffage Brunel, chauffage $\mathbf{J} \times \mathbf{B}$...) sont responsables de la production d'électrons supra-thermiques. Ces électrons rapides, dont l'énergie peut atteindre quelques MeV, se propagent dans la cible. Ils sont suffisamment énergétiques pour provoquer l'ionisation collisionnelle en couche interne des ions ou atomes présents dans le milieu. Les ions ainsi créés sont dans un état instable et leur désexcitation radiative est associée à un spectre de raies dans la gamme 0,1 – 100 keV, suivant le numéro atomique de l'espèce en question. On appelle K- α "froide" la raie correspondant à une transition électronique depuis la couche L vers la couche K, l'atome étant initialement (avant collision) neutre. Si en revanche l'espèce est initialement ionisée, les raies d'émission correspondantes sont progressivement décalées vers les hautes énergies pour des états d'ionisation croissants. La génération des électrons suprathermiques étant

liée à l'impulsion laser, la durée de la source est là aussi comparable à celle de l'impulsion (ps).
Passons maintenant à la description proprement dite des dispositifs expérimentaux.

3.1 Lithium

3.1.1 Objectif

Comme on l'a précisé au chapitre 1, deux types de mesures sont susceptibles d'être réalisées avec le rayonnement X diffusé par un plasma, suivant qu'il soit résolu angulairement ou spectralement. C'est à une mesure du second type qu'est dévolue l'expérience que nous nous attacherons à décrire dans cette section.

Le choix pour le matériau sondé s'est porté sur le lithium ($Z_A = 3$). Son faible numéro atomique (il s'agit du matériau possédant le numéro atomique le plus faible formant un solide stable dans les conditions ambiantes) présente les avantages de ne pas s'éloigner du cadre des expériences de FCI, de s'affranchir des effets radiatifs présents avec des matériaux de Z_A plus élevé, et d'être moins contraignant pour les simulations, du fait de la relative simplicité de sa structure électronique.

Les objectifs expérimentaux sont donc de porter un échantillon de lithium dans des conditions WDM, de créer une source X irradiant l'échantillon, puis d'obtenir le spectre des photons diffusés.

3.1.2 Dispositif expérimental

Le schéma général de l'expérience est reproduit sur la figure 3.2. Les conditions lasers, les diagnostics mis en place et les cibles vont être décrits dans cette section.

3.1.2.1 Conditions laser

Cette expérience a été réalisée au Rutherford Appelton Laboratory (UK), dans la salle d'expérience *Target Area West* (TAW) de l'installation laser *Vulcan*. L'installation laser à verre dopé au néodyme ($\lambda = 1054\text{nm}$) comporte six chaînes d'amplification pouvant délivrer jusqu'à 250J dans l'infrarouge, en impulsion longue. Deux faisceaux furent utilisés pour générer le choc dans l'échantillon de lithium, et quatre furent focalisés sur un cible secondaire pour créer la source X. Pour chaque faisceau, la conversion de fréquence au second harmonique ($\lambda = 527\text{nm}$) est réalisée au moyen de cristaux KDP. Le rendement énergétique de ce doublement de fréquence avoisine 40%.

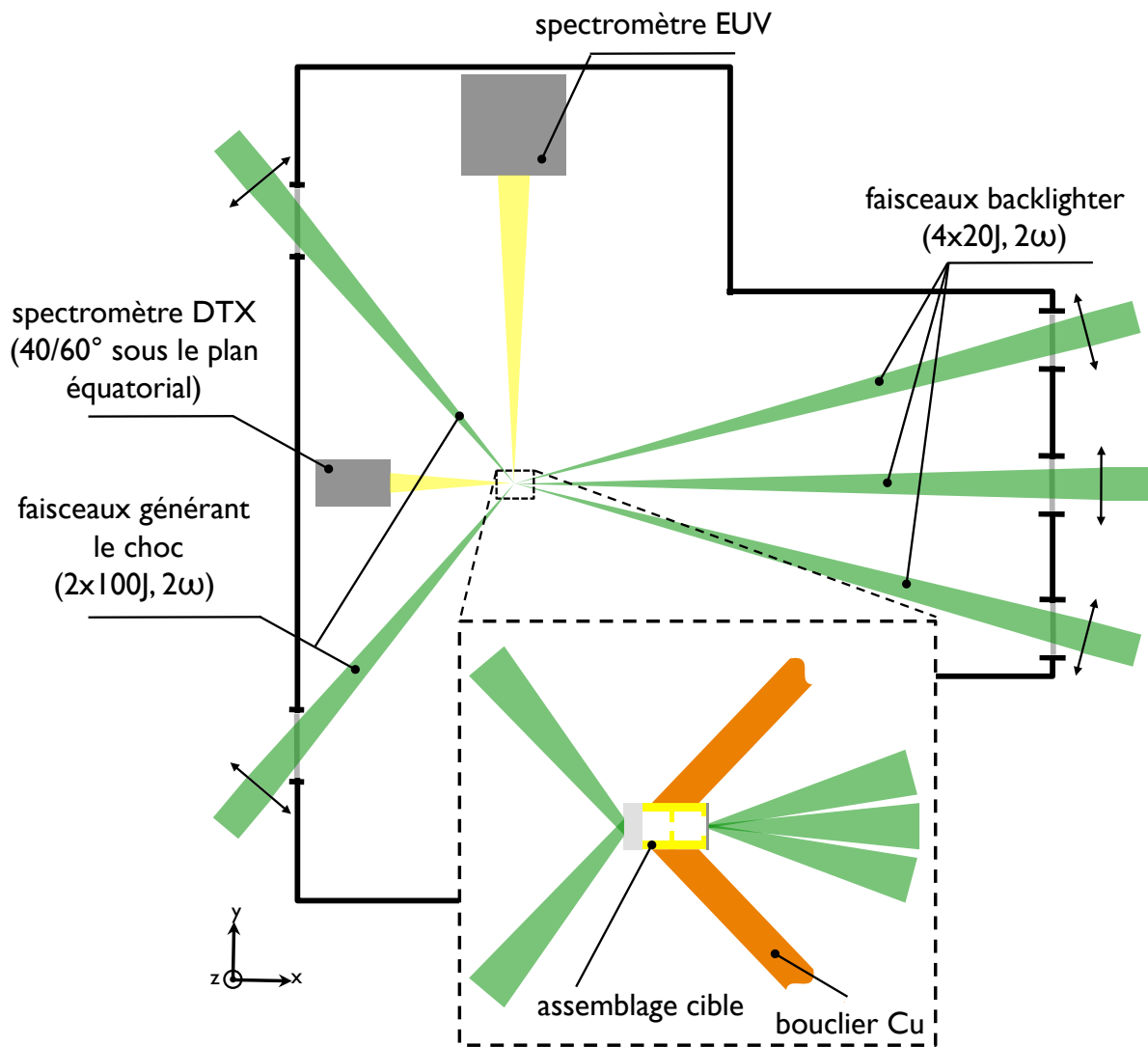


FIGURE 3.2 – Implantation des diagnostics et des faisceaux dans l'enceinte.

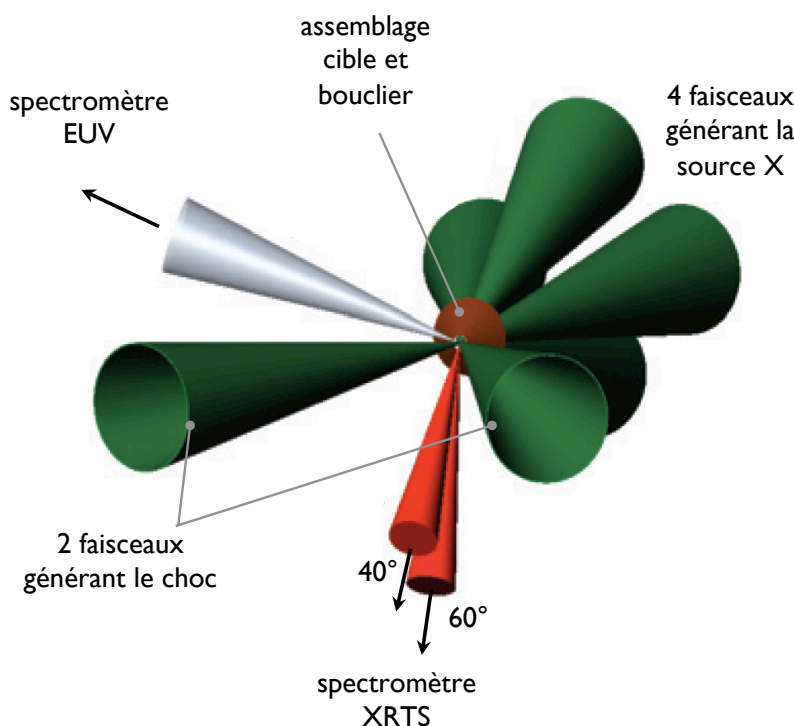


FIGURE 3.3 – Disposition spatiale des faisceaux laser par rapport à la cible.

Les faisceaux employés pour la source X possèdent un angle d'incidence de $12,5^\circ$ par rapport à la normale à la surface de la cible secondaire, et sont disposés symétriquement par rapport à celle-ci (voir figure 3.3). Les impulsions possèdent un profil temporel carré de durée 1 ns, donnant environ 100 J dans le vert après conversion. Les taches focales, superposées au niveau de la cible, sont caractérisées par un profil spatial gaussien de largeur à mi-hauteur $\sim 100 \mu\text{m}$. En prenant en compte la présence de pertes dans les optiques estimées à 50%, on en déduit une intensité sur cible de $I \simeq 2 - 3 \times 10^{15} \text{ W.cm}^{-2}$.

Les deux autres faisceaux furent utilisés pour générer le choc dans l'échantillon de lithium. Situés dans un plan horizontal, disposés symétriquement par rapport à la normale à la surface de la cible irradiée et formant avec elle un angle de 50° , chaque faisceau atteignait 50 J dans l'infrarouge, soit environ 20 J à 527 nm. Après les lentilles de focalisation chacun des faisceaux traverse une lame de phase PZP (*phase zone plate*), afin de créer une tache focale dont l'intensité présente un profil spatial homogène sur un disque de diamètre $400 \mu\text{m}$. Compte tenu d'un profil temporel également carré de durée 1 ns, de l'étalement des taches focales dû à l'angle d'incidence important, et d'une transmission totale des différentes optiques et des lames de phases de l'ordre de 50% on trouve une intensité sur cible $I \simeq 1,5 \times 10^{13} \text{ W.cm}^{-2}$.

La synchronisation temporelle de chaque groupe de faisceaux a été réalisée à l'aide d'une

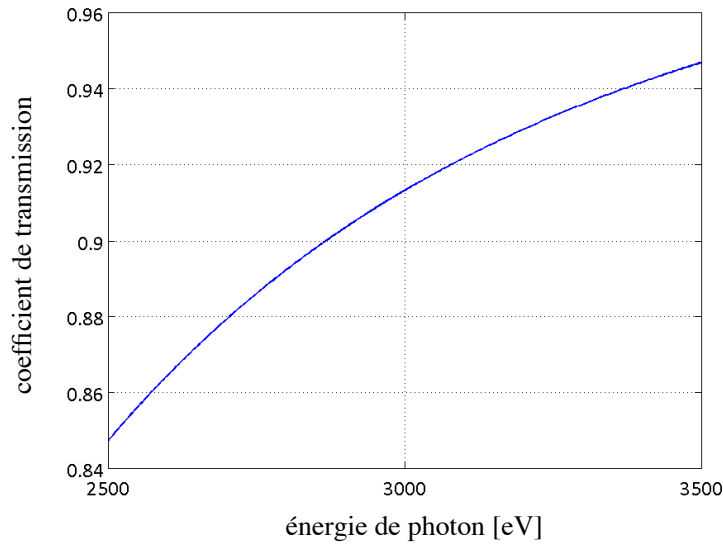


FIGURE 3.4 – Courbe de transmission de $250\ \mu\text{m}$ de Li (à $\rho = \rho_0$) autour de l'énergie de la raie Ly_α du chlore ($E = 2960\ \text{eV}$) [18].

caméra à balayage de fente (CBF) optique, avec une précision de l'ordre de 50 ps. Le retard entre les faisceaux destinés à la compression, et ceux générant la source X, pouvait être varié en ajustant le chemin optique parcouru, avec une précision de l'ordre de 10 ps (correspondant à 3 mm de chemin optique).

3.1.2.2 Cibles

Comme il l'a déjà été précisé, la source X choisie comme sonde est la raie $\text{Ly}-\alpha$ du chlore à une énergie de 2960 eV. En accord avec ce qui a été prescrit au chapitre 2, l'échantillon sondé doit être essentiellement transparent à la longueur d'onde utilisée : la courbe de transmission de $250\ \mu\text{m}$ lithium à la densité du solide (voir figure 3.4) donne une transmission $t \simeq 0,91$ à cette longueur d'onde. Par ailleurs des études antérieures de caractérisation de la raie $\text{Ly}-\alpha$ du chlore ont été menées [88]. Si l'on se réfère à la figure 3.5, tirée de cette référence, on peut évaluer l'efficacité de conversion (définie comme le rapport de l'énergie laser à celle des photons X produits à l'énergie désirée) pour l'intensité laser et la longueur d'onde utilisées : $\eta_{\text{conv}} \simeq 0,1\%$. Compte tenu des 200 J laser sur cible, on s'attend donc à une fluence de l'ordre de $1,6 \times 10^{14}$ photons/sr.

Il faut noter que ce rendement de conversion a été mesuré pour des cibles de plastique chloré, le Saran (nom commercial du polychlorure de vinylidène : $\text{C}_7\text{H}_8\text{Cl}_3\text{N}$). Dans notre expérience, la cible est une feuille de $8\ \mu\text{m}$ de parylène-D ($\text{C}_8\text{H}_6\text{Cl}_2$). On peut essayer d'évaluer la différence de rendement attendue en comparant simplement la densité volumique d'atomes

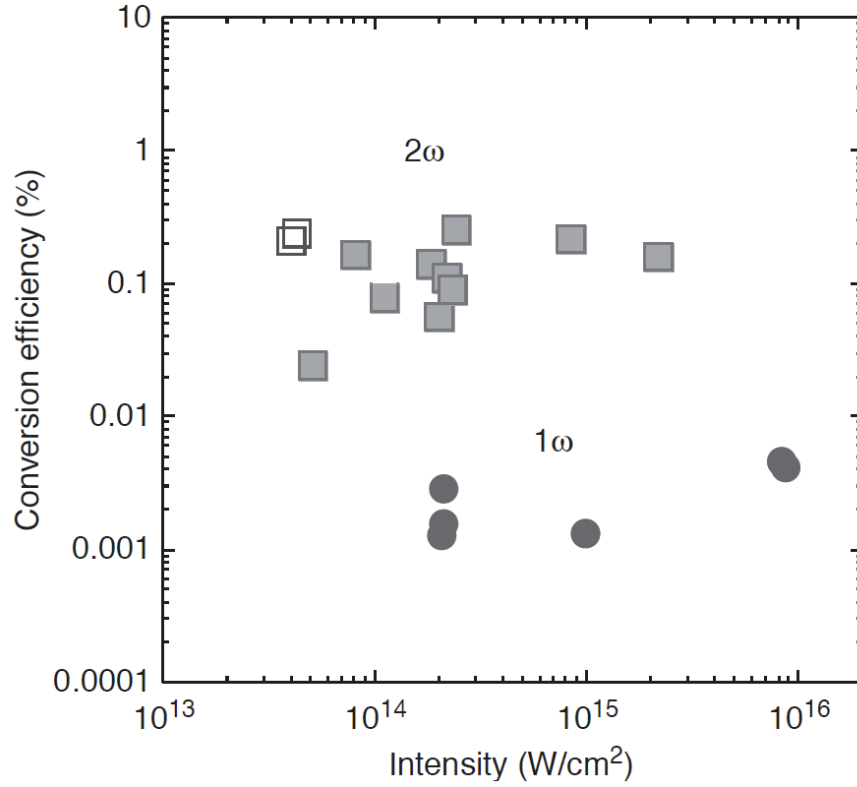


FIGURE 3.5 – Rendement de conversion $\times \eta_{conv} = E_{laser}/E_{photons}$ mesuré pour l'émission de la raie Lyman- α du chlore par une feuille de Saran. Les ronds correspondent à des points expérimentaux mesurés à 1ω , les carrés à 2ω . Les symboles vides correspondent à l'emploi d'une lame de phase, contrairement aux symboles pleins. Courbe tirée de [88].

de chlore dans chaque matériau : $n_{\text{par-D}} = \rho_{\text{par-D}}/M_{\text{par-D}} = 1,42 \text{ g.cm}^{-3}/172,9 \text{ g.mol}^{-1}$, soit $n_{\text{par-D}} \approx 8,2 \cdot 10^{-3} \text{ mol.cm}^{-3}$, de même $n_{\text{Saran}} = 1,63 \text{ g.cm}^{-3}/212,35 \text{ g.mol}^{-1} \approx 7,7 \cdot 10^{-3} \text{ mol.cm}^{-3}$. Dans cette approximation, on s'attend donc que la correction à apporter à l'évaluation précédente soit de l'ordre de $n_{\text{par-D}}/n_{\text{Saran}} \approx 1,07$, ce qui est négligeable par rapport aux barres d'erreur de l'évaluation initiale du rendement de conversion ($\approx 30\%$) et que l'on peut donc conserver cette estimation.

La cible principale, quant à elle, est un échantillon de lithium métallique de $250 \mu\text{m}$ d'épaisseur. Sa densité initiale est $\rho_0 = 0,535 \text{ g.cm}^{-3}$.

Le dessin de l'ensemble est illustré sur la figure 3.6. Les cibles principales et secondaires sont réunies en un même assemblage afin d'éviter les incertitudes liées à l'alignement respectif des deux cibles. La feuille de parylène-D et le bloc de lithium sont séparés par une distance de 1 mm . A mi-distance entre les cibles, une rondelle d'argent dont le trou central possède un diamètre de $170 \mu\text{m}$ assure la fonction de collimater les faisceaux de rayons X émis vers

l'échantillon de lithium. On vérifie que le coefficient de transmission à 2,9 keV de 50 μm d'argent solide ($t \sim 10^{-12}$) est bien compatible avec cet objectif.

L'assemblage cible principale-collimateur-source X est placé au sommet d'un épais (700 μm) cône de cuivre protégeant les spectromètres de tout rayonnement en provenance directe de la source.

L'assemblage de la cible ainsi décrit fut disposé dans l'enceinte d'expérience de TAW suivant le schéma d'implantation de la figure 3.2, où sont représentés les faisceaux ainsi que les différents diagnostics utilisés, que nous allons maintenant détailler.

3.1.2.3 Diagnostics

Spectromètre de diffusion. Il mesure le spectre du rayonnement Cl Ly- α diffusé par le matériau choqué et constitue par conséquent le diagnostic principal du dispositif expérimental. Il s'agit d'un spectromètre à cristal, c'est-à-dire que le rayonnement à analyser est réfléchi par un cristal fonctionnant dans les conditions de Bragg. Rappelons brièvement qu'on a réflexion cohérente par les différents plans atomiques séparés de la distance d si $\sin(\theta) = m\lambda/2d$, ce qui fournit une relation (univoque pour un ordre de réflexion m donné) entre l'angle de déflexion 2θ du rayonnement et sa longueur d'onde λ .

La faible section efficace de la DTX nous a conduit à choisir un cristal et une géométrie maximisant la réflectivité et la collecte de photons. Le cristal utilisé est un cristal de graphite pyrolytique hautement orienté (HOPG, *highly oriented pyrolytic crystal*), utilisé dans l'orientation (002) pour laquelle on a $2d = 6,708\text{\AA}$. Il ne s'agit pas d'un monocristal. L'édifice est formé d'un grand nombre de cristaux, dont les orientations possèdent une distribution angulaire gaussienne autour d'une direction privilégiée qui est la normale à la surface. On appelle dispersion mosaïque γ la largeur à mi-hauteur de cette distribution. Cette dispersion augmente la surface totale satisfaisant aux conditions de Bragg pour une longueur d'onde donnée, et donc la réflectivité [89]. En effet l'ensemble des rayons compris dans un cône d'ouverture angulaire γ sera réfléchi et refocalisé symétriquement par rapport à la normale, comme illustré sur la figure 3.8. La dispersion mosaïque dépend du procédé de fabrication du cristal : pour le cristal utilisé (Advance Ceramics ZYH) la spécification est $\gamma \approx 3.5 \pm 0.5^\circ$. Pour profiter de cet effet focalisant il est nécessaire d'utiliser ce type de cristal dans une géométrie symétrique (voir figure 3.8). C'est donc le cas de la géométrie choisie pour l'expérience qui est celle dite de Von Hamos, représentée en figure 3.9. Le cristal est courbé selon une portion de cylindre, dont l'axe est donné par la direction source-détecteur. Cette symétrie radiale permet d'augmenter l'angle solide de collection et donc la sensibilité du détecteur. Le rayon de courbure ($R = 140\text{ mm}$) du cristal ainsi que l'angle de Bragg correspondant à 2960 eV ($\theta_b = 38,6^\circ$) fixent la distance cristal-cible ($l = 173\text{ mm}$), et ses dimensions latérales ($r \times r = 40 \times 40\text{ mm}$) déterminent l'angle solide de collection Ω_{cristal} . Étant donné que l'angle azimutal sous lequel est vu le cristal depuis la cible ($\theta_{az} \approx 10,3^\circ$) est supérieur à l'angle de dispersion mosaïque, on en déduit que la surface totale du cristal ne participe pas à la collection et on a

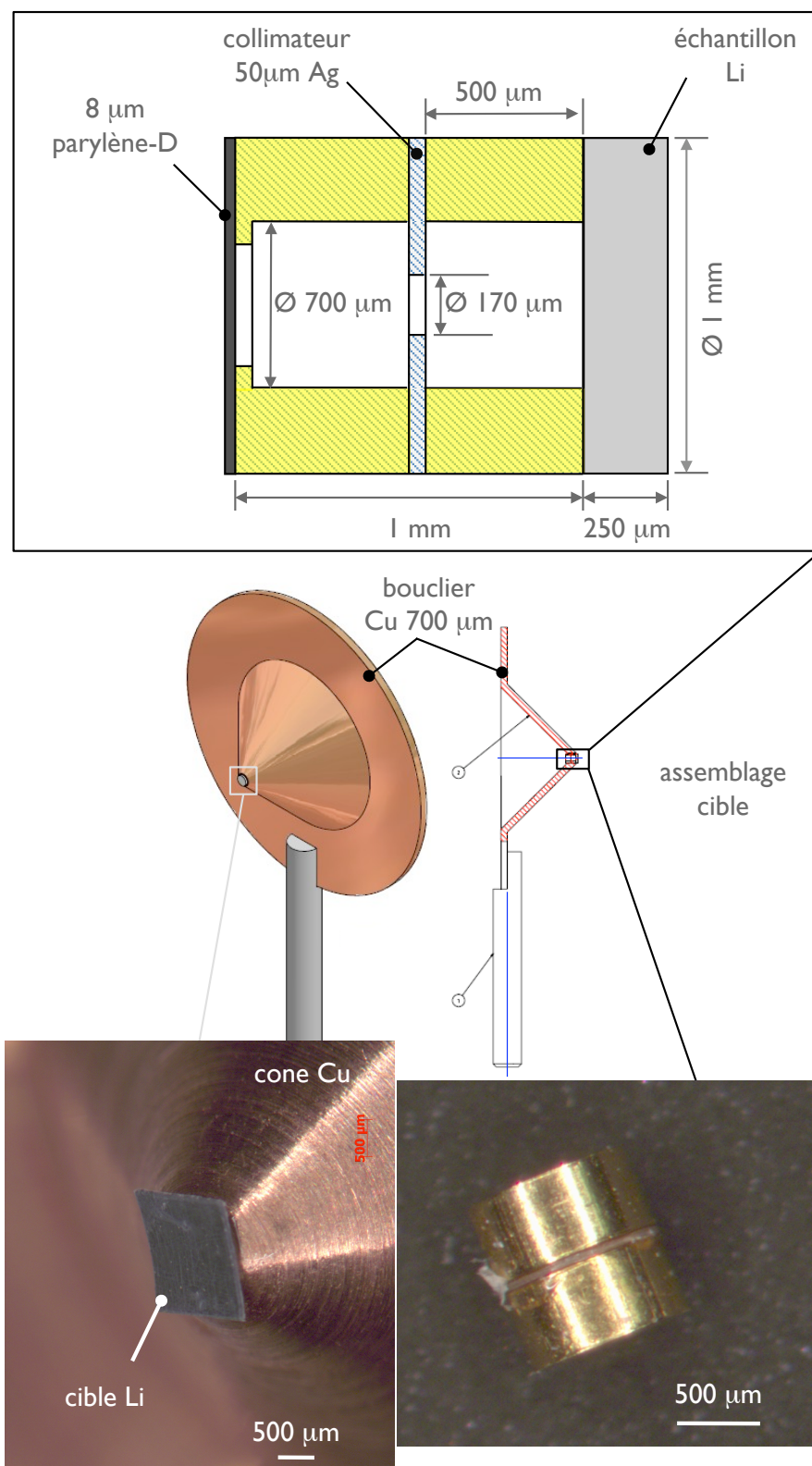


FIGURE 3.6 – Géométrie des cibles utilisées.

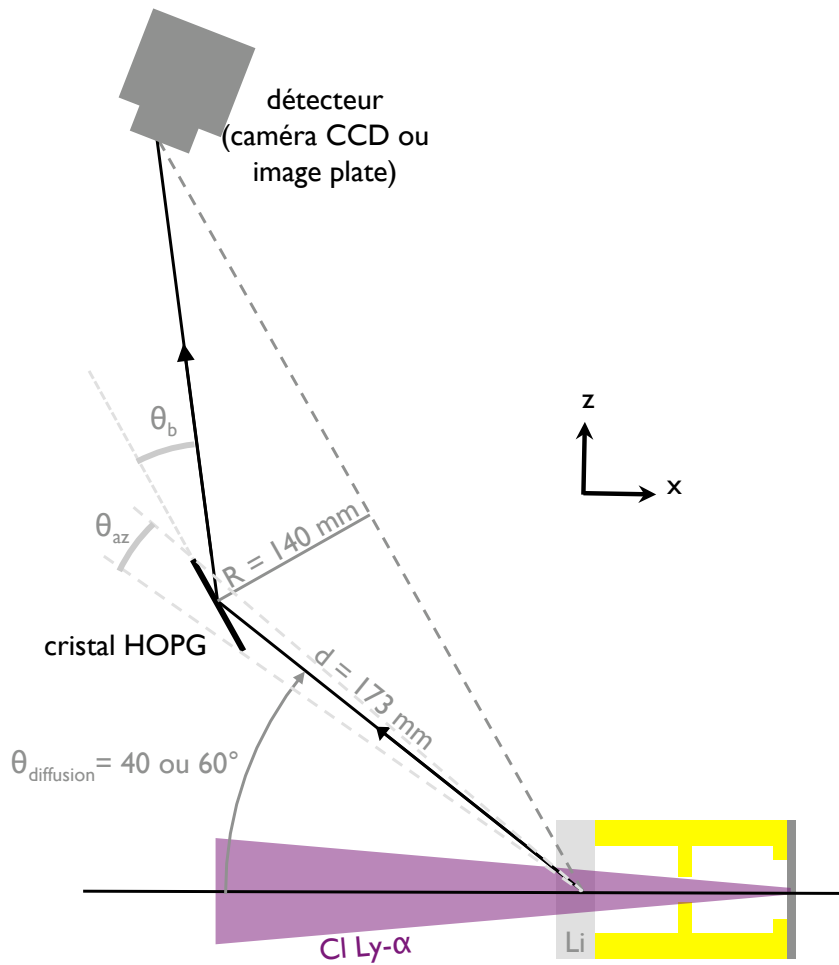


FIGURE 3.7 – Géométrie du spectromètre de diffusion. L'ensemble cristal HOPG+détecteur peut tourner dans un plan vertical autour de la cible de lithium pour sélectionner l'angle de diffusion auquel la mesure est effectuée. Les axes correspondent à ceux définis sur la figure 3.2.

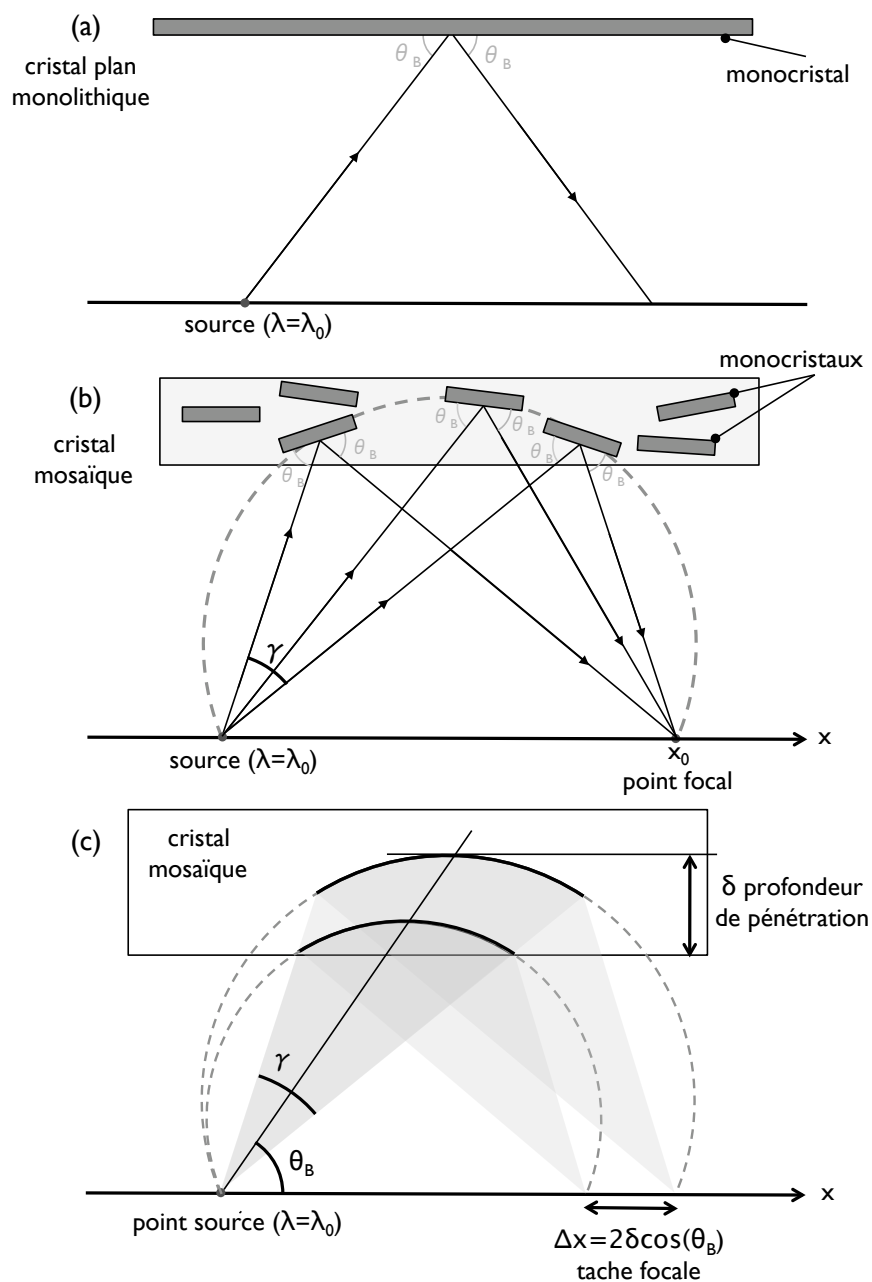


FIGURE 3.8 – Illustration du mécanisme d’augmentation de la réflectivité intégrée d’un cristal mosaïque tel que le HOPG (b), par rapport à un monocristal (a) dans le cas d’une géométrie symétrique (focalisation mosaïque). (c) : Limitation de la résolution spectrale due à la plus grande profondeur de pénétration du HOPG.

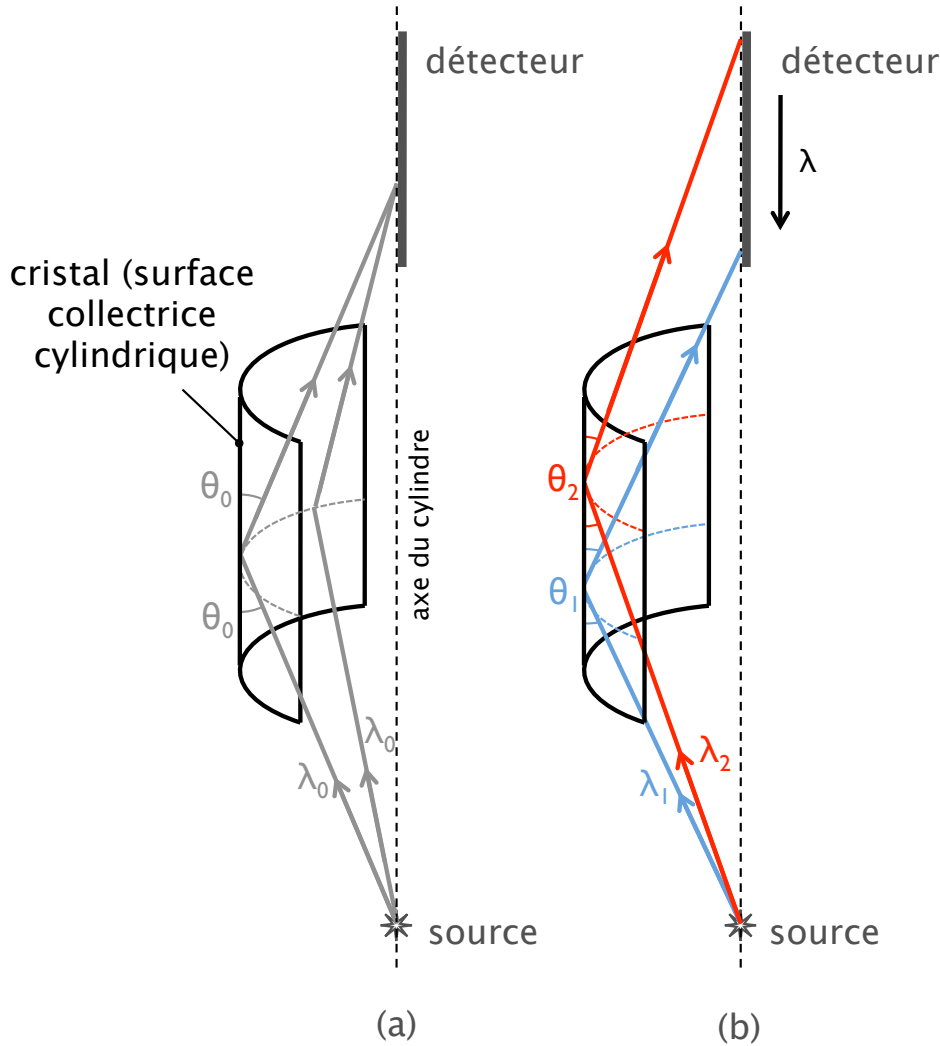


FIGURE 3.9 – Géométrie de Von Hamos pour le spectromètre : Le cristal possède une géométrie cylindrique. La source et le détecteur sont placés sur l'axe de symétrie. Les différents rayons de même longueur d'onde et collectés par une bande cylindrique sont refocalisés au même point de l'axe sur le détecteur (a). Différentes longueurs d'onde sont focalisées en différents points de l'axe (b).

$\Omega_{\text{cristal}} \approx \arcsin(r/l)\gamma \approx 1,4 \cdot 10^{-2} \text{ sr}$. Ces dimensions fixent également une limite supérieure à la résolution angulaire du détecteur $\delta\theta_{\text{max}} = \pm \arcsin(r/l)/2 = \pm 6,6^\circ$. L'ensemble de ces paramètres géométriques sont rappelés sur la figure 3.7.

Le détecteur utilisé, quant à lui, a été alternativement une caméra CCD (*charge coupled device*) ou une *imaging plate*, en raison de dysfonctionnements divers. Les données provenant des tirs qui seront analysés ici ont été systématiquement acquises avec la caméra CCD.

Résolution spectrale. Examinons maintenant la résolution spectrale que l'on peut attendre du spectromètre. En différenciant la loi de Bragg, on obtient la dispersion angulaire du cristal au voisinage d'un angle θ_B donné : $\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = -\frac{\Delta E}{E} = -\frac{\Delta\theta}{\tan(\theta_B)}$, ou bien encore en substituant pour l'angle θ l'abscisse $x = 2R/\tan(\theta)$ d'un point du détecteur, tel que définie sur la figure 3.8 :

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{\sin(2\theta_B)}{4R} \Delta x. \quad (3.1)$$

Différents mécanismes sont susceptibles de limiter la résolution spectrale au niveau du détecteur :

- La taille de la source. Cette contribution peut être simplement estimée en remplaçant Δx par la taille de la source dans l'équation 3.1, l'ensemble étant symétrique. Dans notre cas avec $\Delta x \sim 500 \mu\text{m}$ on obtient $\left(\frac{\Delta E}{E}\right)_{\text{source}} \sim 8,6 \times 10^{-4}$.
- La taille des pixels de la caméra CCD : $\Delta x = 26 \mu\text{m}$. $\left(\frac{\Delta E}{E}\right)_{\text{pixel}} \sim 4,5 \times 10^{-5}$.
- L'élargissement dû à la profondeur de pénétration δ des photons dans le cristal. Comme illustré sur la figure 3.8, on a $\Delta x = 2\delta \cos(\theta_B)$. Dans un cristal, au voisinage de l'angle de Bragg, la réflexion cohérente des photons entraîne une extinction très rapide. Ici on évalue une limite supérieure à l'élargissement spectral en choisissant pour la longueur d'atténuation celle correspondant à l'absorption pure du graphite à la densité solide, soit à $E = 2960 \text{ eV}$: $\delta \simeq 50 \mu\text{m}$. On obtient dans ce cas $\left(\frac{\Delta E}{E}\right)_{\text{profondeur}} \sim 1,4 \times 10^{-4}$.
- La largeur naturelle de la raie utilisée. La raie Lyman alpha du chlore étant constituée d'un doublet, on prend donc la largeur totale de la structure composée des deux composantes fines, rapportée à l'énergie moyenne, soit $\left(\frac{\Delta E}{E}\right)_{\text{raie}} \sim 3 \times 10^{-3}$.
- Un élargissement dû à la rugosité de surface du cristal est aussi à prendre en compte, estimé [?] à $\left(\frac{\Delta E}{E}\right)_{\text{rugosité}} \sim 10^{-3}$.

On en conclut que pour cette expérience, la résolution en énergie est en premier lieu limitée par les deux derniers effets : $\left(\frac{\Delta E}{E}\right)_{\text{total}}^2 \simeq \left(\frac{\Delta E}{E}\right)_{\text{profondeur}}^2 + \left(\frac{\Delta E}{E}\right)_{\text{rugosité}}^2$ et donc $\left(\frac{\Delta E}{E}\right)_{\text{total}} \sim 3,3 \times 10^{-3}$. On peut donc espérer résoudre des détails de l'ordre de $\Delta E \sim 10 \text{ eV}$.

Cette résolution est-elle compatible avec le signal attendu ? Comme on l'a vu lors de la description qualitative des spectres de DTX, ceux-ci sont essentiellement composés de deux contributions, la diffusion élastique et la diffusion inélastique sur les électrons libres. La séparation spectrale de ces deux contributions fournit une évaluation de la résolution minimale nécessaire à sa détection. Dans le régime de diffusion purement individuel, la composante inélastique est décalée vers le rouge par rapport à la composante élastique de la valeur de l'énergie de Compton E_C . Si en revanche la mesure est réalisée dans le régime purement collectif, on trouve la signature des modes plasmons à l'énergie correspondant à la fréquence plasma électronique $E_{\text{plasmon}} = \hbar\omega_{pe}$. Pour des régimes de diffusion intermédiaires, le décalage obtenu est une composition des deux effets. Anticipons donc sur l'analyse des résultats expérimentaux, et évaluons ces énergies pour un plasma de lithium de $\rho = 0,6 \text{ g.cm}^{-3}$, $T_e = 4,5 \text{ eV}$, $Z^* = 1,35$, qui correspondent aux conditions plasma moyennes effectivement obtenues. Dans ces conditions, $E_{\text{plasmon}} = 10,4 \text{ eV}$, et $E_C = 0 - 62 \text{ eV}$ pour $\theta = 0 - 180^\circ$. On

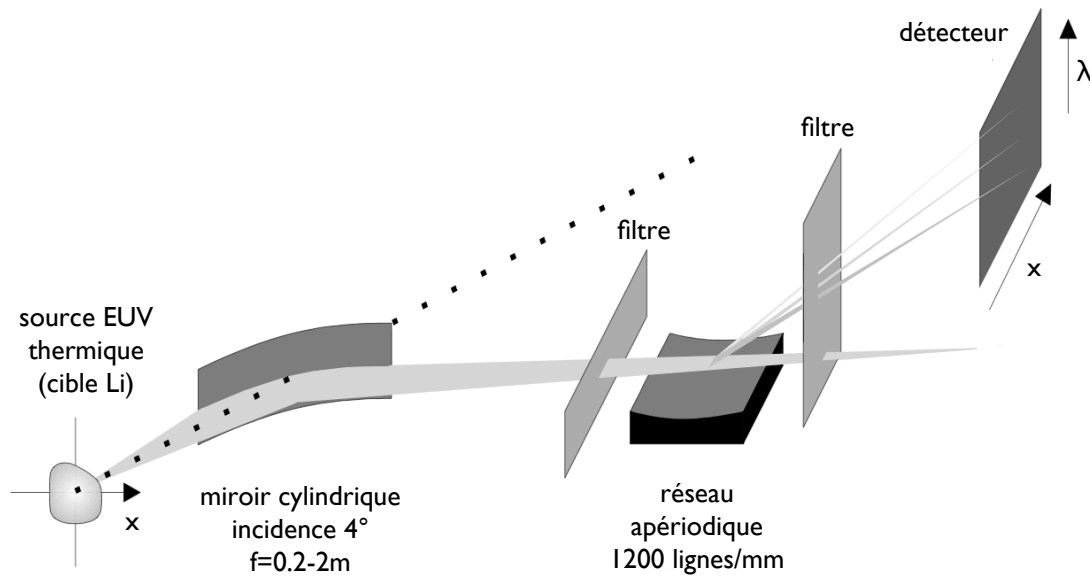


FIGURE 3.10 – Schéma de principe du spectromètre EUV utilisé.

s'attend donc à ne pas pouvoir résoudre le signal en régime purement collectif, mais dans les régimes intermédiaires effectivement sondés, $E_{plasmon} + E_C \approx 25$ eV pour $\theta = 60^\circ$, l'instrument nous permet de mesurer le signal attendu.

Spectromètre EUV. Un spectromètre travaillant dans la bande EUV (*extrême ultra violet*, soit des énergies de photon comprises entre environ 10 eV et 1 keV) [90], a également été mis en œuvre pour détecter le rayonnement thermique du lithium choqué et réaliser une mesure de température spectrale. L'élément diffractant du spectromètre est un réseau en réflexion concave de 50×20 mm, utilisé en incidence rasante ($\theta_i = 3,6^\circ$). Le réseau utilisé est apériodique (avec $p_{moyen} = 1200 \text{ ligne.mm}^{-1}$) et la loi de variation du pas est calculée de sorte que la ligne focale soit contenue dans un plan, dans lequel on vient placer le détecteur, ici une caméra CCD. Un miroir cylindrique en or utilisé en incidence rasante ($\theta_i \approx 4^\circ$) assure la collecte des photons ainsi que la focalisation du rayonnement sur le réseau et augmente la sensibilité de l'appareil de mesure en augmentant la surface collectrice. Il permet en outre de placer le cristal et le détecteur hors de l'axe direct d'émission afin de filtrer d'éventuels rayonnements énergétiques pour lesquels le miroir serait transparent. Les caractéristiques géométriques de l'ensemble du diagnostic sont reproduites sur la figure 3.10.

Spectroscopie résolue en temps. Un autre diagnostic initialement, dévolu à des mesures de spectroscopie d'émission résolues en temps réalisées durant la même campagne expérimentale, fut mis à profit pour cette expérience. Il s'agit d'un second spectromètre à cristal

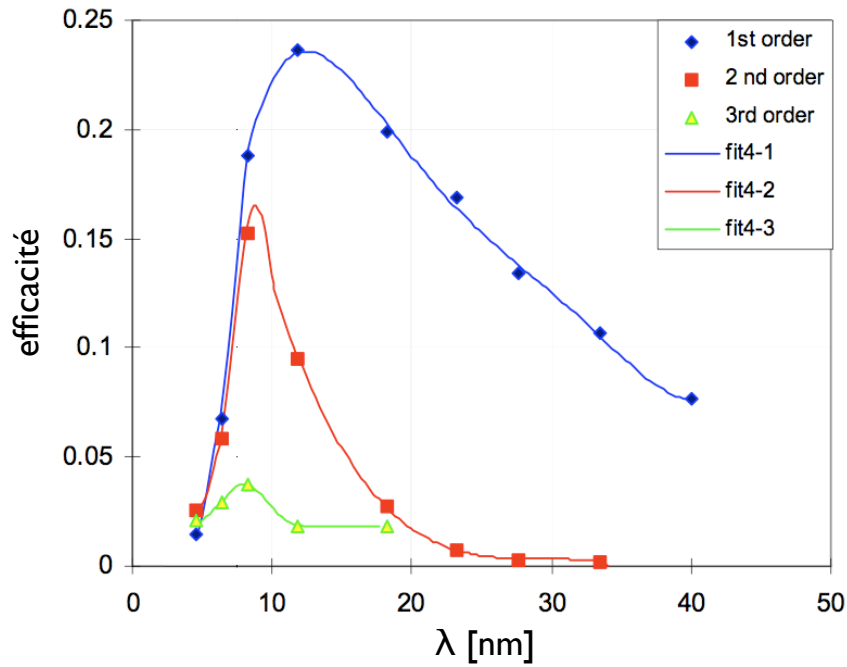


FIGURE 3.11 – Efficacité $E(\lambda)$ du spectromètre XUV mesuré pour les 3 premiers ordres de diffraction. Dans notre cas, le 1er ordre est utilisé.

en configuration de Von Hamos, couplé à une caméra à balayage de fente X (CBFX). Non représentée sur le schéma d'implantation 3.2, la CBFX est placée à la verticale de la cible. Son champ de vision couvre l'ensemble de l'assemblage et permet donc d'enregistrer simultanément l'émission des deux cibles. Sa résolution temporelle, de l'ordre de 10 ps, permet de résoudre les différentes échelles de temps présentes dans l'expérience (durée des impulsions laser 1 ns, retard choc-sonde 3 ns). Sa sensibilité se révèle en revanche insuffisante pour détecter un signal lié à la diffusion Thomson.

3.1.3 Résultats expérimentaux préliminaires ; détermination des conditions plasma sondées

Mesure de la température. Les propriétés de la loi de Planck

$$I(\lambda) = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{\exp(hc/\lambda k_B T) - 1} \quad (3.2)$$

(ici exprimée sous forme de radiance spectrale) d'un corps noir permettent de disposer de plusieurs méthodes pour la mesure de température à partir du rayonnement émis par un corps à l'ETL :

- la mesure de *température de radiation*. Réalisée avec un capteur de type bolométrique intégrant l'énergie lumineuse reçue sur l'ensemble du spectre, elle permet de mesurer la température du corps émissif à partir de la loi de Stefan-Boltzmann : la puissance totale rayonnée par unité de surface est $P = \sigma T^4$ (σ étant la constante de Stefan-Boltzmann).
- la mesure de *température de brillance* est, quant à elle, une mesure de la radiance à une longueur d'onde donnée, qui est une fonction monotone croissante de la température, quelle que soit la longueur d'onde choisie. Elle suppose cependant une calibration absolue de l'appareil de mesure (angles solides de collection, transmissivités/réflexivités...) difficile en général à réaliser.
- la mesure de *température de couleur* contourne la difficulté précédente en mesurant le rapport de radiance à deux longueurs d'onde différentes, celui-ci étant également une fonction monotone de la température.
- la mesure de *température spectrale*, enfin, étend la méthode précédente à une mesure faite sur un intervalle spectral donné, et consiste donc à trouver la température réalisant le meilleur accord entre le spectre mesuré et la loi de Planck paramétrée par T.

Dans notre cas, la gamme de longueurs d'onde et la résolution du spectromètre s'y prêtant d'une part, et l'absence d'une calibration absolue d'autre part, c'est cette dernière stratégie qui a été adoptée.

Le signal $S(\lambda)$ recueilli sur la caméra CCD peut être écrit comme

$$S(\lambda) = AE(\lambda)e(\lambda)I(\lambda), \quad (3.3)$$

où :

- $I(\lambda)$ est la radiance spectrale du corps noir,
- $e(\lambda)$ l'émissivité à la longueur d'onde λ (dans l'hypothèse du corps noir que nous faisons, $e(\lambda)=1$),
- $E(\lambda)$ est l'efficacité globale du spectromètre, qui combine les réflectivités du miroir collecteur, du réseau, la transmission d'éventuels filtres (ici $t = 1$) et la sensibilité du détecteur. $E(\lambda)$, mesurée pour les trois premiers ordres de diffraction du réseau, est tracée en fonction de la longueur d'onde sur la figure 3.11,
- A est un facteur géométrique comprenant notamment l'angle solide de collection.

L'écart quadratique moyen entre $S(\lambda)/E(\lambda)$ et la fonction de Planck est alors minimisé par rapport au paramètre T pour estimer la température. La précision de la mesure est pour cette méthode limitée par la connaissance de $E(\lambda)$, l'adéquation entre la plage spectrale accessible et la température (la sensibilité est en effet meilleure si l'on résout la "bosse" de la distribution que la queue à haute énergie), et la qualité des données, c'est-à-dire le rapport signal sur bruit.

Dans notre cas, la précision est limitée par la qualité des données : la présence d'un spectre de raies (série Balmer-alpha du lithium) superposé à la planckienne détermine ici l'amplitude des barres d'erreur.

L'analyse pour un tir est faite sur la figure 3.12, pour lequel on obtient $T = 12,2 \pm 0.5$ eV.

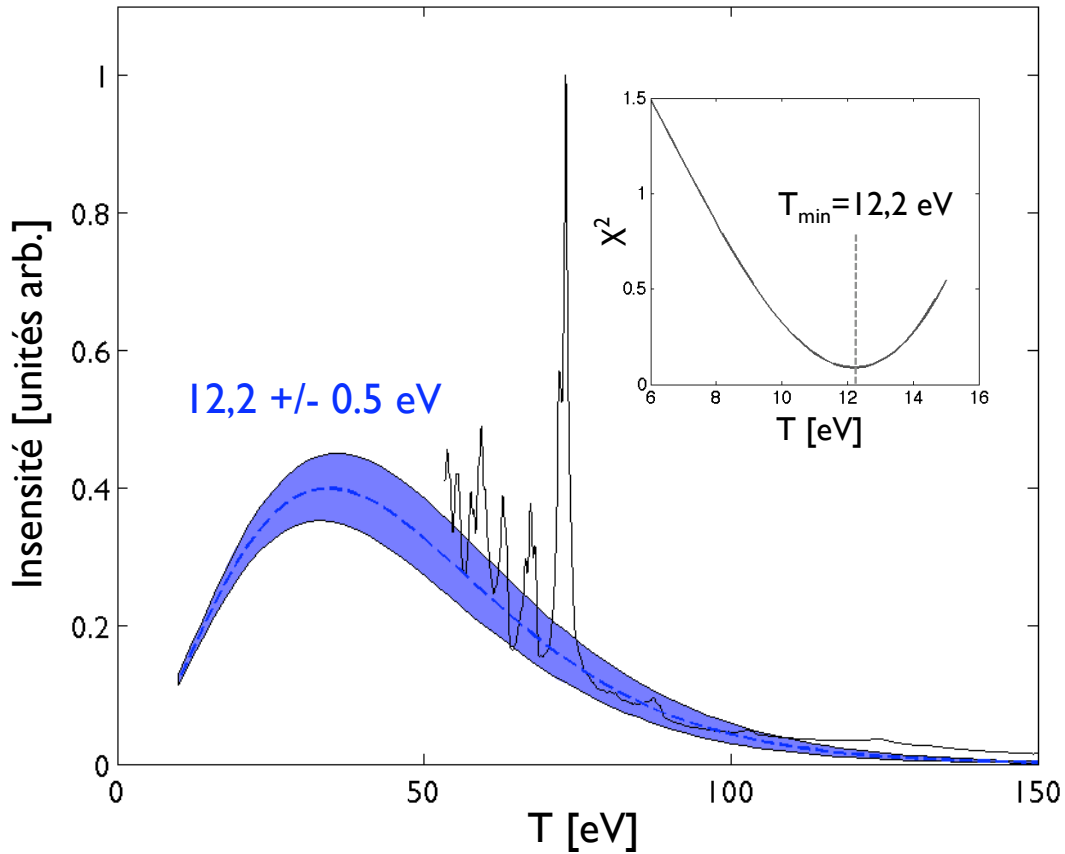


FIGURE 3.12 – Spectre d’émission EUV mesuré, intégré spatialement et temporellement. La température est estimée en ajustant au sens des moindres carrés un spectre de corps noir : $T = 12,2 \pm 0,5 \text{ eV}$. En insert : l’écart quadratique moyen $\chi^2(T)$ en fonction de la température.

Validité de l’estimation de la température. La valeur de la température que nous venons d’évaluer doit être fortement mise en question pour plusieurs raisons.

- En raison de l’implantation du spectromètre EUV (voir figure 3.13), l’émission thermique directe du plasma choqué est bloquée par le lithium froid à la périphérie de la cible.
- L’absence de bouclier, en revanche, permet au spectromètre de recueillir l’émission de la couronne.

Ces doutes sont confirmés par la différence constatée entre la valeur de température moyenne extraite des simulations hydrodynamiques ($T_{\text{hydro}} \simeq 4 \text{ eV}$, voir paragraphe suivant) et celle obtenue par ce diagnostic EUV. Si elle ne peut être considérée comme une mesure, cette valeur est néanmoins conservée comme référence et nous servira (cf. chapitre 4) comme contrainte dans l’analyse des spectres de DTX.

Simulations hydrodynamiques. Ne disposant pas de diagnostic direct de densité, l’évaluation préliminaire de celle-ci a été faite à partir de simulations hydrodynamiques. Le code

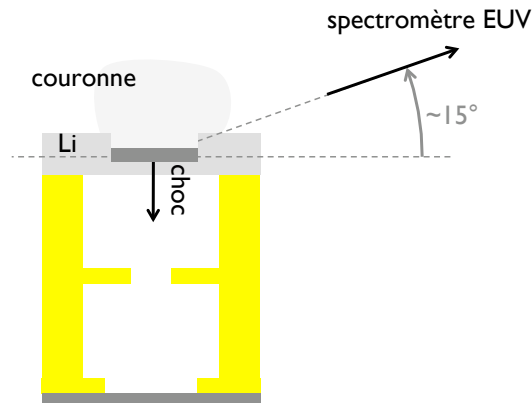


FIGURE 3.13 – Implantation du spectromètre EUV. Illustration des limitations imposées par la géométrie.

utilisé est le code d'hydrodynamique radiative monodimensionnel MULTI, avec les tables d'équations d'état SESAME #2293.

La figure 3.14 illustre dans un plan temps-position eulérienne l'évolution de la densité massique du lithium choqué soumis aux conditions laser expérimentales. Le signal fourni par la CBFX (figure 3.15) permet de mesurer la durée d'émission de la sonde X, d'une largeur à mi-hauteur de 1,35 ns pour une durée d'impulsion laser de 1 ns.

Le détecteur intégrant le signal au cours du temps, la résolution temporelle de la mesure correspond donc à cette durée d'émission de la source, sur laquelle doivent être moyennées les conditions hydrodynamiques de la cible. Les densités et températures, moyennées sur cette fenêtre, évaluées par la simulation hydrodynamique, sont tracées sur la figure 3.16. L'ionisation correspondante est extraite d'une table réalisée à partir d'un modèle hydrogénique, employée dans MULTI.

La résolution spatiale, quant à elle, est déterminée par le fait que l'on sonde dans la direction du choc, que toutes les conditions le long de l'axe du choc sont sondées simultanément.

Finalement, les conditions sondées prédites par la simulation sont :

$$\begin{aligned}\rho_{moy} &= 0,52 \text{ g.cm}^{-3} \\ T_{e,moy} &= 3,98 \text{ eV} \\ Z_{moy}^* &= 0,51\end{aligned}$$

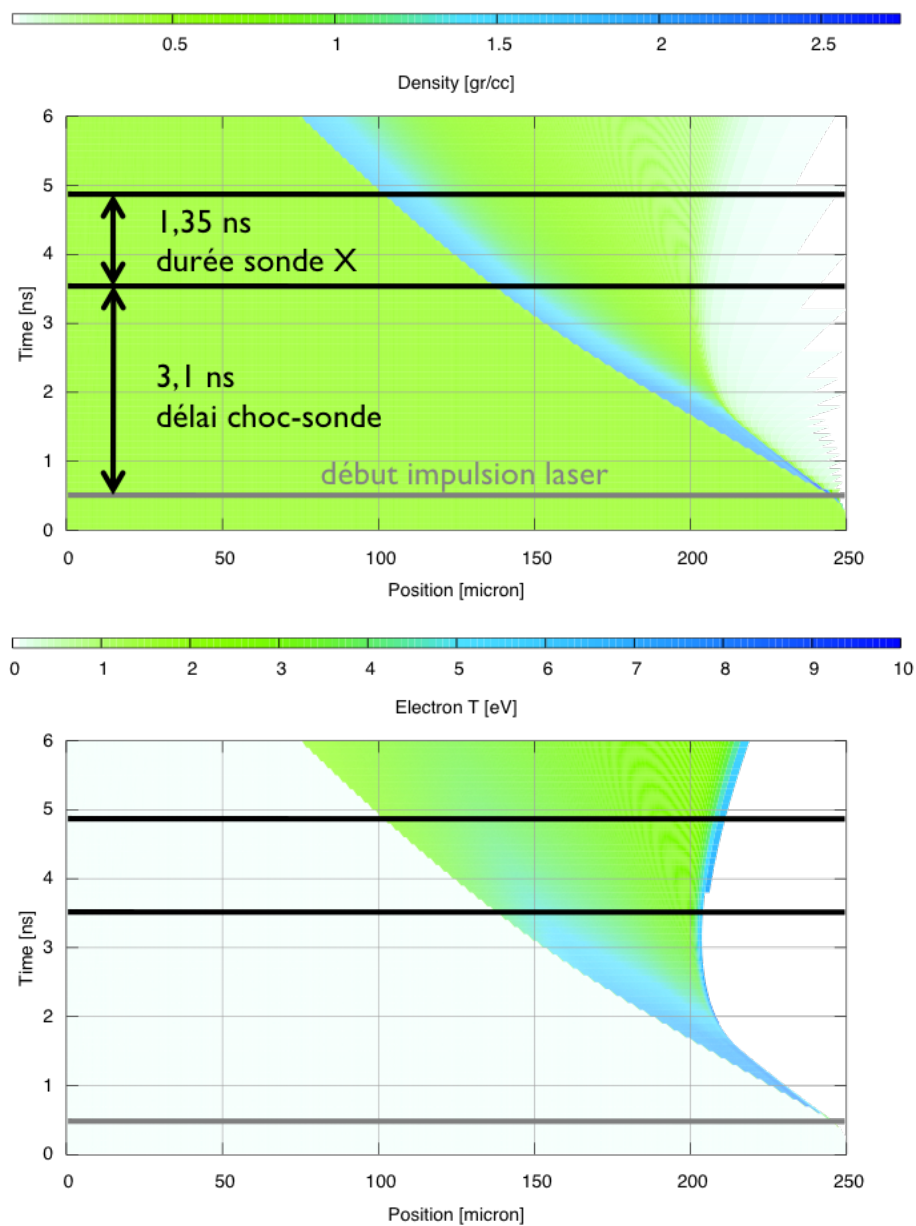


FIGURE 3.14 – Évolution temporelle de la densité massique et de la température électronique dans la cible de lithium choquée simulée avec le code hydrodynamique MULTI. Le laser est incident par la droite, et le temps progresse vers le haut. Sont indiqués sur la figure par des barres horizontales les instants du début de l'illumination laser générant le choc, ainsi que la durée de la sonde X.

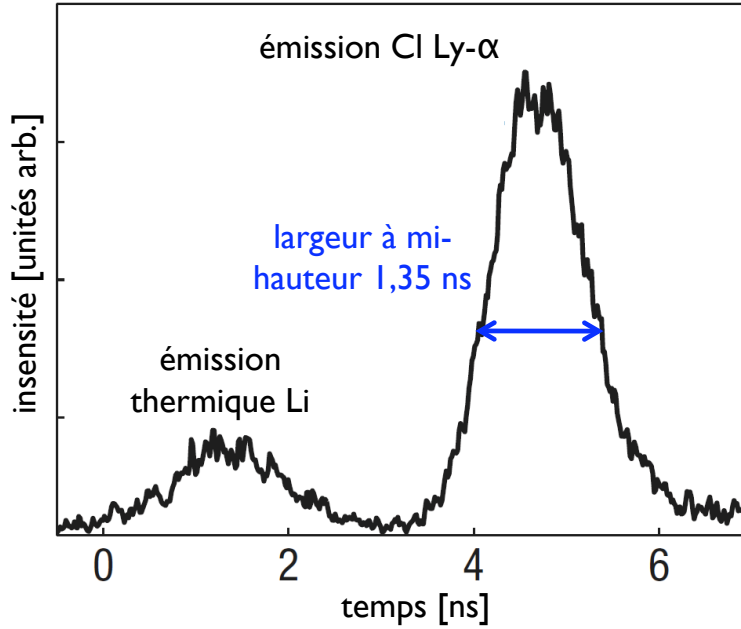


FIGURE 3.15 – Émission X à 2,96 keV résolue en temps enregistrée par la CBFX. Le premier pic est associé à l'émission de la zone coronale du plasma de lithium. Le second correspond à la sonde X provenant de la cible de parylène-D, dont la largeur à mi-hauteur est évaluée à 1,35 ns.

Spectres obtenus Les spectres bruts obtenus dans les conditions précédemment décrites, dans le cas d'un angle de diffusion fixé à $\theta_{\text{diff}} = 60^\circ$, sont représentés sur la figure 3.17. La calibration en énergie a été réalisée au moyen de tirs sur cibles de parylène-D uniquement, placées à la position de la cible de lithium, pour éviter un décalage spectral au niveau du détecteur dû à la position de la source. On identifie sur les spectres correspondants les raies Ly_α (2960 eV) et He_α (2790 eV) du chlore (cf figure 3.18). Examinons la linéarité du spectromètre sur la plage de longueurs d'onde concernée. La loi de dispersion est donnée par $x(\lambda) = 2R\sqrt{(\frac{2d}{m\lambda})^2 - 1}$. On peut comparer les amplitudes respectives des deux premiers ordres du développement de $x(\lambda)$ autour de λ_0 : $\Delta x = \Delta x_1 + \Delta x_2 + \dots = \frac{\partial x}{\partial \lambda} \Delta \lambda + \frac{\partial^2 x}{\partial \lambda^2} \Delta \lambda^2 + \dots$. Pour $\Delta \lambda = \lambda_{\text{Cl He-}\alpha} - \lambda_{\text{Cl Ly-}\alpha} = 0.0255 \text{ nm}$, on trouve $\Delta x_2 / \Delta x_1 \approx 3 \times 10^{-11}$. Le spectromètre est donc très linéaire à une très bonne approximation dans la plage utilisée, et l'on peut utiliser la calibration correspondante $0,22 \text{ eV/pixel} = 3,3 \times 10^{-5} \text{ nm/pixel}$.

La courbe correspondant au spectre expérimental $\theta_{\text{diff}} = 60^\circ$, moyennée dans la direction orthogonale à la direction de dispersion spectrale, est représentée sur la figure 3.19 avec la calibration correspondante. L'interprétation de la courbe au moyen des différents modèles disponibles sera effectuée dans le chapitre suivant.

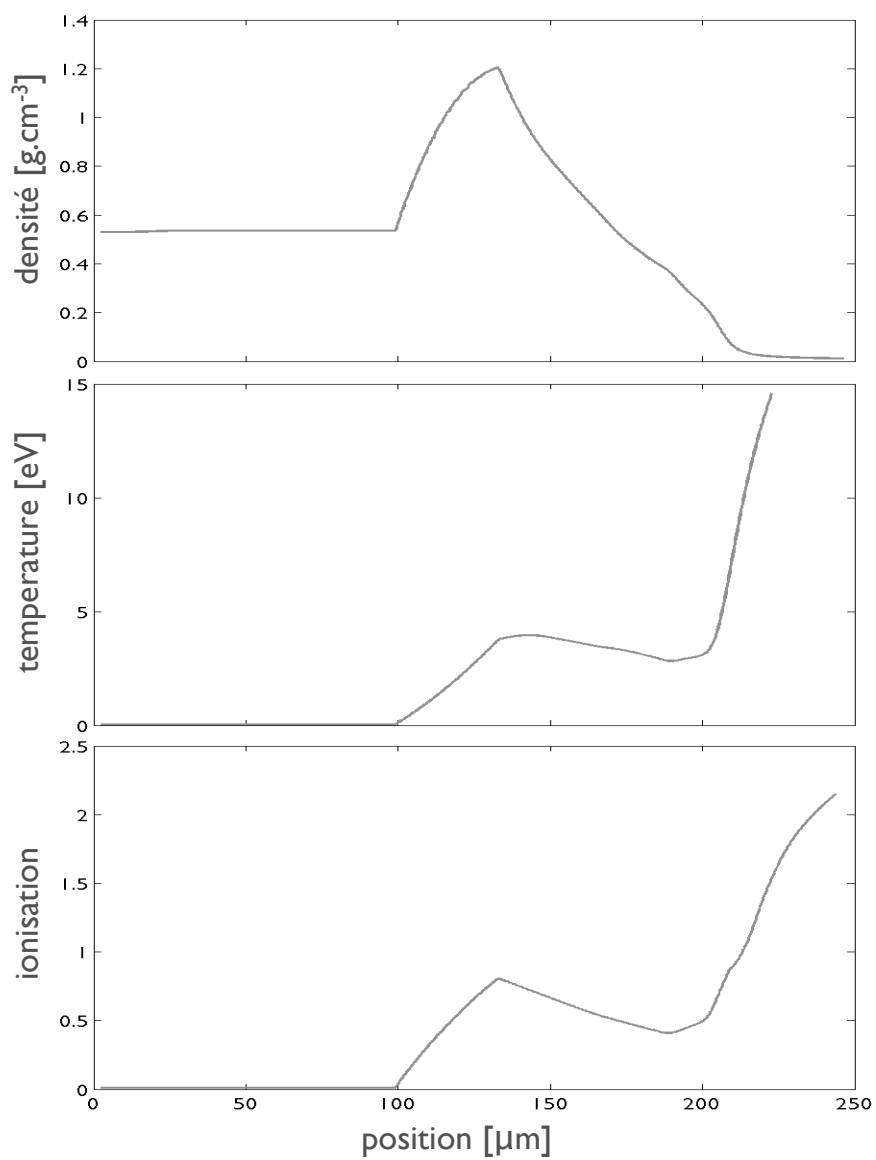


FIGURE 3.16 – Évaluation à partir des simulations hydrodynamiques de la densité volumique, température électronique et ionisation moyennées sur la durée d’émission de la sonde (1,35 ns).

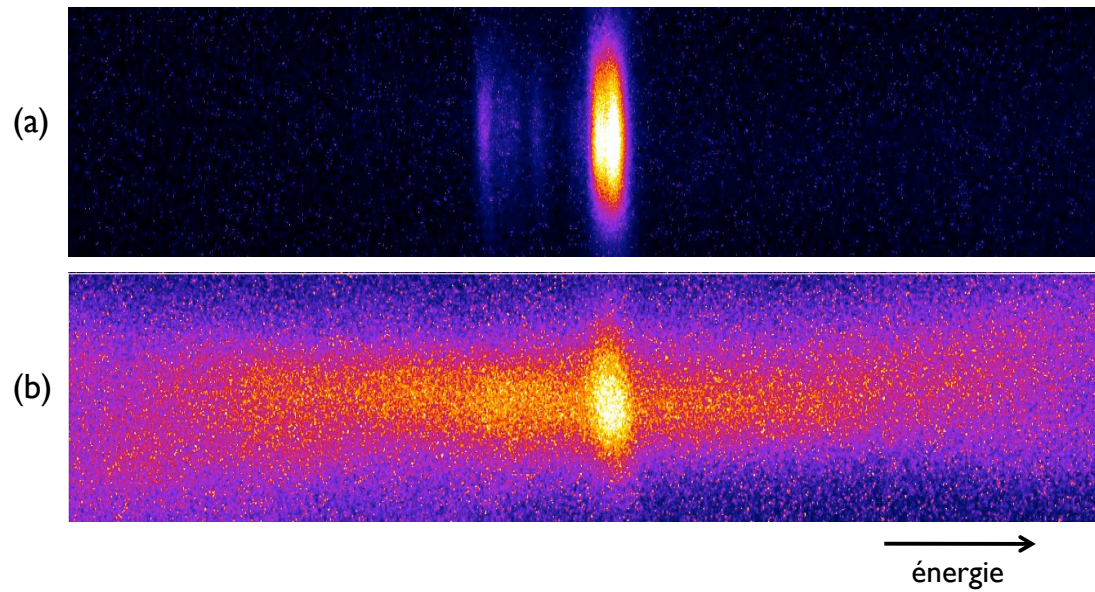


FIGURE 3.17 – Spectres obtenus avec le spectromètre de Von Hamos : (a) Spectre de calibration, cible de parylène-D uniquement. (b) Spectre diffusé par le lithium choqué à 60°.

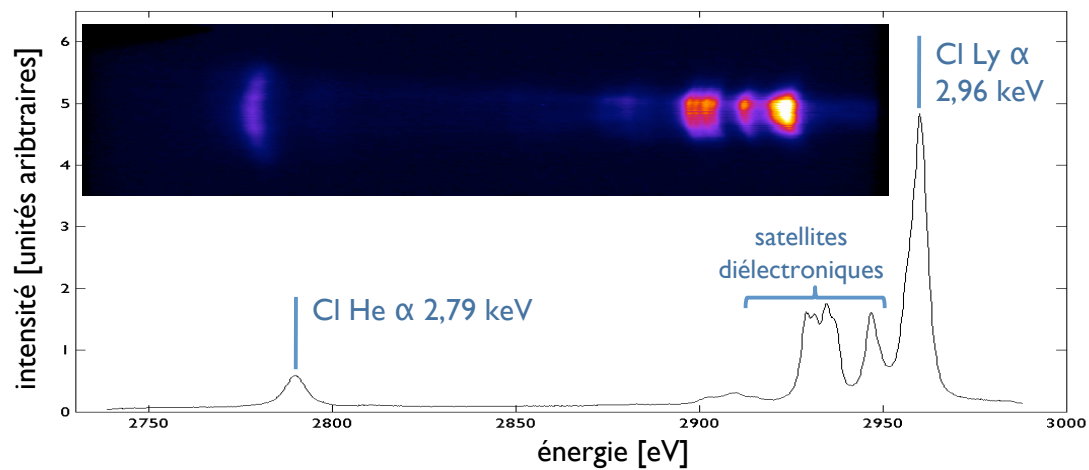


FIGURE 3.18 – Calibration en énergie du spectromètre de Van Hamos. Les deux raies servant à la calibration : Cl Ly- α à 2,96 keV et Cl He- α à 2,79 keV sont clairement visibles.

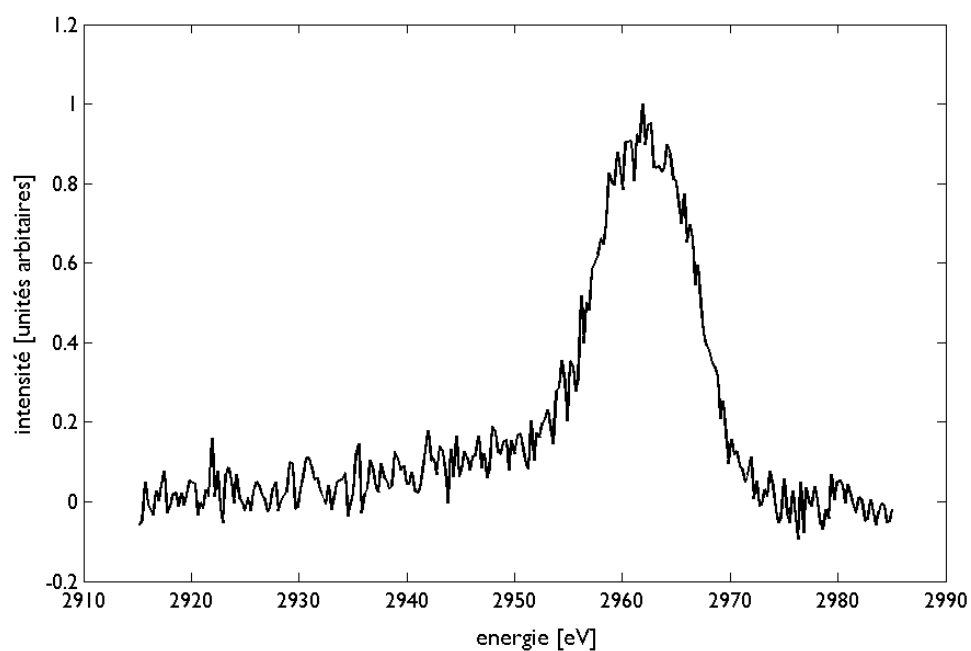


FIGURE 3.19 – Spectre de diffusion obtenu pour $\theta = 60^\circ$.

3.2 Polystyrène

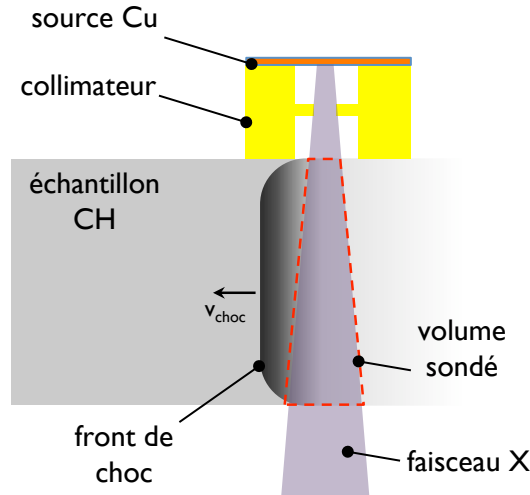


FIGURE 3.20 – Principe de l'expérience.

3.2.1 Objectifs

Passons à la seconde expérience que nous allons exploiter dans ce manuscrit. Elle a été réalisée sur l'installation laser LULI2000/PICO2000. Les objectifs spécifiques pour cette campagne expérimentale étaient :

- L'obtention d'une résolution temporelle meilleure que le temps d'évolution hydrodynamique caractéristique de l'échantillon, permettant donc de sonder un matériau mieux caractérisé, en s'affranchissant de l'intégration temporelle des signaux recueillis.
- Une détermination de l'état de l'échantillon indépendante de la mesure de DTX au moyen d'autres diagnostics.
- Une mesure résolue en angle du spectre diffusé.

3.2.2 Dispositif expérimental

Le principe général de l'expérience est similaire à celui de l'expérience réalisée sur le lithium. L'échantillon de polystyrène est porté dans les conditions WDM par un choc laser à l'aide d'un faisceau laser de type ns, un second faisceau de type ps focalisé sur une cible secondaire génère la source X, la raie K_α du cuivre, à 8048 eV.

3.2.2.1 Conditions laser

L'installation LULI2000/PICO2000 dispose de deux chaînes d'amplification verre-Nd. La chaîne LULI2000 délivre nominale, en sa configuration impulsion longue, un kilojoule en une nanoseconde. La seconde chaîne offre la possibilité d'une impulsion comprimée par amplification par dérive de fréquence [91] (CPA, pour *chirped pulse amplification*). Cela permet d'atteindre des durées d'impulsion bien plus courtes en amplifiant les différentes composantes spectrales d'une impulsion séparées temporellement par une paire de réseaux diffractifs, puis recombinaison après amplification. Les caractéristiques nominales obtenues sur le faisceau PICO2000 sont 100 J-1 ps.

Le choc est obtenu en focalisant l'impulsion longue, doublée en fréquence ($\lambda = 527 \text{ nm}$), de profil temporel carré et de durée 1.5 ns sur la face avant de la cible de plastique. Afin d'obtenir un choc plan, une tache focale de profil spatial plat et de diamètre $400 \mu\text{m}$ est obtenue à l'aide de lames de phase hybrides [92].

La sonde X est obtenue en focalisant sur la cible de cuivre l'impulsion PICO2000 non doublée en fréquence ($\lambda = 1054 \text{ nm}$) de 30 ps avec un miroir parabolique hors-axe $f/4$ en une tache focale de $100 \mu\text{m}$ de diamètre. Pour une énergie laser typique de 60 J sur cible, le régime d'interaction obtenu est donc $I\lambda^2 \approx 2,8 \times 10^{16} \text{ W.cm}^{-2} \mu\text{m}^2$.

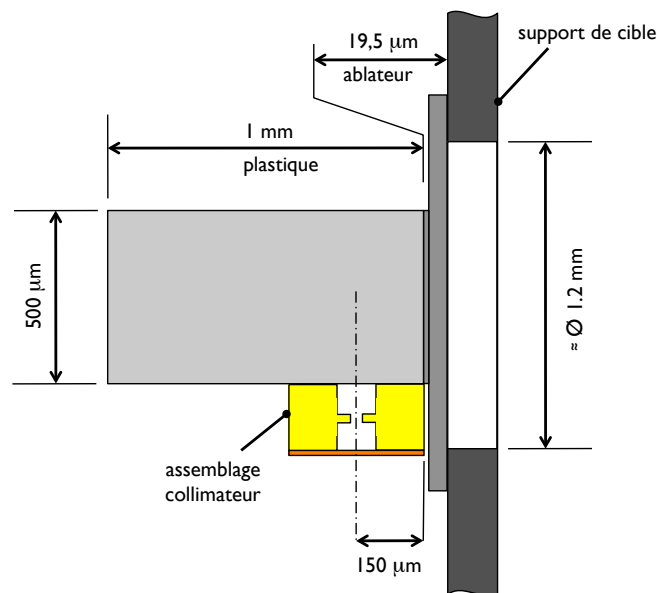


FIGURE 3.21 – Géométrie des cibles utilisées.



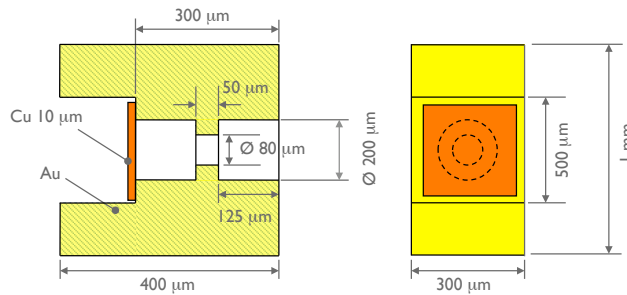


FIGURE 3.22 – Détail du collimateur.

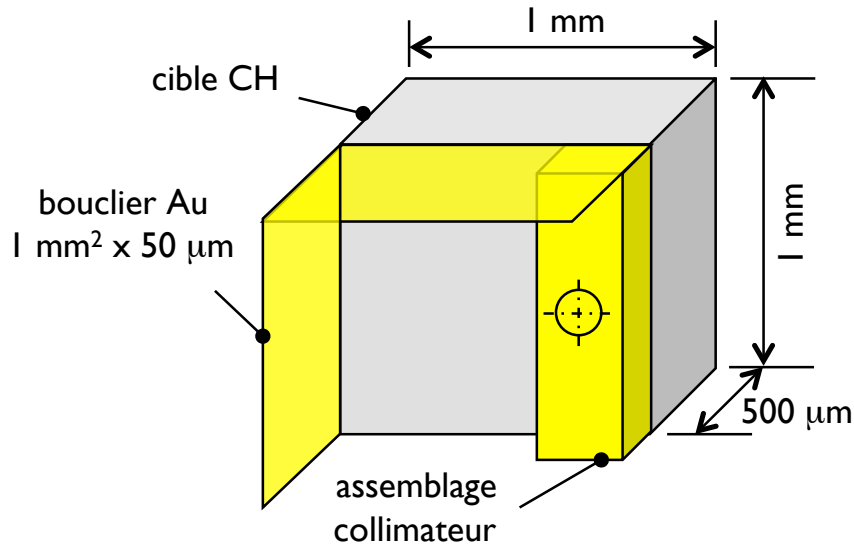


FIGURE 3.23 – Géométrie de l'assemblage cible plastique + collimateur + boucliers.

3.2.2.2 Cibles

La géométrie choisie pour les cibles est illustrée sur la figure 3.21, et est destinée à répondre à l'objectif de sonder un plasma relativement bien défini. Afin que le volume de plasma sondé soit plus homogène, on choisit contrairement à l'expérience précédente de sonder transversalement à la direction du choc. Dans ces conditions, les inhomogénéités dans le volume sondé dépendent principalement du caractère monodimensionnel du choc et de la collimation de la sonde X. La première est assurée par l'emploi de lames de phase, la seconde par un collimateur en or représenté sur la figure 3.22 : ce dernier est constitué d'une feuille d'or de $50\text{ }\mu\text{m}$ d'épaisseur percée d'un trou de $80\text{ }\mu\text{m}$ de diamètre. La sonde est ainsi limitée à un pinceau conique de demi-angle au sommet 12° .

Afin de limiter un éventuel préchauffage radiatif de la cible de plastique, la face avant est re-

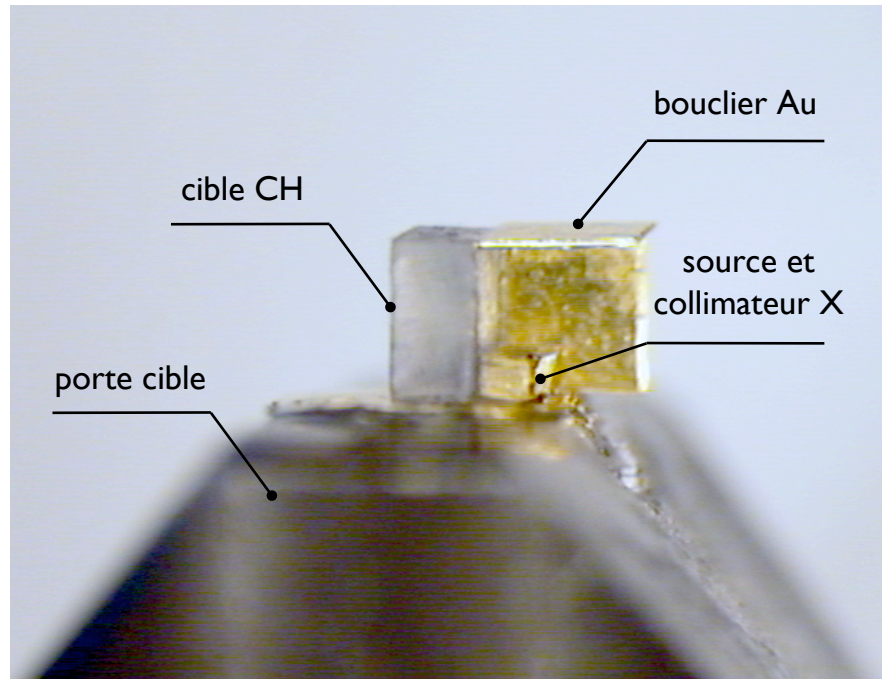


FIGURE 3.24 – Cible de plastique sur son support, collimateur et bouclier.

couverte d'un multi-couche / CH : $15\ \mu\text{m}$ / Al : $2\ \mu\text{m}$ / Au : $0.5\ \mu\text{m}$ / Al : $2\ \mu\text{m}$ / , désigné par le terme ablateur sur la figure 3.21. L'impulsion laser est focalisée sur la première couche de plastique (CH : $15\ \mu\text{m}$), et la dernière couche d'aluminium (Al : $2\ \mu\text{m}$) est déposée sur l'échantillon de plastique sondé. Ce dernier est du polystyrène ($\rho_0 = 1,03\ \text{g.cm}^{-3}$).

La source X est constituée d'une feuille de cuivre de $10\ \mu\text{m}$ d'épaisseur, située à une distance de $300\ \mu\text{m}$ de la cible.

L'assemblage est complété par des boucliers en or (cf. figure 3.23) constitués de $50\ \mu\text{m}$ d'or, afin de protéger les diagnostics des photons X en provenance directe de la source.

3.2.2.3 Diagnostics

Le schéma d'implantation général des diagnostics utilisés et que nous allons maintenant décrire est reproduit sur la figure 3.25.

Le spectromètre à large ouverture angulaire (WASP, pour *wide angle spectrometer*). Il s'agit du spectromètre utilisé pour mesurer le signal diffusé en fonction de l'angle de diffusion. Il a été développé [93] afin que les diffusions à différents angles puissent être mesurées sur un même tir, ce qui permet d'éliminer les incertitudes liées aux fluctuations tir-à-tir

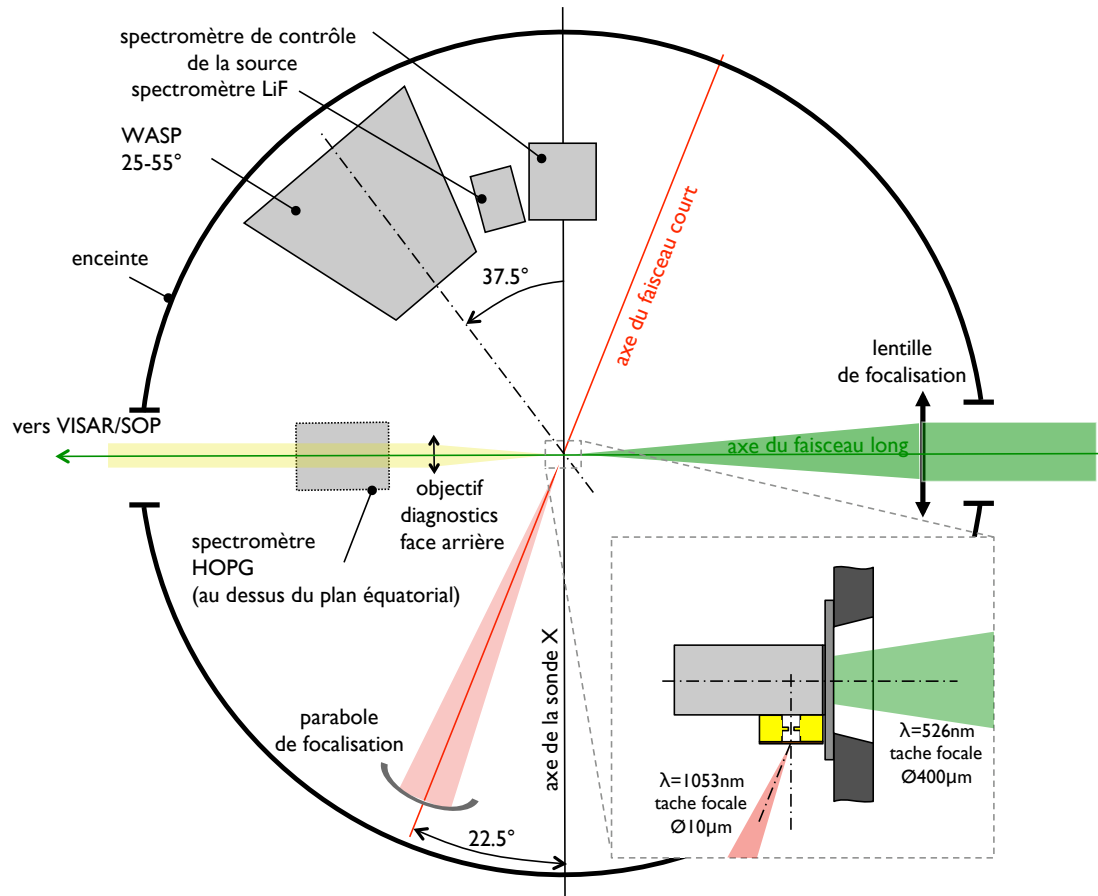


FIGURE 3.25 – Schéma d’implantation des diagnostics dans l’enceinte d’expérience. Vue de dessus.

des conditions laser, de l’alignement de la cible, et du positionnement du détecteur. C’est un spectromètre à cristal plan HOPG. La plage de détection angulaire est simplement donnée par la largeur du cristal (100mm) et par celle du détecteur, une *imaging plate* (IP). Les distances cible-cristal et cristal-détecteur sont choisies égales (voir figure 3.26) afin de profiter du mode de focalisation mosaïque du cristal HOPG.

Le filtrage est constitué de $50\mu\text{m}$ de Mylar ainsi que $25\mu\text{m}$ de cuivre.

Résolution angulaire. La baisse de résolution dans la direction spectrale liée à la mosaïcité du cristal est également associée à une diminution de la résolution dans la direction sagittale, c’est-à-dire sur la résolution angulaire. On peut l’évaluer (voir figure 3.27) à $\delta\theta \simeq 2\gamma \sin(\theta_B)$, où $\gamma \simeq 3.5^\circ$ est la dispersion mosaïque déjà définie, et $\theta_B = 13.3^\circ$ l’angle de Bragg. La résolution angulaire intrinsèque du spectromètre est donc $\delta\theta \simeq 0.8^\circ$. La résolution

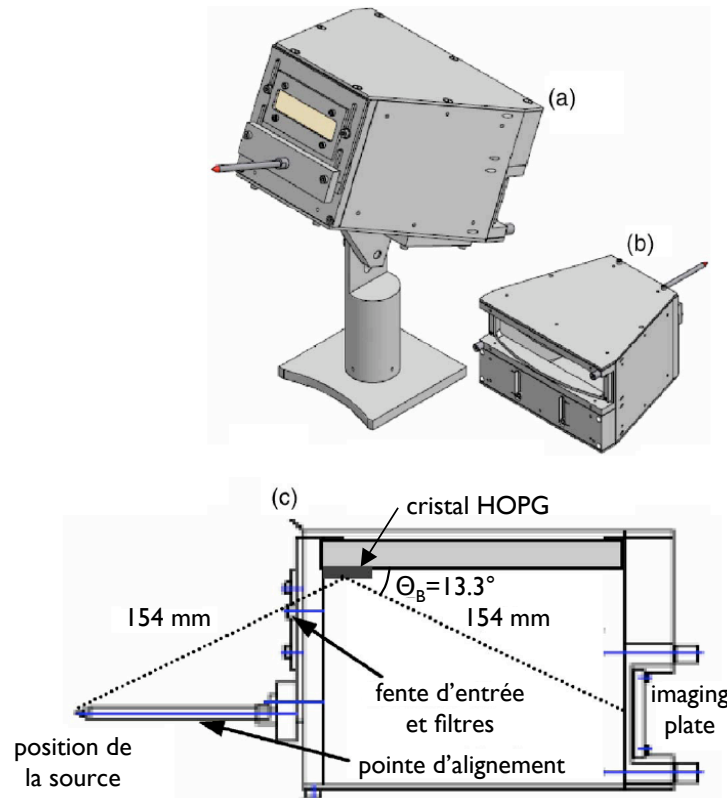


FIGURE 3.26 – Spectromètre à large ouverture angulaire. (a) et (b) : Vues extérieures du boîtier. (c) : Coupe sagittale, montrant les distances, angles, et le trajet des photons X.

angulaire de la mesure est ainsi déterminée par l'ouverture angulaire de la source, laquelle est fixée par le diamètre du trou du collimateur. Pour le diamètre utilisé $\varnothing = 80^\circ$, on a $\delta\theta \approx 13^\circ$. La calibration en angle a été simplement réalisée en mesurant la position du spectromètre dans l'enceinte d'expérience. La plage angulaire couverte correspond à $[25^\circ\text{-}55^\circ]$, avec une incertitude évaluée à ± 1 degré.

La calibration en énergie du spectromètre a été réalisée en effectuant des tirs sur des cibles de cuivre. L'identification de deux raies d'émission spécifiques du cuivre : Cu K- α à $E = 8048$ eV, Cu K- β à $E = 8950$ eV ainsi que du seuil d'absorption K à $E = 8988$ eV dû à la présence du filtre de cuivre, permet de positionner de façon absolue l'axe d'énergie par rapport à une référence fixe, ainsi que d'obtenir le facteur de calibration : 6,07 eV/pixel (voir figure 3.28).

Autres diagnostics X. Trois autres spectromètres à cristal on été mis en œuvre. N'ayant pas fournis de données exploitables, nous ne les décrivons que brièvement.

- un spectromètre à cristal cylindrique HOPG ($2d = 6,708\text{\AA}$), dans la configuration de Von Hamos, à $\theta \approx 90^\circ$.

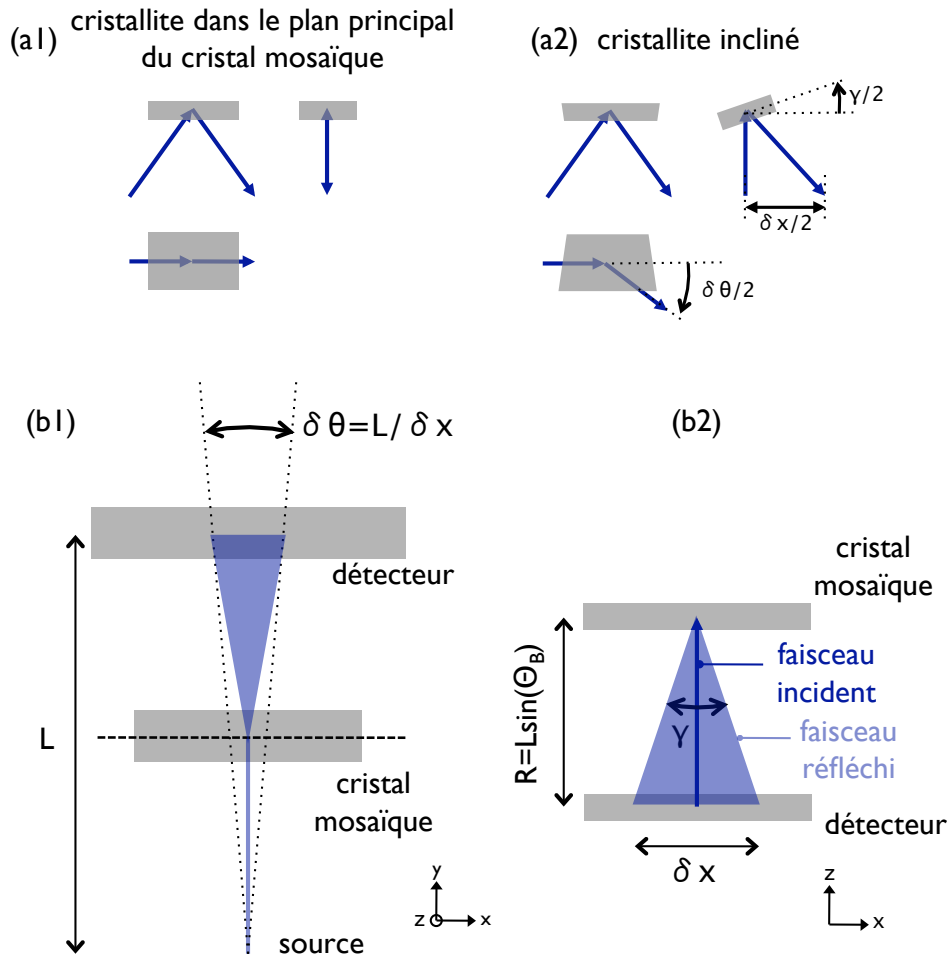


FIGURE 3.27 – Mécanisme de limitation de la résolution angulaire due à la dispersion mosaïque du cristal. (a_1) et (a_2) : Réflexion d'un rayon par un cristallite dans le plan principal du cristal mosaïque, et par un cristallite ayant subi une rotation autour de l'axe source-détecteur. (b_1) et (b_2) : Quantification de l'élargissement angulaire d'un faisceau incident dû à ce mécanisme pour la géométrie du WASP.

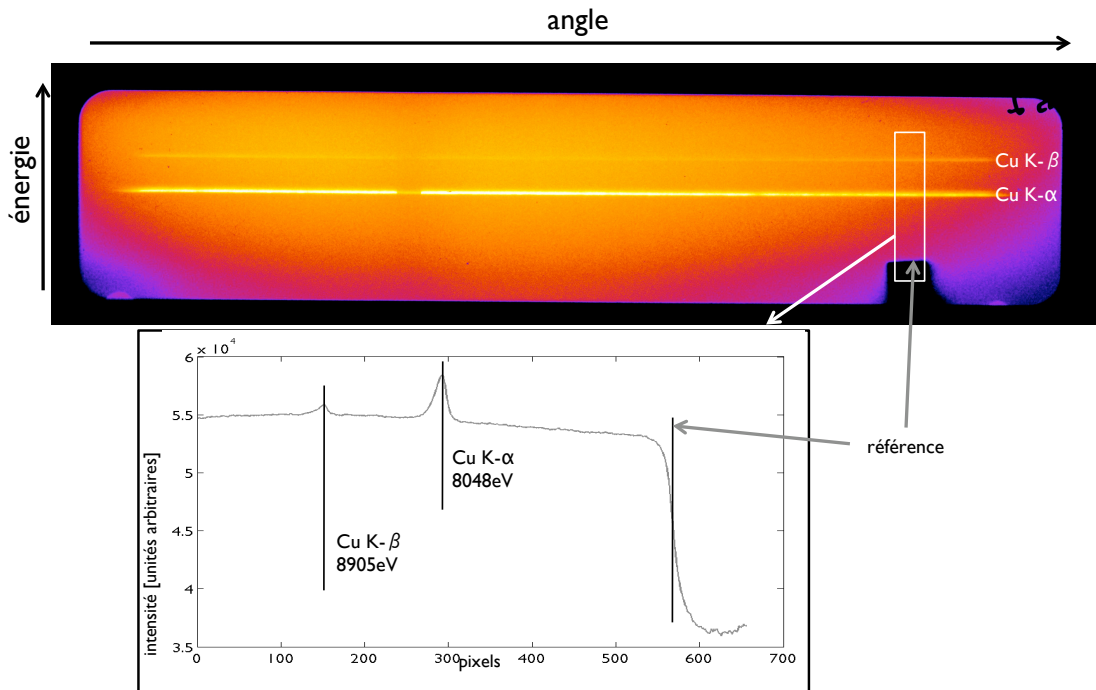


FIGURE 3.28 – Calibration en énergie du spectromètre à large ouverture angulaire. Les raies d'émission Cu K- α et Cu K- β d'énergie connues sont obtenues avec un tir sur une feuille de cuivre.

- un spectromètre à cristal cylindrique de fluorure de lithium dans l'orientation (200) ($2d = 2,848\text{\AA}$), dans la configuration de Von Hamos, à $\theta \simeq 25^\circ$.
- un spectromètre à cristal plan de silicium dans l'orientation (111) ($2d = 6,2712\text{\AA}$), à $\theta \simeq 0^\circ$, pour contrôler l'intensité de la source sur chaque tir.

Diagnostics optiques de face arrière. Afin de répondre au second objectif, *i.e.* une caractérisation du plasma indépendante de la mesure DTX, nous avons mis en place deux diagnostics optiques, imageant la face arrière (la face avant étant celle sur laquelle est focalisé le faisceau générant le choc) de la cible de plastique. Le premier est une mesure de pyrométrie par émission propre résolue en temps (SOP, pour *streaked optical pyrometry*) destinée à mesurer l'intensité de l'émission thermique du plastique choqué et donc sa température. Quant au second, il s'agit d'un diagnostic de vélocimétrie VISAR (pour *velocity interferometer system for any reflector*) ayant pour objectif de mesurer les vitesses moyennes et instantanées du choc dans la cible de plastique. Le schéma d'implantation correspondant à notre expérience est reproduit sur la figure 3.29.

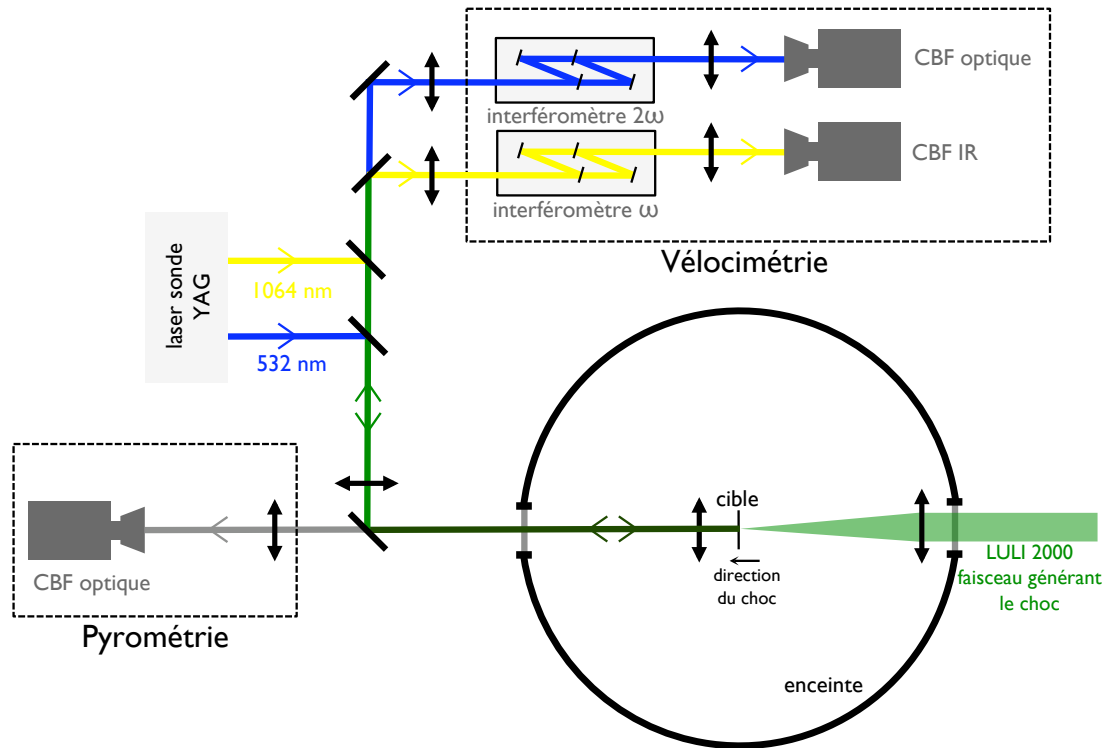


FIGURE 3.29 – Schéma d'implantation des diagnostics de face arrière : pyrométrie (SOP) et vélocimétrie (VISAR). Vue de dessus.

Principe du VISAR. Le VISAR est un diagnostic optique interférométrique fournissant une mesure de vitesse d'une surface réfléchissante, en l'occurrence la surface du choc. Le principe de la mesure est illustré sur la figure 3.30. Une impulsion laser de référence est réfléchiée sur une surface en mouvement et voit sa longueur d'onde λ varier par effet Doppler. Un interféromètre dont le temps de parcours pour la lumière d'un des bras est retardé de τ par rapport à l'autre au moyen d'un étalon d'indice optique n et d'épaisseur e connus, encode cette variation de fréquence en différence de phase à sa sortie. Au premier ordre en v/c et en négligeant la dispersion $n(\lambda)$ de l'étalon, on obtient une relation linéaire entre déphasage et vitesse $\frac{\Delta\Phi}{2\pi} = \frac{2\tau}{\lambda} v = Sv$, où S est appelé la sensibilité du VISAR. L'évolution temporelle de la phase de l'interférogramme obtenu, donc la vitesse, est enregistrée au moyen d'un caméra à balayage de fente.

Le VISAR employé est à double voie (voir figure 3.29), dont les deux interféromètres de Mach-Zehnder travaillent respectivement dans l'infrarouge (" ω " : $\lambda = 1064\text{ nm}$) et dans le vert (" 2ω " : $\lambda = 532\text{ nm}$). Le faisceau sonde utilisé est un laser Nd :YAG (grenat d'yttrium-aluminium dopé au néodyme), dont une partie de la lumière est doublée en fréquence afin d'obtenir les deux longueurs d'onde désirées. Il fournit des impulsions gaussiennes de 8 ns , synchronisées avec le choc. Chacune d'elles est injectée indépendamment dans une fibre optique, et vient se ré-

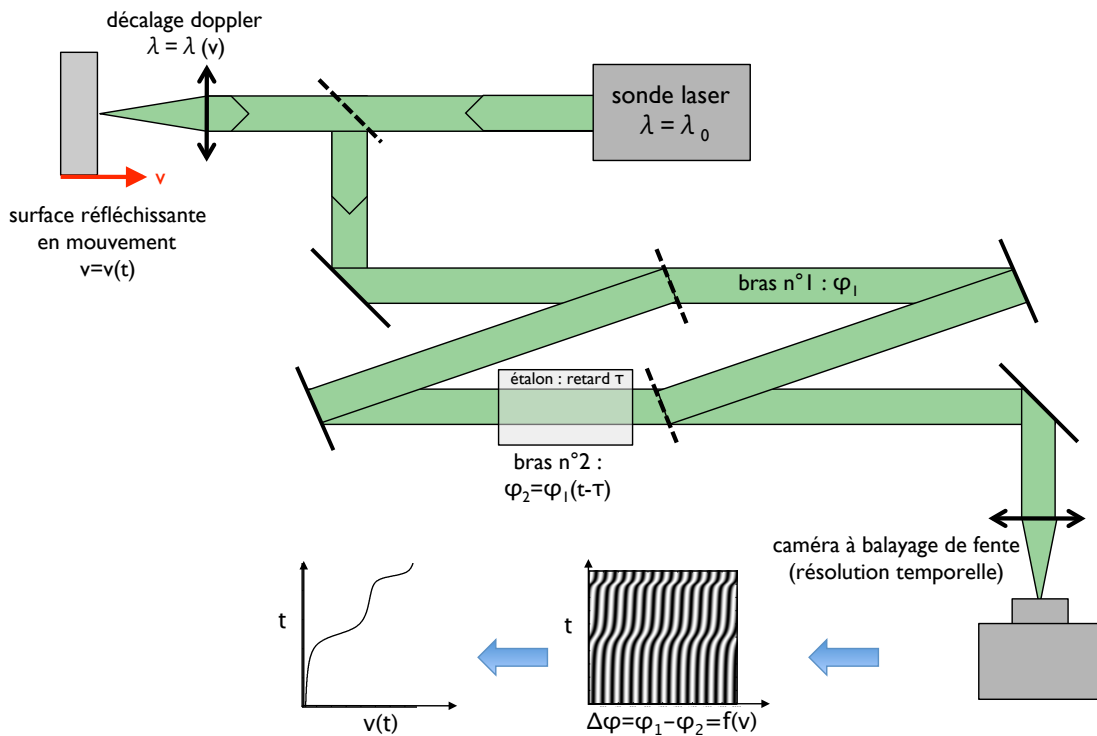


FIGURE 3.30 – Schéma de principe de la mesure de la vitesse avec un diagnostic VISAR.

fléchir sur la face arrière de la cible. Les deux fréquences sont ensuite séparées au moyen d'un miroir diélectrique. Sur chaque voie l'image de la face arrière est faite sur la lame de sortie de l'interféromètre, puis la figure d'interférence correspondante est imagée sur la fente d'entrée d'une caméra à balayage de fente (CBF). Les étalons sont choisis pour obtenir des sensibilités S couvrant la gamme de vitesses attendues :

- VISAR ω : $S = 12,63 \text{ km.s}^{-1}.\text{frange}^{-1}$
- VISAR 2ω : $S = 5,12 \text{ km.s}^{-1}.\text{frange}^{-1}$

SOP. Un miroir diélectrique traité à 1064 nm et 532 nm est utilisé pour séparer les longueurs d'onde du laser sonde du VISAR du rayonnement thermique (optique) émis. L'image de la face arrière de la cible est simplement faite sur la fente d'entrée d'un CBF afin d'obtenir une mesure résolue en temps.

3.2.3 Analyse des résultats

Détermination des conditions plasma. Les données fournies par les diagnostics optiques de face arrière se révèlent difficiles à exploiter pour plusieurs raisons :

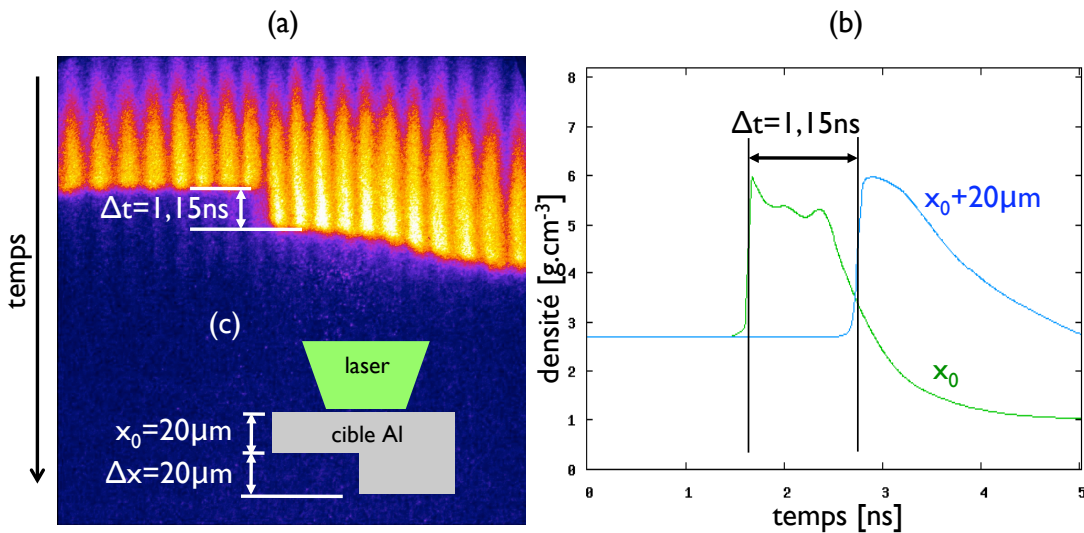


FIGURE 3.31 – (a) Mesure VISAR 2ω de la vitesse moyenne du choc dans une marche d'aluminium. Les franges disparaissent lorsque le choc débouche aux interfaces aluminium/vide. (b) Simulation hydrodynamique (MULTI) de la densité au niveau des interfaces aluminium/vide. On obtient la même vitesse moyenne de choc ($v_{\text{choc}} = 17,4 \mu\text{m} \cdot \text{ns}^{-1}$) pour une intensité sur cible de $I = 2,5 \times 10^{13} \text{ W} \cdot \text{cm}^{-2}$. (c) Représentation schématique de la cible d'aluminium.

- Le mauvais état de surface de la face arrière des cibles les rend très peu transparentes à la lumière visible à laquelle est sensible la mesure d'émission propre.
- Les franges obtenues avec les diagnostics VISAR ont systématiquement disparu lorsque le choc atteint l'interface ablateur/polystyrène. La raison de ce comportement est mal comprise. Le retard faisceau long / faisceau court n'ayant pas d'influence sur ce phénomène, cette dernière peut être écartée. Par ailleurs des expériences réalisées sur le polystyrène pour des gammes d'énergie laser similaires et mettant en oeuvre des mesures VISAR [94] permettent d'éliminer un comportement mal compris du matériau dans ce domaine de densité-température. Une autre hypothèse serait de mettre en cause les cibles elles-mêmes, en particulier l'influence de la colle utilisée pour assembler le polystyrène à la feuille multicouche de l'ablateur.

Au vu de ces difficultés, la détermination de l'état plasma sondé a été réalisée de manière indirecte. L'évolution hydrodynamique a été évaluée à partir de simulations hydrodynamiques, lesquelles furent calibrées avec les données disponibles :

- L'intensité laser effective sur cible a été déterminée à partir de tirs sur des marches d'aluminium d'épaisseur connue (voir figure 3.31) et de simulations hydrodynamiques avec le code 1D MULTI. L'équation d'état de l'aluminium est en effet bien connue (table d'équation d'état SESAME #3717) et peut servir de référence. L'énergie laser infrarouge (avant conversion) étant par ailleurs mesurée par un calorimètre à chaque tir, on obtient ainsi

Δt [ns]	$\langle \rho \rangle$ [g.cm^{-3}]	$\langle T_e \rangle$ [eV]	$\langle Z^* \rangle$
2	1,1	0,39	0,6
8	2,1	1,86	1,5

TABLE 3.1 – Paramètres extraits des simulations hydrodynamiques.

un facteur de conversion pour connaître l'énergie laser sur cible à chaque tir. On obtient pour une énergie infrarouge mesurée $E_\omega = 980 \text{ J}$ une intensité correspondante $I = 2,5 \times 10^{13} \text{ W.cm}^{-2}$.

- La vitesse moyenne simulée du choc dans l'ablateur (table utilisée pour le polystyrène : SESAME #7592) avec le facteur de conversion précédemment évalué est ensuite comparée, pour les tirs réels, à celle déduite du temps de débouché du choc à l'interface ablateur/polystyrène (voir figure 3.32). Pour le tir considéré, la vitesse moyenne du choc dans l'ablateur mesurée avec le VISAR 2ω est $v_{\text{mes},2\omega} \simeq 27,16 \mu\text{m.ns}^{-1}$, celle mesurée avec le VISAR ω $v_{\text{mes},\omega} \simeq 27,1 \mu\text{m.ns}^{-1}$ et celle déduite de la simulation hydrodynamique $v_{\text{sim}} \simeq 26,0 \mu\text{m.ns}^{-1}$, soit une différence maximale de 4,3%.

Cette erreur raisonnable nous permet d'obtenir les conditions plasma sondées à partir des conditions laser et des simulations hydrodynamiques correspondantes.

Pour des énergies laser comparables, et donc pour des vitesses de choc similaires, les conditions plasma sondées sont principalement déterminées par le retard Δt entre la sonde et le choc. L'émission du rayonnement X, coïncidant avec l'impulsion courte d'une durée de 30 ps, est considérée instantanée par rapport aux échelles de temps hydrodynamiques, et on note l'instant correspondant t_{sonde} . Le début de la compression est repéré par l'instant où l'intensité du faisceau nanoseconde atteint 50% de son intensité maximale, noté t_0 . On note $\Delta t = t_{\text{sonde}} - t_0$. Pour les deux tirs analysés, $\Delta t = 2 \text{ ns}$ et $\Delta t = 8 \text{ ns}$, les conditions plasma sondées sont représentées sur la figure 3.33.

Les grandeurs ρ , T_e et Z^* sont moyennées sur un volume conique V tel que délimité par le collimateur X, représenté sur la figure 3.34 : $\langle \rho \rangle = \frac{1}{V} \int_V \rho \, dv$, $\langle T_e \rangle = \frac{\int_V T_e \rho \, dv}{\int_V \rho \, dv}$, $\langle Z^* \rangle = \frac{\int_V Z^* \rho \, dv}{\int_V \rho \, dv}$. Les valeurs moyennes correspondantes sont regroupées dans le tableau 3.1.

Spectres angulaires obtenus. Les données brutes provenant du WASP sont enregistrées sur des IP. Lors de la mesure, les photons X photoexcitent les cristaux de fluoro-bromure de baryum contenus dans le film vers un état métastable pour former une image latente. L'image est révélée en mesurant la fluorescence du film lorsqu'il est exposé à une longueur d'onde laser précise qui provoque la désexcitation des cristaux. Le signal est stocké dans une échelle logarithmique QL (*quantum level*), reliée à l'intensité, notée PSL (*photostimulated luminescence*), par :

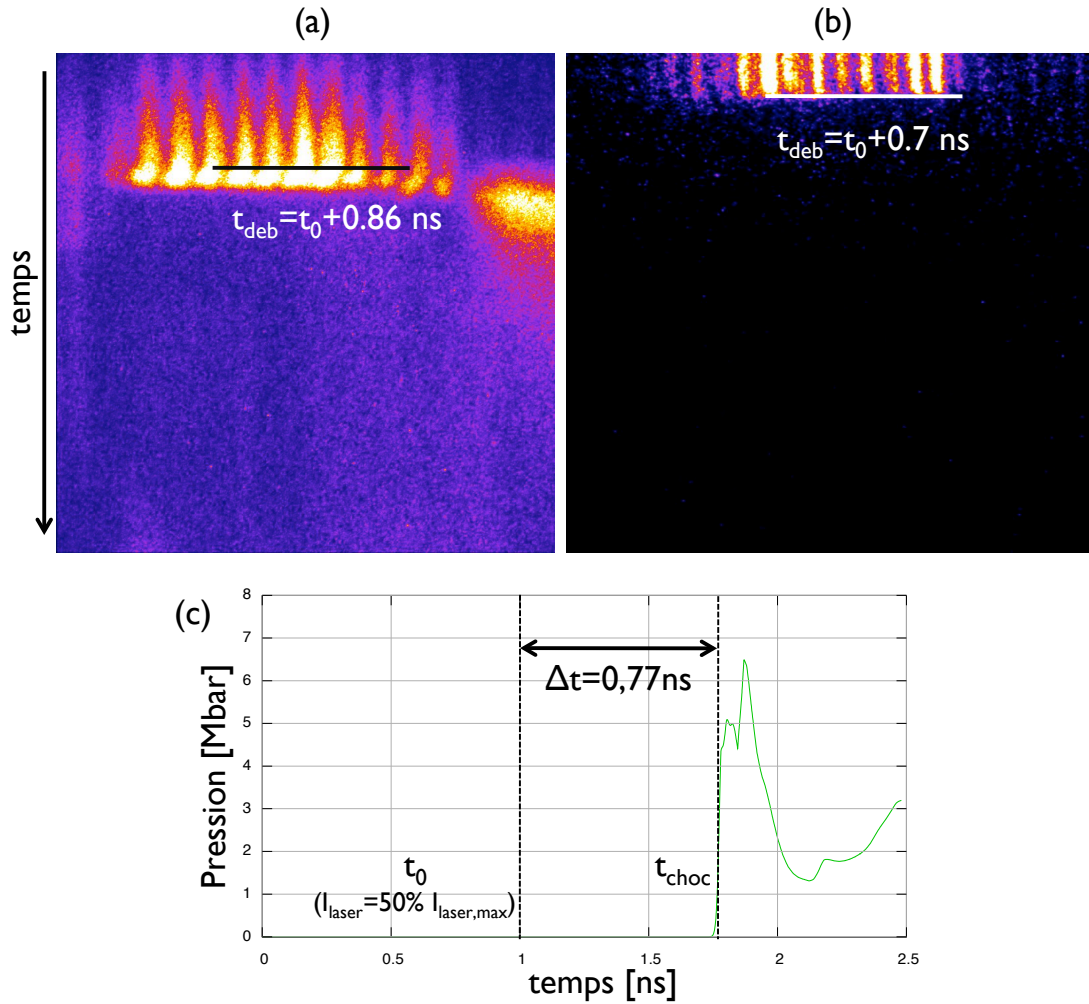


FIGURE 3.32 – Comparaison des instants de débouché du CH. (a) Mesure VISAR à 2ω . (b) Mesure VISAR à ω . (c) Simulation hydrodynamique de la densité à l'interface ablateur/polystyrène. Les valeurs mesurées et simulée diffèrent de 4,3%.

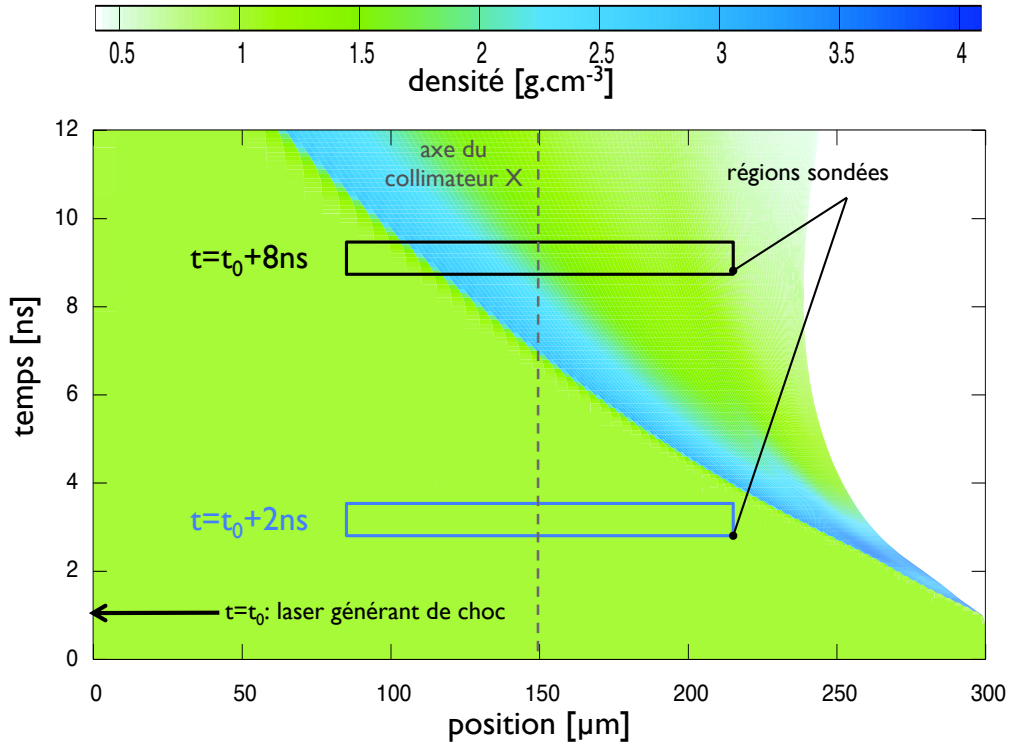


FIGURE 3.33 – Représentation des conditions hydrodynamiques sondées pour deux tirs avec des retards choc/sonde différents : 2 ns et 8 ns. La résolution temporelle (30 ps), représentée par la hauteur de la région rectangulaire, est intentionnellement dégradée, et l'extension spatiale de la région sondée est ici représentée par le diamètre du cône au niveau de la moitié de la profondeur de la cible ($x = 250 \mu\text{m}$, l'axe x étant défini sur la figure 3.34). Les deux régions sondées sont ici abusivement représentées sur la même simulation hydrodynamique, mais les valeurs moyennes sont extraites des simulations réalisées avec les énergies laser correspondant à chaque tir, respectivement 994 J et 849 J.

$$PSL = \left(\frac{R}{100} \right)^2 10^{\frac{QL}{G} - \frac{1}{2}}, \quad (3.4)$$

où R est la résolution avec laquelle est scannée le film et G , la précision utilisée pour coder le signal. Ici $R = 100 \mu\text{m}$ et $G = 2^{16}$.

Les points expérimentaux analysés sont obtenus en moyennant le signal PSL sur des fenêtres $\Delta\theta = 2.5^\circ$ dans la direction angulaire et $\Delta E = 600 \text{ eV}$ dans la direction spectrale comme indiqué sur la figure 3.35.

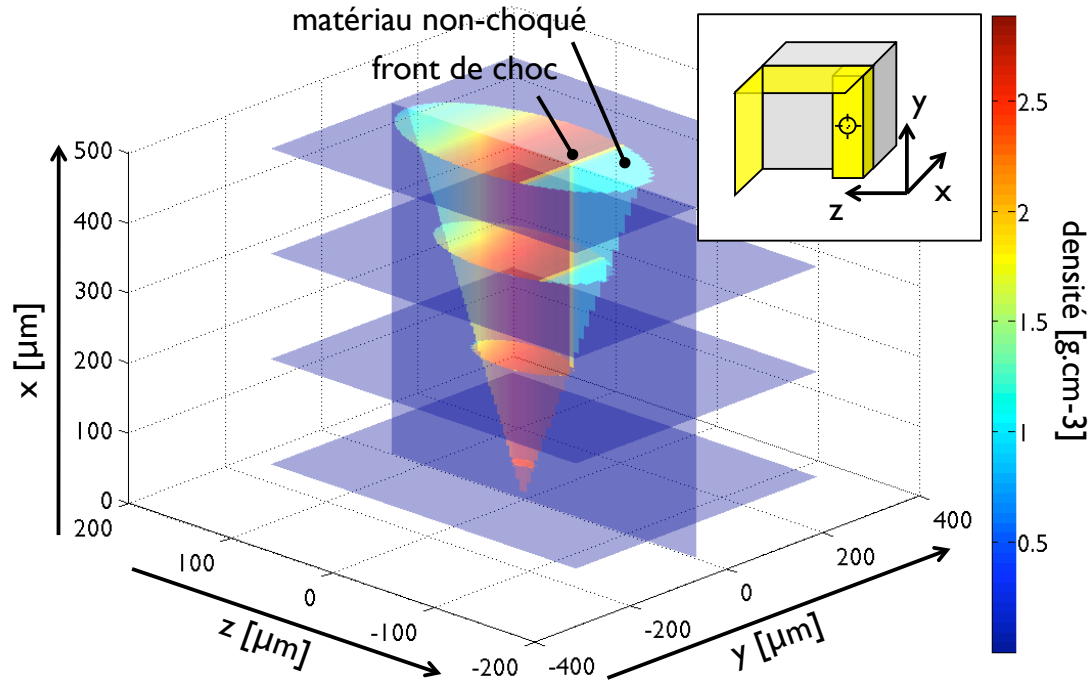


FIGURE 3.34 – Représentation du volume sondé, et de la densité simulée pour $t = t_0 + 8 \text{ ns}$. En insert : définition des axes par rapport à l'orientation de la cible.

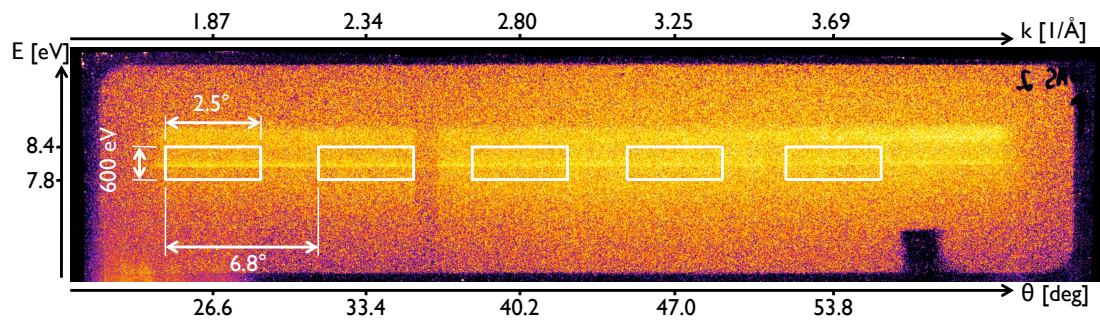


FIGURE 3.35 – Les points expérimentaux exploités fournis par le WASP sont obtenus, pour chaque tir, en moyennant le signal sur les zones encadrées.

Analyse des résultats expérimentaux - Comparaison des différents modèles

Sommaire

4.1	Lithium	110
4.1.1	Préliminaire	110
4.1.2	Contributions négligeables.	111
4.1.2.1	Contribution lié-libre	112
4.1.2.2	Constantes d'écran	113
4.1.3	Modèles linéaires et SOCP	114
4.1.3.1	Adjonction d'un modèle d'ionisation	119
4.1.3.2	Mesure indépendante de la température	119
4.1.3.3	Analyse des barres d'erreur	122
4.1.4	Atome Moyen	128
4.1.5	Dynamique moléculaire quantique	129
4.2	Plastique	136
4.2.1	Aspects du traitement multi-composantes	136
4.2.1.1	Expression multi-composantes du terme élastique du facteur de structure	136
4.2.1.2	Utilisation de la dynamique moléculaire quantique . . .	137
4.2.1.3	Ionisation	140
4.2.2	Inhomogénéité du plasma sondé	141
4.2.3	Utilisation en tant que diagnostic (ρ, T)	143
4.2.4	Comparaison des modèles	147
4.2.4.1	Domaine de validité	147
4.2.4.2	Ionisation	148
4.2.4.3	Longueur de corrélation	149

Cette partie est consacrée à l'analyse des spectres expérimentaux obtenus via les différents modèles présentés, et à la quantification de leur influence sur la valeur des paramètres plasma mesurés.

Remarquons tout d'abord que lorsque les données DTX sont utilisées en tant que diagnostic proprement dit, c'est-à-dire pour mesurer des paramètres thermodynamiques du plasma, et une fois qu'un modèle de matière est choisi, nous avons à notre disposition :

- un jeu de trois paramètres libres ρ , T et Z^* *a priori* si le modèle de matière ne possède pas de cohérence thermodynamique interne,
- un jeu deux paramètres libres ρ et T , dans le cas d'un modèle possédant une cohérence thermodynamique ou si l'on adjoint à un modèle ne satisfaisant pas à cette condition un modèle d'ionisation, c'est-à-dire une relation du type $Z^* = f(\rho, T)$.

Bien entendu plus l'espace de paramètres à ajuster est petit, moins le coût de la recherche de la solution optimale est important, et plus le modèle est contraint par les données. Le deuxième cas est donc de ce point de vue plus favorable mais correspond à des modèles plus complexes (ici atome moyen et dynamique moléculaire quantique (DMQ)).

4.1 Lithium

4.1.1 Préliminaire

Le premier point à souligner est que les données expérimentales analysées ici sont celles obtenues sur un tir unique, réalisé à un angle de diffusion de 60° . On rappelle que dans cette expérience les données brutes correspondent au signal DTX résolu en énergie.

Les valeurs retenues pour l'analyse des données dans l'article [39] nous serviront de référence dans notre analyse.

Le modèle de matière employé pour calculer les spectres DTX dans cette analyse est le modèle de référence de Gregori, faisant usage de la fonction diélectrique RPA sans correction de champ local ($G(k, \omega) = 0$) pour la description des électrons libres, et du facteur de structure SOCP (système de sphères dures chargées dans l'approximation MSA, linéairement écranté par les électrons) pour le système ionique.

Résumons la méthode suivie pour le dépouillement des données expérimentales obtenues, décrite dans [39] :

- Des paramètres plasma moyennés spatialement et temporellement, (tel que décrit dans le chapitre 3) sont tout d'abord obtenus au moyen d'un code d'hydrodynamique radiative (HELIOS [95]).
- La température ainsi obtenue ($T = T_{\text{hydro}} = 4,5 \text{ eV}$) étant fixée, la meilleure ionisation moyenne Z^* est obtenue en fonction de la densité massique ρ par deux méthodes différentes :

- Un fit au sens des moindres carrés entre les points expérimentaux et le spectre DTX simulé avec le modèle de matière choisi, à T et ρ fixés. On obtient alors $Z_{\text{fit exp}}^*(T_{\text{hydro}}, \rho)$
- Une simulation DMQ (code VASP[96, 97, 98]) est réalisée à (T_{hydro}, ρ) . Une fonction de corrélation de paire ion-ion $g_{ii}^{QMD}(r)$ est extraite de cette simulation. Par ailleurs une simulation de type Monte Carlo classique (MC) est réalisée à $(T_{\text{hydro}}, \rho, Z^*)$, de laquelle on extrait une autre fonction de corrélation de paire $g_{ii}^{\text{MC}}(r)$. L'ionisation moyenne, qui est un paramètre libre dans la simulation MC classique, est alors ajustée pour obtenir le meilleur accord entre $g_{ii}^{\text{MC}}(r)$ et $g_{ii}^{QD}(r)$. On obtient à l'issue de cette analyse une ionisation moyenne $Z_{\text{fit simu}}^*(T_{\text{hydro}}, \rho)$.

Les deux ionisations moyennes $Z_{\text{fit simu}}^*$ et $Z_{\text{fit exp}}^*$ sont considérées comme des fonctions de la densité ρ . On constate que la première est une fonction croissante de ρ , la seconde une fonction décroissante, et qui prennent des valeurs identiques pour $\rho = \rho_{\text{fit}} \approx 0,6 \text{ g.cm}^{-3}$.

- Cette densité massique réalisant l'accord des deux valeurs de Z^* étant fixée, on constate en se déplaçant dans le plan (Z^*, T) que les valeurs de Z^* et de T obtenues minimisent l'écart quadratique moyen χ^2 entre le spectre simulé et le spectre expérimental. L'évaluation des barres d'erreurs est faite en comparant χ^2 à l'amplitude quadratique moyenne du bruit.

Sans discuter la validité de la méthodologie employée, dont on peut tout de même noter l'indéniable complexité ainsi que le nombre de modèles différents impliqués, notons le jeu de valeurs obtenues, affectées de leurs incertitudes : $\rho = \rho_{\text{ref}} = 0,6 \pm 0,025 \text{ g.cm}^{-3}$, $T = T_{\text{ref}} = 4,5 \pm 1,5 \text{ eV}$, $Z^* = Z_{\text{ref}}^* = 1,35 \pm 0,1$. Ces valeurs seront à mettre en regard de celles issues des analyses de cette partie.

On fera dans cette partie régulièrement référence aux trois contributions du facteur de structure électronique total que dégage la décomposition de Chihara comme

- le facteur de structure élastique $S_{\text{élastique}} = [f_I(k) + \rho(k)]^2 S_{II}(k)$,
- le facteur de structure inélastique $S_{\text{inélastique}} = Z_F S_{ee}^0(k, \omega)$ lié à la réponse haute fréquence des électrons libres
- la contribution liée aux électrons de coeur (inélastique, elle aussi) $S_{\text{ce}} = Z_B \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{S}_{ce}(k, \omega - \omega') S_S(k, \omega') d\omega'$.

4.1.2 Contributions négligeables.

Certaines contributions ne jouent pas un rôle déterminant dans l'analyse de l'influence du modèle, soit parce qu'elles correspondent à un terme d'amplitude négligeable devant un autre, soit parce que les différents modèles utilisés concordent entre eux dans la plage de paramètres utilisée et n'entraînent pas de différence significative sur le signal total. La contribution lié-libre du facteur de structure électronique total relève du premier cas. Le modèle utilisé pour le calcul des constantes d'écran intervenant dans le facteur de forme ionique, quant à lui, correspond au second. Examinons le cas de ces deux contributions.

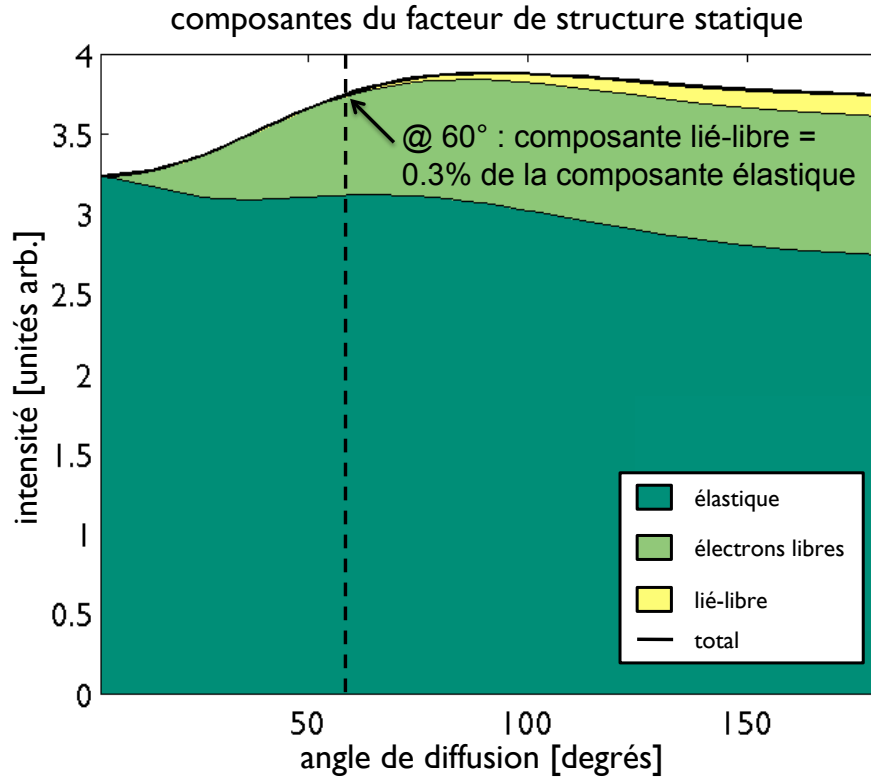


FIGURE 4.1 – Évaluation de la contribution lié-libre au facteur de structure statique total.

4.1.2.1 Contribution lié-libre

Il a été affirmé à plusieurs reprises que la contribution lié-libre du facteur de structure électronique total était négligeable dans le cas des plasmas de faible numéro atomique qui nous concernent. Vérifions *a posteriori* cette affirmation dans le cas du plasma de lithium obtenu.

On se place pour cela dans le cas $\rho = \rho_{\text{ref}}$, $T = T_{\text{ref}}$ et $Z^* = Z_{\text{ref}}^*$, en supposant que ces valeurs sont raisonnablement proches des valeurs réelles. Les différentes contributions sont évaluées dans le modèle de référence, et la contribution lié-libre est évaluée dans l'approximation impulsionnelle [41], corrigée [99] et détaillée dans la référence [36].

L'amplitude respective des trois termes, est tracée comme fonction de l'angle de diffusion sur la figure 4.1. On calcule que pour $\theta_{\text{diff}} = 60^\circ$, l'amplitude relative de la composante lié-libre par rapport au signal total intégré en énergie est de l'ordre de 0,3%. Pour les conditions correspondant au plasma de l'expérience, et même en supposant que l'approximation impulsionnelle sous-estime notablement l'amplitude $S_{ce}(k)$, on peut donc bien négliger l'influence de ce terme, à la fois devant les autres termes et par rapport aux barres d'erreurs expérimentales.

4.1.2.2 Constantes d'écran

Dans l'approximation hydrogénique, le facteur de forme ionique est décrit à l'aide de constantes d'écran. Nous pouvons comparer l'influence des différents modèles de constantes d'écran sur le facteur de structure élastique, ainsi que la comparaison de ces derniers avec un calcul d'atome moyen SCAALP. Le facteur de forme ionique n'intervenant que dans sa forme élastique, on le trace en fonction de l'angle de diffusion θ_{diff} , ou du vecteur d'onde k . L'influence étant faible pour l'angle $\theta_{\text{diff}} = 60^\circ$ qui nous intéresse, la figure 4.2 représente f_I en fonction de la variable k qui couvre une plus grande plage de cas, chaque valeur de k représentant une infinité de couples angle-énergie selon $k = 4\pi \sin(\theta/2) / \lambda$. Trois courbes sont tracées :

- La première utilise un modèle hydrogénique avec les constantes d'écran ne dépendant que du nombre quantique principal n déterminées par Pauling et Sherman [76].
- La seconde est également un modèle hydrogénique doté de constantes d'écran issues du nouveau modèle hydrogénique écranté (NMHE) de Faussurier [77], dépendant des nombres quantiques principal et orbital n et l .
- La dernière enfin, représente le facteur de forme directement issu de la transformée de Fourier de la densité électronique liée calculée par SCAALP.

On constate que les courbes sont confondues à grand et petit k . Ces conditions doivent en effet être respectées car $f_I(k=0) = \int \rho_I(r) dr = Z_B$, et $f_I(k \rightarrow +\infty) = 0$ car $f_I(k)$ est la transformée de Fourier d'une fonction à valeur finie en $r = 0$. Ces conditions étant remplies, les seules variations liées à un changement de modèle interviennent pour des valeurs de k intermédiaires, maximales pour ce cas dans le voisinage de $k = 4a_0^{-1}$ (soit par exemple une géométrie de diffusion vers l'arrière $\theta_{\text{diff}} = 180^\circ$, pour une énergie de sonde de 8 keV) avec une dispersion de $\delta f_I / f_I = 12\%$ entre les modèles.

L'expression de la composante élastique du facteur de structure implique que, au premier ordre, sa variation, liée à une variation de f_I , est $\delta S_{\text{élastique}} = 2\rho S_{II} \delta f_I$. Par la suite, l'erreur obtenue pour l'ionisation lors de l'analyse d'un spectre, sera de l'ordre de $\delta Z^* / Z^* = \delta S_{\text{élastique}} / S_{\text{élastique}}$. L'ordre de grandeur des termes ρ et S_{II} peut être estimé dans le cas général dans leur limite à grand ou à petit cas k (c'est-à-dire sur des distances grandes ou petites devant la longueur d'écrantage) mais on a vu que cela correspond aux cas $\delta f_I \rightarrow 0$. Dans la zone intermédiaire "intéressante", toutes les grandeurs intervenant dans l'amplitude de l'erreur sont variables et on ne peut l'estimer qu'au cas par cas.

Numériquement, on trouve $\delta Z^* / Z^* \simeq 5 \times 10^{-4}$ pour $k = 4a_0^{-1}$ (amplitude maximale de δf_I) et $\delta Z^* / Z^* \simeq 6 \times 10^{-3}$ pour $k = 0.79a_0^{-1}$ (cas de l'expérience : $E = 2960$ eV et $\theta_{\text{diff}} = 60^\circ$). Dans le cas de l'expérience sur le lithium, on peut donc bien négliger l'influence du choix du modèle utilisé pour le facteur de forme ionique.

Remarquons que bien qu'il s'agisse là de cas particuliers, on peut affirmer avec une certaine confiance que cette erreur reste toujours petite, car à petit k si le modèle est cohérent, δf_I est nul, alors que quand k croît, le terme $\rho(k)$ correspondant aux électrons polarisés tombe rapidement à zéro au-delà de la distance d'écrantage. Ne reste alors qu'un terme du second ordre en δf_I .

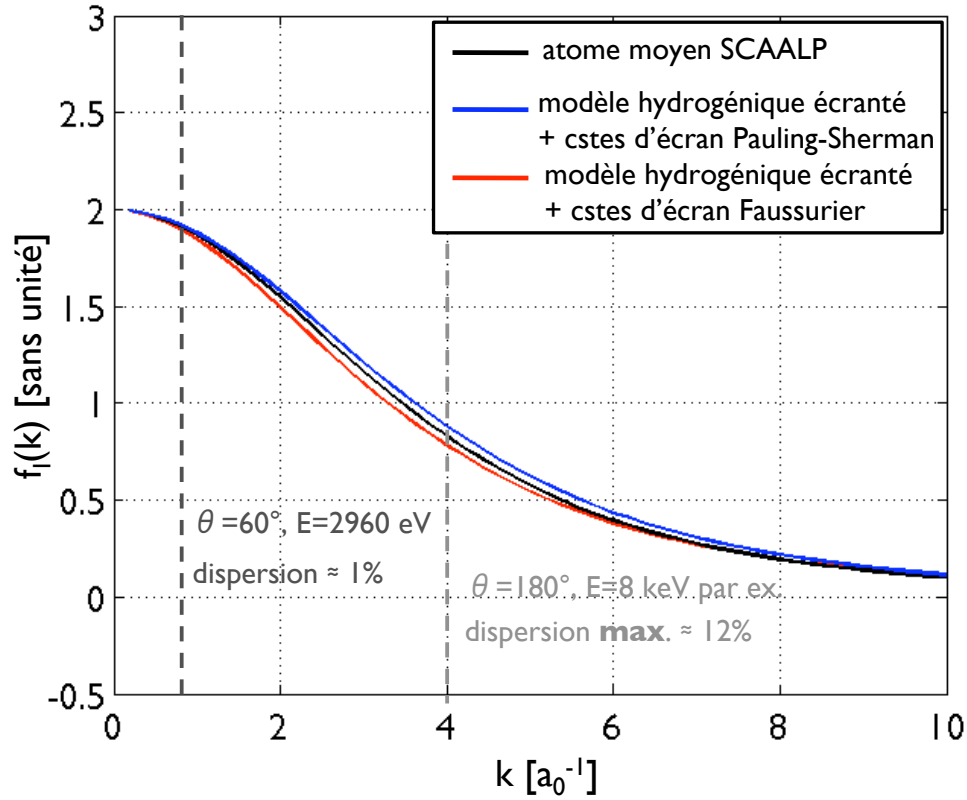


FIGURE 4.2 – Évaluation de l'influence de l'utilisation d'un modèle hydrogénique et du choix du jeu de constantes d'écran. Seul le facteur de forme ionique est représenté. Pour les mêmes conditions plasma, les $f_I(k)$ dans le modèle hydrogénique écrané avec deux jeux de constantes d'écran sont présentées (Faussurier [77] & Pauling-Sherman [76]) ainsi que celui extrait du calcul SCAALP correspondant.

4.1.3 Modèles linéaires et SOCP

Nous venons d'identifier les termes ne contribuant pas significativement au spectre, ou pour lesquels les modèles utilisés pour les calculer sont en accord suffisant pour que le choix de l'un quelconque n'ait pas d'impact sur l'analyse. Passons maintenant à une analyse globale du spectre via un modèle de matière ou un autre.

Le premier modèle, le plus simple à notre disposition, est le modèle linéaire (fonction diélectrique RPA pour la description des électrons libres, pseudo-potentiel semi-classiques et RPA pour le facteur de structure ionique et les électrons polarisés). Sous cette forme le modèle possède trois paramètres libres. Les simulations hydrodynamiques réalisées avec MULTI

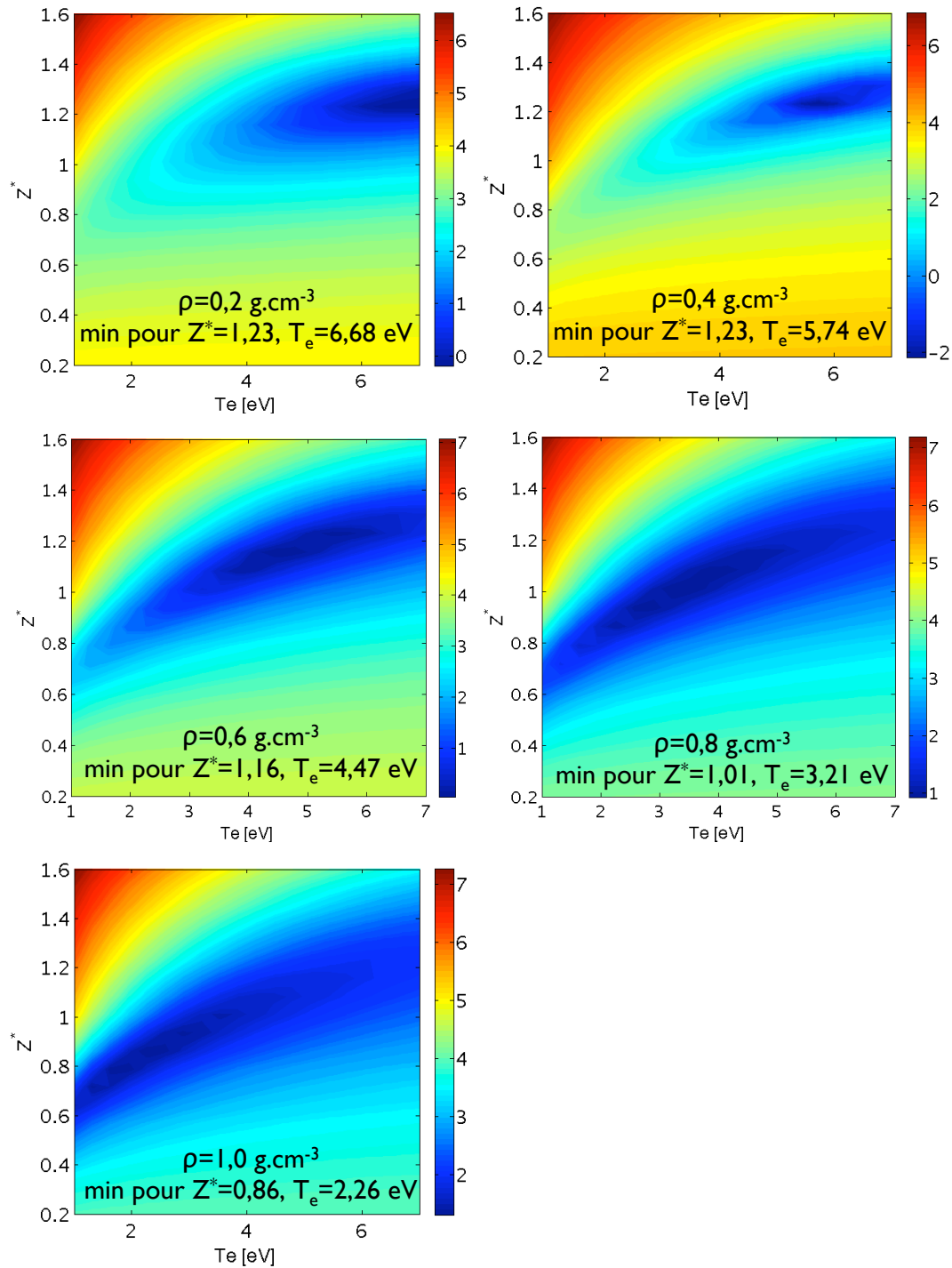


FIGURE 4.3 – Ajustement, avec le modèle linéaire, de T_e et Z^* en prenant la densité massique ρ (variant entre $0,2 \text{ g.cm}^{-3}$ et $1,0 \text{ g.cm}^{-3}$) comme paramètre. La grandeur représentée est l'écart quadratique moyen χ^2 entre le spectre expérimental et les spectres simulés (en échelle logarithmique).

présentées au chapitre 3 proposent des valeurs moyennées spatialement et temporellement :

$$\begin{aligned}\overline{\rho_{\text{hydro}}} &= 0,52 \text{ g.cm}^{-3} \\ \overline{T_{e,\text{hydro}}} &= 3,98 \text{ eV} \\ \overline{Z_{\text{hydro}}^*} &= 0,51.\end{aligned}$$

La grandeur la plus fiable calculée dans une simulation hydrodynamique est réputée être la densité, utilisons dans un premier temps la valeur $\overline{\rho_{\text{hydro}}} = 0,52 \text{ g.cm}^{-3}$ comme point de départ pour rechercher le couple de valeurs $(T_e, Z^*)_\rho$ qui minimisent l'écart entre le spectre simulé et le spectre expérimental. On trouve dans ce cas $(T_e, Z^*)_{\overline{\rho_{\text{hydro}}}} = (5,47 \text{ eV}, 1.23)$. La valeur de la densité issue des simulations hydrodynamique constitue une indication mais est arbitraire. Si l'on fait alors varier cette valeur dans un intervalle compris entre $0,2 \text{ g.cm}^{-3}$ et 1 g.cm^{-3} , suffisamment large autour de $\overline{\rho_{\text{hydro}}}$ pour que la valeur réelle de la densité moyenne y figure très vraisemblablement, on peut alors itérer l'analyse précédente pour chacune des valeurs de la densité. Des valeurs expérimentales de densité moyenne extérieures à cet intervalle sont à exclure. En effet, si l'on augmente l'intensité laser depuis sa valeur expérimentale $I_{\text{laser}} = I_0 = 1,5 \times 10^{13} \text{ W.cm}^{-2}$, la densité moyenne obtenue dans la simulation hydrodynamique augmente jusqu'à $\overline{\rho_{\text{hydro}}} \simeq 0,8 \text{ g.cm}^{-3}$ (pour $I_{\text{laser}} \simeq 5 I_0$), puis commence à redescendre car le choc, dont la vitesse croît avec l'intensité laser, commence à déboucher en face arrière de la cible pendant que l'on sonde le plasma. Si au contraire on diminue l'intensité laser, la vitesse du choc diminue rapidement de sorte que l'on sonde majoritairement du lithium froid à la densité du solide.

La figure 4.3 représente la minimisation de $\chi^2 = \sum(\text{points expérimentaux-point simulés})^2$ dans le plan (T_e, Z^*) , pour différentes valeurs de la densité dans cet intervalle. On constate que l'on trouve toujours dans la partie du plan sondé ($Z^* \in [0.2 - 1.6]$, $T_e \in [1 \text{ eV} - 5 \text{ eV}]$) un minimum local pour χ^2 .

Si maintenant l'on trace l'évolution du couple de valeurs $(T_e, Z^*)_\rho$ en fonction de la densité (voir figure 4.5), on constate que toutes deux varient de façon monotone. Cela revient donc à dire que l'on ne trouve pas de minimum dans la portion explorée de l'espace à trois dimensions des paramètres.

On peut mener exactement la même analyse en raffinant la description de la partie élastique du facteur de structure des ions en adoptant le modèle SOCP. L'ensemble des cartes de χ^2 obtenues pour les mêmes valeurs de la densité massique que dans le cas du calcul à l'aide du modèle RPA sont représentées sur la figure 4.4. A nouveau, dans chaque cas, un minimum dans le plan (T_e, Z^*) est obtenu. Les valeurs de T_e et Z^* sont reportées avec celles du calcul linéaire sur la courbe 4.5.

On remarque également à l'examen des figures 4.3 et 4.4 que la forme des lignes de niveau de χ^2 s'allonge selon l'axe des températures lorsque l'on progresse vers les densités croissantes.

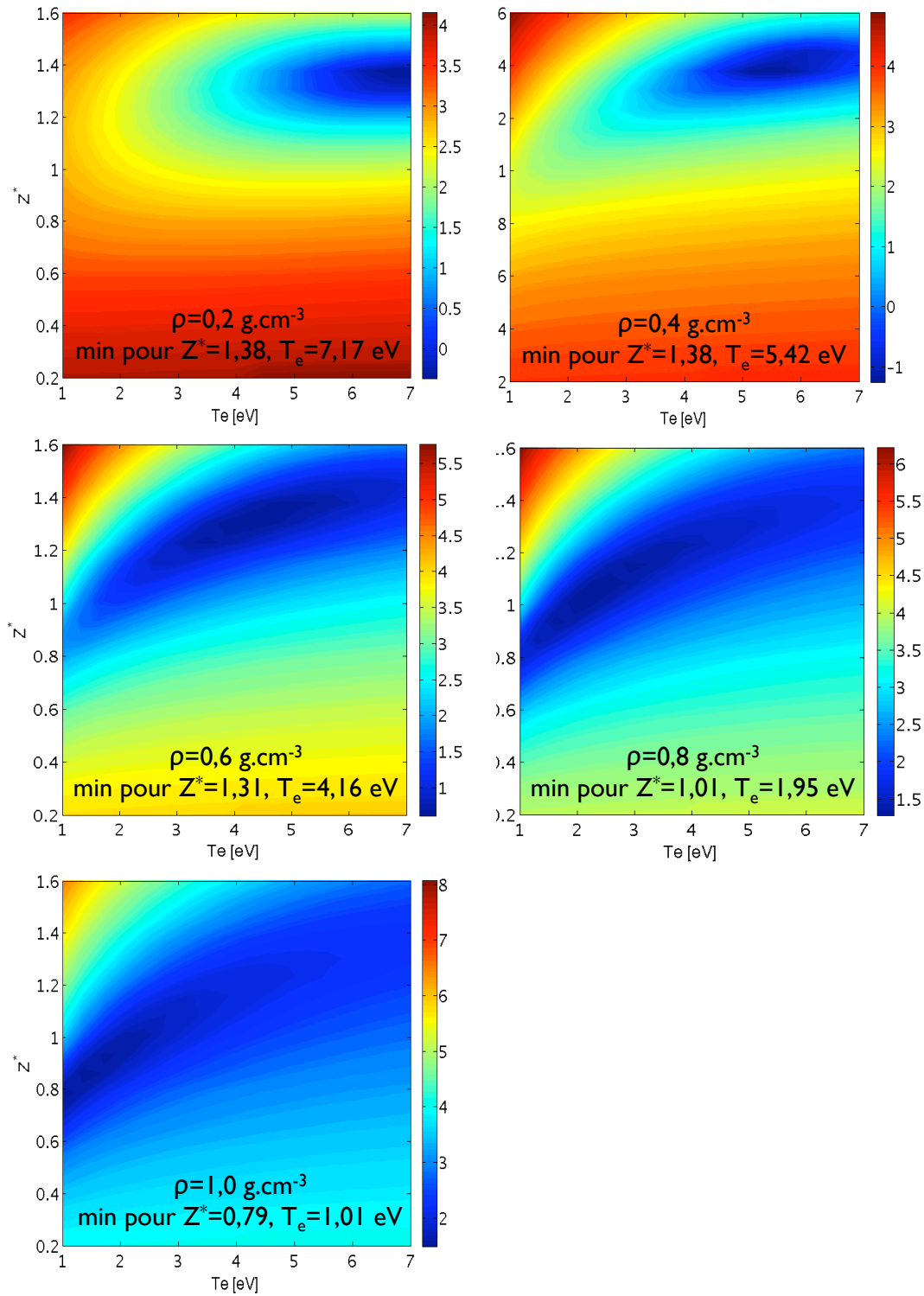


FIGURE 4.4 – Ajustement, avec le modèle SOCP, de T_e et Z^* en prenant la densité massique ρ (variant entre $0,2 \text{ g.cm}^{-3}$ et $1,0 \text{ g.cm}^{-3}$) comme paramètre. La grandeur représentée est l'écart quadratique moyen χ^2 entre le spectre expérimental et les spectres simulés (en échelle logarithmique).

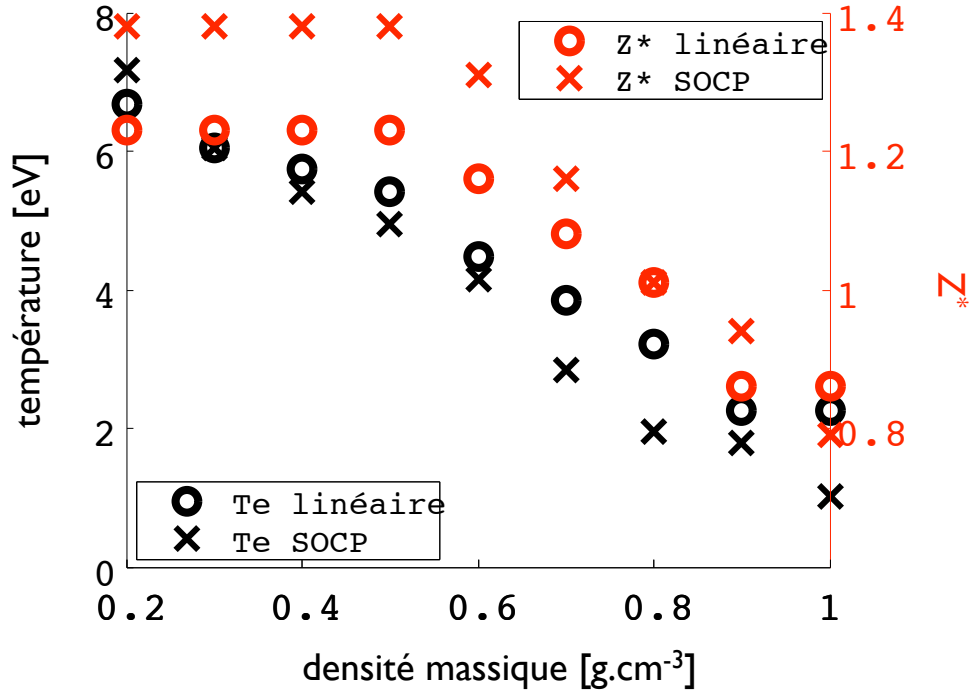


FIGURE 4.5 – Couples de valeurs obtenues pour T_e et Z^* lorsque l'on fait varier ρ entre $0,2 \text{ g.cm}^{-3}$ et $1,0 \text{ g.cm}^{-3}$, pour les modèles linéaire et SOCP.

C'est-à-dire que la sensibilité en température obtenue faiblit à mesure que la densité augmente. Ce comportement qualitatif est attendu et peut être mis en relation avec le fait que l'énergie de Fermi des électrons augmente avec la densité. Les électrons sont donc de plus en plus dégénérés et leur fonction de distribution tend vers celle de Fermi, peu sensible à la température. On vérifie en effet qu'au milieu de la plage de paramètres, on a un paramètre de dégénérescence de l'ordre de l'unité.

On voit donc que la forme du spectre de diffusion permet de trouver relativement clairement un minimum unique dans un espace de paramètres à 2 dimensions, pourvu que l'on ait une idée des valeurs attendues. Dans le cas où l'on doit ajuster 3 paramètres on peut sans difficulté trouver une solution pour une autre valeur du troisième.

Il est donc nécessaire de fixer la valeur d'un des paramètres libres. Trois voies sont envisageables :

- Par la simulation, par exemple l'utilisation comme ci-dessus de la valeur de la densité issue d'un code hydrodynamique.
 - La mesure expérimentale indépendante d'une des grandeurs.
 - L'emploi d'un modèle fixant un des paramètres en fonction des autres.
- Examinons maintenant les deuxième et troisième méthodes.

modèle	ρ [g.cm ⁻³]	T [eV]	Z_{More}^*
RPA	0,57	4,37	1,10
SOCP	0,72	2,47	1,08

TABLE 4.1 – Paramètres plasma déduits d'un fit dans le plan (ρ, T) pour les modèles RPA et SOCP, associés au modèle d'ionisation de More. [17]

modèle	ρ [g.cm ⁻³]	$T = T_{\text{mes}}$ [eV]	Z^*
RPA	0,19	12,2	1,29
SOCP	0,19	12,2	1,33

TABLE 4.2 – Paramètres plasma déduits d'un fit dans le plan (ρ, Z^*) pour les modèles RPA et SOCP, la température étant fixée à sa valeur mesurée.

4.1.3.1 Adjonction d'un modèle d'ionisation

Tout en conservant les mêmes modèles de matière que ci-dessus, nous pouvons employer la troisième méthode en y couplant un modèle d'ionisation. Ici nous emploierons le modèle de More [17] qui est un fit estimant l'ionisation pour un élément donné en fonction de la densité et de la température. Pour chaque couple de valeurs (ρ, T) , l'ionisation moyenne est ainsi fixée $Z^* = f_{\text{More}}(\rho, T, A_{\text{at}})$ et l'on se retrouve bien avec deux paramètres indépendants.

Avec cette méthode, l'exploration du plan (ρ, T) nous fournit alors un triplet unique (ρ, T, Z^*) de valeurs pour les paramètres plasma, aussi bien pour le modèle RPA (figure 4.6) que pour le modèle SOCP (figure 4.7). Les valeurs déduites sont rassemblées dans le tableau 4.1.

4.1.3.2 Mesure indépendante de la température

L'utilisation de la mesure expérimentale indépendante d'une des grandeurs est également possible dans notre cas, puisque qu'on a vu dans le chapitre 3 que le spectromètre EUV nous a fourni une valeur de température : $T_{\text{mes}} = 12,2 \pm 0,5$ eV. Malgré les sérieuses réserves, déjà signalées au chapitre 3, sur la validité de cette valeur, le fait de fixer un paramètre expérimental constitue un test intéressant. Fixons donc ici la température pour ajuster densité et ionisation moyenne au spectre DTX mesuré. Les résultats correspondants sont reportés sur la figure 4.8 et dans le tableau 4.2. On constate que pour ajuster le modèle aux données expérimentales avec une telle température, il est nécessaire d'avoir une densité beaucoup plus basse. Dans ce cas, les deux modèles (linéaires et OCP) donnent le même résultat. Cela est cohérent avec le fait que les deux descriptions possèdent la même limite à haute température et basse densité. Cela correspond à un régime peu couplé avec $\Gamma_{ee} \simeq \Gamma_{ii} \simeq 0,5$.

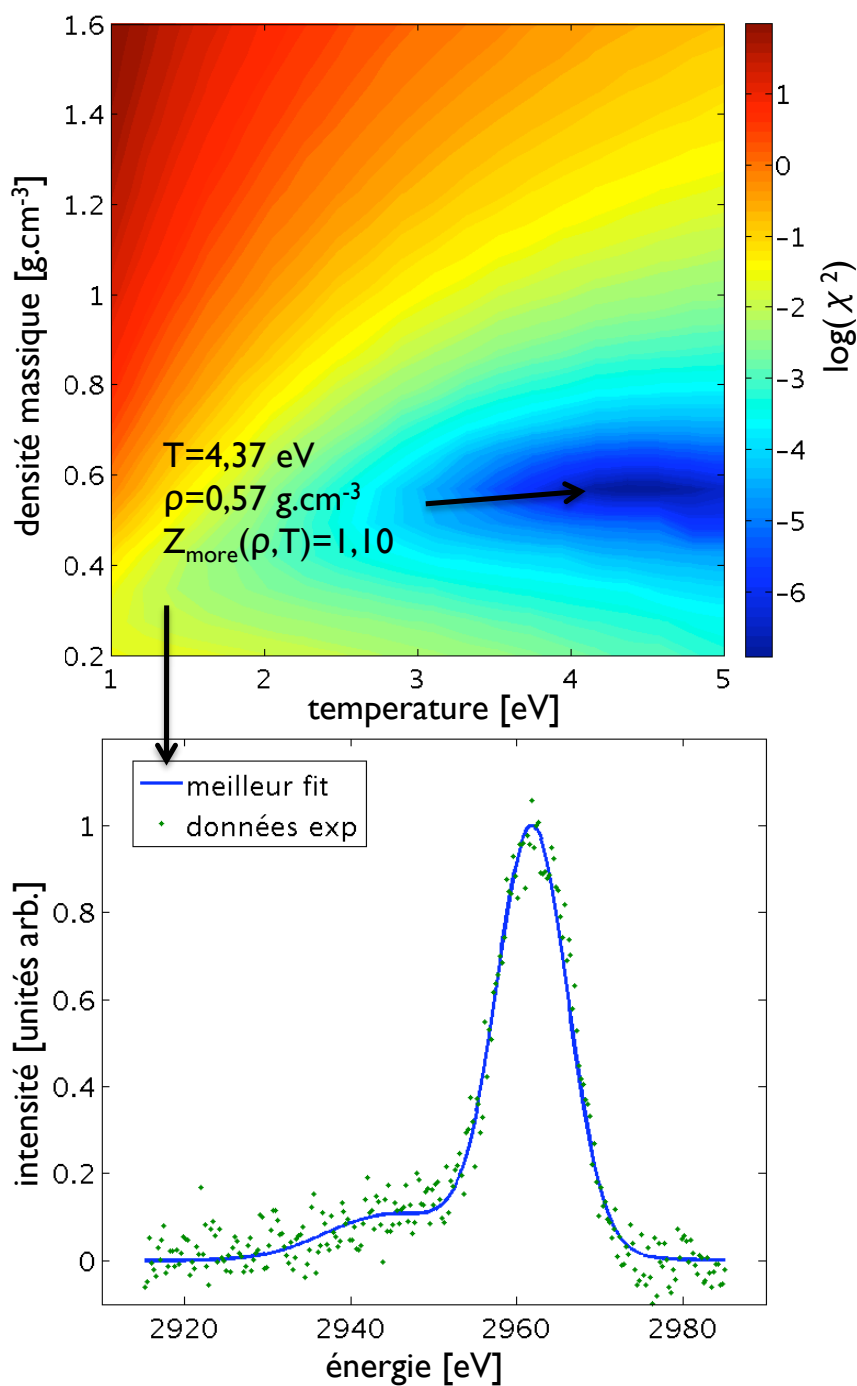


FIGURE 4.6 – Meilleur ajustement dans le plan (ρ, T) en utilisant le modèle RPA où l'ionisation est imposée comme $Z_{\text{More}}^*(\rho, T)$.

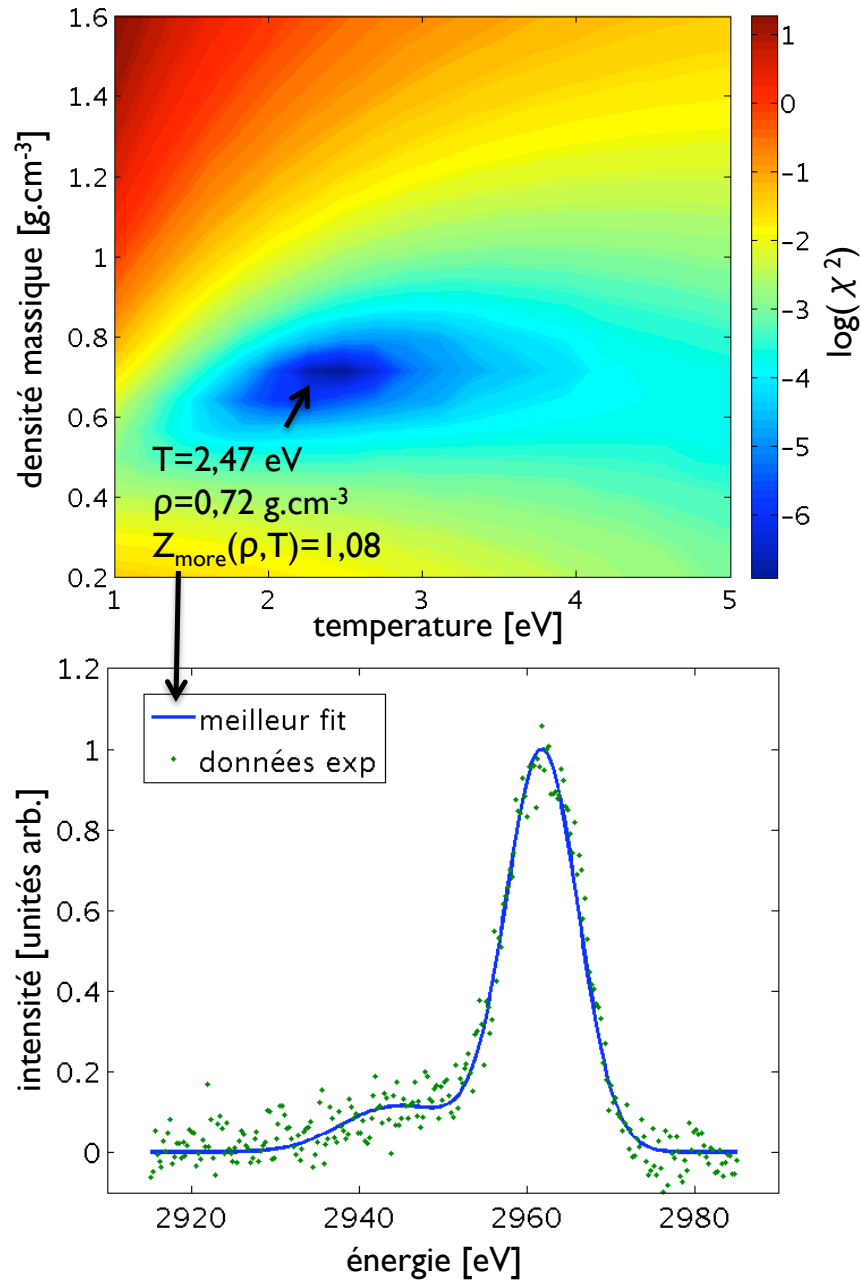


FIGURE 4.7 – Meilleur ajustement dans le plan (ρ, T) en utilisant le modèle SOCP où l'ionisation est imposée comme $Z_{\text{More}}^*(\rho, T)$.

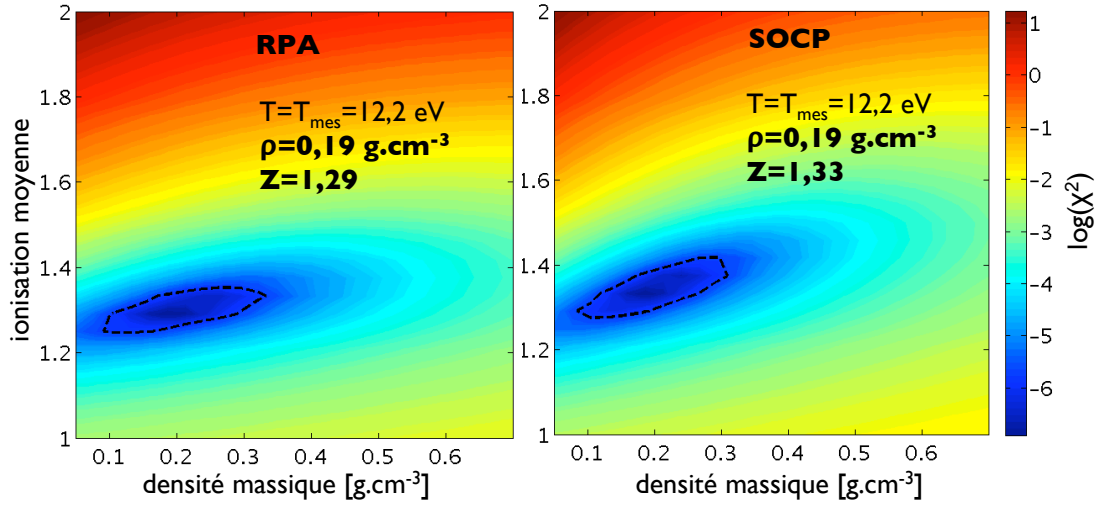


FIGURE 4.8 – La température est donnée par le diagnostic de spectroscopie EUV. Dans ce cas, les valeurs de (ρ, Z^*) déduites des modèles RPA et SOCP sont proches.

4.1.3.3 Analyse des barres d'erreur

Nous avons jusqu'ici trouvé plusieurs jeux de valeurs pour les paramètres plasma à partir des données expérimentales via différents modèles. Afin de déterminer si ces valeurs sont compatibles entre elles, tentons de quantifier les barres d'erreurs associées. Ces dernières ont diverses origines. Nous en avons identifié trois, dont la nature est expliquée graphiquement sur la figure 4.9.

Grille de calcul. Le premier aspect est que toutes ces méthodes impliquent la recherche du minimum de χ^2 sur une grille en chaque point de laquelle est effectuée une simulation. La précision obtenue ne peut donc être meilleure que le pas de grille. Ici le nombre de points choisi est arbitraire, et ne dépend que du temps de calcul que l'on considère acceptable. L'erreur introduite peut donc être choisie arbitrairement petite. Dans le cas des calculs présentés, on a typiquement des grilles de carrées de 30×30 . Pour l'amplitude typique des intervalles explorés ($\Delta\rho \simeq 1,5 \text{ g.cm}^{-3}$, $\Delta T \simeq 5 \text{ eV}$, $\Delta Z^* \simeq 1,5$) on a,

$$\begin{aligned}\delta\rho_1 &\simeq 0,05 \text{ g.cm}^{-3} \\ \delta T_1 &= 0,17 \text{ eV} \\ \delta Z_1^* &= 0,05.\end{aligned}$$

L'indice numérique désigne le type de barre d'erreur, défini sur le schéma 4.9.

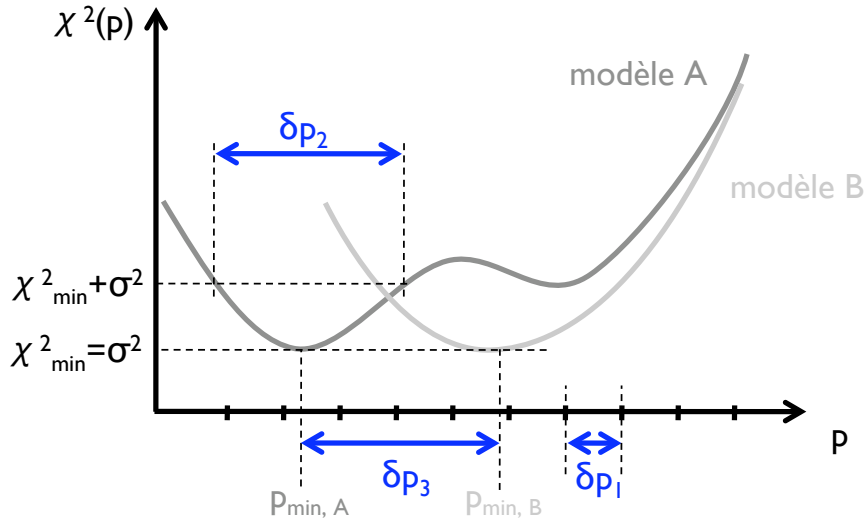


FIGURE 4.9 – Illustration des différents types de barres d'erreur évaluées dans cette partie. p représente l'ensemble des paramètres par rapport auxquels on minimise l'écart quadratique moyen χ^2 . δp_1 : erreur liée à la grille de calcul choisie. δp_2 : erreur liée à la sensibilité du modèle par rapport aux paramètres et au rapport signal sur bruit de la mesure. δp_3 : erreur liée au choix du modèle.

Rapport signal sur bruit et sensibilité. Le second aspect, bien plus important, est lié à la sensibilité du spectre DTX par rapport aux variations des paramètres que l'on tente de mesurer. Tentons de quantifier cet aspect de la façon suivante. On considère que le spectre expérimental $exp(\lambda)$ peut être écrit $exp(\lambda) = sig(\lambda) + b(\lambda)$, la somme du spectre DTX proprement dit $sig(\lambda)$ et d'un bruit $b(\lambda)$. Le meilleur accord entre le signal et le spectre simulé $sim(\lambda)$ est considéré être celui qui minimise $\chi^2 = \sum (sig(\lambda) + b(\lambda) - sim(\lambda))^2$. Si on appelle σ^2 la variance du bruit, alors $\chi^2_{min} = \min \left[\sum (sig(\lambda) + b(\lambda) - sim(\lambda))^2 \right] = \sigma^2$, si le modèle utilisé pour générer $sim(\lambda)$ est tel que dans la plage de paramètre explorée on a un accord parfait $sig(\lambda) = sim(\lambda)$. On peut alors considérer qu'un éventuel minimum trouvé pour χ^2 n'est valable qu'à environ σ^2 près, si bien que l'on peut définir une barre d'erreur comme la plage des paramètres où l'on a $\chi^2 \leq \chi^2_{min} + \sigma^2$. Ces barres d'erreurs sont donc liées à la fois à l'amplitude du bruit et à la sensibilité du spectre aux paramètres que l'on fait varier. Elles correspondent, pour un modèle et une méthode d'analyse donnés, à la sensibilité avec laquelle on minimise l'écart entre le signal et le modèle. Ceci est illustré pour deux cas déjà calculés sur les figures 4.10 et 4.11. Il s'agit des modèles RPA et SOCP dotés de l'ionisation de More. La ligne de niveau $\chi^2 = \sigma^2$ est représentée sur chacune des cartes de χ^2 . Dans le premier cas, on évalue :

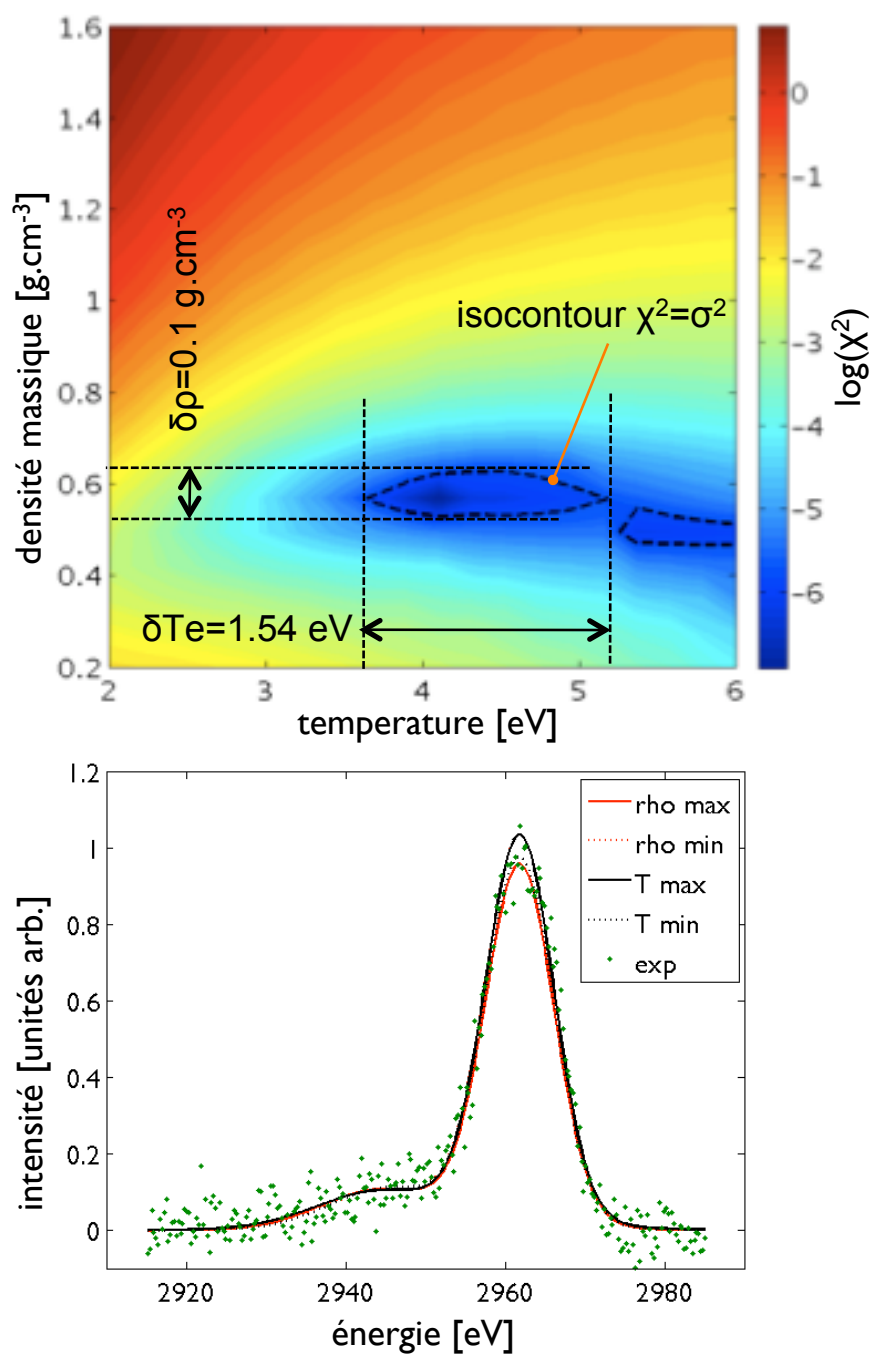


FIGURE 4.10 – Mise en évidence des barres d'erreur liées aux bruit sur la mesure et à la sensibilité du spectre DTX par rapport à la variation des paramètres. Ici modèle RPA + ionisation de More.

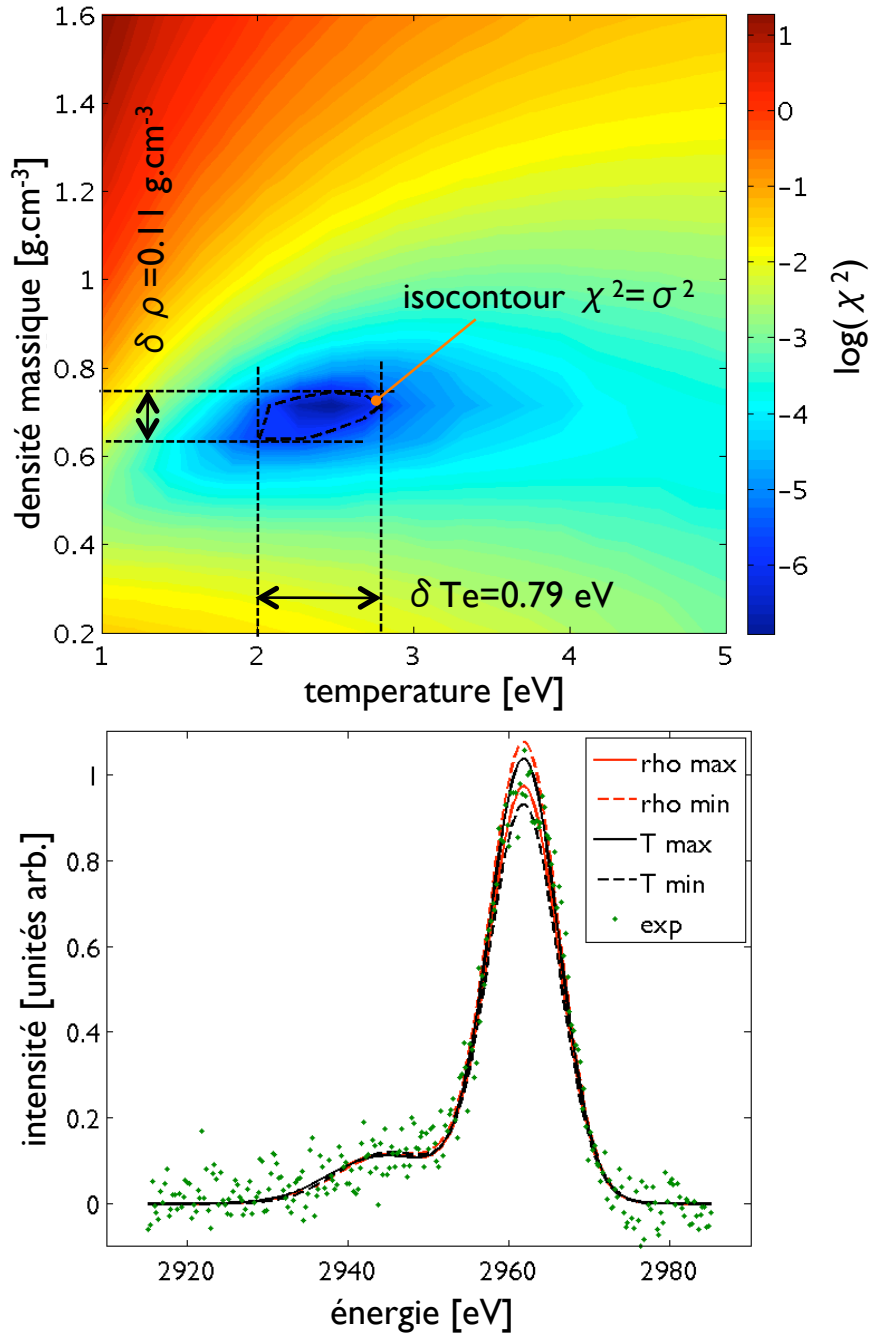


FIGURE 4.11 – Mise en évidence de la variation des barres d'erreur liées aux bruit sur la mesure et à la sensibilité du spectre par rapport à la variation des paramètres. Même figure que 4.10 avec un calcul SOCP + ionisation de More.

$$\begin{aligned}
\delta T_2^{\text{RPA}} &\simeq 1,54 \text{ eV} \\
\delta \rho_2^{\text{RPA}} &\simeq 0.1 \text{ g.cm}^{-3} \\
\delta Z_2^{*,\text{RPA}} &\simeq \delta \rho_2 \frac{\partial Z_{\text{More}}^*}{\partial \rho} + \delta T_2 \frac{\partial Z_{\text{More}}^*}{\partial T} \simeq 0.1
\end{aligned}$$

et dans le deuxième :

$$\begin{aligned}
\delta T_2^{\text{SOCP}} &\simeq 0,79 \text{ eV} \\
\delta \rho_2^{\text{SOCP}} &\simeq 0.11 \text{ g.cm}^{-3} \\
\delta Z_2^{*,\text{SOCP}} &\simeq 0.06
\end{aligned}$$

On met donc en évidence le fait que les barres d'erreur associées à la fois au bruit de mesure et à la sensibilité du modèle par rapport aux paramètres dépendent :

- du modèle choisi, comme le montre la comparaison ci-dessus entre OCP et RPA,
- des valeurs de (ρ, T, Z^*) pour un modèle donné. En effet, comme illustré sur les figures 4.3 et 4.4, lorsque l'on fait varier ρ , la forme de $\chi^2(T, Z^*)$ change et en particulier la sensibilité par rapport à T diminue lorsque la densité augmente.

Ces barres d'erreur ne peuvent donc être évaluées qu'au cas par cas, et non pas estimées dans le cas général. On peut tout de même remarquer que dans les cas qui nous occupent, elles sont bien supérieures à celles liées à la grille de calcul, qui peuvent donc être négligées.

Choix du modèle. Le troisième aspect est celui de la dispersion des résultats liée à au choix du modèle utilisé pour analyser le spectre, ou bien au choix de la méthode ou des données choisies pour analyser le spectre, ce qui revient au même. Parmi les cas déjà évalués, la première partie de l'alternative correspond au choix entre modèle RPA et modèle SOCP, toutes choses étant par ailleurs inchangées. La seconde correspond au choix, un modèle de matière étant donné, entre la densité issue de simulations hydrodynamiques ou la température mesurée pour contraindre le problème. Les barres d'erreur associées sont d'une autre nature que les précédentes, mais ce sont elles qui peuvent représenter la plus grande dispersion. Pour les évaluer numériquement, on a simplement pris, par exemple dans le cas de la densité :

$$\delta \rho_3 = \max \{ \rho_{0,m} \} - \min \{ \rho_{0,m} \}, \quad (4.1)$$

où $\{ \rho_{0,m} \}$ est l'ensemble des valeurs optimales de ρ obtenues avec les différents modèles m à disposition. Idem pour les autres paramètres.

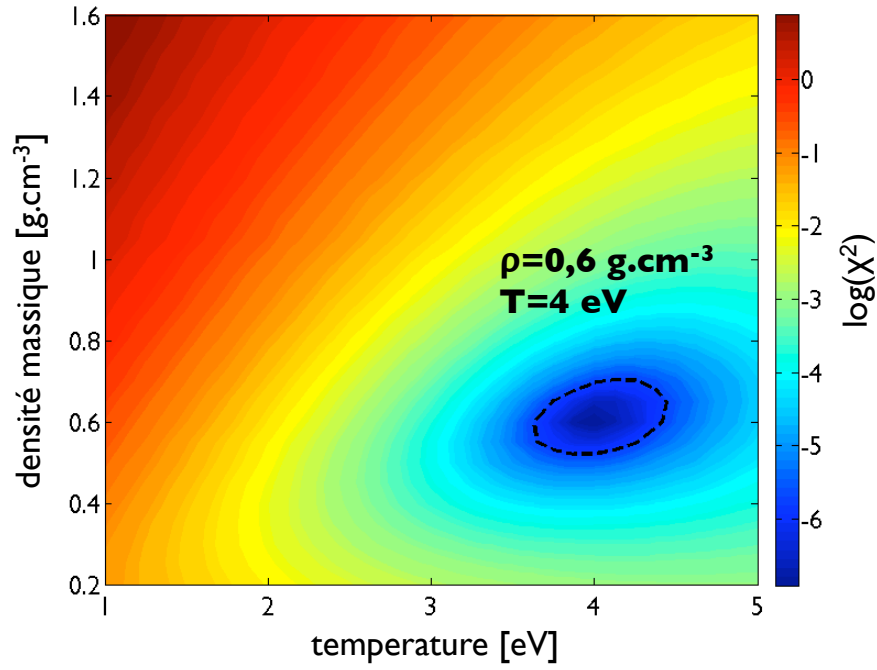


FIGURE 4.12 – Meilleur ajustement dans le plan (ρ, T) en utilisant le modèle d'atome moyen SCAALP.

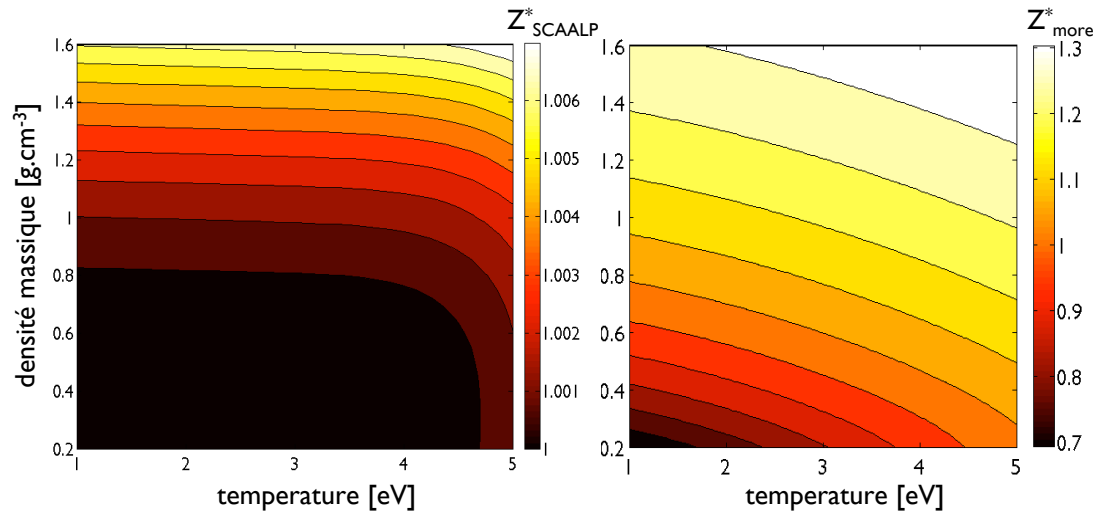


FIGURE 4.13

modèle	ρ [g.cm ⁻³]	T [eV]	Z_{SCAALP}^*
SCAALP	0,60	4,0	1,0

TABLE 4.3 – Paramètres plasma déduits d'un fit dans le plan (ρ, T) avec le modèle SCAALP.

4.1.4 Atome Moyen

Complétons maintenant cette analyse avec l'utilisation du modèle d'atome moyen SCAALP. Dans ce cas de figure, chacun des termes du facteur de structure élastique vient du calcul SCAALP, alors que la réponse des électrons libres reste donnée par son expression RPA. Les deux seuls paramètres d'entrée sont réduits à la densité massique et la température, et l'ionisation moyenne fixée par le calcul.

De même que pour les modèles RPA et SOCP on trouve un minimum unique (voir figure 4.12), pour des valeurs de (ρ, T, Z^*) reportées dans le tableau 4.3.

En reprenant la notation la notation introduite dans le paragraphe 4.1.3.3, et en tenant compte du pas de grille utilisé (32×28 points), ces valeurs peuvent être dotées des barres d'erreurs suivantes :

$$\begin{aligned}\delta T_1^{\text{SCAALP}} &\simeq 0,125 \text{ eV} \\ \delta \rho_1^{\text{SCAALP}} &\simeq 0.05 \text{ g.cm}^{-3}\end{aligned}$$

ainsi que

$$\begin{aligned}\delta T_2^{\text{SCAALP}} &\simeq 0,81 \text{ eV} \\ \delta \rho_2^{\text{SCAALP}} &\simeq 0.18 \text{ g.cm}^{-3}.\end{aligned}$$

La variation relative de l'ionisation moyenne Z_{SCAALP}^* dans toute cette région du plan ne dévie pas de la valeur $Z_{\text{SCAALP}}^* = 1,0$ de plus de 10^{-2} . A titre de comparaison, l'amplitude de la variation de l'ionisation obtenue avec le fit de More est $\Delta Z_{\text{more}}^* \sim 0,6$ dans les mêmes conditions (voir figure 4.13).

$$\delta Z_2^{\text{SCAALP}} < 10^{-2}. \quad (4.2)$$

4.1.5 Dynamique moléculaire quantique

Le dernier modèle utilisé est l'utilisation de simulation de dynamique moléculaire quantique avec le code ABINIT. La seule donnée provenant effectivement des simulations DMQ réalisées est la fonction de corrélation de paire ion-ion $g_{ii}(r)$, qui permet d'avoir accès à $S_{ii}(k)$. Toutes les autres grandeurs sont identiques à celles du modèle de référence.

Contraintes liées à la simulation DMQ. Les simulations présentées ici ont été réalisées avec $N_{\text{part}} = 128$ particules, la durée d'un pas de dynamique moléculaire est fixée à $t_{\text{step}} = 20 \frac{\hbar}{E_{\text{part}}} \simeq 4,8 \times 10^{-16}$ s et la durée totale de chaque simulation est variable, de l'ordre de $n_{\text{step}} = 1000$ pas, soit environ 500 fs. La boîte de simulation est un domaine cubique de côté a_{cell} , auquel sont appliquées des conditions aux limites périodiques. Le nombre d'ions étant fixe, la taille de la boîte impose la densité : $\rho = m_i N_{\text{part}} / a_{\text{cell}}^3$. La température, enfin, est imposée au moyen d'un thermostat numérique (thermostat de Nosé-Hoover, voir par exemple [85]).

La fonction $g_{ii}(r)$ est extraite de l'historique des trajectoires ioniques : on évalue le nombre moyen de particules séparées par une distance r en énumérant l'ensemble des paires de particules à chaque pas de temps. Le facteur de structure statique ionique est obtenu à partir de cette fonction par la relation

$$S_{ii}(k) = 1 + n_i \mathcal{F}_{\mathbf{r}} [g_{ii}(r) - 1] = 1 + \frac{4\pi n_i}{k} \int_0^{+\infty} (g_{ii}(r) - 1) r \sin(r) dr, \quad (4.3)$$

(où $n_i = \frac{a_{\text{cell}}^3}{N_{\text{part}}}$ est la densité numérique d'ions) qui est calculé au moyen d'une FFT.

L'analyse spectrale que constitue le calcul de $S_{ii}(k)$ est fondamentalement limitée par les propriétés du $g_{ii}(r)$ ainsi obtenu :

- Le bruit numérique est lié au nombre fini de paires de particules $N_{\text{paires}} = \frac{1}{2} N_{\text{part}} (N_{\text{part}} - 1) n_{\text{step}}$ utilisé pour évaluer la fonction de corrélation de paires. Le rapport signal à bruit n'augmente que lentement avec le temps de simulation ($\text{SNR} \sim N_{\text{paires}} / \sqrt{N_{\text{paires}}} = \sqrt{N_{\text{paires}}}$).
- La taille finie de la boîte de simulation introduit une limite basse fréquence pour $k < k_{\text{min}} \sim \frac{1}{a_{\text{cell}}}$, en-deçà de laquelle le $S_{ii}(k)$ calculé ne correspond pas à celui du système physique que l'on veut simuler. En effet, les corrélations entre particules séparées par plus de la taille de la boîte de simulation ne sont pas réelles, mais liées aux conditions aux limites périodiques imposées. Les fréquences spatiales concernées sont $k_{lmn} = \frac{2\pi}{a_{\text{cell}}} \sqrt{1/l^2 + 1/m^2 + 1/n^2}$, $(n, l, m) \in \mathbb{N}^*$. On s'attend donc que la valeur du facteur de structure calculé numériquement soit plus élevé qu'attendu pour $k < k_{\text{min}} = 2\pi\sqrt{3}/a_{\text{cell}}$, en raison des corrélations artificiellement introduites.

modèle	\mathcal{S}_ρ	\mathcal{S}_T
SCAALP	$2,3 \times 10^{-1}$	$3,5 \times 10^{-2}$
ABINIT	$2,9 \times 10^{-1}$	$1,9 \times 10^{-2}$

TABLE 4.4 – Paramètres plasma déduits d'un fit dans le plan (ρ, T) avec le modèle SCAALP.

S(k) obtenus. Le graphique 4.14 fait figurer les $S_{ii}(k)$ calculés pour une même valeur de la température $T = 4 \text{ eV}$, et pour trois densités différentes $\rho = 0,4 \text{ g.cm}^{-3}$, $\rho = 0,6 \text{ g.cm}^{-3}$ et $\rho = 0,8 \text{ g.cm}^{-3}$. La valeur de k correspondant à nos conditions expérimentales ($k_{\text{exp}} = 0,79 \text{ a}_0^{-1}$) est repérée sur la figure. Vérifions tout d'abord que les simulations réalisées sont exploitables pour le cas considéré, c'est-à-dire compte tenu du paragraphe précédent, que $k_{\text{exp}} > k_{\text{min}}$. A chacune des densités considérées correspond une taille de boîte donnée et donc une fréquence spatiale minimale. On a respectivement $k_{\text{min}} = 0,37 \text{ a}_0^{-1}$, $k_{\text{min}} = 0,42 \text{ a}_0^{-1}$ et $k_{\text{min}} = 0,46 \text{ a}_0^{-1}$. On constate sur la figure 4.14 le comportement qualitatif attendu : les facteurs de structure calculés présentent une bosse pour $k \lesssim k_{\text{min}}$. Dans les trois cas cependant, on vérifie qu'on a bien $k_{\text{min}} < k_{\text{exp}}$.

Sensibilité. L'utilisation de la dynamique moléculaire quantique, contrairement aux modèles précédents, ne permet pas, pour des raisons purement pratiques de temps de calcul, de parcourir un domaine (ρ, T) sur grille de quelques centaines de points. Ainsi on ne peut pas déterminer un couple $(\rho, T)_{\text{QMD}}$ correspondant via ce modèle aux données expérimentales. On peut cependant vérifier le principe, et évaluer la sensibilité du modèle par rapport aux variations de ρ et T de la façon suivante. Deux séries de trois simulations ont été réalisées, autour des valeurs de densité et température extraites de l'analyse avec le modèle d'atome moyen ($\rho_{\text{SCAALP}} = 0,6 \text{ g.cm}^{-3}$ et $T_{\text{SCAALP}} = 4 \text{ eV}$). La première à densité constante et pour $T = 3; 4; 5 \text{ eV}$. La seconde à température constante et pour $\rho = 0,4; 0,6; 0,8 \text{ eV}$. Les facteurs de structure extraits de ces simulations sont représentés sur les figures 4.14 et 4.15.

On peut alors comparer les valeurs de $S_{ii}(k_{\text{exp}})$ provenant d'une part des simulations DMQ, et d'autre part du modèle d'atome moyen (c'est-à-dire les facteurs de structure de HS-PY avec un paramètre de sphère dure ajusté variationnellement par SCAALP). Ces valeurs sont reportées sur les courbes 4.16. On constate des variations similaires dans chaque lorsque l'on passe d'un modèle à l'autre. Puisque le facteur de structure statique est la seule grandeur qui change entre les deux modèles, on peut évaluer, pour chaque modèle, la sensibilité \mathcal{S}_p de la mesure au paramétré p , avec $p = \rho$ ou T par la variation relative de S_{ii} :

$$\mathcal{S}_p = \left| \frac{1}{S_{ii}(p)} \frac{\delta S_{ii}}{\delta p} \right| \simeq \left| \frac{S_{ii}(p + \delta p) - S_{ii}(p - \delta p)}{S_{ii}(p) 2\delta p} \right|. \quad (4.4)$$

Avec cette définition, on a bien que plus \mathcal{S}_p est grand, plus le minimum de χ^2 dans la direction de p est localisé, c'est-à-dire que δp_2 est petit.

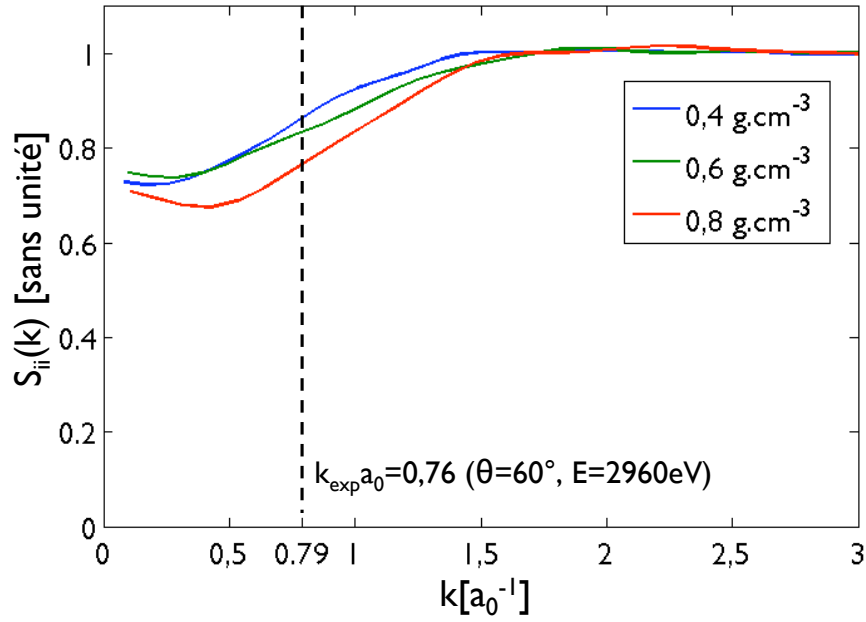


FIGURE 4.14 – Facteurs de structure statiques ion-ion $S_{ii}(k)$ obtenus à partir de simulations ABINIT pour du lithium à $T = 4 \text{ eV}$ et pour différentes densités massiques.

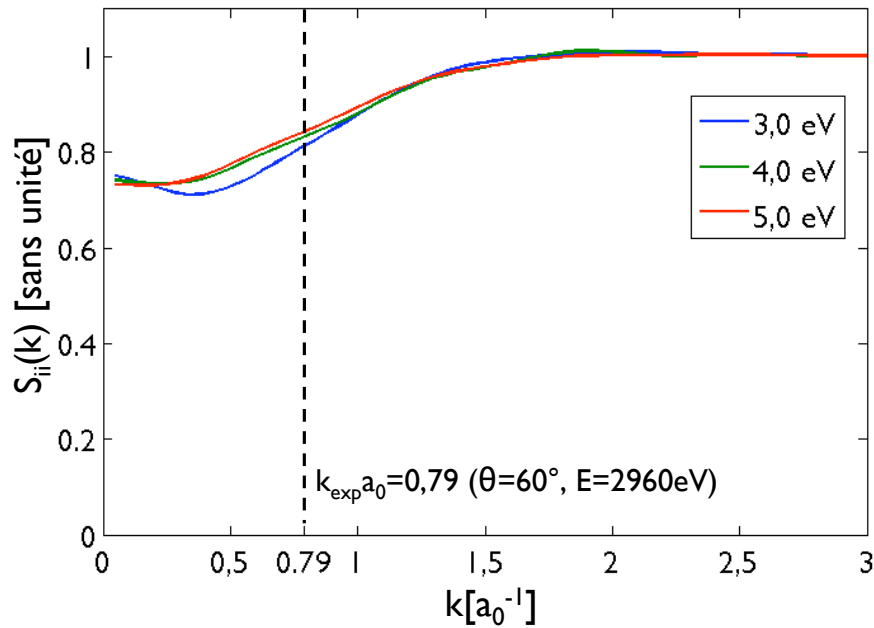


FIGURE 4.15 – Facteurs de structure statiques ion-ion $S_{ii}(k)$ obtenus à partir de simulations ABINIT pour du lithium à $\rho = 0,6 \text{ g.cm}^{-3}$ et pour différentes températures.

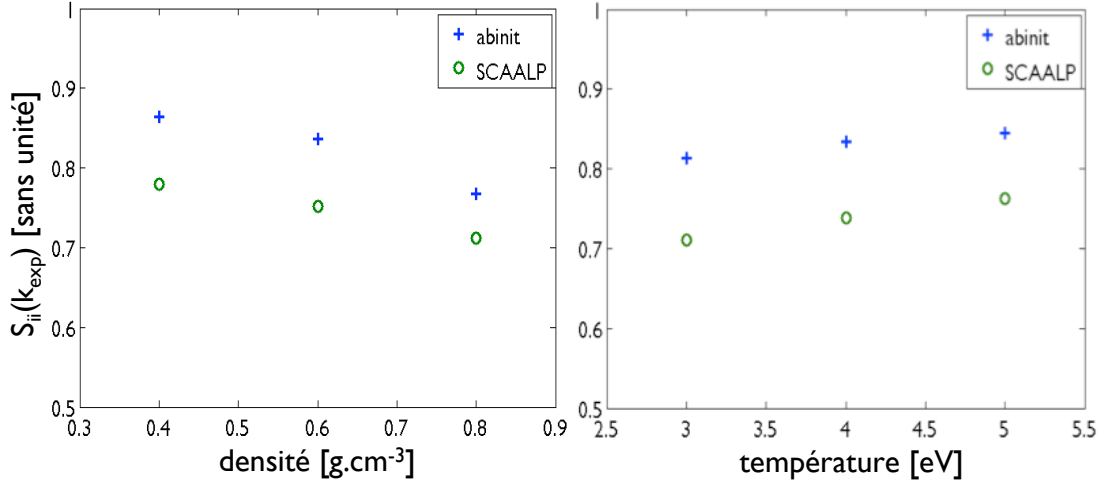


FIGURE 4.16 – Facteurs de structure statiques ion-ion évalués pour les conditions expérimentales $k = k_{exp}$. La valeur calculée par SCAALP et celle calculée par ABINIT sont comparées en fonction de la densité et pour $T = 4 \text{ eV}$ (à gauche) et en fonction de la température pour $\rho = 0,6 \text{ g.cm}^{-3}$.

En comparant ces différentes sensibilités (tableau 4.4), et en supposant que les valeurs optimales de ρ et de T que l'on aurait trouvé avec la DMQ soient proches de celles obtenues via SCAALP, on constate :

- que la sensibilité \mathcal{S}_ρ obtenue sur les variations de densité est meilleure de 25% avec les facteurs de structure QMD qu'avec l'atome moyen
- que par contre la sensibilité par rapport aux variations de température \mathcal{S}_T est 45% plus faible.

Si l'on estime qu'au premier ordre les barres d'erreur évoluent dans les mêmes rapports que les sensibilités, alors on peut évaluer celles liées au modèle *ab initio* :

$$\begin{aligned}\delta \rho_2^{\text{DMQ}} &\simeq 0,75 * \delta \rho_2^{\text{SCAALP}} = 0,14 \text{ g.cm}^{-3} \\ \delta T_2^{\text{DMQ}} &\simeq 1,45 * \delta T_2^{\text{SCAALP}} = 1,17 \text{ eV}\end{aligned}$$

CQFR : Cette analyse d'un spectre expérimental de DTX résolu en énergie au travers de plusieurs modèles nous a permis de mettre en évidence les points suivants.

Types de contributions : Les multiples termes entrant en compte dans l'expression du spectre diffusé ne sont pas tous également importants pour l'analyse des données.

- Pour les conditions expérimentales considérées (en particulier : matériau de faible numéro atomique) la contribution lié-libre peut être négligée.
- Pour ce qui concerne le facteur de forme ionique, il peut être rapidement calculé aux moyen d'un modèle hydrogénique écranté, sans avoir recours à un calcul de physique atomique détaillé, à condition d'avoir une bonne idée de l'ionisation moyenne.
- Le facteur de structure statique $S_{ii}(k)$ apparaît en revanche comme une grandeur fondamentale. Les différents modèles utilisés diffèrent principalement par le calcul de cette fonction, et fournissent des résultats significativement différents.
- Par manque de modèle alternatif à l'expression RPA, cette analyse ne permet pas de conclure quant au rôle de la contribution des électrons libres.

Nombre de paramètres : Telle quelle, la décomposition de Chihara laisse trois paramètres libres (ρ , T , Z^*) dans l'expression du spectre DTX. La première partie de l'analyse, grâce aux modèles simples RPA et SOCP, a mis en évidence la difficulté de déterminer les paramètres optimaux de façon unique dans ce cas. Le choix le plus physique est clairement de tenter d'éliminer l'ionisation moyenne, car à l'équilibre thermodynamique sa valeur doit être fixée par les deux autres.

Ce n'est pas le seul choix possible. La tentative de fixer la température à sa valeur mesurée aboutit à de grands écarts avec les valeurs déterminées par d'autres moyens, mais cela est directement lié à la méthode expérimentale utilisée pour la déterminer. Cela permet toutefois de souligner l'importance fondamentale d'une mesure indépendante des paramètres plasma.

Modèles : Quatre approches permettent de fixer l'ionisation pour rechercher le meilleur accord entre modèle et données expérimentales en faisant varier densité et température :

- modèle RPA + ionisation de More
- modèle SOCP + ionisation de More
- modèle d'atome moyen SCAALP
- modèle de DMQ ABINIT (bien que dans ce cas la possibilité de faire un fit ne soit que théorique).

Les valeurs (ρ_0 , T_0) et l'ionisation Z^* (ρ_0 , T_0) inférées de chacun des modèles sont résumées dans le tableau suivant.

modèle	ρ_0 [g.cm ⁻³]	T_0 [eV]	Z^*
RPA+More	0,57	4,37	1,10
SOCP+More	0,72	2,47	1,08
SCAALP	0,6	4,6	1,0
ABINIT	?	?	?

SOCP : On observe un bon accord entre RPA+More et SCAALP. Les valeurs qui en sont déduites concordent à environ 5% près, à la fois sur la densité et la température estimées. Les valeurs déduites de l'utilisation du modèle SOCP+More, quant à elles, s'écartent de ces dernières de 20% pour la densité, et de 45% pour la température. L'accord entre les deux premiers modèles suggère que le modèle SOCP est ici mis en défaut. Le paramètre de couplage pour $\rho = 0.6 \text{ g.cm}^{-3}$ et $T = 4.5 \text{ eV}$ est $\Gamma \simeq 2$. Or on sait que la description de la structure ionique par un simple OCP s'avère donner de bons résultats [74, 69] pour les métaux liquides à des températures proches de la température de fusion. Dans ces conditions on a des paramètres de couplage de l'ordre de $\Gamma \sim 200$. L'écrantage introduit dans le modèle SOCP par rapport à un simple OCP permet de corriger le facteur de structure ionique à petit k (et entre autres de trouver une valeur non nulle pour la compressibilité), mais n'est pas effective en-deçà d'une longueur de coupure associée au diamètre de sphère dure effectif utilisé (voir [49, 69]). C'est-à-dire que pour $k > k_{\text{lim}}$, $S_{\text{SOCP}}(k) = S_{\text{OCP}}(k)$. Ici on calcule $k_{\text{lim}} = 0,7 \text{ a}_B^{-1}$. Dans nos conditions expérimentales, on a $k = 0,79 \text{ a}_B^{-1} > k_{\text{lim}}$. Ainsi l'écrantage n'introduit pas dans notre cas de correction et la valeur que prend le facteur de structure est la même que celle d'un modèle OCP simple. Dans nos conditions de couplage ionique modéré ($\Gamma \simeq 2$), il est donc possible que le modèle SOCP décrive un état trop corrélé qui s'écarte des conditions réelles du plasma, ce qui pourrait expliquer l'écart constaté entre les valeurs déduites de ce modèle et celles obtenues via RPA et SCAALP.

Barres d'erreur : L'analyse de l'origine des erreurs met en évidence trois sources :

- La finesse de la grille utilisée pour parcourir le plan (ρ, T) . Celle-ci dépend uniquement du temps de calcul considéré comme acceptable. Pour les deux premiers modèles, (RPA+More et SOCP+More) les temps de calcul permettent de raffiner la grille à volonté (1000 *points* $\sim 15 \text{ min}$ sur un ordinateur portable). En ce qui concerne le modèle d'atome moyen SCAALP on a 1000 *points* $\sim 10 \text{ jours}$ sur un processeur. Le calcul est donc faisable en un week-end sur une dizaine de processeurs. Quant à la DMQ, pour une telle grille le coût se chiffre en mois. C'est donc uniquement pour ce modèle que les erreurs liées au pas de la grille de calcul peuvent être rédhibitoires.
- La sensibilité du modèle aux paramètres (ρ, T) dans la région d'intérêt ainsi que le rapport signal sur bruit des données expérimentales. Le tableau suivant regroupe les barres d'erreurs de ce type, en fonction des modèles. Noter qu'elles sont toujours fonction de (ρ_0, T_0) .

modèle	$\delta \rho_2 [\text{g.cm}^{-3}]$	$\delta T_2 [\text{eV}]$	δZ^*
RPA+More	0,1	1,54	0.1
SOCP+More	0,11	0,79	6×10^{-2}
SCAALP	0,18	0,81	$< 10^{-2}$
abinit	0,14	1,17	?

- Le choix du modèle lui-même. Ici l'amplitude de l'erreur a été calculée (voir le paragraphe 4.1.3.3) comme l'écart maximal entre l'ensemble des valeurs calculées via les différents modèles.

	$\delta \rho_3$ [g.cm ⁻³]	δT_3 [eV]	δZ_3^*
choix du modèle	0,15	2,13	0.1

4.2 Plastique

Passons maintenant à l'analyse de l'expérience sur le plastique. Rappelons que, à la différence de la précédente, le spectre de DTX est analysé ici en fonction de l'angle de diffusion θ , ou de façon équivalente $k = \frac{2\pi}{\lambda_p} = \frac{4\pi}{\lambda_0} \sin(\theta/2)$, que l'on interprète comme l'inverse de l'échelle spatiale caractéristique sur laquelle on sonde le plasma.

Les données expérimentales exploitées sont constituées de deux spectres angulaires, obtenus pour différents retards $\Delta t = t_{\text{sonde}} - t_{\text{laser}}$, pour lesquels les conditions plasma sont évaluées à (voir chapitre 3) :

- $\rho_1 = 1,1 \text{ g.cm}^{-3}$, $T_1 = 0,39 \text{ eV}$ pour $\Delta t_1 = 2 \text{ ns}$
- $\rho_2 = 2,10 \text{ g.cm}^{-3}$, $T_2 = 1,86 \text{ eV}$ pour $\Delta t_2 = 8 \text{ ns}$

On rappelle également que ces valeurs ne sont pas des mesures directes de densité et de température, mais sont extraites de simulations hydrodynamiques, dont la validité est assurée par l'utilisation de données provenant du VISAR.

4.2.1 Aspects du traitement multi-composantes

Le premier point important pour l'analyse est que le matériau sondé est constitué de deux espèces ioniques différentes, carbone et hydrogène. Parmi les modèles de matière disponibles, cela exclut par conséquent d'emblée l'utilisation du modèle d'atome moyen SCAALP, puisqu'il ne peut décrire les mélanges.

De même, la décomposition de Chihara pour l'expression du spectre ne traite, telle quelle, que le cas d'une seule espèce d'ionique. Une extension à un nombre arbitraire de composantes est cependant possible. Ce modèle de mélange a été suggéré par Gregori dans [100], et sa dérivation complète a été menée dans l'annexe A afin de mettre en évidence les hypothèses supplémentaires nécessaires par rapport à la formule mono-composante. Contentons nous ici de résumer le résultat.

4.2.1.1 Expression multi-composantes du terme élastique du facteur de structure

En négligeant la contribution lié-libre du facteur de structure électronique total, le seul terme affecté est la partie élastique. On peut l'écrire sous la même forme que dans le cas d'une espèce unique :

$$S_{\text{élastique}} = [\tilde{f}_I(k) + q(k)]^2 \tilde{S}_{ii}(k, \omega),$$

pourvu que l'on pose pour les facteurs de structure ion-ion et facteurs de forme ionique équivalents, respectivement :

$$\bar{S}_{ii}(k) = S_{ii}(k) + \frac{\sum_{s=1}^m x^s (f_I^s(k))^2 - (\bar{f}_I(k))^2}{[\bar{f}_I(k) + q(k)]^2} \quad (4.5)$$

et

$$\bar{f}_I(k) = \sum_{s=1}^m x^s f_I^s(k). \quad (4.6)$$

Dans les expressions précédentes, m désigne le nombre d'espèces ioniques, $f_I^s(k)$ et x^s respectivement le facteur de forme ionique et la concentration de l'espèce s . Dans notre cas, $m = 2$ et $x^C = x^H = 0,5$. $S_{ii}(k)$ enfin, désigne le facteur de structure statique *moyen* (ou total), c'est-à-dire $S_{ii}(k) = 1 + n_i \mathcal{F}_r[g_{ii}(r) - 1]$, expression dans laquelle fonction de corrélation de paire $g_{ii}(r)$ est calculée sur chaque paire d'ion, quelle que soit l'espèce.

L'unique hypothèse supplémentaire par rapport à la dérivation standard de Chihara consiste à supposer que les facteurs de structure partiels (*i.e.* entre espèces) soient liés aux facteurs de structure moyens par leur expression RPA (voir équations A.19 et A.20 de l'annexe A). Physiquement cela signifie que chaque espèce répond linéairement à la présence des autres (de même que les électrons ne sont sensibles qu'à la densité moyenne des autres électrons dans le traitement RPA de leur réponse diélectrique).

4.2.1.2 Utilisation de la dynamique moléculaire quantique

De même que dans le cas du lithium, les simulations de dynamique moléculaire quantique ne sont pas susceptibles de fournir des données dans une large plage de grandeurs thermodynamiques avec un temps de calcul raisonnable. Toutefois, la DMQ peut nous apporter des données importantes quant à la validité des modèles plus simples. En particulier, elle est tout à fait adaptée au traitement d'un mélange. Nous avons donc ici l'opportunité de valider l'utilisation de la loi de mélange qui vient d'être présentée.

Plaçons nous dans les conditions correspondant aux données expérimentales, puisque c'est dans cette zone que sera utilisé le modèle de mélange. Parmi les données expérimentales dont nous disposons, le cas *a priori* le plus contraignant du point de vue du modèle de mélange est celui le plus dense, pour lequel on a $\Delta t = 8 \text{ ns}$, où l'on a vu que l'on estime $\rho = 2,1 \text{ g.cm}^{-3}$ et $T = 1,9 \text{ eV}$.

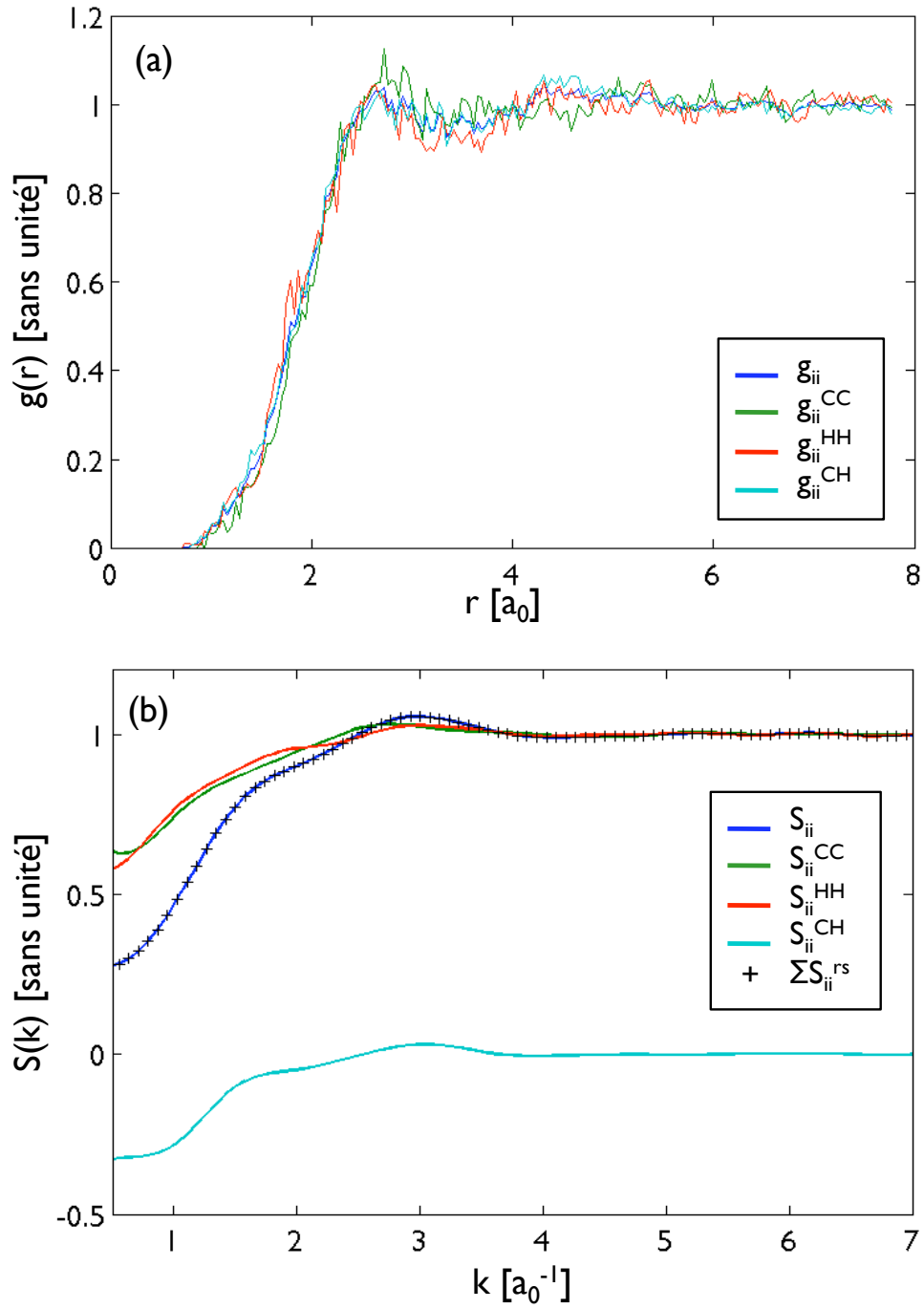


FIGURE 4.17 – (a) Fonctions de distribution de paire ion-ion partielles $g_{ii}^{rs}(r)$, ($r, s = C$ ou H) et fonction de distribution de paire ion-ion totale $g_{ii}(r)$, obtenues avec ABINIT. (b) facteurs de structure statiques correspondants. Est aussi représenté (croix noires) la quantité $\sum \sqrt{x^r x^s} S_{ii}^{rs}(k, \omega)$.

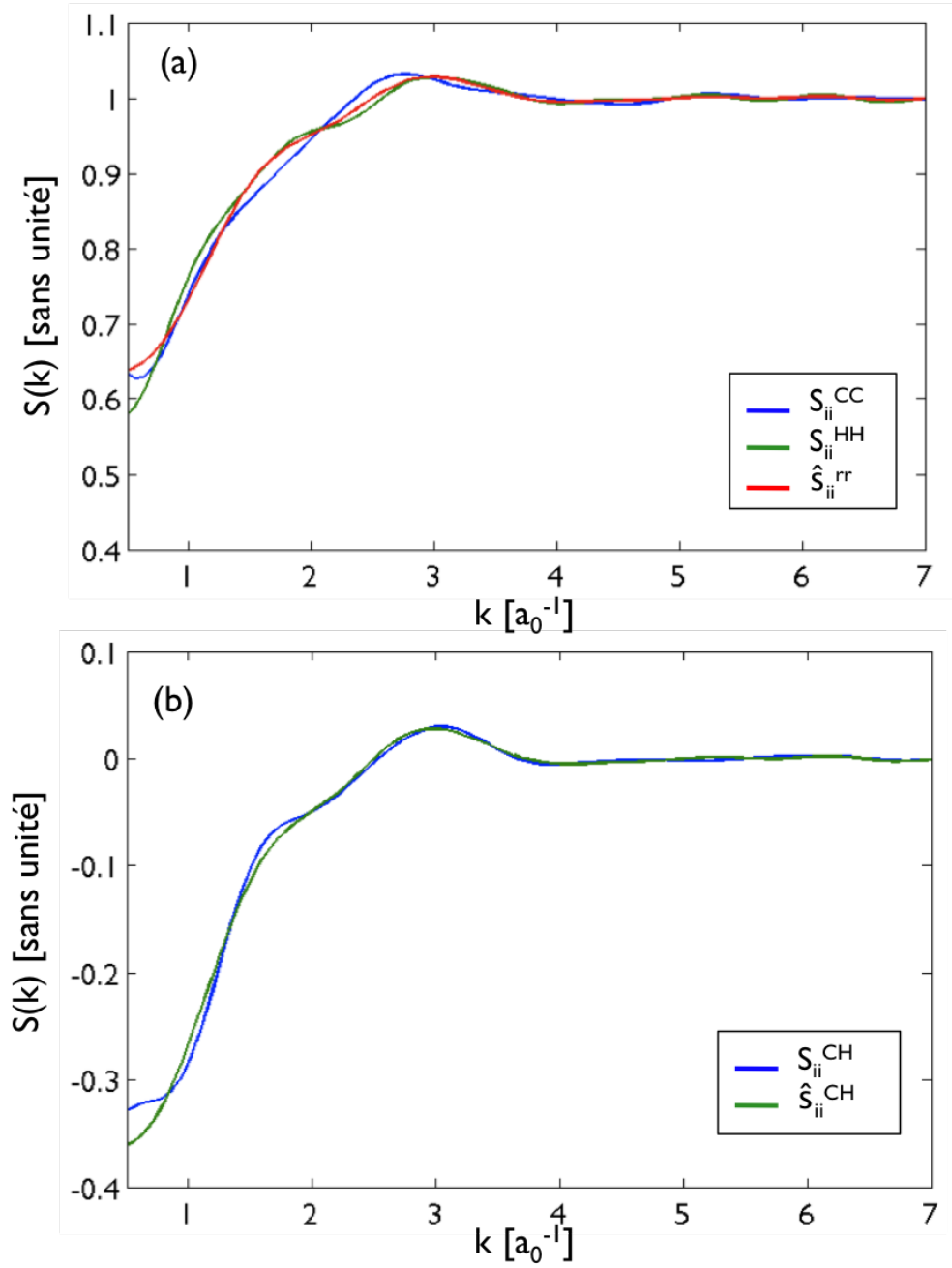


FIGURE 4.18 – Vérification de la validité du modèle de mélange. (a) comparaison de $\hat{S}_{ii}^{rr}(k) = [S_{ii}(k) - 1]/2$ et de $S_{ii}^{rr}(k)$, $r = C$ ou H . (b) Comparaison de $\hat{S}_{ii}^{CH}(k) = [S_{ii}(k) + 1]/2$ et $S_{ii}^{CH}(k)$

La simulation réalisée avec le code ABINIT comporte $N_{part} = 108$ particules, soit 54 atomes de carbone et 54 atomes d'hydrogène. Dans ces conditions une densité de $\rho = 2,1 \text{ g.cm}^{-3}$ correspond à une boîte de simulation de côté $a_{cell} = 15,54 a_0$. La simulation comprend 1001 pas de temps $t_{step} = 2,4 \times 10^{-16} \text{ s}$ soit $t_{simu} = 240 \text{ fs}$. La température est fixée à $1,9 \text{ eV}$.

Les diverses fonctions de distribution de paire partielles $g_{ii}^{rs}(r)$ (où les indices r et s désignent les espèces ioniques C ou H), ainsi que la fonction de corrélation moyenne $g_{ii}(r)$ définie plus haut, sont extraites de l'historique des différentes trajectoires ioniques comme expliqué dans la section précédente, ainsi que les facteurs de structure $S_{ii}^{rs}(k)$ associés. Toutes ces quantités sont représentées sur la figure 4.17 (a) et (b). On peut faire les remarques suivantes :

- Les facteurs de structure partiels $S_{ii}^{rs}(k)$, sont calculés avec la généralisation de l'expression $S_{ii}(k) = 1 + n_i \mathcal{F}_{\mathbf{r}}[g_{ii}(r) - 1]$, qui devient $S_{ii}^{rs}(k) = \delta_{rs} + \sqrt{n_i^s n_i^r} \mathcal{F}_{\mathbf{r}}[g_{ii}^{rs}(r) - 1]$ dans le cas d'un plasma à composantes multiples (voir [69], par exemple). Ainsi $S_{ii}^{CH}(k)$, par exemple, prend bien des valeurs négatives et tend vers 0 à grand k .
- La quantité $S_{ii}^{CC}(k, \omega)/2 + S_{ii}^{HH}(k, \omega)/2 + S_{ii}^{CH}(k, \omega)$ a également été tracée sur la figure 4.17 (b). On constate le parfait accord entre cette somme et $S_{ii}(k)$. Ceci constitue simplement une application de la relation A.15 de l'annexe A, qui doit être vérifiée.

S'étant assuré de la cohérence des facteurs de structure obtenus, nous pouvons les utiliser pour vérifier la validité de la loi de mélange utilisée. En particulier celle-ci suppose que les facteurs de structure partiels $S_{ii}^{rs}(k)$ peuvent être approximés par (voir équation A.19) les quantités $\hat{S}_{ii}^{rs}(k)$, où

$$\hat{S}_{II}^{rs}(k) = \delta_{rs} + \sqrt{x^r x^s} [S_{II}(k) - 1]. \quad (4.7)$$

Sur la figure 4.18 sont tracés les $S_{ii}^{rs}(k)$ et les $\hat{S}_{ii}^{rs}(k)$. On constate un très bon accord entre ces grandeurs. Conformément aux remarques du chapitre précédent, les facteurs de structure calculés à partir d'une boîte de simulation finie ne sont pas valables pour $k < k_{min}$. Dans notre cas on obtient $k_{min} = 0,7 a_0^{-1}$. Quantitativement l'accord sur la plage $k > k_{min}$ est $|\hat{S}_{ii}^{CC}(k) - S_{ii}^{CC}(k)| < 1,3 \times 10^{-2}$, $|\hat{S}_{ii}^{HH}(k) - S_{ii}^{HH}(k)| < 1,6 \times 10^{-2}$ et $|\hat{S}_{ii}^{CH}(k) - S_{ii}^{CH}(k)| < 9,7 \times 10^{-3}$.

On en conclut donc qu'il est licite d'employer la loi de mélange dans les conditions testées.

4.2.1.3 Ionisation

L'évaluation de l'ionisation via le modèle de More doit également être adaptée au traitement d'un mélange. En effet ce dernier fournit une valeur d'ionisation fonction des densités et températures pour un élément. Lorsque plusieurs éléments sont considérés, la stratégie adoptée est la suivante :

- La densité massique totale ρ et la température T du mélange sont fixées, ainsi que la concentration x_r de chaque espèce r .

retard	ρ [g.cm ⁻³]	T [eV]	Z_C^*	Z_H^*	n_e [cm ⁻³]	Z^*	Z_{multi}^*
Δt_1	1,1	0,4	1,65	0,59	$1,14 \times 10^{23}$	1,12	0,04
Δt_2	2,1	1,9	2,07	0,66	$2,65 \times 10^{23}$	1,37	0,1

TABLE 4.5 – Valeurs d’ionisation partielle et moyenne obtenues pour les conditions (ρ, T) correspondant aux deux retards Δt . Z_{multi}^* correspond aux valeurs issues de MULTI.

- Pour chaque espèce r , le fit de More fournit une ionisation moyenne $Z_r^*(\rho_r, T)$. La température utilisée est celle du mélange, et les densités partielles ρ_r restent à déterminer.
- Les densités partielles ρ_r utilisées sont choisies pour assurer la condition que la densité électronique n_e obtenue par : $n_e = Z_r^* n_i^r$, soit la même quelle que soit l’espèce r , avec la définition : $n_i^r = \rho_r / A_r m_u$. A_r est la masse atomique de l’espèce r et m_u l’unité de masse atomique. Dans ces conditions les ρ_r sont reliées à la densité massique moyenne ρ par : $\sum_r x_r A_r / \rho_r = \sum_r x_r A_r / \rho$.

Ce choix fixe une valeur unique n_e pour la densité électronique. Cette approche du mélange est appelée More-iso- n_e , pour des raisons évidentes. On peut ensuite définir une ionisation moyenne pour le mélange via $Z^* = \sum_r x_r Z_r^*$, soit ici $Z^* = Z_C^*/2 + Z_H^*/2$. On vérifie qu’avec la loi de mélange iso- n_e , cette ionisation moyenne ainsi définie correspond à la fraction

$$Z^* = \frac{n_e}{n_i} \quad (4.8)$$

où la densité ionique : $n_i = \rho / \sum_r x_r A_r m_u$ correspondrait à celle d’un plasma de densité ρ d’ions de masse moyenne $m_i = \sum_r x_r A_r m_u$.

Le tableau 4.5 rassemble pour chacun des deux points (ρ, T) , les valeurs des ionisations partielles et moyennes obtenues via la loi de mélange More-iso- n_e . Sont aussi rappelées Z_{multi}^* les valeurs extraites de la simulation hydrodynamique réalisée avec MULTI.

4.2.2 Inhomogénéité du plasma sondé

Après avoir questionné l’aspect multi-composantes du matériau sondé, tournons-nous vers l’influence de son inhomogénéité sur les spectres simulés.

L’analyse des données s’appuie en effet sur des valeurs de densité et de température moyennées sur le volume sondé, à l’intérieur duquel les conditions plasma ne sont pas constantes. L’intensité du rayonnement X diffusé par l’ensemble du volume V_{plasma} sondé est l’intégrale sur tout le volume des intensités diffusées par chacun des volumes élémentaires et dans lesquels le plasma peut être considéré comme homogène.

$$I_{\text{volume}}(k) \propto \int_{V_{\text{plasma}}} d^3r \int d\omega \rho S_{ee}^{\text{tot}} [k, \omega, \rho(r), T(r), Z(r)]. \quad (4.9)$$

Pour des raisons encore une fois de temps de calcul, l'ensemble de l'analyse n'a pu être menée systématiquement en considérant cette somme sur tous les spectres. Nous pouvons cependant nous intéresser, pour un cas précis, à un calcul détaillé. Comparons pour cela $I_1(k)$ et $I_2(k)$: $I_1(k)$ est le résultat d'un calcul détaillé correspondant à la moyenne pondérée

$$I_1(k) = \langle I(k, p) \rangle = \sum_i I_i(k, p_i) = \sum_i \rho_i V_i \int d\omega S_{ee}^{\text{tot}} [k, \omega, \rho_i, T_i, Z_i], \quad (4.10)$$

qui est évaluée en discrétisant le volume total V_{plasma} du plasma en éléments de volume V_i affectés de (ρ_i, T_i, Z_i) . $I_2(k)$ est le spectre qui correspond aux conditions plasma moyennes, évalué pour des valeurs $\langle \rho \rangle, \langle T \rangle, \langle Z \rangle$, moyennées sur le volume sondé comme expliqué dans le chapitre 3.

$$I_2(k) = I(k, \langle p \rangle) = \langle \rho \rangle V_{\text{plasma}} \int d\omega S_{ee}^{\text{tot}} [k, \omega, \langle \rho \rangle, \langle T \rangle, \langle Z \rangle]. \quad (4.11)$$

Le cas choisi est $\Delta t = 8 \text{ ns}$, pour lequel les paramètres plasma moyennés ont déjà été rappelés ($\langle \rho \rangle = 2,1 \text{ g.cm}^{-3}$, $\langle T \rangle = 0,4 \text{ eV}$). I_2 est donc simplement calculé pour ces valeurs. I_1 a été calculé en discrétisant la totalité du volume conique sondé en environ 10^6 éléments de volume de $10 \mu\text{m}^3$, pour lesquels des densités massiques, températures et ionisations (ρ_i, T_i, Z_i) locales ont été obtenues en y moyennant les données de la simulation hydrodynamique. Étant donné que la simulation hydrodynamique est monodimensionnelle, les 10^6 éléments de volume ne correspondent qu'à ~ 200 triplets (ρ_i, T_i, Z_i) distincts. Le spectre total est obtenu en prenant la somme des spectres individuels, pondérée par la masse de matière $\rho_i V_i$ dans la cellule correspondante.

Tous les calculs ont été effectués avec le modèle SOCP. $I_1(k)$ et $I_2(k)$ sont tracés sur la même courbe figure 4.19.

On constate un très bon accord entre $I_1(k)$ et $I_2(k)$, avec $|I_1(k) - I_2(k)| < 5\%$ sur la plage considérée. Ce bon accord s'explique par le fait que les spectres individuels sont pondérés par la masse des cellules, car l'intensité diffusée est proportionnelle au nombre de diffuseurs. La contribution des régions les plus denses se voit donc naturellement accentuée au détriment de celle des régions moins denses, ce qui réduit la dispersion.

Cet argument est illustré sur la figure 4.20, où sont représentés une partie des spectres $I_i(k, p_i)$, ainsi qu'une nouvelle fois $I_1(k)$, et les profils de densités et températures simulés dans la cible à l'instant où elle est sondée. On remarque que les spectres $I_i(k, p_i)$ présentent un maximum dont la position est une fonction croissante de la densité. En effet plus le plasma est dense,

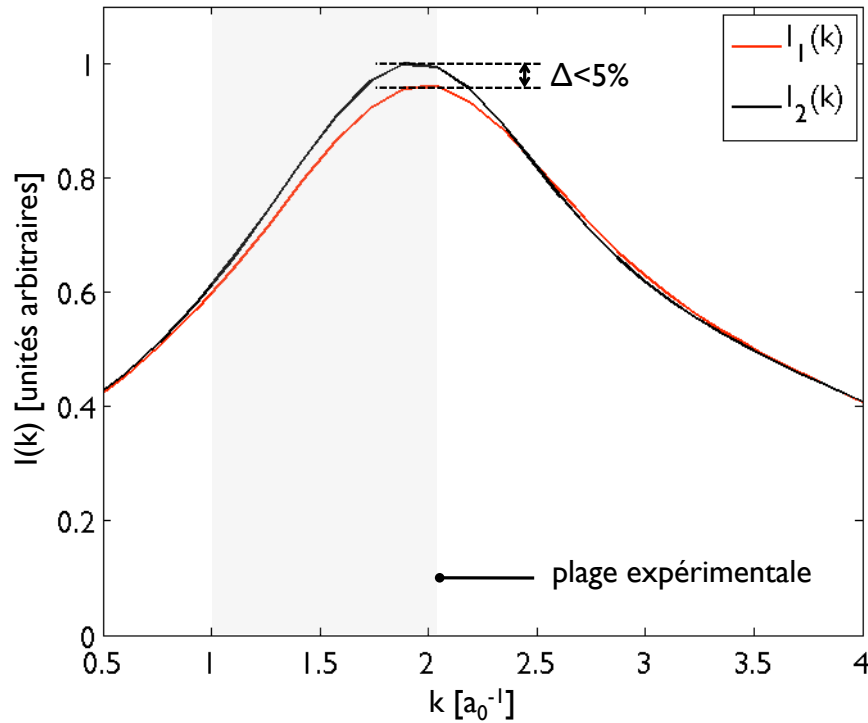


FIGURE 4.19 – Estimation de l’effet de l’inhomogénéité du plasma sondé. $I_1(k)$ représente la moyenne des spectres correspondant aux conditions plasma locales, $I_2(k)$ représente le spectre obtenu pour les conditions plasma moyennes (voir texte).

plus les positions des électrons sont corrélées sur une échelle spatiale λ_s petite, ce qui se traduit par le décalage du maximum de $S_{ee}(k)$ vers les grands k ($k_s \sim 1/\lambda_s$). On note bien que le spectre moyen $I_1(k)$ est peu différent des spectres $I_i(k)$ obtenus en aval du choc, où la densité est maximale.

Cette brève analyse constitue donc un argument en faveur de l’utilisation d’un unique couple (ρ, T) , ou triplet (ρ, T, Z) , pour décrire le plasma par la suite. Malgré les gradients de conditions plasma obtenus expérimentalement, (essentiellement du fait de l’ouverture angulaire du faisceau X, nécessaire pour recueillir un niveau de signal significatif), les spectres réels obtenus sont bien approchés par les spectres que l’on obtiendrait pour des conditions plasma moyennées.

4.2.3 Utilisation en tant que diagnostic (ρ, T)

Armés d’un modèle d’ionisation et d’une loi de mélange, nous pouvons mener le même type d’analyse que celles réalisées pour le lithium, c’est-à-dire parcourir une région du plan (ρ, T)

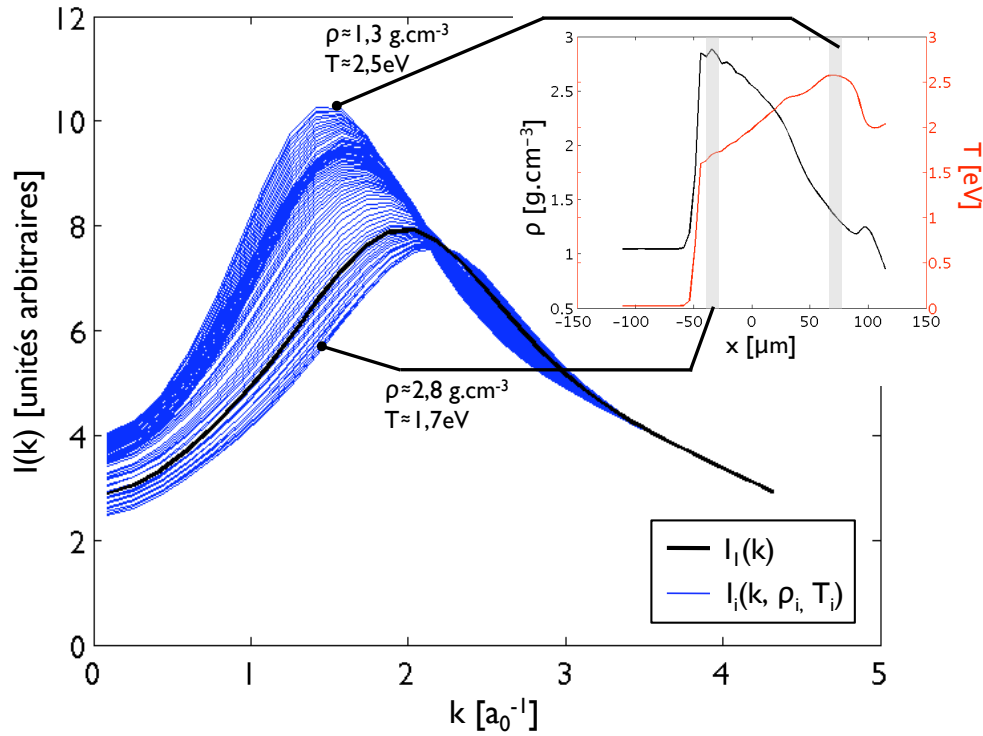


FIGURE 4.20 – Illustration de la contribution majoritaire des régions denses du plasma au spectre diffusé. Les $I_i(k, p_i)$ sont les spectres calculés dans les conditions locales, $I_1(k)$ est la moyenne pondérée. En encart : les profils de densités et températures dans la cible à l'instant où elle est sondée.

afin de minimiser l'écart entre spectre simulé et données expérimentales. Comme on l'a déjà remarqué, le code SCAALP ne permet pas de traiter les mélanges et le choix du modèle de matière se réduit à l'alternative :

- RPA, doté de l'ionisation More-iso- n_e
- SOCP, avec la même ionisation.

La même grille d'analyse (différents types de barres d'erreur) que dans la section sur le lithium a été conservée : barres d'erreurs liées au pas de grille de calcul, à l'amplitude de barres d'erreur expérimentales, et au choix du modèle. Dans les deux cas les plages de densité et température ($\rho = [1 - 3 \text{ g.cm}^{-3}]$ et $T = [1 - 4 \text{ eV}]$ pour $\Delta t = 8 \text{ ns}$, $\rho = [0,3 - 3 \text{ g.cm}^{-3}]$ et $T = [0,5 - 5 \text{ eV}]$ pour $\Delta t = 2 \text{ ns}$) ont été choisies suffisamment larges pour que les conditions expérimentales nous assurent que les paramètres plasma recherchés soient compris entre les bornes.

Les figures 4.21 et 4.22 représentent les cartes de l'écart quadratique moyen entre données expérimentales et spectres simulés, dans le plan (ρ, T) pour chacun des deux cas, respectivement $\Delta t = 8 \text{ ns}$ et $\Delta t = 2 \text{ ns}$. L'ensemble des valeurs (ρ_0, T_0) , ainsi que les incertitudes $\delta \rho_i, \delta T_i$ sont rassemblées dans les tableaux 4.6 et 4.7.

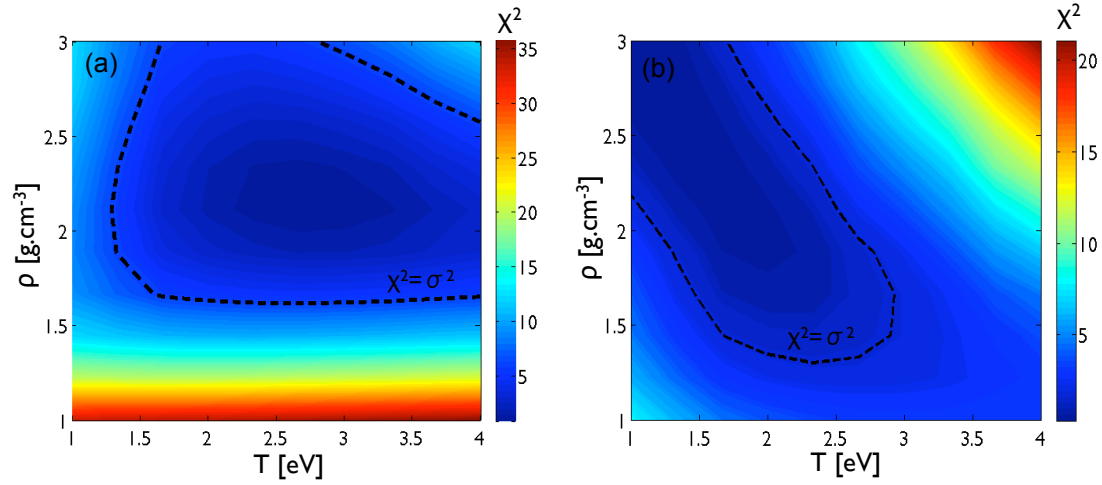


FIGURE 4.21 – Ajustement dans le plan (ρ, T) pour le cas $\Delta t = 8$ ns. (a) SOCP + More-iso- n_e (b) RPA + More-iso- n_e .

$\Delta t = 8$ ns	SOCP + More-iso- n_e	RPA + More-iso- n_e
ρ_0 [g.cm ⁻³]	2,17	<1
T_0 [eV]	2,71	>3
Z^*	1,39	?
$\delta\rho_1$ [g.cm ⁻³]	0,2	0,2
δT_1 [eV]	0,3	0,3
$\delta\rho_2$ [g.cm ⁻³]	>1,3	>1,7
δT_2 [eV]	>3,5	>1,9
$\delta\rho_3$ [g.cm ⁻³]	>1,17	
δT_3 [eV]	>0,29	

TABLE 4.6 – Ensemble des valeurs issues de l'analyse via les modèles SOCP et RPA pour $\Delta t = 8$ ns

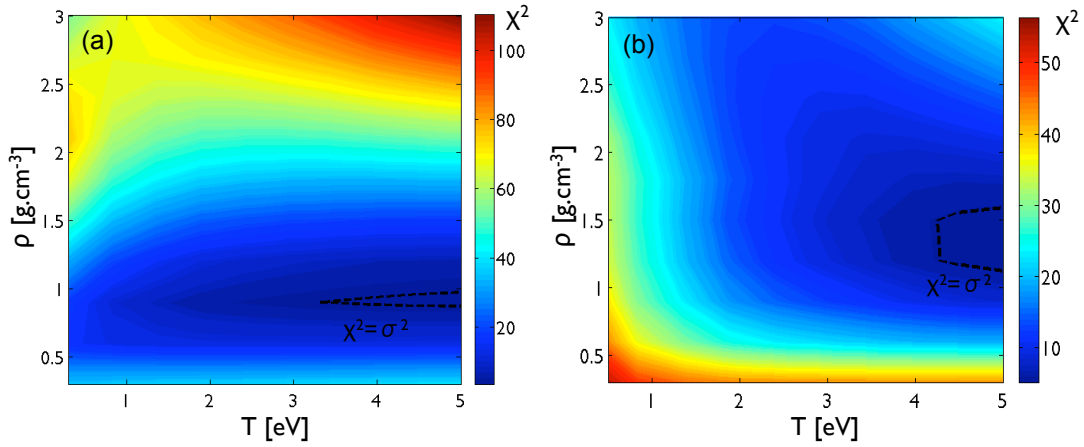


FIGURE 4.22 – Ajustement dans le plan (ρ, T) pour le cas $\Delta t = 2 \text{ ns}$. (a) SOCP + More-iso- n_e (b) RPA + More-iso- n_e .

$\Delta t = 2 \text{ ns}$	SOCP + More-iso- n_e	RPA + More-iso- n_e
$\rho_0 [\text{g.cm}^{-3}]$	0,9	1,2
$T_0 [\text{eV}]$	>5	>5
Z^*	>1,18	>1,28
$\delta \rho_1 [\text{g.cm}^{-3}]$	0,27	0,27
$\delta T_1 [\text{eV}]$	0,45	0,45
$\delta \rho_2 [\text{g.cm}^{-3}]$	$\sim 0,1$	$\sim 0,5$
$\delta T_2 [\text{eV}]$	>1,8	>0,8
$\delta \rho_3 [\text{g.cm}^{-3}]$	0,3	
$\delta T_3 [\text{eV}]$?	

TABLE 4.7 – Ensemble des valeurs issues de l'analyse via les modèles SOCP et RPA pour $\Delta t = 2 \text{ ns}$

Il apparaît immédiatement que pour $\Delta t = 8 \text{ ns}$:

- on ne trouve de minimum dans les bornes explorées qu'avec le modèle SOCP.
- les incertitudes sont largement dominées par la taille des barres d'erreur expérimentales (liées au faible rapport signal sur bruit). Elles sont suffisamment grandes pour qu'on ne puisse en déterminer qu'une borne inférieure dans la région explorée : $\delta \rho^{SOCP} > 1,3 \text{ g.cm}^{-3}$ et $\delta T^{SOCP} > 3,5 \text{ eV}$ pour le modèle SOCP, et $\delta \rho^{RPA} > 1,7 \text{ g.cm}^{-3}$ et $\delta T^{RPA} > 1,9 \text{ eV}$.

Dans le cas $\Delta t = 2 \text{ ns}$, la situation est encore pire et aucun des deux modèles ne parvient à trouver des valeurs (ρ_0, T_0) dans les bornes explorées.

L'utilisation de signaux DTX résolus en angle comme diagnostic dans le plan (ρ, T) , avec les méthodes systématisées dans le cas du lithium, est donc un échec. Il peut être attribué à

- un rapport signal sur bruit trop faible dans le cas $\Delta t = 8 \text{ ns}$

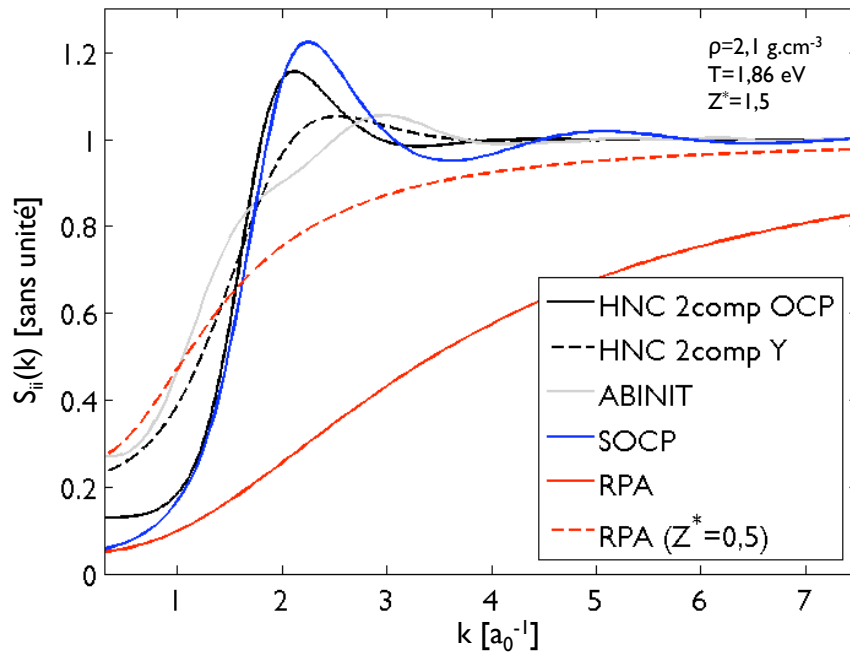


FIGURE 4.23 – Facteurs de structure statiques $S_{ii}(k)$ ion-ion calculés avec différents modèles, dans les conditions $\rho = 2,1 \text{ g.cm}^{-3}$, $T_1 = 1,86 \text{ eV}$ et $Z^* = 1,5$ (sauf pour ABINIT, où Z^* n'est pas un paramètre libre). Est aussi tracé le facteur de structure RPA correspondant à une ionisation moyenne $Z^* = 0,5$, à titre indicatif.

- dans les autres cas, on ne peut qu'incriminer la validité des modèles utilisés, puisqu'on est alors incapable de reproduire les données expérimentales à l'intérieur d'une plage acceptable pour les paramètres libres des modèles.

4.2.4 Comparaison des modèles

Comme nous l'avons vu dans le paragraphe précédent, l'utilisation de données DTX résolues angulairement pour réaliser un diagnostic température-densité n'est pas tout à fait convaincante. Si le problème de l'amplitude des barres d'erreur ne peut être contourné, on peut cependant s'intéresser aux différences entre les modèles.

4.2.4.1 Domaine de validité

On vient de voir que RPA + More-iso- n_e était incapable de reproduire les données expérimentales. Examinons le facteur de structure statique ion-ion calculé dans ce modèle, comparé

aux autres modèles multi-composantes disponibles. La figure 4.23 fait apparaître les facteurs de structure ioniques suivants :

- SOCP
- RPA
- ABINIT
- TC-HNC (*two components HNC*). Ces calculs ont été réalisés avec le code de K. Wünsch et D. Gericke (voir [50]). Deux variantes du calcul HNC sont présentées, l'une avec deux espèces ioniques interagissant par un potentiel coulombien, et un fond rigide neutralisant (désignée OCP sur la figure), l'autre faisant intervenir deux espèces ioniques interagissant par un potentiel linéairement écranté (Yukawa, désigné Y sur la figure).

On retrouve le comportement qualitatif attendu : le comportement oscillant des modèles SOCP, HNC et ABINIT traduit la présence de corrélations ioniques, avec une longueur de corrélation (maximum principal de $S_{ii}(k)$) comprise entre $0,3 a_0$ et $0,5 a_0$ suivant les modèles. Bien que le détail des $S_{ii}(k)$ pour ces modèles varie (en particulier SOCP et HNC-OCP prédisent tous deux un comportement plus rigide avec des maxima principaux très marqués), ils sont tous en relativement bon accord qualitatif par rapport à la description RPA, dont on constate qu'elle est incapable de décrire la structure ionique dans ces conditions. Ce résultat est attendu au vu des paramètres de couplage estimés pour nos conditions plasma (on évalue le paramètre de couplage $\Gamma > 10$, voir plus loin le tableau 4.9). On est donc ici largement hors du domaine de validité d'une description linéaire du plasma.

4.2.4.2 Ionisation

Pour poursuivre l'analyse, on peut donc choisir de faire confiance aux valeurs de densité et température déterminées par les simulations hydrodynamiques. En ce qui concerne l'ionisation, on a vu en revanche que celle moyenne extraite de MULTI (cf tableau 4.5) est très faible comparée à l'ionisation prédite par More-iso- n_e .

- Cela peut être attribué en partie au fait que la moyenne sur le volume sondé fait intervenir un volume de plastique non-choqué, pour lequel l'ionisation est strictement nulle, et qui contribue à la valeur moyenne mais qui comme on l'a montré plus haut contribue peu au spectre diffusé.
- D'autre part le fit de More, qui est basé sur une description de type Thomas-Fermi des électrons, est faux pour un isolant. Il est normal qu'il surestime l'ionisation à basse température pour le CH.

Les doutes sur la valeur de Z^* suggèrent de choisir cette grandeur comme paramètre libre pour ajuster les spectres simulés aux données expérimentales. C'est ce qui a été fait sur la figure 4.24 avec le modèle de matière SOCP. Les Z^* résultant figurent dans la table 4.8.

- Dans le cas le plus chaud ($\Delta t = 8$ ns) l'ionisation trouvée est comparable (environ 10% plus élevée) à l'ionisation moyenne obtenue dans les mêmes conditions par More-iso- n_e . On peut alors penser avoir abouti à une description raisonnable de l'état du plasma sondé : paramètres plasma $\rho_0 = 2,1 \text{ g.cm}^{-3}$, $T_0 = 1.86 \text{ eV}$ et structure ionique approchée par un

	Z_{More}^*	$Z_{\text{fit SOCP}}^*$
$\Delta t = 8 \text{ ns}$ ($\rho = 2, 1 \text{ g.cm}^{-3}$, $T = 1, 9 \text{ eV}$)	1,37	1,5
$\Delta t = 2 \text{ ns}$ ($\rho = 1, 1 \text{ g.cm}^{-3}$, $T = 0, 4 \text{ eV}$)	1,12	0,6

TABLE 4.8 – Valeurs de l'ionisation moyenne réalisant le meilleur accord pour $(\rho, T)_{\text{hydro}}$ et SOCP. Sont aussi rappelées les valeurs de obtenues via More-ison_e

	$\Gamma_{ii}(Z_{\text{More}}^*)$	$\Gamma_{ii}(Z_{\text{fit SOCP}}^*)$	$\Lambda(Z_{\text{More}}^*)$	$\Lambda(Z_{\text{fit SOCP}}^*)$
$\Delta t = 8 \text{ ns}$	1,7	1,9	8	8,5
$\Delta t = 2 \text{ ns}$	1,6	0,7	22	14,5

TABLE 4.9 – Paramètres de couplage (non échantés) et paramètres de dégénérescence Λ du plasma pour les différentes valeurs de Z^* .

SOCP (ρ_0 , T_0 , $Z^* \simeq 1.5$). La mise en regard du spectre RPA calculé dans les mêmes conditions (4.24) illustre bien l'incapacité de ce dernier à reproduire les données.

- Le cas le moins dense et plus froid ($\Delta t = 2 \text{ ns}$), l'ionisation qui présente le meilleur accord avec les données est alors 50% plus basse que celle prédite par More-iso- n_e , ce qui fait passer le paramètre de couplage calculé de $\Gamma_{ii} \simeq 1,6$ à $\Gamma_{ii} \simeq 0,7$. Cela suggère que dans ce cas l'ionisation fournie par More n'est pas compatible avec les paramètres thermodynamiques. On s'attend en effet à ce que ce modèle d'ionisation ne soit pas valable pour un isolant. Pour $T = 0,4 \text{ eV}$, ce modèle qui traite C et H comme des métaux fournit une valeur trop élevée de l'ionisation.

4.2.4.3 Longueur de corrélation

Indépendamment des modèles de matière utilisés et leur domaine de validité, rappelons que les facteurs de structure sont des transformées de Fourier de fonctions de corrélation à deux particules. D'autre part le spectre diffusé $I(k)$ est proportionnel au facteur de structure statique de tous les électrons du plasma $S_{ee}^{\text{tot}}(k)$. Ainsi l'interprétation de l'apparition d'un maximum dans le $I(k)$ nous renseigne sur l'apparition d'un degré d'ordre dans l'organisation spatiale des électrons. Comme le suggère l'expression du facteur de structure statique ($S_{ee}^{\text{tot}}(k) = (f_I(k) + q(k))^2 S_{ii}(k) + S_{ee}(k)$), cette organisation a pour origine :

- celle des ions eux-mêmes qui est caractérisée par $S_{ii}(k)$,
- celle des électrons liés ($f_I(k)$) et libres ($q(k)$) autour des ions,
- celle des électrons libres ($S_{ee}(k)$).

L'interprétation des données pour $\Delta t = 8 \text{ ns}$ avec un maximum pour $k_s \sim 1,9 \text{ a}_B^{-1}$ suggère une échelle d'organisation spatiale caractéristique $\lambda_s = \frac{2\pi}{k_s} \simeq 3,3 \text{ a}_0$. Pour une densité de $2,1 \text{ g.cm}^{-3}$, le rayon de Wigner-Seitz ionique est $r_{WS} = 2,02 \text{ a}_B$. Ainsi la longueur de corrélation électronique est de l'ordre de la distance moyenne entre deux ions, ce qui suggère simplement que les corrélations électroniques observées sont l'image directe des corrélations entre les

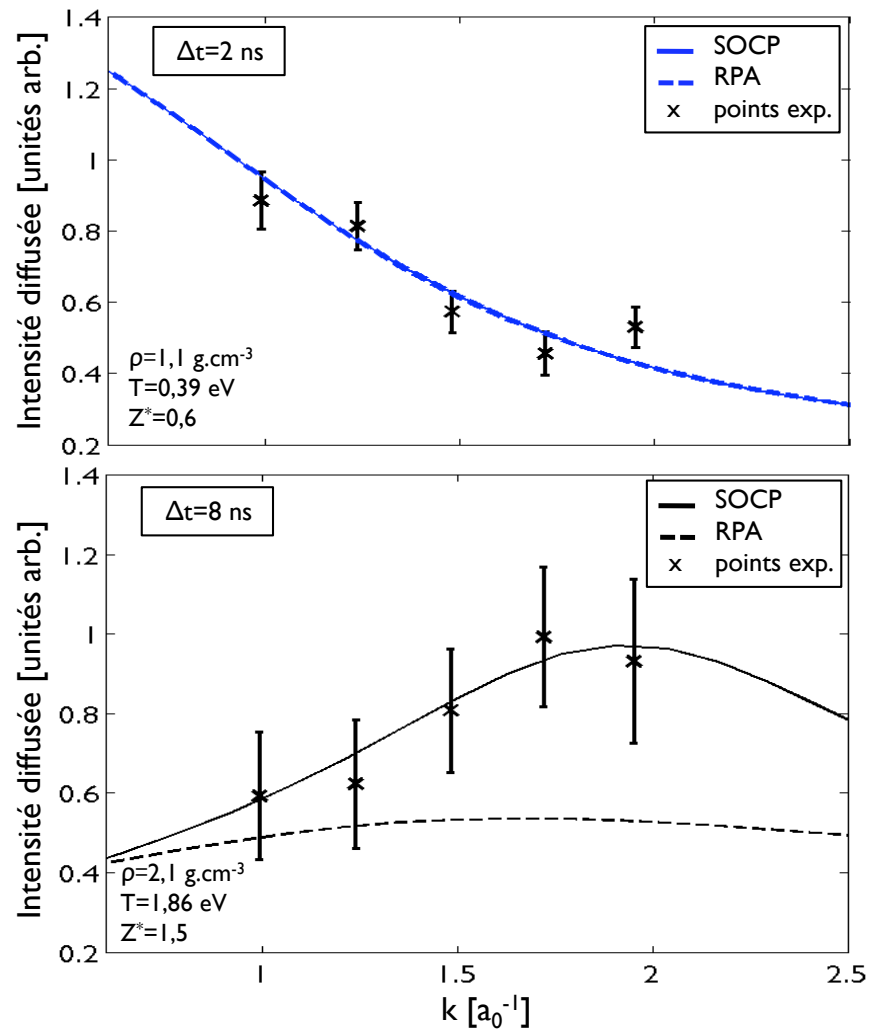


FIGURE 4.24 – Meilleur accord entre spectres SOCP et points expérimentaux, en choisissant Z^* comme paramètre libre. Sont aussi tracées les courbes correspondant au spectre RPA dans les mêmes conditions.

ions. Remarquons que si ce n'était pas le cas, comme par exemple le cas de corrélation à plus grande échelle liées à des clusters (états moléculaires) dans le plasma WDM, les modèles à notre disposition ne permettraient pas de le décrire. En effet la décomposition de Chihara fait l'hypothèse que les électrons liés à un ion sont statistiquement indépendants des électrons liés aux autres.

Dans le cas $\Delta t = 2 \text{ ns}$, les données expérimentales ne mettent pas en évidence de maximum dans la plage angulaire sondée et l'on conclut à l'absence d'échelle caractéristique de corrélations de densité électronique dans la plage sondée.

CQFR : L'analyse des spectres expérimentaux résolus en angle sur le plastique a nécessité :

- la mise en oeuvre d'une loi de mélange appropriée nécessaire au traitement d'un plasma comportant plusieurs espèces ioniques et de la valider (au moyen de simulations de dynamique moléculaire quantique)
- l'utilisation d'un modèle d'ionisation cohérent avec cette loi de mélange, pour, comme dans le cas du traitement de spectres DTX résolus en énergie, réduire le nombre de paramètres libres.

L'application de la méthodologie développée dans la section précédente (utilisation de modèles "rapides" avec un modèle d'ionisation pour pouvoir parcourir le plan $\rho - T$ suffisamment finement) afin d'utiliser les spectres angulaires comme diagnostic pression-température s'est révélée inefficace :

- d'une part les barres d'erreurs, pour l'un des cas analysés ($\Delta t = 8 \text{ ns}$) sont trop importantes pour contraindre les paramètres plasmas
- d'autre part pour l'autre cas ($\Delta t = 2 \text{ ns}$) aucun des modèles de matière ne converge vers une solution crédible.

Dans aucun de ces deux cas, l'interprétation via le modèle RPA ne correspond à des points (ρ, T) physiquement acceptables. L'inapplicabilité du modèle linéaire pour les plasmas corrélés obtenus est également mise en évidence par la comparaison des facteurs de structure ioniques avec ceux des modèles décrivant les corrélations dans le plasma.

En supposant en revanche les paramètres plasma (ρ, T) issus des simulations hydrodynamiques corrects, les données mettent en évidence la mise en défaut du modèle d'ionisation utilisé à basse température.

Chapitre

5

Conclusion

Sommaire

5.1	Bilan	154
5.1.1	Outils de modélisation	154
5.1.2	Moyens expérimentaux	155
5.1.3	Analyse des données	155
5.2	Perspectives	156
5.2.1	Expérimentales	156
5.2.2	Modélisation	158

L'étude des plasmas denses dans la région WDM du plan densité-température représente un double défi sur le plan théorique aussi bien qu'expérimental. Dans cette perspective, la DTX constitue un outil dont les caractéristiques la rendent pertinente relativement aux deux aspects du problème. Elle est en effet une sonde, sensible à l'état du plasma investigué, et offre donc l'espoir de pouvoir être utilisée comme diagnostic. Cependant les difficultés auxquelles on se heurte lorsque l'on tente de modéliser l'état d'un plasma WDM sont les mêmes que celles qui émergent lorsque l'on souhaite calculer le signal DTX diffusé par celui-ci. Les théories font inmanquablement appel à un modèle de matière, et ceux à notre disposition sont justement en difficulté dans la région WDM.

L'approche choisie pour ce travail de thèse a pour objectif de s'attaquer à ces difficultés. Du point de vue expérimental, il est incontournable d'obtenir et de travailler sur des plasmas dont l'état est bien caractérisé, de façon indépendante de l'emploi de la DTX. Du point de vue de l'analyse, parmi les modèles de matière disponibles, il faut disposer d'une part de modèles numériquement "légers" pour pouvoir se livrer à des analyses systématiques sur les données expérimentales, et de modèles plus réalistes mais numériquement coûteux pour en explorer les limites de validité.

5.1 Bilan

Résumons ici l'ensemble des enseignements que l'on peut tirer de cette étude.

5.1.1 Outils de modélisation

Du point de la vue de la modélisation nous avons passé en revue un certain nombre d'outils théoriques pour décrire les plasmas WDM.

La seule approche aujourd'hui utilisée pour obtenir une expression calculable de la section efficace de DTX, et donc la simulation d'un spectre diffusé, est celle de la décomposition du facteur de structure dynamique de tous les électrons du plasma obtenue par Chihara. Celle-ci requiert déjà certaines hypothèses telles que la validité de la description du milieu par une espèce moyenne, séparation nette entre électrons libres et liés, l'état d'équilibre thermodynamique local réalisé, l'absence d'effet multi-centres.

Pour rendre cette expression effective, il faut y adjoindre un modèle de matière fournissant tout ou partie des grandeurs qui y interviennent (facteur de forme ionique, facteur de structure ion-ion, facteur de structure des électrons libres...) tel qu'une description linéaire, un OCP écranté, un atome moyen ou la dynamique moléculaire quantique. Divers niveaux d'approximation sont alors possibles en choisissant parmi ces modèles.

Dans cette optique un code (ATHOS) a été développé permettant la simulation des spectres DTX. Les modèles fournissant les divers termes du facteur de structure électronique peuvent être choisis pour générer les $I(k, \omega)$ correspondant.

5.1.2 Moyens expérimentaux

Des expériences ont été réalisées sur des plasmas WDM obtenus par choc laser, en explorant les deux modes principaux d'utilisation de la DTX : la mesure des photons X diffusés soit en fonction de leur énergie $\hbar\omega$ soit en fonction de l'angle de diffusion θ . Une première campagne expérimentale sur les cibles de lithium nous a permis d'obtenir des données expérimentales résolues en énergie avec une résolution temporelle de l'ordre de 1,35 ns. Lors de la campagne expérimentale ultérieure réalisée au LULI sur les cibles de plastique, les efforts ont été orientés vers une meilleure caractérisation du plasma sondé. Cela a pu être obtenu grâce à la première utilisation de sonde X picoseconde dans une expérience de DTX sur un plasma choqué, qui nous a permis d'atteindre une résolution temporelle de 30 ps pour la mesure, représentant de ce point de vue un gain d'un facteur 45. Ceci nous a ouvert la possibilité de sonder différents états de plasma correspondant à l'évolution hydrodynamique de la matière choquée. La géométrie choisie offre la possibilité de diminuer les gradients spatiaux, le facteur limitant de ce point de vue étant l'ouverture angulaire de la source.

5.1.3 Analyse des données

L'analyse des données expérimentales est riche en enseignement, et ce bien que la quantité de données effectivement recueillies soit relativement faible, confirmant ainsi la richesse de l'outil DTX.

Lithium. L'examen du spectre DTX résolu en énergie nous apprend :

- qu'il apparaît nécessaire d'employer un modèle d'ionisation ou de mesurer indépendamment densité ou température pour en déduire des valeurs de paramètres plasma réalistes
- que, ces conditions étant réunies, tous les modèles utilisés convergent vers un minimum dans le plan (ρ, T) . Les barres d'erreurs associées à ces valeurs sont dominées
 - pour la densité : à parts égales par le rapport signal sur bruit de la mesure et par la dispersion entre les modèles
 - pour la température : par la dispersion entre les modèles.

On peut remarquer que parmi les trois modèles de complexité croissante (RPA, SOCP, SCAALP) qui ont permis une analyse systématique dans le plan (ρ, T) , RPA et SCAALP donnent des résultats concordants (on rappelle $\rho_0^{\text{RPA}} = 0,57 \text{ g.cm}^{-3}$, $T_0^{\text{RPA}} = 4,37 \text{ eV}$, et $\rho_0^{\text{SCAALP}} = 0,6 \text{ g.cm}^{-3}$, $T_0^{\text{SCAALP}} = 4,6 \text{ eV}$), desquels ceux obtenus via SOCP s'écartent significativement ($\rho_0^{\text{SOCP}} = 0,72 \text{ g.cm}^{-3}$, $T_0^{\text{SOCP}} = 2,47 \text{ eV}$). Il est intéressant de remarquer qu'il n'est donc pas observé de convergence des résultats avec l'augmentation de la sophistication du modèle employé.

Nous avons mis ici en évidence la dépendance des grandeurs (ρ_0, T_0) ainsi évaluées au modèle utilisé. De plus on ne peut formellement écarter un modèle au profit d'un autre. Dans les conditions expérimentales précises (paramètre de couplage modéré $\Gamma \simeq 1,7$) qui nous intéressent, nous avons cependant développé un argument au chapitre 4 mettant en doute la validité de l'utilisation du modèle SOCP. Sous l'hypothèse de la validité de cet argument, on peut considérer que l'analyse a convergé vers un résultat unique.

Il faut néanmoins souligner que l'analyse des spectres DTX ne constitue en soi une mesure que dès lors que le modèle utilisé est adapté aux conditions sondées.

Polystyrène. Les signaux DTX résolus en angle sur cibles de polystyrène choqué ont tout d'abord mis en évidence la difficulté d'utiliser de tels signaux pour en déduire via un modèle des valeurs (ρ_0, T_0) , tout du moins avec les niveaux élevés de bruit obtenus.

Un résultat essentiel est la mise en évidence expérimentale de l'incapacité d'un modèle linéaire à décrire la structure du plasma.

Les données obtenues constituent également la première mesure de l'apparition d'une longueur de corrélation dans la densité électronique dans un plasma WDM, se traduisant par l'apparition d'un maximum dans le facteur de structure électronique.

5.2 Perspectives

Si ce travail nous a permis de valider la richesse et la pertinence de la DTX en tant qu'outil d'étude des plasmas WDM, son utilisation en tant que diagnostic plasma de routine n'est pas encore validée. Pour aller plus loin, des efforts à la fois sur le plan expérimental et sur le plan de la modélisation sont à poursuivre.

5.2.1 Expérimentales

Du point de vue des expériences, plusieurs voies assez naturelles peuvent être explorées pour améliorer la qualité des signaux obtenus.

Sources X. Les sources X utilisées jusqu'à maintenant sont produites par interaction laser intense-matière. Même si le passage à l'utilisation d'impulsions laser picosecondes, qui est un des résultats majeurs de cette thèse, a permis d'obtenir une résolution temporelle sur la mesure, ces sources sont fondamentalement limitées. Un problème est la reproductibilité tir-à-tir de la source, due aux fluctuations de l'énergie laser sur cible, au niveau du piédestal

laser qui modifie sensiblement le bruit, ainsi qu'aux aléas de l'alignement. Cela représente une vraie limitation. L'interaction laser ultra-intense/solide est également source de rayonnement X dur et de particules (électrons, protons) énergétiques, lesquels sont susceptibles de limiter le rapport signal sur bruit des données mesurées. La monochromaticité de la source est également problématique. Le nombre de photons utiles, qui est habituellement la principale source de limitation du rapport signal sur bruit, est enfin naturellement limitée par l'énergie laser disponible et le fait que les sources obtenues sont isotropes et doivent être collimatées.

Une nouvelle génération de sources X, constituée par les lasers à électrons libres (FEL, pour *free electron laser*), apporte une solution à nombre de ces problèmes. Elles sont monochromatiques, directionnelles, d'énergie réglable, de courte durée. On peut citer le projet Européen XFEL au Deutsches Elektronen-Synchrotron (Allemagne) ou l'installation qui rentre actuellement en phase de fonctionnement LCLS (*Linac Coherent Light Source*) du SLAC National Accelerator Laboratory (US). Cette dernière délivre des impulsions X cohérentes d'environ 10^{12} photons d'une durée de 100fs dans la gamme d'énergie 1 – 10keV. Les expériences réalisées avec ce type de source apporteront un réel saut qualitatif aux données DTX, dès lors qu'elles seront couplées à une source de production d'un élément de matière WDM de volume suffisant.

Plasma sondé. On l'a vu, la caractérisation du plasma sondé est fondamentale. Des outils existent cependant, et c'est souvent la complexité de la mise en place expérimentale qui limite les résultats obtenus.

Dans les expériences où le plasma WDM est obtenu par choc laser, la combinaison VISAR/SOP a fait ses preuves pour mesurer densité et température, combinée avec la mesure d'un spectre DTX [32]. La mesure de densité ainsi obtenue reste cependant indirecte. La radiographie X a démontré la capacité d'une mesure directe de la densité de matériaux choqués par laser de numéro atomique faible [101], moyen [102] ou élevé [103] avec des sources X plasma. Couplée à la DTX, celle-ci nécessiterait cependant une seconde source laser picoseconde pour générer le backlighter X. Seule l'installation Omega EP du Laboratory for Laser Energetics (US) offre une telle configuration.

Une meilleure précision sur les conditions plasma obtenues peut également être obtenue en minimisant l'inhomogénéité du plasma sondé. L'utilisation de sources X picosecondes constitue une avancée importante, nous permettant de nous affranchir de l'intégration temporelle des conditions plasma liées à son évolution hydrodynamique. Reste à travailler sur les gradients spatiaux. La production par onde de choc générée par laser à l'avantage d'être une technique bien maîtrisée, et l'emploi de lames de phase permet d'obtenir des chocs à géométrie mono-dimensionnelle avec une bonne approximation. Comme l'illustre notre expérience sur le plastique, l'ouverture angulaire de la source X, nécessaire dans notre cas pour atteindre un rapport signal sur bruit mesurable, constitue la limitation de cette technique. Cette géométrie serait réutilisée avec grand bénéfice avec une source plus directionnelle (voir

paragraphe précédent). En conservant la technique des sources X laser, la seule possibilité est d'augmenter le nombre de photons, donc l'énergie laser.

Systématique. Il convient enfin de remarquer que les résultats obtenus et commentés dans le bilan que nous venons de tirer correspondent à des conditions expérimentales données, et ne permettent en toute rigueur que de tirer des conclusions pour les matériaux choisis dans les conditions thermodynamiques effectivement étudiées. Des expériences plus systématiques, faisant varier conditions plasma ou matériau sondé, seraient particulièrement utiles pour éprouver les limites de validité des modèles et les barres d'erreur que nous avons évaluées. De ce point de vue le schéma expérimental retenu pour notre étude sur le plastique (choc laser + sonde X picoseconde transverse) est particulièrement pertinent, puisque qu'il permet de faire varier de façon contrôlée, via le délai choc-sonde et l'énergie laser, les conditions plasma sondées.

FCI. En ce qui concerne l'extension de la DTX à plus haute densité et température et en particulier comme diagnostic du combustible comprimé pour la FCI, pour les conditions plasma attendues (mélange DT à $\rho \sim 300 \text{ g.cm}^3$, $T \sim 200 \text{ eV}$) la relativement modeste valeur du paramètre de couplage ($\Gamma \simeq 0.15$) laisse penser que la réalisation de la mesure est possible. Cependant pour de telles densités le plasma doit être sondé à l'aide de rayons X durs, c'est-à-dire d'énergie supérieure à 10 keV (raie $K\alpha$ du tantale, $Z_A = 73$, à 57 keV par exemple). Il est tout à fait incertain à l'heure d'aujourd'hui que l'on puisse obtenir avec des sources X plasma à de telles énergies un rapport signal sur bruit suffisant. Des travaux récents [104] montrent en effet l'importance de l'émission de type bremsstrahlung pour ce type de plasma créé en interaction à UHI.

5.2.2 Modélisation

Du point de vue de la modélisation, les voies de progrès ne sont pas moins nombreuses et moins évidentes qu'en ce qui concerne les expériences.

Z_A moyen à élevé. D'éventuelles expériences sur des matériaux de numéro atomique plus élevé ne pourront faire l'impasse sur un traitement plus fin du terme lié-libre du facteur de structure électronique total. Un traitement détaillé de ce terme nécessite un calcul de physique atomique pour obtenir la structure électronique des ions du plasma. Dans les cas où ce terme possède une amplitude non négligeable et introduit une structure complexe dans le spectre DTX résolu en énergie (voir [105], pour le cas de l'aluminium), il reste à prouver que la fonction de diagnostic de la DTX reste envisageable.

Plasma WDM. La modélisation de la matière dense et tiède est et restera un problème compliqué. Du point de vue théorique, il n'y a pas de révolution à attendre. C'est sur le plan des modèles numériques que des efforts peuvent être faits à brève échéance. On l'a vu, un modèle d'atome moyen prenant en compte la structure ionique dans du plasma constitue un intermédiaire praticable entre les modèles simples et rapides, et les très importants temps de calcul de la DMQ. De plus ils fournissent la plupart des données nécessaires pour les spectres DTX. Pour le traitement des mélanges, il manque donc un code d'atome moyen prenant en compte la structure ionique pour un nombre arbitraire de composantes. Par ailleurs, un code d'atome moyen fournit la structure électronique nécessaire au calcul propre du terme lié-libre du facteur de structure électronique (cf. paragraphe précédent).

Calcul du spectre *ab initio*. L'amélioration du modèle de matière utilisé pour calculer les différents termes intervenant dans l'expression de Chihara du facteur de structure électronique reste intrinsèquement limitée dans ses objectifs par les hypothèses liés à l'emploi même de cette formule. Afin de s'affranchir de toutes les hypothèses relatives au comportement du plasma, la voie naturelle consiste maintenant à calculer la section efficace $\frac{d\sigma}{d\omega}(k, \omega)$ de diffusion dans un plasma dense par des techniques entièrement *ab initio*. Les temps de calcul impliqués ne pourront pas en faire un outil d'analyse de routine, mais cela apparaît nécessaire pour valider l'emploi de modèles plus simples.

Annexe

A

Modèle de mélange

Sommaire

A.1	Expression multi-composantes du facteur de structure électronique	162
A.1.1	Utilisation pour la description de différents états de charge	168

A.1 Expression multi-composantes du facteur de structure électronique

La dérivation qui suit reprend essentiellement les étapes de celle correspondant à la formule de Chihara à une composante, détaillée dans le chapitre 2. Seules les différences notables avec celle-ci seront donc mises en évidence. Cet exemple de modèle de mélange a été suggéré dans [100]. Il est repris ici avec des modifications mineures.

On s'intéresse maintenant à un plasma constitué de m espèces ioniques, indicées s , de numéro atomique Z^s et de concentration $x^s = \frac{N^s}{N}$, où N^s et $N = \sum_{s=1}^m N^s$ sont respectivement le nombre d'ions d'espèce s et le nombre total d'ions dans le volume considéré.

Afin de conserver les mêmes hypothèses de base que pour le modèle à une composante, chaque espèce, d'ionisation moyenne $Z^{*,s}$, est modélisée par N^s ions moyens possédant chacun $Z_B^s = Z^s - Z^{*,s}$ électrons liés et par $N^s Z_F^s = N^s Z^{*,s}$ électrons libres. On définit également les quantités moyennes $Z_F = \sum_{s=1}^m x^s Z_F^s$, $Z_B = \sum_{s=1}^m x^s Z_B^s$ et $Z = Z_F + Z_B$, respectivement les nombres d'électrons libres, liés et le numéro atomique moyen *par ion*.

La densité électronique totale dépendant du temps, dans l'espace réciproque, peut toujours être décomposée en ses composantes libre et liée, puis cette dernière l'est en ses contributions associées à chaque espèce. Ainsi :

$$\rho_e(k, t) = \rho_b^0(k, t) + \rho_f(k, t) = \sum_{s=1}^m \rho_b^{0,s}(k, t) + \rho_f(k, t). \quad (\text{A.1})$$

En conservant les mêmes notations qu'au chapitre 2, la densité électronique liée aux ions de l'espèce s s'écrit maintenant :

$$\rho_b^{0,s}(k, t) = \sum_{\alpha=1}^{N^s} \left(\sum_{j=1}^{Z_B^s} \exp(i\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{r}}_{j\alpha}^s(t)) \right) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_\alpha^s(t)), \quad (\text{A.2})$$

que l'on approxime par sa moyenne temporelle sur l'échelle de temps τ_{moy} :

$$\rho_b^s(k, t) = \frac{1}{\tau_{moy}} \int_{t-\tau_{moy}/2}^{t+\tau_{moy}/2} \rho_b^{0,s}(k, t') dt'. \quad (\text{A.3})$$

On obtient immédiatement, via l'approximation de Born-Openheimer, pour chaque espèce s , la densité électronique liée comme produit du facteur de forme ionique correspondant $f_I^s(k)$ et de la densité ionique $\rho_I^s(k, t)$, de même que dans le cas à une composante :

$$\rho_b^s(k, t) = f_I^s(k) \rho_I^s(k, t), \quad (\text{A.4})$$

avec

$$f_I^s(k) = \left\langle \sum_{j=1}^{Z_B^s} \exp(i\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{r}}_{j\alpha}^s(t)) \right\rangle \quad (\text{A.5})$$

et

$$\rho_I^s(k) = \sum_{\alpha=1}^{N^s} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_\alpha^s(t)). \quad (\text{A.6})$$

Les différents termes de la fonction de diffusion intermédiaire s'écrivent alors $I^{tot}(k, t) = (a) + (b) + (c)$ avec :

$$(a) = \left\langle \sum_{s=1}^m \rho_b^s(k, t) \sum_{r=1}^m \rho_b^{r*}(k, 0) \right\rangle$$

$$(b) = (b_1) + (b_2) = \left\langle \rho_f(k, t) \sum_{s=1}^m \rho_b^{s*}(k, 0) \right\rangle + \left\langle \sum_{s=1}^m \rho_b^s(k, t) \rho_f^*(k, 0) \right\rangle,$$

et

$$(c) = \left\langle \rho_f(k, t) \rho_f^*(k, 0) \right\rangle.$$

Les définitions des diverses fonctions de diffusion intermédiaires sont naturellement déduites de celles du cas à une espèce. $F_{ee}(k, t)$ conserve la même expression.

$$F_{ee}(k, t) = \frac{1}{Z_F N} \left\langle \rho_f(k, t) \rho_f^*(k, 0) \right\rangle \quad (\text{A.7})$$

$$F_{eI}^s(k, t) = \frac{1}{\sqrt{Z_F^s N^s}} \left\langle \rho_I^s(k, t) \rho_f^*(k, 0) \right\rangle \quad (\text{A.8})$$

$$F_{II}^{rs}(k, t) = \frac{1}{\sqrt{N^r N^s}} \sum_{\alpha=1}^{N^s} \sum_{\beta=1}^{N^r} \left\langle \exp \left[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_{\alpha}^s(t) - \mathbf{R}_{\beta}^r(0)) \right] \right\rangle \quad (\text{A.9})$$

$$F_S^s(k, t) = \left\langle \exp \left[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_{\alpha}^s(t) - \mathbf{R}_{\alpha}^s(0)) \right] \right\rangle \quad (\text{A.10})$$

$$F_{ce}^s(k, t) = \frac{1}{Z_B^s} \left\langle \rho_B^s(k, t) \rho_B^{s*}(k, 0) \right\rangle \quad (\text{A.11})$$

$$\text{où } \rho_B^s(k, t) = \sum_{j=1}^{Z_B^s} \exp \left(i\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{r}}_{j\alpha}^s(t) \right).$$

Pour expliciter le premier terme de $I^{tot}(k, t)$, l'emploi des deux hypothèses utilisées dans le cas à une composante (les dynamiques des électrons et des ions sont statistiquement indépendantes, de même que celles des électrons liés à deux ions différents) permet d'écrire :

$$\begin{aligned} (a) &= \sum_{r,s=1}^m \sum_{\alpha=1}^{N^s} \sum_{\beta=1}^{N^r} \left\langle f_I^s(k, t) f_I^r(k, t) \exp \left[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_{\alpha}^s(t) - \mathbf{R}_{\beta}^r(0)) \right] \right\rangle \\ &\quad - \sum_{s=1}^m \sum_{\alpha=1}^{N^s} |f_I^s(k, t)|^2 \left\langle \exp \left[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_{\alpha}^s(t) - \mathbf{R}_{\alpha}^s(0)) \right] \right\rangle \\ &\quad + \sum_{s=1}^m \sum_{\alpha=1}^{N^s} \left\langle \left(\sum_{j=1}^{Z_B^s} \exp \left(i\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{r}}_{j\alpha}^s(t) \right) \right) \left(\sum_{k=1}^{Z_B^s} \exp \left(-i\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{r}}_{k\alpha}^r(0) \right) \right) \right\rangle \\ &\quad \left\langle \exp \left[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_{\alpha}^s(t) - \mathbf{R}_{\alpha}^s(0)) \right] \right\rangle \\ &= \sum_{r,s=1}^m \sqrt{N^s N^r} f_I^s(k) f_I^r(k) F_{II}^{rs}(k, t) \\ &\quad - \sum_{s=1}^m N^s |f_I^s(k)|^2 F_S^s(k, t) \\ &\quad + \sum_{s=1}^m N^s Z_B^s F_{ce}^s(k, t) F_S^s(k, t). \end{aligned}$$

Pour les termes (b_i) , on obtient directement

$$(b_2) = \sum_{s=1}^m N^s \sqrt{Z_F^s} F_{eI}^s(k, t) f_I^s(k, t), \quad (\text{A.12})$$

et les mêmes arguments de symétrie assurent toujours $(b_2) = (b_1)$. De même le dernier terme prend la forme :

$$(c) = Z_F N F_{ee}(k, t). \quad (\text{A.13})$$

Leur somme est la fonction de diffusion intermédiaire :

$$\begin{aligned} I^{tot}(k, t) = & \sum_{r,s=1}^m \sqrt{N^s N^r} f_I^s(k) f_I^r(k) F_{II}^{rs}(k, t) \\ & + \sum_{s=1}^m N^s \left[Z_B^s F_{ce}^s(k, t) - |f_I^s(k)|^2 \right] F_S^s(k, t) \\ & + Z_F N F_{ee}(k, t) + \sum_{s=1}^m 2N^s \sqrt{Z_F^s F_{eI}^s(k, t)} f_I^s(k), \end{aligned}$$

dont la transformée de Fourier par rapport à la variable temporelle est le FSD électronique total :

$$\begin{aligned} S_{ee}^{tot}(k, \omega) = & \sum_{r,s=1}^m \sqrt{x^s x^r} f_I^s(k) f_I^r(k) S_{II}^{rs}(k, \omega) \\ & + \sum_{s=1}^m x^s Z_B^s \int_{-\infty}^{+\infty} S_{ce}^s(k, \omega - \omega') S_S^s(k, \omega') d\omega' \\ & - \sum_{s=1}^m x^s |f_I^s(k)|^2 S_S^s(k, \omega) + Z_F S_{ee}(k, \omega) + \sum_{s=1}^m 2x^s \sqrt{Z_F^s S_{eI}^s(k, \omega)} f_I^s(k). \end{aligned}$$

qui peut être réécrit (en définissant $\tilde{S}_{ce}^s(k, \omega) = S_{ce}^s(k, \omega) - \frac{|f_I^s(k)|^2}{Z_B^s} \delta(\omega)$) :

$$\begin{aligned} S_{ee}^{tot}(k, \omega) = & \sum_{r,s=1}^m \sqrt{x^r x^s} f_I^s(k) f_I^r(k) S_{II}^{rs}(k, \omega) \\ & + \sum_{s=1}^m x^s Z_B^s \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{S}_{ce}^s(k, \omega - \omega') S_S^s(k, \omega') d\omega' \\ & + Z_F S_{ee}(k, \omega) + \sum_{s=1}^m 2x^s \sqrt{Z_F^s S_{eI}^s(k, \omega)} f_I^s(k). \quad (\text{A.14}) \end{aligned}$$

Dans le plasma à plusieurs composantes, la quantité $\mathcal{F}_t \left[\frac{1}{N} \sum_{i,j=1}^N \langle \exp[i\mathbf{k} \cdot (R_i(t) - R_j(0))] \rangle \right]$ reste définie et peut être interprétée comme le facteur de structure ion-ion moyen $S_{II}(k, \omega)$.

De même, le facteur de structure moyen électron-ion est défini par $S_{eI}(k, \omega) = \mathcal{F}_t \left[\frac{1}{\sqrt{Z_F} N} \langle \rho_I(k, t) \rho_f^*(k, 0) \rangle \right]$.

On vérifie facilement que ces deux facteurs de structure moyens sont reliés aux facteurs de structure partiels précédemment définis par les relations :

$$S_{II}(k, \omega) = \sum_{r,s=1}^m \sqrt{x^r x^s} S_{II}^{rs}(k, \omega) \quad (\text{A.15})$$

$$S_{eI}(k, \omega) = \sum_{s=1}^m \sqrt{\frac{Z_F^s}{Z_F}} x^s S_{eI}^s(k, \omega). \quad (\text{A.16})$$

Ces deux grandeurs permettent de définir une densité électronique polarisée moyenne $\rho(k)$ via

$$S_{ee}(k, \omega) = \frac{|\rho(k)|^2}{Z_F} S_{II}(k, \omega) + S_{ee}^0(k, \omega) \quad (\text{A.17})$$

$$S_{eI}(k, \omega) = \frac{\rho(k)}{\sqrt{Z_F}} S_{II}(k, \omega). \quad (\text{A.18})$$

L'approximation principale pour obtenir une expression multicomposantes est faite ici en prenant l'expression RPA [106] des facteurs de structure statiques partiels pour les exprimer à partir des facteurs de structure moyens :

$$\hat{S}_{II}^{rs}(k) = \delta_{rs} + \sqrt{x^r x^s} [S_{II}(k) - 1] \quad (\text{A.19})$$

$$\hat{S}_{eI}^s(k) = \sqrt{\frac{Z_F^s}{Z_F}} S_{eI}(k), \quad (\text{A.20})$$

dont on constate qu'il vérifient bien (A.15) et (A.16), avec $\hat{S}_{II}^{rs}(k, \omega) = \hat{S}_{II}^{rs}(k) \delta(\omega)$ and $\hat{S}_{eI}^s(k, \omega) = \hat{S}_{eI}^s(k) \delta(\omega)$.

En injectant (A.19) et (A.20) dans l'expression (A.14) de $S_{ee}^{tot}(k, \omega)$, le premier terme prend la forme :

$$\begin{aligned} \sum_{r,s=1}^m \sqrt{x^r x^s} f_I^s(k) f_I^r(k) \hat{S}_{II}^{rs}(k, \omega) &= \left(\sum_{s=1}^m x^s f_I^s(k) \right)^2 (S_{II}(k) - 1) \delta(\omega) \\ &+ \sum_{s=1}^m x^s (f_I^s(k))^2 \delta(\omega), \end{aligned}$$

et les deux derniers :

$$Z_F S_{ee}(k, \omega) + \sum_{s=1}^m 2x^s \sqrt{Z_F^s} \hat{S}_{eI}^s(k, \omega) f_I^s(k) = Z_F S_{ee}^0(k, \omega) + S_{II}(k) \left[(\rho(k))^2 + \sum_{s=1}^m 2x^s \rho(k) f_I^s(k) \right] \delta(\omega).$$

On aboutit alors, en regroupant les termes, à une expression du FSD électronique total similaire à l'expression obtenue pour un plasma à une composante :

$$S_{ee}^{tot}(k, \omega) = [\bar{f}_I(k) + \rho(k)]^2 \bar{S}_{ii}(k, \omega) + Z_F S_{ee}^0(k, \omega) + \bar{S}_{ce}(k, \omega)$$

où l'on a fait usage des définitions suivantes :

$$\bar{S}_{II}(k, \omega) = \left[S_{II}(k) + \frac{\sum_{s=1}^m x^s (f_I^s(k))^2 - (\bar{f}_I(k))^2}{[\bar{f}_I(k) + \rho(k)]^2} \right] \delta(\omega), \quad (\text{A.21})$$

$$\bar{f}_I(k) = \sum_{s=1}^m x^s f_I^s(k), \quad (\text{A.22})$$

et

$$\bar{S}_{ce}(k, \omega) = \sum_{s=1}^m x^s Z_B^s \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{S}_{ce}^s(k, \omega - \omega') S_S^s(k, \omega') d\omega'. \quad (\text{A.23})$$

CQFR: Pour les plasmas constitués de plusieurs espèces, sous l'unique hypothèse supplémentaire de la validité de l'expression RPA des facteurs de structure partiels à partir des facteurs de structure moyens, on aboutit à une expression du FSD électronique total similaire dans sa forme à celle obtenue pour un plasma à une composante :

$$S_{ee}^{tot}(k, \omega) = [\bar{f}_I(k) + \rho(k)]^2 \bar{S}_{ii}(k, \omega) + Z_F S_{ee}^0(k, \omega) + \bar{S}_{ce}(k, \omega).$$

Dans cette expression, le facteur de forme ionique est remplacé par un facteur de forme moyen

$$\bar{f}_I(k) = \sum_{s=1}^m x^s f_I^s(k), \quad (\text{A.24})$$

et au facteur de structure ionique est adjoit un terme correctif

$$\bar{S}_{II}(k) = S_{II}(k) + \frac{\sum_{s=1}^m x^s (f_I^s(k))^2 - (\bar{f}_I(k))^2}{[\bar{f}_I(k) + \rho(k)]^2}. \quad (\text{A.25})$$

A.1.1 Utilisation pour la description de différents états de charge

L'emploi du modèle hydrogénique écranté pour décrire le facteur de forme des ions, conjointement à la décomposition de Chihara pour écrire le FSD électronique, impose de se restreindre à des états de charge entiers. En effet le modèle hydrogénique décrit $f_I(k)$ comme une somme de Z_B fonctions d'ondes (une par électron). Z_B doit donc être entier. Tel n'est pas le cas dans l'expression de Chihara où chaque espèce est décrite par un ion moyen d'ionisation donnée et non pas par une distribution de charge.

L'emploi d'un modèle de mélange permet de résoudre le problème et de décrire une distribution de charge dans le plasma et donc d'obtenir une ionisation moyenne quelconque comme un mélange d'ions réels.

La distribution de charge à l'ETL peut être évaluée à partir de l'équation de Saha. Dans ATHOS, qui ne contient pas de physique atomique, les grandeurs nécessaires à un tel calcul ne sont disponibles. Une espèce ionique d'ionisation moyenne quelconque Z^* est décrite comme un mélange binaire d'ions possédant $E(Z^*)$ et $E(Z^*) + 1$ électrons ($E(X)$ représente la partie entière de X). Leurs concentrations relatives sont calculées pour que l'ionisation moyenne soit bien Z^* .

Bibliographie

- [1] V. FORTOV, I. IAKUBOV, and A. KHRAPAK, *Physics of Strongly Coupled Plasma*, Oxford University Press, USA, 2006.
- [2] R. DRAKE, *High-Energy-Density Physics*, Heidelberg, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2006. 534, 2006.
- [3] W. HUBBARD, T. GUILLOT, J. LUNINE, A. BURROWS, D. SAUMON, M. MARLEY, and R. FREEDMAN, *Physics of Plasmas* **4**, 2011 (1997).
- [4] J. BAILEY, G. ROCHAU, C. IGLESIAS, J. ABDALLAH JR, J. MACFARLANE, I. GOLOVKIN, P. WANG, R. MANCINI, P. LAKE, T. MOORE, et al., *Physical Review Letters* **99**, 265002 (2007).
- [5] G. CHABRIER and A. POTEKHIN, *Physical Review E* **58**, 4941 (1998).
- [6] B. MILITZER and E. POLLOCK, *Physical Review B* **71**, 134303 (2005).
- [7] W. NELLIS, M. ROSS, and N. HOLMES, *Science* **269**, 1249 (1995).
- [8] P. CELLIERS, G. COLLINS, L. DA SILVA, D. GOLD, R. CAUBLE, R. WALLACE, M. FOORD, and B. HAMMEL, *Physical Review Letters* **84**, 5564 (2000).
- [9] M. KNUDSON, D. HANSON, J. BAILEY, C. HALL, J. ASAY, and W. ANDERSON, *Physical Review Letters* **87**, 225501 (2001).
- [10] R. LIBOFF, *Journal of Applied Physics* **56**, 2530 (1984).
- [11] S. LYON and J. JOHNSON, *Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM, LA-UR-92-3407* (1992).
- [12] Y. INUBUSHI, H. NISHIMURA, M. OCHIAI, S. FUJIOKA, T. JOHZAKI, K. MIMA, T. KAWAMURA, S. NAKAZAKI, T. KAI, S. SAKABE, et al., *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **99**, 305 (2006).
- [13] T. FUJIMOTO and A. IWAMAE, *Plasma Polarization Spectroscopy*, Springer Verlag, 2007.
- [14] P. PLATZMAN and P. WOLFF, *Waves and Interactions in Solid State Plasmas*, Academic Press New York, 1973.
- [15] L. LANDAU and E. LIFCHITZ, *Physique Statistique, 4ème édition*, Mir-Ellipses, 1996.
- [16] O. LANDEN, S. GLENZER, M. EDWARDS, R. LEE, G. COLLINS, R. CAUBLE, W. HSING, and B. HAMMEL, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **71**, 465 (2001).

- [17] R. MORE, K. WARREN, D. YOUNG, and G. ZIMMERMAN, *Physics of Fluids* **31**, 3059 (1988).
- [18] B. HENKE, E. GULLIKSON, and J. DAVIS, *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **54**, 181 (1993).
- [19] B. HENKE, X-ray Transmission of a Solid Calculator (http://henke.lbl.gov/optical_constants/), 1993.
- [20] K. BOWLES, *Physical Review Letters* **1**, 454 (1958).
- [21] J. FEJER, *Canadian Journal of Physics* **38**, 1114 (1960).
- [22] M. ROSENBLUTH and N. ROSTOKER, *Physics of Fluids* **5**, 776 (1962).
- [23] E. SALPETER, *Physical Review* **120**, 1528 (1960).
- [24] E. SALPETER, *Physical Review* **122**, 1663 (1961).
- [25] B. TANENBAUM, *Physical Review* **171**, 215 (1968).
- [26] E. FÜNFER, B. KRONAST, and H. KUNZE, *Physical Letters* **5**, 125 (1963).
- [27] D. EVANS and J. KATZENSTEIN, *Reports on Progress in Physics* **32**, 207 (1969).
- [28] F. PERKINS, E. SALPETER, and K. YNGVESSON, *Physical Review Letters* **14**, 579 (1965).
- [29] S. RAMSDEN and W. DAVIES, *Physical Review Letters* **16**, 303 (1966).
- [30] O. LANDEN and R. WINFIELD, *Physical Review Letters* **54**, 1660 (1985).
- [31] S. GLENZER, G. GREGORI, F. ROGERS, D. FROULA, S. POLLAINÉ, R. WALLACE, and O. LANDEN, *Physics of Plasmas* **10**, 2433 (2003).
- [32] A. RAVASIO, G. GREGORI, A. BENUZZI-MOUNAIX, J. DALIGAULT, A. DELSERIEYS, A. FAENOV, B. LOUPIAS, N. OZAKI, M. RABEC LE GLOAHEC, T. PIKUZ, et al., *Physical Review Letters* **99**, 135006 (2007).
- [33] A. RAVASIO, *Nouveaux diagnostics pour l'étude de la matière dense et chaude : application aux cibles comprimées par choc laser*, PhD thesis, Ecole Polytechnique, 2007.
- [34] E. NARDI, *Physical Review A* **43**, 1977 (1991).
- [35] E. NARDI, Z. ZINAMON, D. RILEY, and N. WOOLSEY, *Physical Review E* **57**, 4693 (1998).
- [36] G. GREGORI, S. GLENZER, F. ROGERS, S. POLLAINÉ, O. LANDEN, C. BLANCARD, G. FAUS-SURIER, P. RENAUDIN, S. KÜHLBRODT, and R. REDMER, *Physics of Plasmas* **11**, 2754 (2004).
- [37] D. RILEY, J. ANGULO GARETA, A. BENUZZI-MOUNAIX, M. ESPOSITO, E. GARCIA SAIZ, G. GREGORI, F. KHATTAK, M. KOENIG, M. LAMB, D. MCSHERRY, et al., *Plasma Physics and Controlled Fusion* **47**, B491 (2005).
- [38] S. GLENZER, O. LANDEN, P. NEUMAYER, R. LEE, K. WIDMANN, S. POLLAINÉ, R. WALLACE, G. GREGORI, A. HÖLL, T. BORNATH, et al., *Physical Review Letters* **98**, 65002 (2007).

- [39] E. GARCIA SAIZ, G. GREGORI, D. GERICKE, J. VORBERGER, B. BARBREL, R. CLARKE, R. FREEMAN, S. GLENZER, F. KHATTAK, M. KOENIG, et al., *Nature Physics* **4**, 940 (2008).
- [40] A. COMPTON, *Physical Review* **21**, 483 (1923).
- [41] P. EISENBERGER and P. PLATZMAN, *Physical Review A* **2**, 415 (1970).
- [42] Y. MIZUNO and Y. OHMURA, *Journal of the Physical Society of Japan* **22**, 445 (1967).
- [43] P. PLATZMAN and N. TZOAR, *Physical Review* **139**, 410 (1965).
- [44] J. CHIHARA, *Journal of Physics F : Metal Physics* **17**, 295 (1987).
- [45] J. CHIHARA, *Journal of Physics : Condensed Matter* **12**, 231 (2000).
- [46] G. GREGORI, S. GLENZER, W. ROZMUS, R. LEE, and O. LANDEN, *Physical Review E* **67**, 26412 (2003).
- [47] G. GREGORI, S. GLENZER, and O. LANDEN, *Journal of Physics A Mathematical and General* **36**, 5971 (2003).
- [48] G. GREGORI, S. GLENZER, and O. LANDEN, *Physical Review E* **74**, 26402 (2006).
- [49] G. GREGORI, A. RAVASIO, A. HÖLL, S. GLENZER, and S. ROSE, *High Energy Density Physics* **3**, 99 (2007).
- [50] K. WÜNSCH, P. HILSE, M. SCHLANGES, and D. GERICKE, *Physical Review E* **77**, 56404 (2008).
- [51] R. THIELE, T. BORNATH, C. FORTMANN, A. HOLL, R. REDMER, H. REINHOLZ, G. ROPKE, A. WIERLING, S. H. GLENZER, and G. GREGORI, *Physical Review E* **78**, 026411 (2008).
- [52] J. JACKSON, *Classical Electrodynamics, Second Edition*, Wiley, New York, 1975.
- [53] W. HEITLER, *The Quantum Theory of Radiation*, Courier Dover Publications, 1984.
- [54] J. CHIHARA, *Journal of Physics C : Solid State Physics* **17**, 1633 (1984).
- [55] S. ICHIMARU, *Statistical Plasma Physics. Vol. 1 : Basic principles*, Westview Press, 1994.
- [56] N. ASHCROFT and N. MERMIN, *Solid State Physics*, Harcourt College Publishers, 1976.
- [57] S. ICHIMARU, *Statistical Plasma Physics. Vol. 2 : Condensed Plasmas*, Westview Press, 1991.
- [58] A. SELCHOW, G. RÖPKE, A. WIERLING, H. REINHOLZ, T. PSCHIWUL, and G. ZWICKNAGEL, *Physical Review E* **64**, 56410 (2001).
- [59] N. MERMIN, *Physical Review B* **1**, 2362 (1970).
- [60] R. DANDREA, N. ASHCROFT, and A. CARLSSON, *Physical Review. B, Condensed Matter* **34**, 2097 (1986).
- [61] D. GELDART and S. VOSKO, *Canadian Journal of Physics* **44**, 2137 (1966).
- [62] K. SINGWI, M. TOSI, and A. SJÖLANDER, *Il Nuovo Cimento B (1965-1970)* **54**, 160 (1968).

- [63] S. TANAKA, S. MITAKE, X. YAN, and S. ICHIMARU, *Physical Review A* **32**, 1779 (1985).
- [64] S. ICHIMARU, S. MITAKE, S. TANAKA, and X. YAN, *Physical Review A* **32**, 1768 (1985).
- [65] S. ICHIMARU, *Basic Principles of Plasma Physics : A Statistical Approach*, Addison-Wesley, 1973.
- [66] Y. ARKHIPOV and A. DAVLETOV, *Physics Letters A* **247**, 339 (1998).
- [67] C. DEUTSCH, *Phys. Lett. A* **60**, 317 (1977).
- [68] L. ORNSTEIN and F. ZERNIKE, Solution of an Arbitrary Function of Time, in *Proc. Acad. Sci., Amsterdam*, volume 17, p. 793, 1914.
- [69] J. HANSEN and I. McDONALD, *Theory of Simple Liquids*, Academic, New York, 1986.
- [70] J. PERCUS and G. YEVICK, *Physical Review* **110**, 1 (1958).
- [71] G. ZERAH and J. HANSEN, *The Journal of Chemical Physics* **84**, 2336 (1986).
- [72] J. VAN LEEUWEN, J. GROENEVELD, and J. DE BOER, *Physica* **25** (1959).
- [73] R. PALMER and J. WEEKS, *The Journal of Chemical Physics* **58**, 4171 (1973).
- [74] H. SINGH and A. HOLZ, *Physical Review A* **28**, 1108 (1983).
- [75] S. GALAM and J. HANSEN, *Physical Review A* **14**, 816 (1976).
- [76] L. PAULING and J. SHERMAN, *Zeitschrift fur Kristallographie* **1**, 81 (1932).
- [77] G. FAUSSURIER, *Traitement statistique des propriétés spectrales des plasmas à l'équilibre thermodynamique local dans le cadre du modèle hydrogénique écranté*, PhD thesis, Paris XI Orsay, 1996.
- [78] D. LIBERMAN, *Physical Review B* **20**, 4981 (1979).
- [79] C. BLANCARD and G. FAUSSURIER, *Physical Review E* **69**, 16409 (2004).
- [80] M. DHARMA-WARDANA and F. PERROT, *Phys. Rev. A* **45**, 5883 (1992).
- [81] P. HOHENBERG and W. KOHN, *Physical Review* **136**, B864 (1964).
- [82] W. KOHN and L. SHAM, *Physical Review* **140**, 1133 (1965).
- [83] A. D. BECKE, *Phys. Rev. A* **38**, 3098 (1988).
- [84] R. CAR and M. PARRINELLO, *Physical Review Letters* **55**, 2471 (1985).
- [85] D. FRENKEL and B. SMIT, *Understanding molecular simulation : from algorithms to applications*, Academic Pr, 2002.
- [86] <http://www.abinit.org/>.
- [87] Y. ZEL'DOVICH, *Physics of Shock Waves and High-Temperature Hydrodynamic Phenomena*, Dover Publications, 2002.

- [88] M. URRY, G. GREGORI, O. LANDEN, A. PAK, and S. GLENZER, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **99**, 636 (2006).
- [89] A. PAK, G. GREGORI, J. KNIGHT, K. CAMPBELL, D. PRICE, B. HAMMEL, O. LANDEN, and S. GLENZER, *Review of Scientific Instruments* **75**, 3747 (2004).
- [90] K. OSBORN and T. CALLCOTT, *Review of Scientific Instruments* **66**, 3131 (1995).
- [91] D. STRICKLAND and G. MOUROU, *Opt. Comm.* **56**, 219 (1985).
- [92] D. A. PEPLER and S. PARADOWSKI, *Central Laser Facility Annual Report 2005/2006* (2006).
- [93] E. GARCIA SAIZ, F. KHATTAK, G. GREGORI, S. BANDYOPADHYAY, R. CLARKE, B. FELL, R. FREEMAN, J. JEFFRIES, D. JUNG, M. NOTLEY, et al., *Review of Scientific Instruments* **78**, 095101 (2007).
- [94] M. KOENIG, F. PHILIPPE, A. BENUZZI-MOUNAIX, D. BATANI, M. TOMASINI, E. HENRY, and T. HALL, *Physics of Plasmas* **10**, 3026 (2003).
- [95] J. MACFARLANE, I. GOLOVKIN, and P. WOODRUFF, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **99**, 381 (2006).
- [96] G. KRESSE and J. HAFNER, *Physical Review B* **47**, 558 (1993).
- [97] G. KRESSE and J. HAFNER, *Physical Review B* **49**, 14251 (1994).
- [98] G. KRESSE and J. FURTHMÜLLER, *Physical Review B* **54**, 11169 (1996).
- [99] P. HOLM and R. RIBBERFORS, *Physical Review A* **40**, 6251 (1989).
- [100] G. GREGORI, S. GLENZER, H. CHUNG, D. FROULA, R. LEE, N. MEEZAN, J. MOODY, C. NIEMANN, O. LANDEN, B. HOLST, et al., *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **99**, 225 (2006).
- [101] D. HICKS, *Bulletin of American Physical Society* **8**, 234 (2004).
- [102] A. RAVASIO, M. KOENIG, S. LE PAPE, A. BENUZZI-MOUNAIX, H. PARK, C. CECCHETTI, P. PATEL, A. SCHIAVI, N. OZAKI, A. MACKINNON, et al., *Physics of Plasmas* **15**, 060701 (2008).
- [103] E. BRAMBRINK, H. WEI, B. BARBREL, P. AUDEBERT, A. BENUZZI-MOUNAIX, T. BOEHLY, T. ENDO, C. GREGORY, T. KIMURA, R. KODAMA, N. OZAKI, H. PARK, and M. KOENIG, *Physical Review E* **80**, 56407 (2009).
- [104] E. BRAMBRINK, H. G. WEI, B. BARBREL, P. AUDEBERT, A. BENUZZI-MOUNAIX, T. BOEHLY, T. ENDO, C. GREGORY, T. KIMURA, R. KODAMA, N. OZAKI, H.-S. PARK, M. RABEC LE GLOAHEC, and M. KOENIG, *Physics of Plasmas* **16**, 033101 (2009).
- [105] S. SAHOO, G. GRIBAKIN, G. SHABBIR NAZ, J. KOHANOFF, and D. RILEY, *Physical Review E* **77**, 46402 (2008).
- [106] H. TOTSUJI, *Physical Review A* **38**, 5440 (1988).