

# **MODÈLE COLLISIONNEL RADIATIF EN PRESENCE DE TURBULENCES PLASMA POUR L'ARGON : APPROCHE STOCHASTIQUE**

**SARRAT Mathieu**

**Dirigé par Fabrice Catoire, chargé de recherche CNRS**

Centre Lasers Intenses et Applications

Avril – Mai 2013

## **I - Motivation et contexte**

A l'heure où les besoins en énergie de l'humanité croissent de jour en jour, la recherche de nouvelles énergies et le développement de moyens technologiques visant à les produire de manière économiquement rentable sont des enjeux majeurs pour l'humanité. Une des voies vers laquelle nous pouvons nous tourner est la maîtrise des réactions de fusion nucléaire, qui offre des perspectives d'abondance énergétique alliées à une relative sécurité et à un faible impact sur la nature.

Pour produire une réaction de fusion nucléaire, il est indispensable de porter les réactifs à de très hautes températures (de l'ordre de 100 millions de Kelvin) afin de vaincre la barrière coulombienne répulsive séparant les deux noyaux. A cette température, la matière est sous forme de plasma : un mélange d'ions, d'atomes neutres et d'électrons libres. Pour réaliser les conditions requises pour la fusion, il est nécessaire de confiner la matière. Plusieurs procédés sont à l'heure actuelle envisagés pour réaliser cela. L'un d'eux est le confinement magnétique, qui consiste à utiliser les lignes d'un puissant champ magnétique pour guider, et donc confiner dans un volume donné, les ions et les électrons constituant le plasma. Les principales caractéristiques de ce type de confinement sont la faible densité du plasma (inférieure à  $10^{20} \text{ m}^{-3}$ ) et un temps de confinement de l'ordre de quelques secondes.

Plusieurs géométries sont étudiées pour réaliser technologiquement ce confinement. La plus en vue actuellement est celle du tokamak. Sa géométrie torique permet de refermer sur elles-mêmes les lignes de champ magnétique et donc de confiner le plasma dans un anneau, mais elle implique également une non-uniformité du champ magnétique régnant dans le milieu. Ces gradients de champ provoquent des pertes de particules vers les parois de la chambre, ce qui nuit donc par définition à la qualité du confinement.

En outre, le plasma n'est pas à l'équilibre thermodynamique : il existe de forts gradients de pression, de densité et de température en son sein. Ces gradients sont responsables de phénomènes de turbulence inhérents aux plasmas magnétisés qui dominent le transport de particules et d'énergie, notamment en bord de cavité. Ces phénomènes sont source d'une grande complexité. Ils se traduisent entre autres par la formation de structures appelées « filaments plasmas » dans lesquels températures et densités, électroniques et ioniques, sont relativement constantes. Ces filaments tendent à s'aligner le long des lignes de champ magnétique. Leur étendue transversale est relativement faible, d'où leur surnom familier de « blobs ».

Les lignes de champ proches de la paroi du tokamak peuvent couper celle-ci : les particules chargées qui suivent ces lignes entrent alors en collision avec les parois, provoquant leur érosion et donc l'apparition de polluants dans le plasma qui nuisent au confinement. Les phénomènes de transport dans les régions de bord du plasma jouent donc un rôle dans la qualité du confinement. Il est important de mieux les comprendre, si on veut un jour réaliser la production d'énergie à partir de réactions de fusion nucléaire.

Parmi les diagnostics couramment employés dès lors qu'il s'agit d'analyser les bords d'un plasma de tokamak, se trouve la spectroscopie optique. Elle se prête bien à cette analyse, car la température du plasma est de l'ordre de quelques eV dans cette région, la densité étant de l'ordre de  $10^{18} \text{ m}^{-3}$ . Ces conditions permettent en effet aux atomes neutres d'émettre d'importantes quantités de photons avant qu'ils ne soient ionisés, essentiellement par collision avec les électrons libres du plasma. Elle est en outre un outil d'analyse non intrusif, c'est à dire qu'elle ne perturbe pas le comportement du milieu qu'elle étudie.

L'amplitude des raies d'émission observées permet de remonter aux populations des niveaux atomiques émetteurs. Via un modèle collisionnel-radiatif, il est possible de fournir une interprétation des résultats expérimentaux. Il permet d'acquérir une compréhension globale de la dynamique des espèces constituant le plasma.

A ce titre, il est nécessaire de dégager quels sont les processus qui dominent cette dynamique, qu'ils soient de type collisionnel (par exemple l'excitation induite par un impact d'électron) ou de type radiatif (notamment l'émission spontanée) et quels sont les états qui y contribuent de manière significative.

Deux approches sont possibles : une approche Eulérienne où la lumière émise par une région du plasma est collectée et une approche de type Lagrangienne où on collecte la lumière émise par un atome bien déterminé lors de son parcours à travers le plasma. Nous nous plaçons dans le cadre de cette seconde approche.

Ce stage se déroulera au CELIA et se basera sur des travaux déjà développés conjointement avec l'équipe DGP (Diagnostics dans les Gaz et Plasmas) du Laboratoire de Physique des Interactions Ioniques et Moléculaires (PIIM) de l'université d'Aix-Marseille. Il aura pour objectif le développement d'un modèle collisionnel radiatif stochastique afin de traiter le système considérant les quinze premiers niveaux énergétiques de l'argon neutre. Une première étape consistera à développer et à tester ce modèle dans le cas de l'hydrogène, où ce dernier sera représenté par un système fermé de trois états. Une fois le modèle stochastique maîtrisé, le cas de l'argon sera alors abordé. Nous nous intéresserons notamment à l'influence d'un paramètre caractéristique de notre modèle, la fréquence de turbulence, sur la dynamique des populations.

## II - Présentation du modèle

### a/ Équation des taux

De manière générale, on peut décrire la variation de population  $dN_a$  d'un état quantique  $|a\rangle$  donné pendant un intervalle de temps  $dt$  comme étant la somme de deux contributions : un terme source lié aux transitions aboutissant sur l'état  $|a\rangle$  et un terme de perte lié aux transitions ayant pour point de départ l'état  $|a\rangle$ . On obtient une équation bilan pour la population de l'état  $|a\rangle$  du type :

$$dN_a = \sum_{j \neq a} N_j P_{j \rightarrow a} dt - N_a \sum_{j \neq a} P_{a \rightarrow j} dt$$

où  $P_{i \rightarrow j}$  désigne le taux de transition (probabilité de transition par unité de temps) de l'état  $i$  vers l'état  $j$  et où  $N_i$  est la population de l'état  $i$ . On verra plus loin comment exprimer ces taux.

En divisant par  $dt$ , on obtient une équation différentielle, dite équation de taux, décrivant l'évolution temporelle des populations de différents états du système. L'ensemble des niveaux décrivant le système forme une base si on suppose qu'ils sont tous indépendants (une transition ne dépendant pas de la population de l'état d'arrivée mais de celle du lieu de départ). Il est important de souligner que la somme des populations  $\sum_i N_i$  est constante : en effet, le système étudié est considéré comme étant fermé.

On peut résoudre cette équation pour tous les niveaux en utilisant un formalisme matriciel. L'équation générale du modèle collisionnel radiatif (MCR) s'écrit donc sous la forme :

$$\frac{dX(t)}{dt} = M(Y(t)) X(t) \quad (2.1)$$

où  $M$  désigne la matrice des taux de transition. Elle dépend de  $Y$ , paramètre représentant de manière générale les grandeurs thermodynamiques du plasma définies au sens macroscopique, par exemple la température ou encore la densité. Ces mêmes grandeurs peuvent dépendre du temps, du fait des turbulences du plasma.

### b/ Solution stationnaire dans le cas où la température est constante

Si les grandeurs fluides du plasma évoluent lentement devant les temps caractéristiques de relaxation atomiques, seule la solution stationnaire importe car les populations ont le temps d'atteindre cette solution, d'où l'importance de sa détermination. On peut alors considérer que  $Y$  ne dépend plus du temps. La solution générale de (2.1) s'écrit dans ce cas :  $X(t) = e^{Mt} X_0$  où  $X_0$  est le vecteur contenant les populations initiales.

La somme des éléments de chaque colonne de  $M$  vaut 0 car le système est fermé, il y a donc une relation de linéarité entre les lignes. Le déterminant de  $M$  est donc nul et  $M$  possède une valeur propre nulle, dont le vecteur propre associé est l'état stationnaire que l'on note  $X_\infty$ .

Le système dans son état stationnaire n'évolue plus dans le temps, ce qui implique :

$$\frac{dX(t)}{dt} = 0 = M(Y) X_\infty ,$$

d'où l'équation à résoudre pour cet état :

$$M(Y) X_\infty = 0$$

Pour assurer la convergence aux temps longs, les autres valeurs propres de  $M$  sont nécessairement négatives.

Comme le système est supposé fermé, on a :

$$\sum_i X_i(t) = N_0$$

quelque soit l'instant considéré,  $N_0$  étant une constante représentative de la population totale. On pourra normaliser le vecteur  $X$  des populations par  $N_0$  pour avoir des valeurs comprises entre 0 et 1.  $X$  sera alors un vecteur de fractions (sans dimension) dont la somme des éléments sera égale à 1.

### c/ Implémentation des fluctuations de température via un modèle stochastique

Dans toute la suite, on négligera toute fluctuation de densité pour ne considérer que les variations aléatoires de température :  $Y$  correspondra donc à  $T$ . Ce choix est guidé par le fait que la dépendance des taux vis à vis de la densité est linéaire, contrairement à la dépendance en température. On s'attend donc à ce que les effets les plus intéressants soient liés aux fluctuations de  $T$ .

Le modèle stochastique développé est basé sur le choix suivant : les variations de  $T$  (les fluctuations) se font par sauts instantanés entre deux paliers, ces sauts étant statistiquement indépendants entre eux. En d'autres termes, la valeur de température du palier  $i$  ne dépend pas de celle du palier  $i-1$ , et ce quelque soit  $i$ . Il en va de même pour la durée de ces paliers. Cette modélisation des fluctuations est appelée stochastique.

Dans un plasma de tokamak, il existe des filaments plasma à l'intérieur desquels l'équilibre thermodynamique est réalisé et qui sont de grande taille devant celle d'un atome, ce sont les blobs évoqués dans l'introduction. Nous pouvons donc considérer un blob indicé  $i$  comme étant un thermostat, de température  $T_i$ , avec lequel un atome, se trouve en contact pendant une durée limitée, comprise entre  $t_i$  et  $t_{i+1}$ .

Au cours de son voyage dans le plasma, l'atome va de blob en blob, de façon aléatoire. Il perçoit donc des changements de température à divers instants de son parcours. Nous pouvons représenter schématiquement cette évolution par la figure 1 ci-dessous.

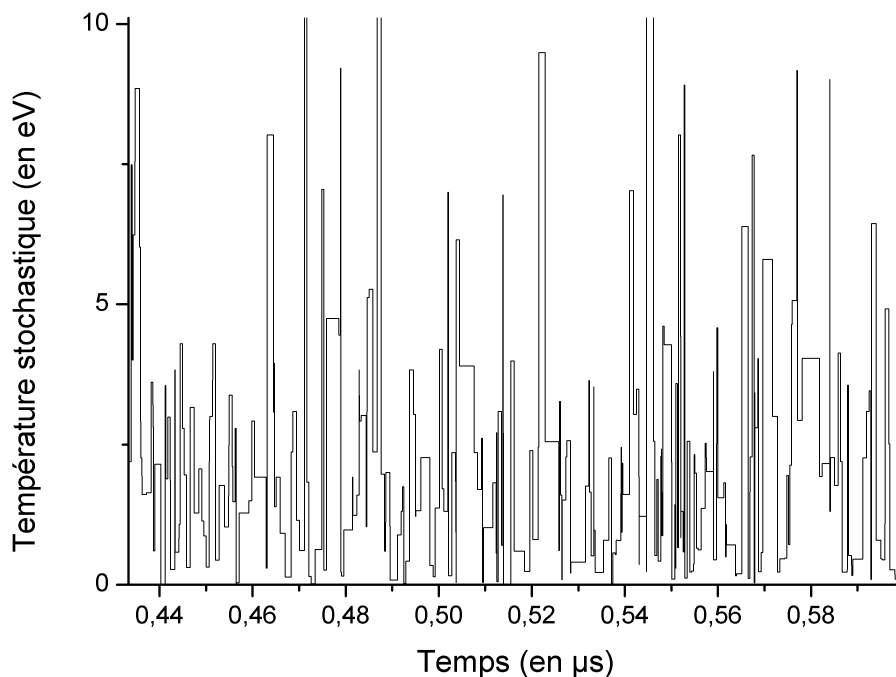


Figure n°1 : exemple d'une évolution stochastique de la température en fonction du temps

Nous souhaitons savoir comment les fluctuations de température liées à la turbulence agissent sur la valeur des populations des niveaux atomiques des atomes neutres. Il est possible de résoudre ce problème de manière analytique ou via une simulation de type Monte-Carlo. Pour la simulation, il est nécessaire de générer numériquement ces fluctuations, et donc de générer une carte de température du type de celle représentée en figure 1.

L'amplitude des sauts et la durée des paliers sont distribuées respectivement par la « probability density function » (PDF) et par la « waiting time distribution » (WTD). Ces deux distributions sont statistiquement indépendantes l'une de l'autre dans le modèle utilisé ici et il est important de noter qu'elles peuvent être déterminées expérimentalement.

La carte représentée en figure 1 a été obtenue pour une PDF et une WTD de type exponentielle :

$$\varphi(t) = \nu \exp(-\nu t) \quad (\text{WTD})$$

$$p(T) = \frac{1}{\langle T \rangle} \exp\left(-\frac{T}{\langle T \rangle}\right) \quad (\text{PDF})$$

pour les valeurs numériques suivantes :  $\nu = 1500 \mu\text{s}^{-1}$  pour la fréquence de turbulence (inverse du temps caractéristique des variations de  $Y$ ) et  $\langle T \rangle = 2 \text{ eV}$  pour la température moyenne.

Une comparaison des distributions simulées via la méthode de Monte-Carlo avec les distributions initiales a été faite. Un bon accord commence à apparaître dès lors qu'environ 1 million de valeurs de température et de paliers sont générées. Si on veut obtenir un meilleur accord, il faudrait augmenter considérablement le nombre de paliers.

*Remarque :*

En réalité, le choix de la WTD découle de celui de la fonction d'auto-corrélation des paliers  $C(t)$ , définie telle que :

$$C(t) = \frac{\langle \delta Y(t) \delta Y(0) \rangle}{\langle \delta Y(0)^2 \rangle} = \int_t^\infty dt \varphi(t)$$

$$\text{où } \delta Y(t) = Y(t) - \langle Y(t) \rangle \quad \text{pour tout } t.$$

On définit alors l'inverse de la fréquence de turbulence  $\nu$  comme étant :

$$\int_0^\infty C(t) dt = \int_0^\infty t \varphi(t) dt = \langle t \rangle = \frac{1}{\nu}$$

Cette fréquence correspond donc à l'inverse de la durée moyenne des paliers.

#### d/ Résolution de l'équation des taux dans le cas où la température fluctue

Nous faisons l'hypothèse que les processus sont ergodiques, de sorte que nous pouvons assimiler la moyenne temporelle de  $X(t)$  sur une carte unique pour des temps longs à la moyenne de  $X(t)$  sur  $N$  cartes de température, pour  $N$  grand et à  $t$  grand.

La première méthode possible est une simulation de type Monte-Carlo : les paliers sont générés selon la PDF et la WTD. L'équation des taux (2.1) est résolue via la méthode d'Euler palier après palier, au fur et à mesure que ceux-ci sont générés, et ce pendant une durée de calcul  $t_{\text{max}}$  choisie au préalable. Le choix de  $t_{\text{max}}$  est important car il faut que l'état stationnaire au sens statistique soit atteint avant cet instant. On entend par « état stationnaire au sens statistique » le fait que la valeur moyenne d'ensemble de  $X$ , notée  $\langle X(t) \rangle$  ne varie plus au cours du temps.

On peut également trouver une solution analytique au problème pour l'état stationnaire au sens statistique, ce qui nous fournit une deuxième méthode et un moyen d'évaluer la qualité de la simulation Monte-Carlo.

La solution de l'équation (2.1) s'écrit sous la forme ci-dessous :

$$X(t) = G(t, 0) X_0$$

où  $X_0$  désigne le vecteur contenant les valeurs des populations initiales et  $G(t, 0)$  la fonction de Green définie comme étant :

$$\frac{\partial G}{\partial t}(t, t') = M(t) G(t, t')$$

avec  $G(t, t') = G(t - t')$  et  $G(t, t) = Id$ , où  $Id$  est la matrice identité.

Dans notre cas, nous pouvons écrire  $G(t, 0)$  comme suit :

$$G(t, 0) = \prod_{i=0}^{N-1} G(t_{i+1}, t_i)$$

où  $G(t_{i+1}, t_i)$  est la fonction de Green solution de (2,1) pour un palier donné (donc pour une température  $T$  constante entre  $t_{i+1}$  et  $t_i$ ). Compte tenu de l'indépendance des différentes valeurs de  $T$  (et donc de  $M$ ), on peut écrire la moyenne de  $G$  sur une configuration donnée de durées de paliers (donc sur un ensemble de  $t_i$  donnés) comme suit :

$$\langle G \rangle_N(t) = \prod_{i=0}^{N-1} \langle G(t_{i+1}, t_i) \rangle = \prod_{i=0}^{N-1} G_{ST}(t_{i+1}, t_i)$$

où  $ST$  désigne stationnaire, au sens statistique :  $G_{ST}$  désigne une valeur moyenne, sur la PDF (donc sur les réalisations), puisque même si on a fixé les durées de chaque palier, nous n'avons pas fixé la valeur de  $T$  de ceux-ci :

$$G_{ST}(t_{i+1}, t_i) = \int dY p(Y) G(t_{i+1} - t_i)$$

Il faut ensuite considérer l'ensemble de toutes les configurations possibles pour les  $t_i$ . La probabilité de ne pas avoir de saut entre 0 et  $t$  s'écrit :

$$\Phi(t) = 1 - \int_0^t \varphi(t') dt'$$

$\langle G \rangle(t)$  peut alors s'écrire sous la forme d'une somme de probabilités (de ne pas avoir de saut, d'avoir un saut en  $t_1$ , d'avoir un saut en  $t_1$  et en  $t_2$ , ainsi de suite) :

$$\begin{aligned} \langle G \rangle(t) = & \Phi(t) G_{ST}(t, 0) + \int_0^t \Phi(t - t_1) G_{ST}(t - t_1) \varphi(t_1) dt_1 G_{ST}(t_1) \\ & + \int_0^t \int_{t_1}^t \Phi(t - t_2) G_{ST}(t - t_2) \varphi(t_2) dt_2 G_{ST}(t_2 - t_1) \varphi(t_1) dt_1 G_{ST}(t_1) + \dots \end{aligned}$$

qui se réécrit sous la forme plus compacte qui suit :

$$\langle G \rangle(t) = \Phi(t) G_{ST}(t) + \int_0^t dt_1 \langle G \rangle(t - t_1) \varphi(t_1) G_{ST}(t_1)$$

En passant dans l'espace de Laplace [1], et si la WTD est une loi exponentielle, on obtient l'équation suivante qui nous permet de remonter aux valeurs des populations moyennes :

$$\widetilde{\langle G \rangle}(s) = [Id - \nu \widetilde{G}_{ST}(s)]^{-1} \widetilde{G}_{ST}(s) \quad \text{avec} \quad \widetilde{G}_{ST}(s) = \left\langle \frac{1}{(s + \nu) Id - M} \right\rangle \quad (2.5)$$

Nous avons alors, selon les propriétés des transformations de Laplace :

$$\langle X_\infty \rangle = \lim_{t \rightarrow +\infty} \langle X(t) \rangle = \lim_{s \rightarrow 0^+} s \langle \widetilde{X} \rangle(s) = \lim_{s \rightarrow 0^+} s \langle \widetilde{G} \rangle(s) X_0 \quad (2.6)$$

On peut alors distinguer deux cas limites, selon la valeur de la fréquence de turbulence :

- la limite **statique** lorsque  $\nu \ll \nu_{at}$  (on prend en pratique  $\nu \sim 0$ ), où  $\nu_{at}$  est l'inverse d'un temps caractéristique de la dynamique intrinsèque du système : cette solution correspond à la moyenne sur les fluctuations de Y de la solution stationnaire. En effet, le système a le temps de se relaxer vers l'état stationnaire entre deux sauts.

Dans ce cas,  $\lim_{\nu \rightarrow 0, s \rightarrow 0} s \langle \widetilde{G} \rangle (s) X_0 = \lim_{s \rightarrow 0} \langle \frac{s}{s Id - M} X_0 \rangle$  et on peut montrer [1] que :

$$\langle X_\infty \rangle \equiv X_{ST} = \int dY p(Y) X_\infty[Y] \quad (2.7a)$$

est la moyenne de l'état stationnaire pour un palier sur la PDF.

$X_\infty$  est tel que  $M X_\infty = 0$  c'est à dire l'état stationnaire dans le cas non turbulent.

- la limite **adiabatique** lorsque  $\nu \gg \nu_{at}$  (on prend en pratique  $\nu \rightarrow \infty$ ). Le système n'a pas le temps de se relaxer, les fluctuations de Y étant trop rapides.

On obtient alors dans ce cas l'équation suivante :

$$\langle M \rangle X_{DB} = 0 \quad (2.7b)$$

Tout se passe comme si les transitions étaient caractérisées par des taux moyennés sur la PDF.

Dans le premier cas, on résout l'équation stationnaire des taux pour chaque palier, et on moyenne le résultat sur la PDF. Dans le second cas, on moyenne la matrice des taux et on l'utilise pour résoudre l'équation stationnaire des taux. Il est intéressant de constater que dans les deux cas, la moyenne des populations ne dépend pas de l'état initial. Notons que nous n'avons fait aucune hypothèse sur le choix de l'atome d'intérêt ni sur le choix des taux de transition entre les états énergétiques de cet atome, ce qui confère un caractère général à cette conclusion. Enfin, les comportements asymptotiques présentés ci-dessus ne dépendent pas du choix de la WTD, pourvu que celle-ci ait ses moments finis [1]

Nous venons de terminer la description du modèle stochastique qui nous servira à décrire les fluctuations de température du plasma et à calculer les populations moyennes de chaque niveau énergétique considéré. Nous allons maintenant l'appliquer au système de l'hydrogène, puis au système de l'argon.



### III – Cas de l'Hydrogène, un petit système

#### a/ Description du système

Il est intéressant de confronter le modèle décrit plus haut à un système pour lequel la construction de la matrice des taux sera rapide, afin d'acquérir une bonne compréhension des notions physiques et des méthodes numériques mises en œuvre.

Dans cette optique, nous nous intéressons à un système à deux niveaux d'énergie ( $n=1, n=2$ ). Nous pouvons considérer les deux premiers niveaux énergétiques de l'atome d'hydrogène (voir Figure n°2), sans oublier que le second niveau est quatre fois dégénéré.

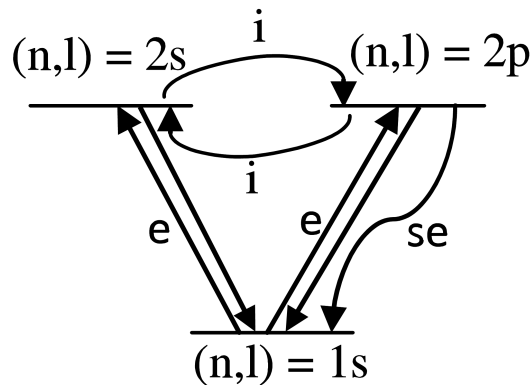


Figure n°2 : schéma des processus considérés dans le cas général (non coronal)

Nous nous intéressons à un plasma de faible densité ( $n_e = 10^{18} \text{ m}^{-3}$ ) et de basse température ( $T_e \approx 2 \text{ eV}$ ), vérifiant donc le critère du régime coronal :

$$n_e (\text{cm}^{-3}) < 10^{16} T_e (\text{eV})^{\frac{7}{2}}$$

On peut donc faire l'approximation du régime coronal, qui consiste à négliger les désexcitations  $2s \rightarrow 1s$  et  $2p \rightarrow 1s$  par impact d'électrons du fait de leur caractère peu probable. Nous nous placerons exclusivement dans le cas du régime coronal dans toute la suite du travail.

On ne considèrera donc que les processus suivants :

- excitation d'un atome neutre (cible) par collision avec un électron ( $1s \rightarrow 2s$  et  $1s \rightarrow 2p$ )
- émission spontanée d'un neutre excité ( $2p \rightarrow 2s$ ) par transition dipolaire électrique.

On y ajoutera dans le cas de l'hydrogène le processus ci-dessous :

- collision élastique d'un atome neutre (cible) avec un ion ( $2s \rightarrow 2p$  et  $2p \rightarrow 2s$ )

**NB :** la transition  $2s \rightarrow 1s$  par émission spontanée est interdite en vertu des règles de sélection.

Dans le cas des processus collisionnels, on écrit les probabilités de transition par unité de temps sous la forme :

$$P_{i \rightarrow j} = k_{i \rightarrow j} N_{e, \text{ion}}$$

où  $k_{i \rightarrow j} = \langle \sigma_{i \rightarrow j} v_{\text{ion}, e} \rangle$  où  $\sigma$  désigne la section efficace du processus considéré (une excitation de l'état  $i$  vers l'état  $j$ ) et  $v_{\text{ion}, e}$  la vitesse de l'ion ou de l'électron provoquant la transition [4]. La moyenne est calculée sur la distribution des vitesses, supposée être Maxwellienne.

$$k_{i \rightarrow j}^e = \langle \sigma_{i \rightarrow j} v_e \rangle = \int_{E_{ij}}^{\infty} dE f(E) \sigma(E) \sqrt{\frac{2E}{m_e}}$$

En choisissant judicieusement l'expression des sections efficaces, on peut donner une expression analytique pour chaque valeur de  $k$ .

A partir de cela, on peut caractériser totalement la matrice des taux de transition.

$$M[T] = \begin{pmatrix} -\Gamma_{1s \rightarrow 2s} - \Gamma_{1s \rightarrow 2p} & 0 & A_{2p \rightarrow 1s} \\ \Gamma_{1s \rightarrow 2s} & -\Gamma_{2s \rightarrow 2p} & \Gamma_{2p \rightarrow 2s} \\ \Gamma_{1s \rightarrow 2p} & \Gamma_{2s \rightarrow 2p} & -\Gamma_{2p \rightarrow 2s} - A_{2p \rightarrow 1s} \end{pmatrix}$$

où 
$$\Gamma_{i \rightarrow j} = N_e k_{i \rightarrow j}(T_e)$$

On suppose que les densités ionique et électronique sont égales, ainsi que les températures ionique et électronique.

Enfin, notons que dans le cas de l'émission spontanée, la probabilité de transition par unité de temps correspond au coefficient d'Einstein de cette transition.

### b/ Résultats et validation du modèle

Nous avons mis en œuvre les deux approches possibles i.e la simulation Monte-Carlo et la résolution faisant appel à l'expression analytique des populations moyennée proposée dans la partie précédente (Eq. 2.5 et 2.6)

Il n'a pas été possible d'employer la simulation Monte-Carlo pour autant de valeurs de fréquence de turbulence que ce que nous avons pu faire avec la méthode analytique, pour des raisons de temps de calcul. En effet, si la simulation est relativement rapide (quelques dizaines de minutes) lorsqu'il s'agit de traiter le cas de la limite diabatique, les paliers de température étant courts et l'état stationnaire au sens statistique étant atteint pour de faibles  $t_{\max}$  (inférieurs à  $10^{-8}$ s), les calculs peuvent durer plusieurs dizaines d'heures dès que l'on diminue la fréquence de turbulence. En outre, la simulation de Monte-Carlo ne nous permet pas de prédire la dynamique des populations puisqu'elle ne fournit en elle-même aucune information sur l'existence de cas limites. Pour toutes ces raisons, nous donnerons priorité à la méthode analytique lorsque nous traiterons le cas de l'Argon. Les courbes ci-dessous ont été tracées pour une température moyenne de 2 eV et une densité de  $5.10^{18} \text{ m}^{-3}$ .

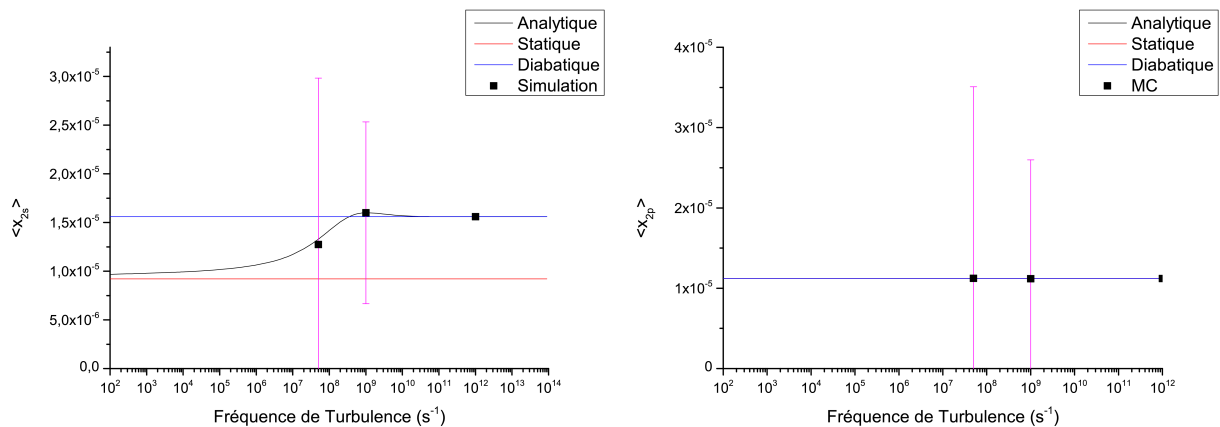


Figure n°3 : évolution des populations des états 2s et 2p en fonction de la fréquence de turbulence. Les résultats obtenus via la méthode analytique sont comparés à ceux fournis par la simulation. L'importance des barres d'erreur est liée au fait qu'il est nécessaire, pour réduire l'écart type, de moyenner les populations sur un nombre extrêmement important de cartes (largement supérieur au million).

La simulation de Monte-Carlo reste un bon moyen de vérifier la cohérence vis à vis des calculs analytiques, c'est pour cela que nous l'avons employée pour quelques valeurs de fréquence de turbulence seulement, notamment au niveau de la résonance observée pour l'état 2s

(Figure n°3, ci-dessus). La moyenne est calculée sur les valeurs stationnaires obtenues sur un million de cartes, pour des raisons de temps de calcul. On voit que la simulation fournit des résultats en accord avec ceux obtenus analytiquement, malgré un écart type très important, lié au nombre de cartes choisi pour le calcul qui reste trop faible.

On observe que les courbes obtenues respectent les comportements aux limites prédits dans la partie précédente (2.7a et 2.7b). Le comportement des états 2s et 2p est clairement différent : la population de l'état 2p est constante, quelle que soit la valeur de la fréquence de turbulence, ce qui n'est pas le cas de la population de l'état 2s pour laquelle on observe une forte augmentation ponctuée d'une résonance aux alentours de  $\nu = 10^9 \text{ s}^{-1}$ . Cette valeur ne varie que très peu lorsqu'on modifie la température électronique moyenne ou la densité d'électrons. Elle est aussi relativement indépendante de la PDF choisie pour les calculs ([2] et figure n°4).

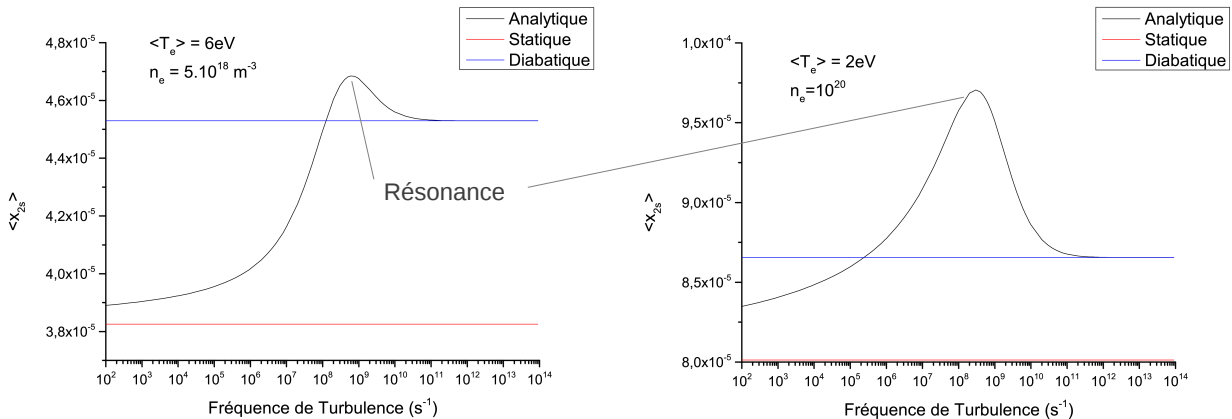


Figure n°4 : effet de la température moyenne et de la densité sur la position de la résonance et sur la valeur des populations moyennes

On peut montrer [2] que la valeur de la fréquence de résonance est au signe près égale à une valeur propre non nulle de  $\langle M \rangle$  (moyennée sur la PDF). Ces valeurs propres correspondent à l'inverse de durées caractéristiques d'évolution du système décrit par les taux retenus pour l'écriture de  $M$  dans la limite diabatique. On peut également montrer qu'au delà d'une certaine valeur de  $\nu$  les populations moyennes stationnaires ne dépendent plus de la fréquence de turbulence, ce qui correspond à la limite diabatique et explique la constance de la population de 2s au delà d'une certaine fréquence. Si les valeurs propres de  $\langle M \rangle$  se trouvent dans cette limite, alors il ne peut tout simplement pas y avoir de résonance. Avec notre modèle de l'hydrogène, seule l'une des deux valeurs propres de  $\langle M \rangle$  se trouve hors de la limite diabatique, ce qui explique pourquoi nous ne voyons qu'une seule résonance.

Demeure alors une question : pourquoi n'observe-t-on pas de résonance pour l'état 2p et seulement pour l'état 2s ? L'état 2p peut se dépeupler de deux manières : soit par collision élastique avec un ion, auquel cas se produit une transition  $2p \rightarrow 2s$ , soit par émission spontanée avec retour sur le niveau fondamental. L'émission spontanée empêche donc une accumulation d'atomes dans l'état 2p qui pourrait, si elle avait lieu, conduire à une résonance. Qu'en est-il de l'état 2s ? Il ne peut pas se désexciter autrement que par une transition  $2s \rightarrow 2p$  induite par une collision élastique avec un ion. Lorsque le taux de transition  $2p \rightarrow 2s$  devient en moyenne plus important que le taux d'émission spontanée, il se produit une accumulation d'atomes dans l'état 2s, ce qui produit une résonance.

On remarque enfin qu'une augmentation de la température moyenne entraîne une augmentation de la valeur des populations moyennes des niveaux excités et accentue la résonance. Il en va de même pour une augmentation de la densité électronique (égale à la densité ionique dans notre cas) : cela semble logique dans la mesure où le taux de collisions électroniques (ou ioniques) pour une transition donnée est proportionnel à cette densité.

Cette étape intermédiaire nous aura permis de comprendre modèle stochastique des fluctuations et de nous familiariser avec la physique impliquée dans ce problème, de même qu'avec les méthodes numériques mises en œuvre pour les résoudre. Nous pouvons donc maintenant commencer à étudier un système plus réaliste, avec un nombre plus important d'états énergétiques et de processus de transition, en l'occurrence l'atome d'argon.

#### IV – Adaptation du modèle au cas de l'Argon

##### a/ Description du système étudié

La finalité de ce travail est d'appliquer ce modèle stochastique au cas de l'argon, ce que nous allons faire dans ce qui suit. Il convient d'abord de décrire notre système.

La complexité du traitement du cas de l'argon réside dans le fait que cet atome possède un très grand nombre d'états susceptibles d'être impliqués de manière significative dans la cinétique des populations. Ne pouvant pas déterminer à l'avance ces états, nous faisons le choix arbitraire de considérer les quinze états de plus basse énergie de l'Argon neutre pour une première approche. Ces états seront désignés dans toute la suite par leur notation de Paschen (voir Annexe n°1 et Figure n°5 et Figure n°6).

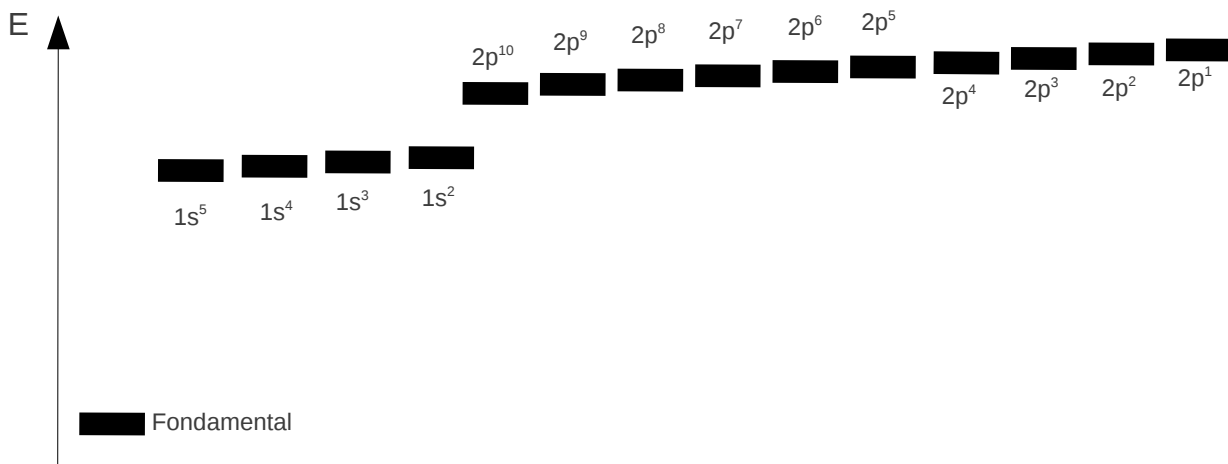
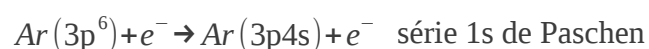
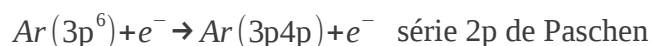


Figure n°5 : Diagramme d'énergie représentant les 15 états considérés en fonction de leur énergie.

Le nombre de processus entrant en jeu dans la dynamique des populations de l'argon peut-être très important. Il existe des modèles collisionnels radiatifs bien plus exhaustifs que le nôtre, prenant en compte des dizaines d'états et des centaines de processus de transition : excitations par impact d'ions, d'électrons, ionisation, recombinaison ... L'importance de ces processus les uns par rapport aux autres dépend des conditions thermodynamiques (pression, densité etc...) [6].

Comme il a été dit dans la partie précédente, nous nous intéressons dans le cadre de ce stage au cas du régime coronal, ce qui implique une diminution drastique du nombre de processus à considérer. Les processus dominants dans ce régime sont majoritairement les processus d'excitation électronique et l'émission spontanée, et ce sont donc eux que nous prendrons en compte dans ce travail :



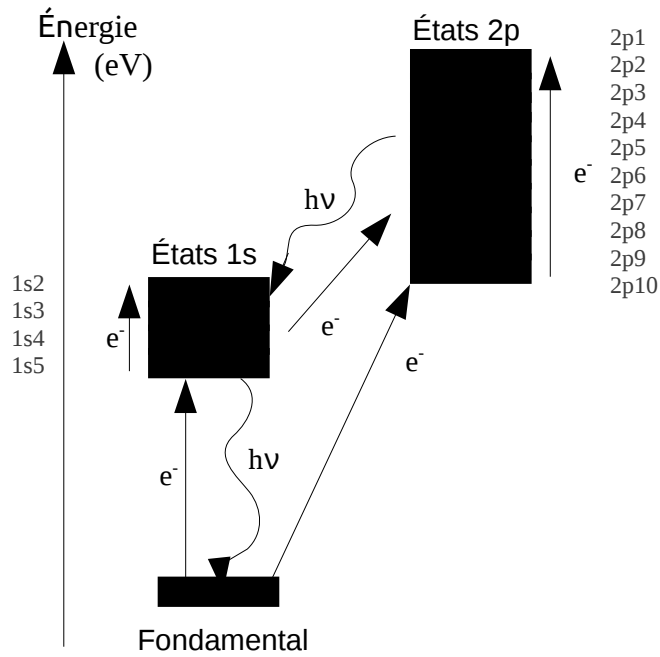


Figure n°6 : Diagramme d'énergie représentant les quinze premiers états de l'Argon neutre et les processus pris en compte dans notre système de manière schématique. Le signe  $e^-$  signifie impact électronique,  $h\nu$  désigne l'émission spontanée. Il n'y a pas d'émission spontanée entre deux états 2p ni entre deux états 2s. Dans les autres cas, toutes les transitions ne sont pas permises, on peut se reporter à l'annexe 1 pour voir la liste des transitions prises en compte et les coefficients d'Einstein associés.

Il a été expliqué dans la partie précédente que nous pouvons négliger la désexcitation des neutres par impact d'électrons, l'émission spontanée devenant alors la seule source de désexcitation des neutres.

Nous nous plaçons volontairement dans un cadre encore plus simplifié, où nous négligerons l'absorption de la lumière émise par le plasma. Cela peut se justifier par la faible densité du milieu qu'implique le régime coronal.

Nous nous plaçons dans un cas où l'équilibre entre l'ionisation et la recombinaison est atteint, ce qui implique la conservation du nombre de neutres. Les ions sont évidemment présents, puisqu'il y a des électrons libres, mais l'ionisation est supposée faible, de sorte que l'ionisation de l'Argon est négligée. Il en va de même pour la recombinaison des ions  $Ar^+$ ,  $Ar^{2+}$  (et ordres d'ionisation plus élevés) ainsi que la formation de l'ion moléculaire  $Ar_2^+$ , et donc plus généralement toute émission de lumière ou transition impliquant ces ions en tant que cible ou projectiles.

La problématique est la même que pour le plasma d'hydrogène. Nous voulons résoudre l'équation des taux, déterminer la solution stationnaire et implémenter les fluctuations selon le modèle stochastique décrit dans la partie précédente. Nous avons donc l'équation suivante :

$$\frac{dX(t)}{dt} = M[Y(t)]X(t) \quad (II\ 1)$$

où  $M$  est la matrice des taux, de dimension  $15 \times 15$  et dont la somme des éléments de chaque colonne vaut 0, le système étant considéré comme fermé (le nombre de neutres est toujours constant). On obtient un système de 15 équations, pour 15 inconnues, chaque équation étant de la forme ci-dessous :

$$\frac{dX_i}{dt} = \sum_{j \neq i} (N_e k_{j \rightarrow i} + A_{j \rightarrow i}) X_j - X_i \sum_{j \neq i} (N_e k_{i \rightarrow j} + A_{i \rightarrow j}) \quad (II\ 2)$$

Le premier terme de la somme représente le terme source pour l'état  $i$ , le second terme est le terme de pertes. On rappelle que le produit  $Nk_{j \rightarrow i}$  désigne le taux associé aux excitations par impact d'électron.  $A_j$  désigne un coefficient d'Einstein, probabilité de transition par unité de temps pour l'émission spontanée.

## b/ Calcul des taux de transition pour l'excitation par impact d'électrons

Afin d'explicitier la matrice  $M$ , il est nécessaire de connaître tous les taux de transition liés aux processus que nous prenons en compte. Rappelons que la formule générale donnant l'expression de  $k$  s'écrit comme suit :

$$k_{i \rightarrow j}^e = \langle \sigma_{i \rightarrow j} v_e \rangle = \int_{E_{ij}}^{\infty} dE f(E) \sigma(E) \sqrt{\frac{2E}{m_e}} \quad (\text{II } 3)$$

où  $\sigma$  désigne la section efficace du processus concerné,  $v_e$  et  $m_e$ , la vitesse et la masse de l'électron. On fait l'hypothèse que  $f(E)$  est la distribution de Maxwell.  $E_{ij}$  est l'énergie totale minimale nécessaire pour que le processus puisse avoir lieu.

L'implémentation des fluctuations et la nécessité de tracer l'évolution de l'état stationnaire en fonction de la fréquence de turbulence impliquent une durée de calcul importante. Recalculer les taux par intégration systématique du produit  $\sigma v$  pour chaque palier de température de chaque carte de température est extrêmement long, compte tenu du nombre élevé de réalisations nécessaires pour que la simulation de Monte-Carlo donne un résultat satisfaisant. Il est donc nécessaire de trouver des expressions analytiques générales pour chaque type d'allure des sections efficaces afin de réduire le temps de calcul (cf Figure 7).

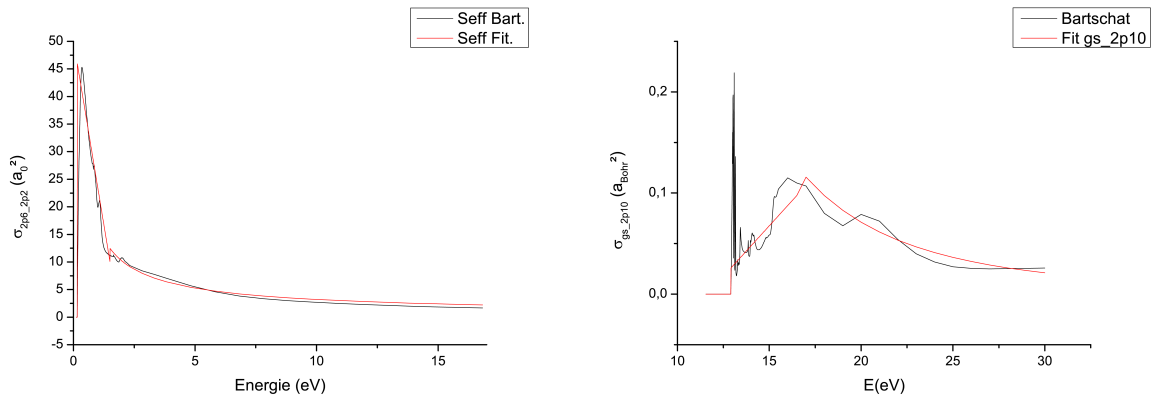


Figure n°7 : deux exemples de modélisation des sections efficaces. Le deuxième modèle semble grossier, mais donne des résultats corrects lors du calcul des taux (cf figure n°8).

La plupart des courbes de  $\sigma$  possèdent deux comportements bien distincts (parfois même trois) :

- une partie à basse énergie, croissante et très irrégulière, marquée par des résonances
- une partie à haute énergie, décroissante et plus régulière.

Les valeurs originelles de  $\sigma$  proviennent des résultats de K. Bartschat et V. Zeman, eux mêmes obtenus via des méthodes quantiques numériques très complexes et dépassant le cadre de ce stage. Ces sections ne sont tabulées que sur une gamme d'énergie allant d'environ 10 eV à 30 eV. Il est donc nécessaire d'extrapoler ces courbes. Notre choix est basé sur le fait que ces sections efficaces sont pour la plupart en accord avec les résultats expérimentaux (malgré quelques problèmes concernant les transitions par collision électronique prenant pour état initial l'état  $2p^5$ , l'état  $2p^4$  ou l'état  $2p^3$ ). Dans certains cas, la partie décroissante n'apparaît pas, le choix a donc été fait de supposer arbitrairement une décroissance en  $1/E^2$  pour ces quelques rares cas (seulement 3 processus sont concernés).

Une première étape a consisté à tester l'importance des résonances observées à basse énergie. Celles-ci sont négligeables ou n'influent que relativement peu les valeurs finales de  $k$ . Il y a deux raisons à cela.

Premièrement, les résonances apparaissent pour de faibles valeurs de l'énergie, or, pour ces valeurs de E, la vitesse est par définition très faible. Le produit  $\sigma v$  donne donc quelque chose de faible, quand bien même il y ait une résonance de  $\sigma$ . Deuxièmement, on intègre le produit de  $\sigma v$  pondéré par  $f(E)$ , la distribution de Maxwell : cela a tendance à lisser toute formation de  $\sigma v$  variant plus vite en énergie que  $f(E)$ .

La deuxième étape a consisté à trouver une courbe de tendance pour chaque portion de section efficace. L'expression de cette courbe doit conduire à un résultat analytique, comme justifié plus haut. On dénombre trois cas de figure :

- la section efficace comporte deux parties, la partie à basse énergie est modélisable par une droite, celle à haute énergie par une loi de puissance (type I). Ce cas est le plus fréquent.
- la section efficace ne comporte qu'une seule partie, modélisable par une loi de puissance du type  $\sigma = aE^b$  (types II et III)
- la section efficace doit être modélisée en trois morceaux pour limiter des erreurs trop importantes : les deux premiers modèles sont des droites, la partie à haute énergie est une loi de puissance (type IV)

Plusieurs conditions doivent être respectées pour les lois de puissance :

- l'exposant b doit être négatif pour simuler un comportement décroissant
- si b est compris entre 0 et -2 exclus, il peut prendre n'importe quelle valeur réelle dans cet intervalle : le calcul de l'expression de k conduit alors à une fonction gamma incomplète
- si b est inférieur ou égal à -2, il doit être entier : le calcul de k conduit à une exponentielle intégrale.

Les expressions analytiques obtenues pour chacun des cas (I,II,III,IV) sont données en Annexe 3.

Les courbes de k obtenues à partir de ces expressions ont été comparées à celles obtenues par intégration complète des tables construites par K. Bartschat et V. Zeman (après interpolation et extrapolation de celles-ci) et les résultats sont assez satisfaisants : les courbes se superposent relativement bien sur de grandes gammes de température dans la plupart des cas (Figures n°7 et 8).

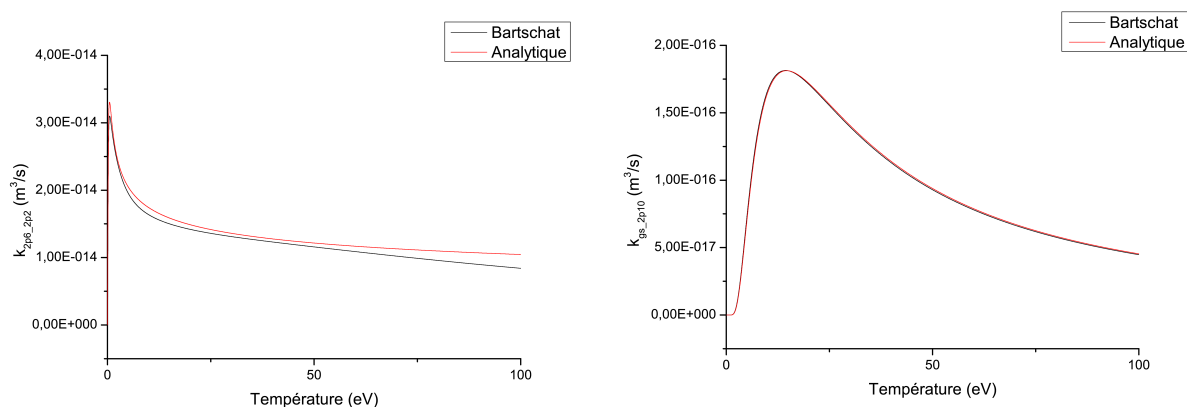


Figure n°8 : taux de transition (par unité de densité) relatifs aux sections efficaces d'excitation par impact d'électron représentées et modélisées sur la figure 6 pour les transitions  $2p6 \rightarrow 2p2$  et fondamental  $\rightarrow 2p10$ . La courbe de gauche correspond à l'un des cas les plus mauvais. Au delà de 50eV, l'erreur relative commise dépasse 5 %. Ceci est cependant à relativiser étant donné que nous avons extrapolé les sections efficaces.

## V – Analyse des résultats pour l'Argon

Nous pouvons donc maintenant combiner notre modèle collisionnel radiatif de l'Argon avec le modèle stochastique. Dans un premiers temps nous nous intéresserons au cas où il n'y a pas de fluctuations, puis nous introduirons les fluctuations dans le modèle et étudierons la dépendance des populations moyennes stationnaires vis à vis de la fréquence de turbulence  $\nu$  et de la température moyenne  $\langle T \rangle$ . Enfin, nous supprimerons certains taux de transition afin d'évaluer les modifications éventuelles que ces suppressions pourraient entraîner.

### a/ Modèle sans fluctuations

Nous imposons une température constante  $T_0$  au système : les taux ne dépendent donc plus du temps (la densité étant elle aussi fixée rappelons-le). Les populations atteignent un état stationnaire, obéissant à l'équation :

$$M(T_0) X_\infty = 0$$

Nous pouvons déterminer cet état en résolvant cette équation, et tracer la dépendance en température de  $X_\infty$ . Il est intéressant de comparer les populations des états 1s3 et 1s5, métastables, à celles des états 1s2 et 1s4 qui ne le sont pas et peuvent se désexciter par émission spontanée vers l'état fondamental (figure n°9).

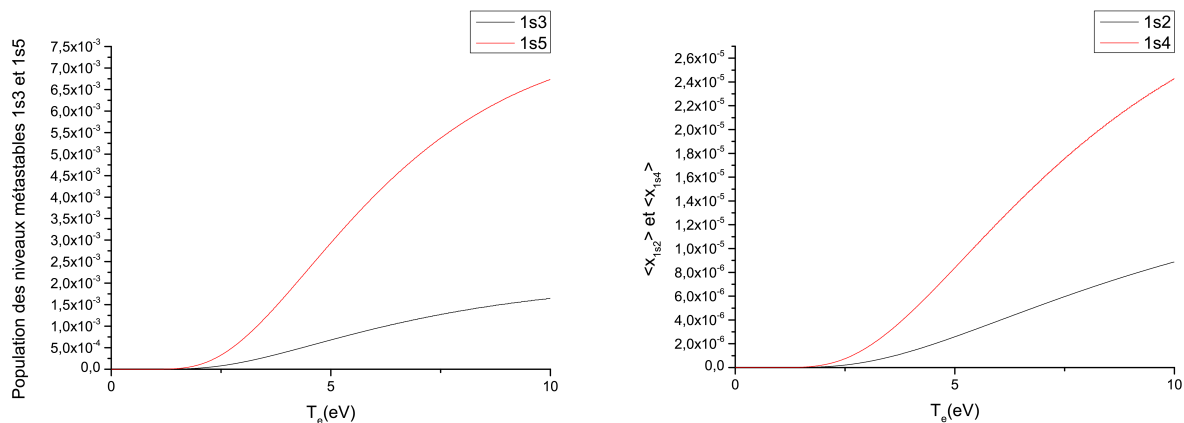


Figure n°9 : à gauche, l'évolution des populations normalisées des états métastables, à droite celle des états résonants. Ces courbes ont été obtenues pour une densité électronique  $N_e = 10^{18} \text{ m}^{-3}$ .

On constate une différence de un à trois ordres de grandeur en faveur des états métastables. Ces derniers constituent donc un réservoir vis à vis de leurs homologues non-métastables (on pourrait ainsi songer à intégrer un terme source correspondant à ces états dans l'équation des taux pour réduire la dimension du problème dans un travail ultérieur). Notons que les coefficients d'Einstein des transitions 1s4 → fondamental et 1s2 → fondamental sont les plus forts de tous ceux retenus (cf Annexe 2). La dépendance des populations des états 2p est sensiblement la même que celle des états résonants, à l'exception de l'état 2p9 (figure n°10) pour laquelle l'augmentation est un peu plus forte.

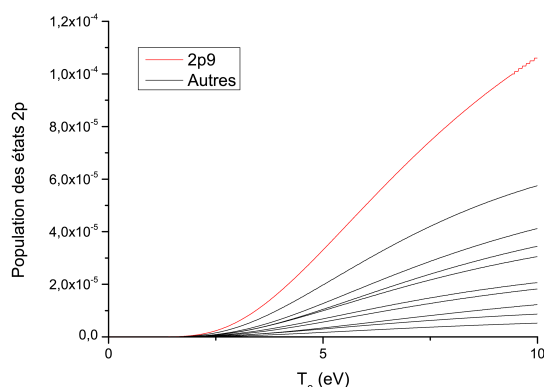


Figure n°10 : dépendance vis à vis de  $T$  des populations stationnaires des états 2p en l'absence de fluctuations de température. Ces courbes ont été obtenues pour une densité électronique  $N_e = 10^{18} \text{ m}^{-3}$ .



Remarquons enfin que la population totale étant conservée, il n'est pas surprenant de voir que la population de l'état fondamental décroît compte tenu de l'augmentation de la population des autres états. Cependant, cette décroissance est lente et de faible ampleur : la population de l'état fondamental reste de l'ordre de 1, à 1 % près, sur cette gamme de température moyenne.

Nous allons maintenant introduire les fluctuations dans nos calculs, via le modèle stochastique décrit précédemment.

### b/ Dynamique des populations en fonction de $\nu$

Dans un premier temps, nous allons nous intéresser aux variations des populations de chaque niveau en fonction de la fréquence de turbulence, qui rappelons-le, est liée au choix de la fonction de corrélation des paliers par le biais de la WTD. Nous nous attendons à voir apparaître les deux limites, statique et diabatique, puisque nous avons montré que leur existence ne dépendait pas du système atomique et des transitions considérées mais qu'elles étaient une propriété intrinsèque au modèle.

Les courbes ont été obtenues de façon analogue au cas de l'hydrogène, par la méthode « analytique ». Compte tenu de la durée des calculs, nettement plus importante que pour l'hydrogène en raison de la dimension du système, du nombre de transitions pris en compte et de la convergence lente de la méthode de Monte-Carlo, les valeurs obtenues via la simulation sont proches, mais présentent une dispersion très importante. On peut imputer principalement cela au choix du  $t_{\max}$ , qui rappelons-le est la durée sur laquelle on résout l'équation des taux via la méthode d'Euler. Il faut en effet qu'il soit supérieur de plusieurs ordres de grandeur à l'inverse de la fréquence de turbulence pour qu'on puisse moyenner sur un grand nombre de paliers et qu'on laisse ainsi le temps à la moyenne statistique de converger vers sa valeur stationnaire.

Néanmoins, pour la limite diabatique (donc pour des paliers très courts, et donc un petit  $t_{\max}$ ), on voit que les deux méthodes sont en bon accord (figure n°11).

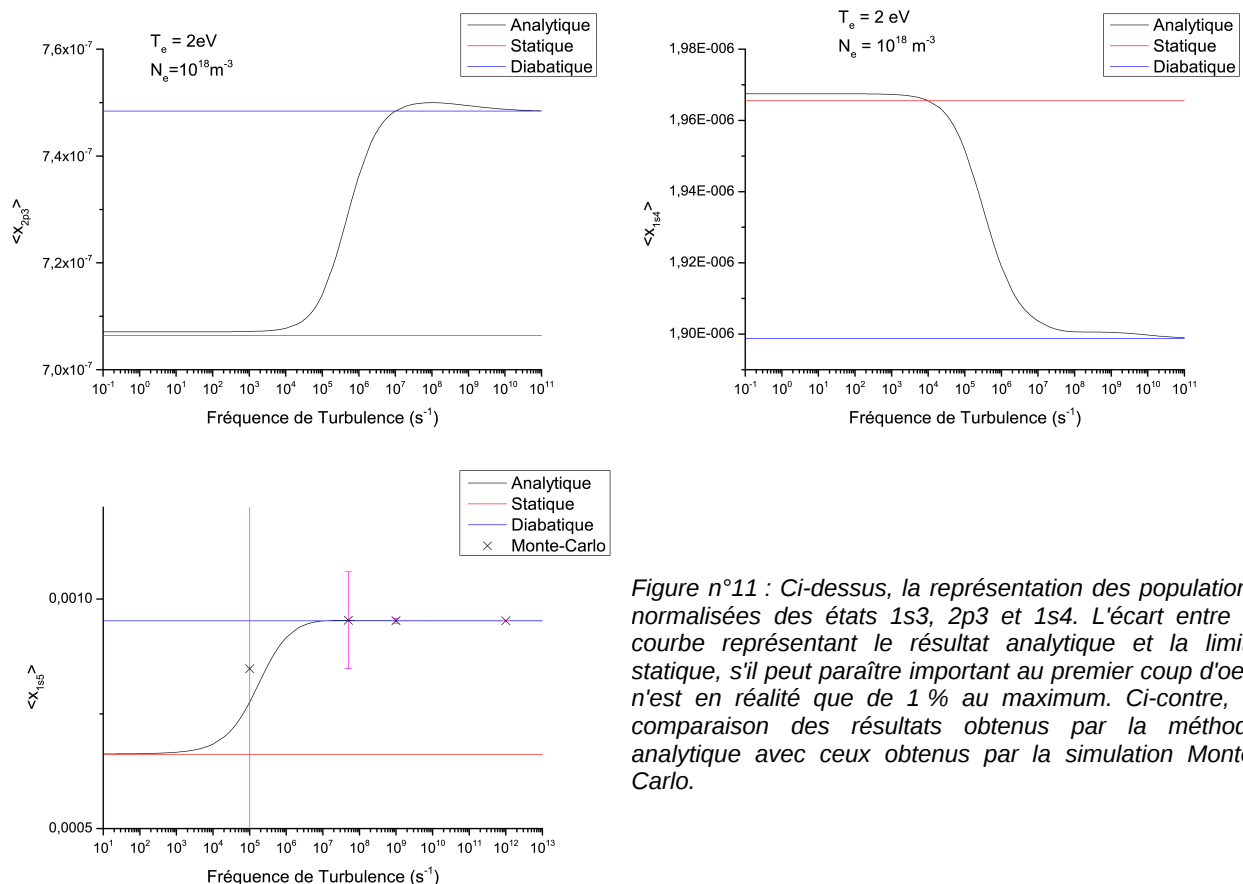


Figure n°11 : Ci-dessus, la représentation des populations normalisées des états 1s3, 2p3 et 1s4. L'écart entre la courbe représentant le résultat analytique et la limite statique, s'il peut paraître important au premier coup d'oeil, n'est en réalité que de 1 % au maximum. Ci-contre, la comparaison des résultats obtenus par la méthode analytique avec ceux obtenus par la simulation Monte-Carlo.

Une nouveauté par rapport au cas de l'hydrogène, réside dans le fait que nous observons un autre type de comportement. Comme on peut le voir sur la figure 11, certains états tendent à se dépeupler lorsque  $\nu$  augmente. On constate également que les populations moyennes de chaque état dépendent cette fois-ci de  $\nu$  contrairement au cas de l'hydrogène où  $\langle x_{2s} \rangle$  était constante.

On voit que les courbes respectent les comportements prévus aux limites statique et diabatique. Notons à nouveau la présence de résonances, situées peu avant la limite diabatique. On voit que des résonances peuvent survenir pour des états se dépeuplant lorsque  $\nu$  augmente.

### c/ Dynamique des populations en fonction de $\langle T \rangle$

On peut maintenant envisager de fixer la fréquence de turbulence tout en faisant varier la température moyenne du plasma pour déterminer comment celle-ci influe sur les populations moyennes. On trouve des courbes similaires à celles obtenues dans le cas non fluctuant représentées en Figures n°9 et n°10.

Afin de mieux visualiser les effets de la température moyenne et se rapprocher des grandeurs expérimentales, nous pouvons tracer des rapports de population. Comme l'intensité d'une raie spectrale est directement proportionnelle à la population du niveau émetteur, les rapports de population correspondent à des rapports d'intensité de raies spectrales. On peut s'intéresser pour cela à plusieurs des principales raies émises par l'argon neutre (750,38 nm ; 763,51 nm ; 794,82 nm ; 800,62 nm ; 801,48 nm ; 810,37 nm ; 811,53 nm (source NIST)).

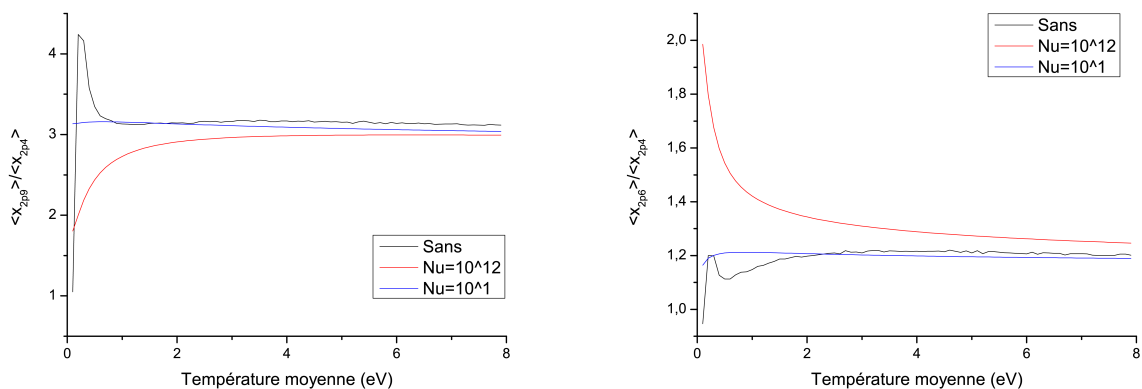


Figure n°12 : rapport de populations normalisées  $x_{2p9}/x_{2p4}$  (raie à 811,5 nm sur raie à 794,82 nm) et  $x_{2p6}/x_{2p4}$  (raie à 763,51 nm sur raie à 794,82 nm) en fonction de la température, dans divers cas : sans fluctuations de température,  $\nu=10^1$  (limite statique),  $\nu=10^{12}$  (limite diabatique).

Il est intéressant de constater que dans chacun de ces cas et pour de grandes températures moyennes, le rapport des populations ne semble plus dépendre de la présence de turbulence. Les trois courbes de chaque graphe de la figure n°12 semblent se rejoindre. Ceci est en cours d'analyse

## **Conclusion**

En conclusion, nous avons utilisé un modèle stochastique décrivant les fluctuations de température dans un plasma et l'avons appliqué tout d'abord à un système de trois états décrivant l'atome d'hydrogène, puis à un système de quinze états décrivant l'atome d'argon. Nous avons mis en évidence l'existence de deux comportements aux limites lorsqu'on s'intéresse à l'évolution des populations moyennes de chaque niveau en fonction de la fréquence de turbulence et avons pu calculer des rapports d'intensité des raies spectrales.

Confronter les résultats fournis par ce modèle à des résultats expérimentaux nous permettrait de valider ou non les diverses approximations que nous avons pu faire en traitant le cas de l'Argon. Il serait intéressant de reprendre le système de l'argon en y ajoutant les états 3d de Paschen et d'analyser les changements éventuels. Ces niveaux sont en effet relativement proches des états 4p, et il est donc légitime de soupçonner qu'il puissent participer de manière significative à la dynamique des populations. En outre, ces niveaux sont très proches les uns des autres, ce qui rend nécessaire l'implémentation de transitions provoquées par impact d'ions (la section efficace de ces collisions domine lorsque les niveaux impliqués sont proches).

Il a déjà été montré ([1] et [2]) que le choix de la PDF influait sur les valeurs moyennes des populations, au niveau des limites statique et diabatique comme pour les valeurs intermédiaires de fréquence de turbulence. Nous pourrions donc envisager d'appliquer au cas de l'argon des PDF autres qu'une loi exponentielle, par exemple une fonction Gamma ou une distribution Log-Normale. Cela nous permettrait également de jouer sur le taux des fluctuations de température défini comme  $r = \Delta T / \langle T \rangle$

Enfin, il serait intéressant de déterminer pourquoi aux grandes températures des rapports de populations données semblent converger vers une même valeur qu'il y ait ou non des turbulences.

## **Références bibliographiques**

- [1] F. Catoire *et al.*, Population kinetics in fluctuating plasmas (Physical Review A 83, 012548, 2011)
- [2] F. Catoire *et al.*, A resonance effect of the atomic populations kinetics induced by a fluctuating plasma (Eur. Phys. J D 65, 481-488 (2011))
- [3] A. Escarguel, Optical diagnostics of a low frequency instability rotating around a magnetized plasma column (Eur. Phys. J. D 56, 209-214 (2010))
- [4] T. Fujimoto, *Plasma Spectroscopy* (Oxford Science Publications, 2004)
- [5] B. Diu, C. Guthmann, D. Lederer, *Physique Statistique*
- [6] Xi-Ming Zhu, Yi-Kang Pu, A simple collisional-radiative model for low-temperature argon discharges with pressure ranging from 1 Pa to atmospheric pressure : kinetics of Paschen 1s and 2p levels (2010 J. Phys. D : Appl. Phys. 43 015204)

## ANNEXE 1

### Les 15 premiers niveaux énergétiques de Ar neutre

Notation de Paschen	Configuration électronique	Terme, valeur de J	Durée de vie radiative (s)	Énergie (eV) (1)
1p0	3s <sup>2</sup> 3p <sup>6</sup>	<sup>1</sup> S, 0	∞	0,0
1s5	3s <sup>2</sup> 3p <sup>5</sup> (2P <sup>o</sup> <sub>3/2</sub> )4s	2[ <sup>3</sup> / <sub>2</sub> ] <sup>o</sup> , 2	métastable	11,5483537
1s4	3s <sup>2</sup> 3p <sup>5</sup> (2P <sup>o</sup> <sub>3/2</sub> )4s	2[ <sup>3</sup> / <sub>2</sub> ] <sup>o</sup> , 1	8,33.10 <sup>-9</sup>	11,6235920
1s3	3s <sup>2</sup> 3p <sup>5</sup> (2P <sup>o</sup> <sub>1/2</sub> )4s	2[ <sup>1</sup> / <sub>2</sub> ] <sup>o</sup> , 0	métastable	11,7213596
1s2	3s <sup>2</sup> 3p <sup>5</sup> (2P <sup>o</sup> <sub>1/2</sub> )4s	2[ <sup>1</sup> / <sub>2</sub> ] <sup>o</sup> , 1	2,00.10 <sup>-9</sup>	11,8280704
2p10	3s <sup>2</sup> 3p <sup>5</sup> (2P <sup>o</sup> <sub>3/2</sub> )4p	2[ <sup>1</sup> / <sub>2</sub> ] <sup>o</sup> , 1	3,90.10 <sup>-8</sup>	12,9070145
2p9	3s <sup>2</sup> 3p <sup>5</sup> (2P <sup>o</sup> <sub>3/2</sub> )4p	2[ <sup>5</sup> / <sub>2</sub> ] <sup>o</sup> , 3	3,03.10 <sup>-8</sup>	13,0757149
2p8	3s <sup>2</sup> 3p <sup>5</sup> (2P <sup>o</sup> <sub>3/2</sub> )4p	2[ <sup>5</sup> / <sub>2</sub> ] <sup>o</sup> , 2	3,05.10 <sup>-8</sup>	13,0948717
2p7	3s <sup>2</sup> 3p <sup>5</sup> (2P <sup>o</sup> <sub>3/2</sub> )4p	2[ <sup>3</sup> / <sub>2</sub> ] <sup>o</sup> , 1	2,99.10 <sup>-8</sup>	13,1531430
2p6	3s <sup>2</sup> 3p <sup>5</sup> (2P <sup>o</sup> <sub>3/2</sub> )4p	2[ <sup>3</sup> / <sub>2</sub> ] <sup>o</sup> , 2	2,87.10 <sup>-8</sup>	13,1717769
2p5	3s <sup>2</sup> 3p <sup>5</sup> (2P <sup>o</sup> <sub>3/2</sub> )4p	2[ <sup>1</sup> / <sub>2</sub> ] <sup>o</sup> , 0	2,50.10 <sup>-8</sup>	13,2730373
2p4	3s <sup>2</sup> 3p <sup>5</sup> (2P <sup>o</sup> <sub>1/2</sub> )4p	2[ <sup>3</sup> / <sub>2</sub> ] <sup>o</sup> , 1	2,97.10 <sup>-8</sup>	13,2826382
2p3	3s <sup>2</sup> 3p <sup>5</sup> (2P <sup>o</sup> <sub>1/2</sub> )4p	2[ <sup>3</sup> / <sub>2</sub> ] <sup>o</sup> , 2	2,90.10 <sup>-8</sup>	13,3022266
2p2	3s <sup>2</sup> 3p <sup>5</sup> (2P <sup>o</sup> <sub>1/2</sub> )4p	2[ <sup>1</sup> / <sub>2</sub> ] <sup>o</sup> , 1	2,84.10 <sup>-8</sup>	13,3278562
2p1	3s <sup>2</sup> 3p <sup>5</sup> (2P <sup>o</sup> <sub>1/2</sub> )4p	2[ <sup>1</sup> / <sub>2</sub> ] <sup>o</sup> , 0	2,21.10 <sup>-8</sup>	13,4798860

Tableau n°1 : Les quinze premiers états de l'Argon. 1p0 désigne l'état fondamental

(1) relative au niveau fondamental

*NB : Compte tenu du faible écart énergétique entre les états 2p<sup>n</sup> et les groupements d'états 3d<sub>1</sub> et 3d<sub>2</sub>, il est toutefois légitime de penser que ces derniers peuvent jouer un rôle significatif dans la cinétique du système. Ils ne seront cependant pas pris en compte au cours de ce travail, pour des raisons de simplification du problème. Il s'agit, là encore, d'une première approche.*

La durée de vie radiative  $\tau$  est calculée comme suit :

$$\tau = \frac{1}{\sum_i A_{ij}}$$

où  $A_{ij}$  désigne le coefficient d'Einstein d'émission spontanée pour la transition impliquant les états  $i$  et  $j$ .

## ANNEXE 2

### Coefficients d'Einstein $A_{ij}$ pour l'émission spontanée des 15 premiers niveaux de Ar

(transitions dipôlaires électriques seulement)

Transition	A (en $s^{-1}$ )
2p1 => 1s2	$4,5 \cdot 10^7$
2p1 => 1s4	$2,4 \cdot 10^5$
2p2 => 1s2	$1,5 \cdot 10^7$
2p2 => 1s3	$1,2 \cdot 10^7$
2p2 => 1s4	$1,8 \cdot 10^6$
2p2 => 1s5	$6,4 \cdot 10^6$
2p3 => 1s2	$2,2 \cdot 10^7$
2p3 => 1s4	$8,7 \cdot 10^6$
2p3 => 1s5	$3,8 \cdot 10^6$
2p4 => 1s2	$1,4 \cdot 10^7$
2p4 => 1s3	$1,9 \cdot 10^7$
2p4 => 1s4	$2,5 \cdot 10^4$
2p4 => 1s5	$6,5 \cdot 10^5$
2p5 => 1s2	$1,9 \cdot 10^4$
2p5 => 1s4	$4,0 \cdot 10^7$
2p6 => 1s2	$5,0 \cdot 10^6$
2p6 => 1s4	$4,9 \cdot 10^6$
2p6 => 1s5	$2,5 \cdot 10^7$
2p7 => 1s2	$1,0 \cdot 10^6$
2p7 => 1s3	$2,4 \cdot 10^6$
2p7 => 1s4	$2,5 \cdot 10^7$
2p7 => 1s5	$5,0 \cdot 10^6$
2p8 => 1s2	$1,5 \cdot 10^6$
2p8 => 1s4	$2,2 \cdot 10^7$
2p8 => 1s5	$9,3 \cdot 10^6$
2p9 => 1s5	$3,3 \cdot 10^7$
2p10 => 1s2	$2,5 \cdot 10^5$
2p10 => 1s3	$1,0 \cdot 10^6$
2p10 => 1s4	$5,4 \cdot 10^6$
2p10 => 1s5	$1,9 \cdot 10^7$
1s4 => fondamental	$1,2 \cdot 10^8$
1s2 => fondamental	$5,0 \cdot 10^8$

## ANNEXE 3

### Expressions analytiques détaillées des taux de transition dans le cas de l'Argon

- **Type I** : droite entre  $E_S$  et  $E_T$  + loi de puissance

$$k = A + B + f(c, d, E_T, \gamma)$$

$$\text{où } A = \frac{a v_e E_S}{\beta} \left( e^{-\beta} (\beta^2 + 2\beta + 2) - e^{-\beta \frac{E_T}{E_S}} \left( \left( \beta \frac{E_T}{E_S} \right)^2 + 2\beta \frac{E_T}{E_S} + 2 \right) \right) ,$$

$$\text{où } B = b v_e \left( e^{-\beta} (1 + \beta) - e^{-\beta \frac{E_T}{E_S}} \left( 1 + \beta \frac{E_T}{E_S} \right) \right) ,$$

$$\text{et où } f(c, d, E_T, \gamma) = c v_e \left( \frac{E_T}{\gamma} \right)^d \Gamma(d+2, \gamma) \text{ ou } f(c, d, E_T, \gamma) = c v_e \gamma^2 E_T^d E_q(\gamma) .$$

selon que  $d$  est compris entre 0 et -2 exclus ou inférieur à -2, comme détaillé plus haut.

Avec :

$$v_e : \text{ vitesse moyenne électronique au sens de Maxwell i.e } v_e = \sqrt{\frac{8 k_B T}{\pi m_e}}$$

$E_S$  est l'énergie seuil du processus,  $E_T$  l'énergie marquant la transition entre les deux comportements modélisés de la section efficace

$a$  et  $b$  sont des paramètres de modélisation, propres à chaque transition,  $q = -(d+1)$

$$\beta = \frac{E_S}{k_B T} \text{ et } \gamma = \frac{E_T}{k_B T}$$

- **Type II** : loi de puissance,  $d$  réel compris entre 0 et -2 exclus

$$k = c v_e \left( \frac{E_T}{\gamma} \right)^d \Gamma(d+2, \gamma)$$

- **Type III** : loi de puissance,  $d$  entier relatif inférieur ou égal à -2

$$k = c v_e \gamma^2 E_T^d E_q(\gamma)$$

- **Type IV** : droite entre  $E_S$  et  $E_{T1}$ , droite entre  $E_{T1}$  et  $E_{T2}$  + loi de puissance

$$k = A + B + F + G + f(c, d, E_T, \gamma)$$

$$\text{où } A = \frac{a v_e E_S}{\beta} \left( e^{-\beta} (\beta^2 + 2\beta + 2) - e^{-\beta \frac{E_{T1}}{E_S}} \left( \left( \beta \frac{E_{T1}}{E_S} \right)^2 + 2\beta \frac{E_{T1}}{E_S} + 2 \right) \right) ,$$

$$\text{où } B = b v_e \left( e^{-\beta} (1 + \beta) - e^{-\beta \frac{E_{T1}}{E_S}} \left( 1 + \beta \frac{E_{T1}}{E_S} \right) \right) ,$$

$$\text{où } F = \frac{f v_e E_{T1}}{\delta} (e^{-\delta}(\delta^2 + 2\delta + 2) - e^{-\delta \frac{E_{T2}}{E_{T1}}} ((\delta \frac{E_{T2}}{E_{T1}})^2 + 2\delta \frac{E_{T2}}{E_{T1}} + 2)) ,$$

$$\text{où } G = g v_e (e^{-\delta}(1 + \delta) - e^{-\delta \frac{E_{T2}}{E_{T1}}}(1 + \delta \frac{E_{T2}}{E_{T1}})) ,$$

et où  $f(c, d, E_{T2}, \gamma) = c v_e (\frac{E_T}{\gamma})^d \Gamma(d+2, \gamma)$  ou  $f(c, d, E_T, \gamma) = c v_e \gamma^2 E_{T2}^d E_q(\gamma)$  selon que d est compris entre 0 et -2 exclus ou inférieur à -2, comme détaillé plus haut.

$$\text{avec } \beta = \frac{E_S}{k_B T} , \quad \delta = \frac{E_{T2}}{k_B T} \quad \text{et} \quad \gamma = \frac{E_{T2}}{k_B T}$$

NB :

– Fonction gamma incomplète :  $\Gamma(a, x) = \int_x^{\infty} e^{-t} t^{a-1} dt$

**Condition sur a : a > 0**

– Exponentielle intégrale :  $E_n(x) = \int_1^{\infty} dt \frac{e^{-xt}}{t^n}$

**Condition sur n : n entier positif**

