The background of the slide is a painting of a coastal scene. It features a large, craggy rock formation on the left side, with a small boat beached on the sandy shore in the foreground. The sky is filled with soft, white clouds, and the overall color palette is muted and naturalistic.

# **Plasmas hors équilibre : thermodynamique et propriétés radiatives**

M. Poirier, F. de Gaufridy de Dortan  
T. Blenski, R. Piron, F. Thais

*Séminaire SPAM-LFP, Étretat, 9–11 octobre 2006*  
*Mise à jour 6 novembre 2006*

# Plasmas à l'équilibre thermodynamique

Plasmas plus faciles à décrire si  
équilibre thermodynamique (local) ETL

Équilibre atteint par collisions ( $n_e$ ),  
par interaction avec rayonnement thermique

Critère ETL :  $n_e \text{ (cm}^{-3}\text{)} \geq 2 \cdot 10^{14} [T \text{ (eV)}]^{1/2} [E_r \text{ (eV)}]^3$   
nanolithographie  $T = 26 \text{ eV}$ ,  $E_r = 92 \text{ eV}$  :  $n_e \geq 7 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$   
 $\Rightarrow$  *souvent non satisfait*

Possibilité de définir une *température* pour

- les électrons
- les ions
- les niveaux atomiques
- le rayonnement

# Température électronique

- Électrons : fortes interactions  
⇒ **existence de  $T_e$  généralement admise**
- Distribution Maxwellienne des vitesses / énergies :  $\rho(\varepsilon) \sim \varepsilon^{1/2} \exp(-\varepsilon/k_B T_e) / T_e^{3/2}$
- Taux d'excitation / ionisation collisionnelle fonctions de  $T_e$
- Électrons « libres » (potentiel = 0 )  
non relativistes  
non dégénérés ⇒ statistique Boltzmann  
**Validité** :  $k_B T_e \gg \varepsilon_F \sim n_e^{2/3}$  énergie de Fermi  
soit  $T_e \gg 0,08 \text{ eV}$  si  $n_e \sim 10^{20} \text{ cm}^{-3}$

# Température ionique

Si il est possible de définir  $T_i$  (non général)

Répartition des états de charge : *Saha*

$$n_{Z+1}/n_Z = 2 \exp(-I_Z/k_B T_i)/n_e \lambda_{th}^3$$

*long. onde thermique* :  $\lambda_{th} = (h^2/2\pi m k_B T_i)^{1/2}$

$$n_{Z+1}/n_Z = 6 \cdot 10^{21} [T_i(\text{eV})]^{3/2} \exp(-I_Z/T_i)/n_e (\text{cm}^{-3})$$

Différence / Boltzmann : *charge Z+1 accessible même si  $I_Z/k_B T_i$  est « grand »*

**Exemple**  $T_i = 10$  eV,  $I_Z = 30$  eV,  $n_e = 10^{18}$  cm<sup>-3</sup>

$$n_{Z+1}/n_Z = 1000 \text{ alors que } \exp(-I_Z/T_i) = 0,05$$

# Température des niveaux, configurations...

Si il est possible de définir  $T_n$  :

Populations des niveaux d'un ion donné

$$\text{Boltzmann : } p(i) \sim g_i \exp(-E_i/k_B T_n)$$

Possibilité de regrouper les niveaux en *configurations*

(ex :  $1s^2 2s^2 2p$  dans  $C^+$ ) et de définir une  $T_c$  pour chacune d'elles

Cas  $T_i = T_n = T$

Saha-Boltzmann (SB) : niveaux *excités* peuplés

$$n_{Z+1}/n_Z = 2 \exp(-I_Z/k_B T)/n_e \lambda_{th}^3 \cdot (\xi_{Z+1}/\xi_Z)$$

avec  $\xi_Z = \sum_i g_i \exp(-(E_i - E_0)/k_B T)$  fn partition

$$\text{Pop. niveau : } n(i; Z) = n_Z g_i \exp(-(E_i - E_0)/k_B T) / \xi_Z$$

# Température radiative

Rayonnement en interaction avec le plasma

**Si**  $T_r$  définie, corps noir :

$u_\nu = 8\pi hc^3/\nu^3 /(\exp(h\nu/k_B T_r)-1)$  loi de Planck  
suppose la réabsorption complète

***Cas considéré :***

milieu *optiquement mince*

⇒ rayonnement émis **non réabsorbé**

⇒ **absorption / émission induite**  
**non prises en compte**

~ Planck à  $T_r = 0$

# Un exemple simple hors ETL : le modèle de Colombant et Tonon

- CT, J. Appl. Phys. **44** 3524 (1973)
- Modèle « minimal » incluant le seul fondamental de chaque ion en l'absence de rayonnement extérieur  
Données :  $T_e$ ,  $N_e$ , potentiels d'ionisation
- Inclut les taux de transition semi-empiriques pour
  - ionisation collisionnelle IC :  $X(Z)+e \rightarrow X(Z+1)+e+e$
  - recombinaison 3 corps R3C: inverse de IC
  - recombinaison radiative RR :  $X(Z+1)+e \rightarrow X(Z) + h\nu$
- NB - photoionisation PI, processus inverse de RR  
non incluse : pas de rayonnement externe
- Résolution analytique des équations de taux
$$dN_Z/dt = -(R_{ZZ+1} + R_{ZZ-1})N_Z + R_{Z+1 Z}N_{Z+1} + R_{Z-1 Z}N_{Z-1}$$
- Régime stationnaire  $dN_Z/dt = 0$  (solution à  $t \rightarrow \infty$ )

# Principe du bilan détaillé (microréversibilité)

Les taux IC et R3C vérifient  $N_j R_{ij} = N_i R_{ji}$  (MR)

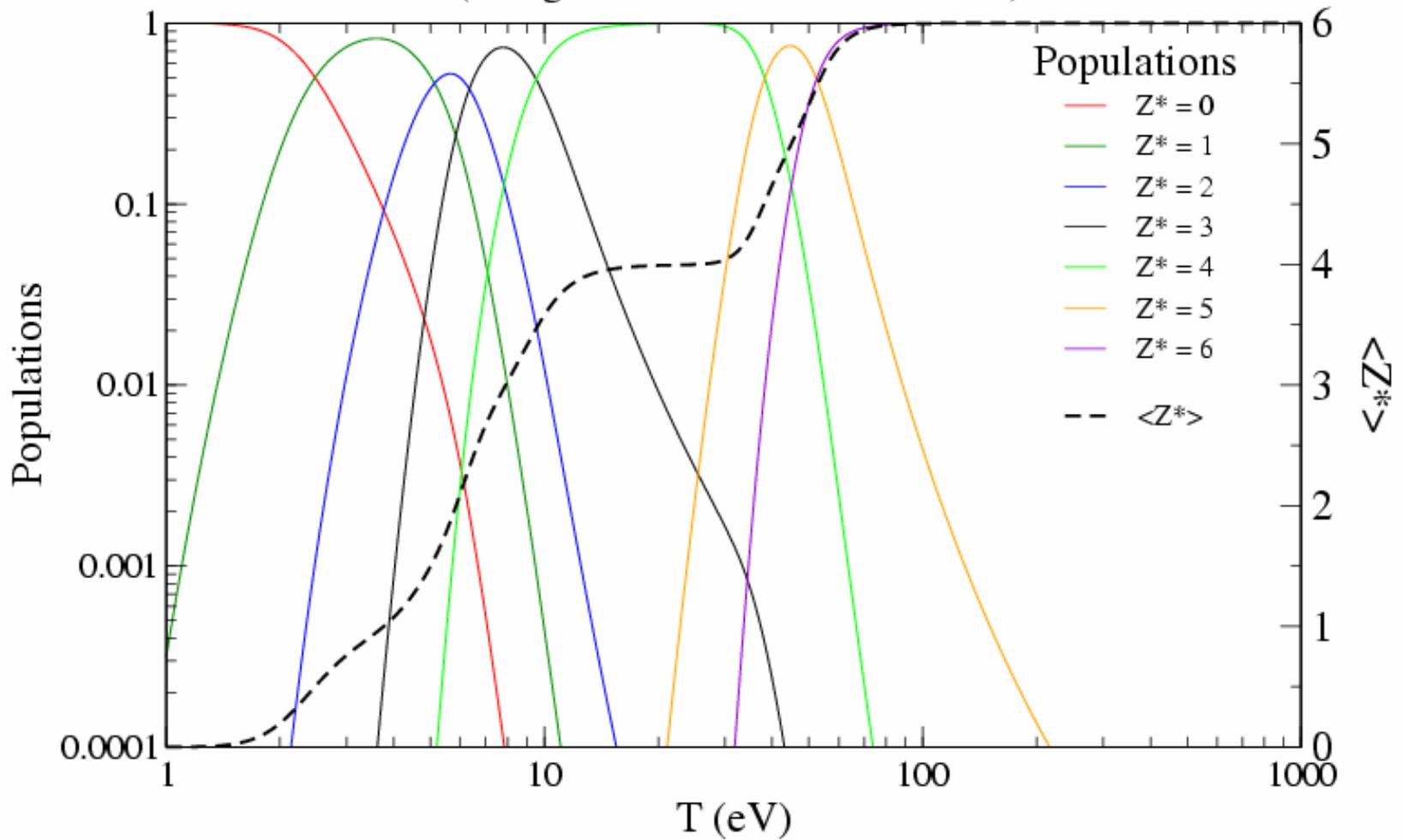
où  $N_j/N_i$  est donné par loi de Saha (fonction de  $n_e$ ,  $T_e$ )

De même les taux d'excitation et de désexcitation collisionnelle (non inclus dans CT) ( $X(i; Z) + e \leftrightarrow X(j; Z) + e$ ) vérifient (MR) avec  $N_j/N_i = g_j/g_i \exp(-E_{ji}/T)$  loi de Boltzmann

- *Si les processus inclus dans les équations de taux obéissent au principe de microréversibilité, alors la solution stationnaire de ces équations est celle de l'équilibre thermodynamique avec  $T = T_e$  (i.e. Saha-Boltzmann).*
- Dans les équations de CT, RR non « équilibrée » par PI  
⇒ *la solution de ces équations est différente de ET*
- Rappel : Einstein 1916 → bilan détaillé absorption / émission si équilibre thermodynamique rayonnement-matière ⇒ *émission induite*

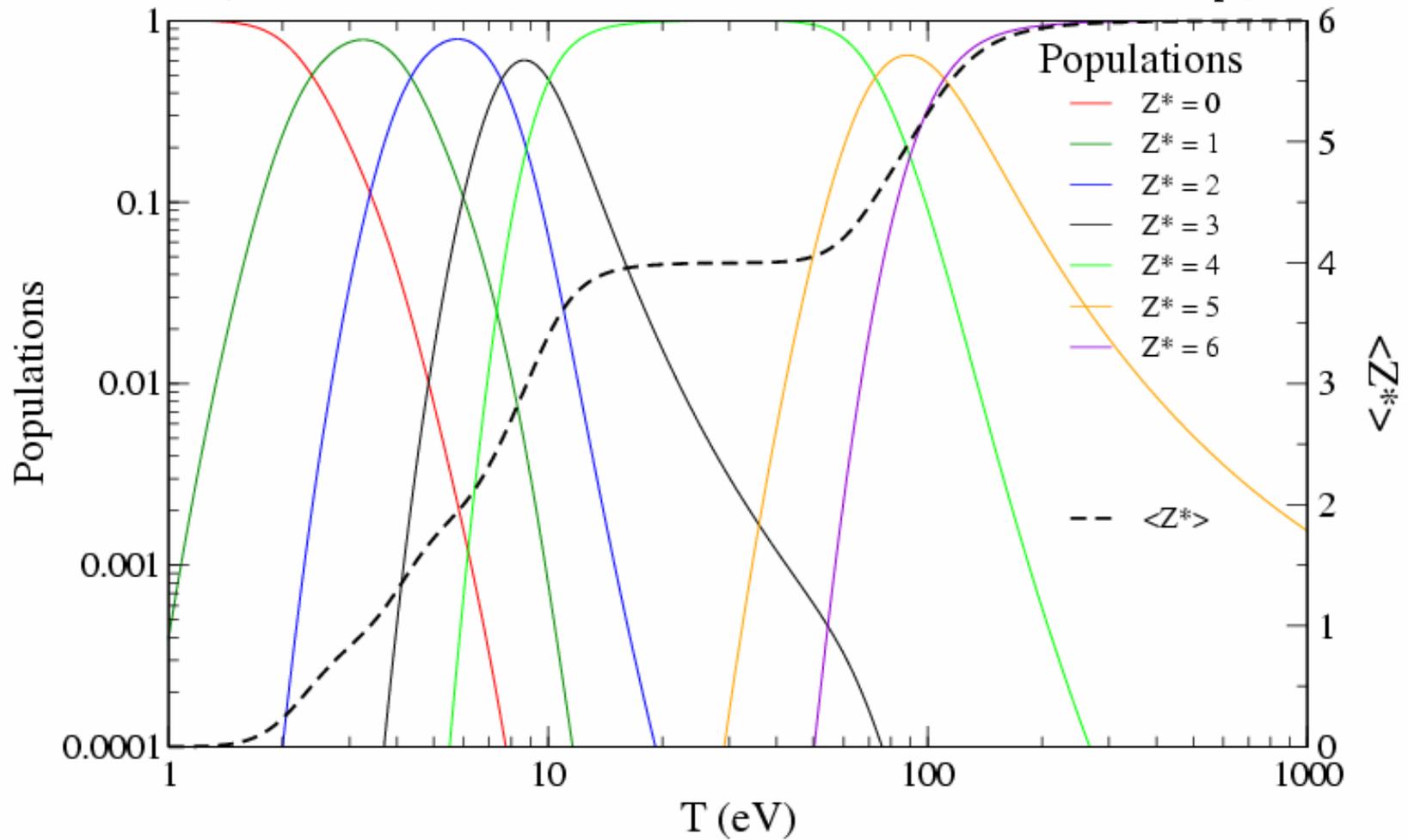
**C**

Populations loi de Saha,  $n_e = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$   
(configuration fondamentale seulement)



**C**

Populations Colombant-Tonon,  $n_e = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$   
(fondamental seult, ionisation coll., recomb. radiative, recomb. 3 corps)



# Nouveau modèle collisionnel-radiatif (CR)

- Modèle détaillé fondé sur la suite HULLAC
  - A. Bar-Shalom *et al*, JQSRT 71 169 (2001)
  - avec post-processeur résolvant les éqns de taux
  - F. de Dortan, rapport CEA-R-6115 (2006)
- Milieu homogène, pas de rayonnement externe
- Processus atomiques et collisionnels inclus
  - ✓ Émission spontanée ES
  - ✓ Excitation/désexcitation collisionnelle
  - ✓ Ionisation collisionnelle/recombinaison 3 corps
  - ✓ Autoionisation/recombinaison diélectronique
  - ✓ Recombinaison radiative RR
- Microréversibilité ?  
processus inverses de ES et RR **non inclus**  
⇒ **situation hors ETL**

# Deux codes numériques développés

- Version **détaillée par niveaux**  
et version ***moyennée en configuration***
  - Intérêt : simplification système collisionnel-radiatif  
temps calcul  $\sim N^3$ ,  $N$  nombre de niveaux/configs
  - Étude d'un plasma de C à  $T_e = 10$  eV et 1eV
    - ✓ états de charge  $Z = 0$  à 6 inclus
    - ✓ 1782 niveaux regroupés en 150 configurations
- Ex fdtl C :  $1s^2 2s^2 2p^2 \rightarrow 1$  configuration, 5 niveaux  
 $2p_{1/2}^2 [J = 0]$ ,  $2p_{3/2}^2 [J = 0 \text{ ou } 2]$ ,  $2p_{1/2} 2p_{3/2} [J = 1 \text{ ou } 2]$

# Tests des codes CR détaillé et en configuration

Procédure de test :

résolution d'un système CR « partiel » incluant excitation et ionisation collisionnelle et processus inverses :  
microréversibilité  $\Rightarrow$  équivalent à SB dans le cas « détaillé »

Mais principe de microréversibilité non valable sur moyennes en configuration. Avec

$$R_{\alpha\beta} = \frac{\sum_{i \in \alpha, j \in \beta} g_i R_{ij}}{\sum_{i \in \alpha} g_\alpha}, N_\alpha = \sum_{i \in \alpha} N_i$$

$N_i R_{ij} = N_j R_{ji}$  *n'implique pas en général*  $N_\alpha R_{\alpha\beta} = N_\beta R_{\beta\alpha}$   
(propriété vérifiée si  $R_{\alpha\beta} = g_\beta R_{ij} / g_j$  pour tous les  $i, j$  de  $\alpha, \beta$ ).

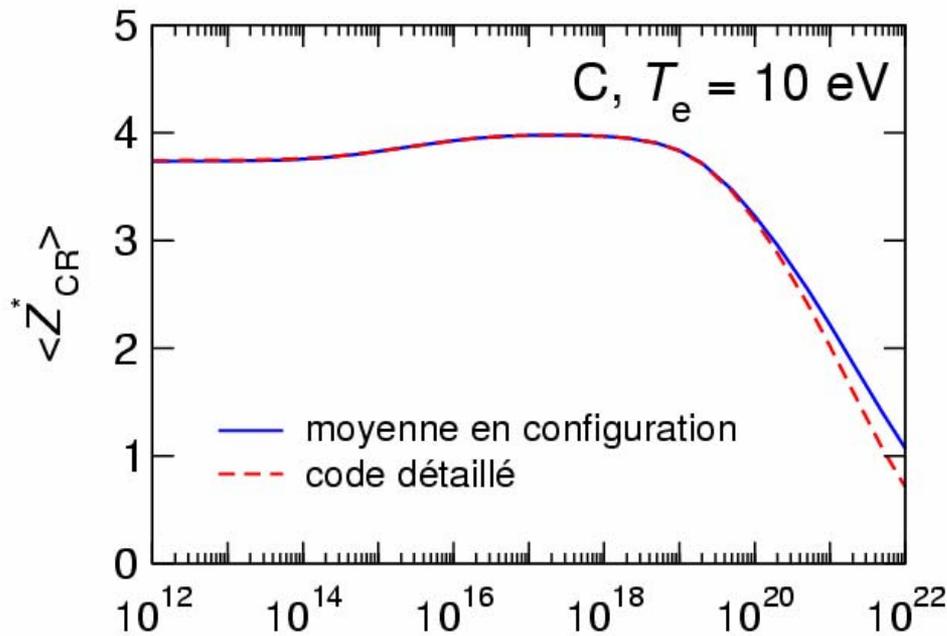
L'écart de la solution du système CR « partiel » à SB est une mesure de la validité de la moyenne en configuration.

# Les quatre systèmes CR résolus

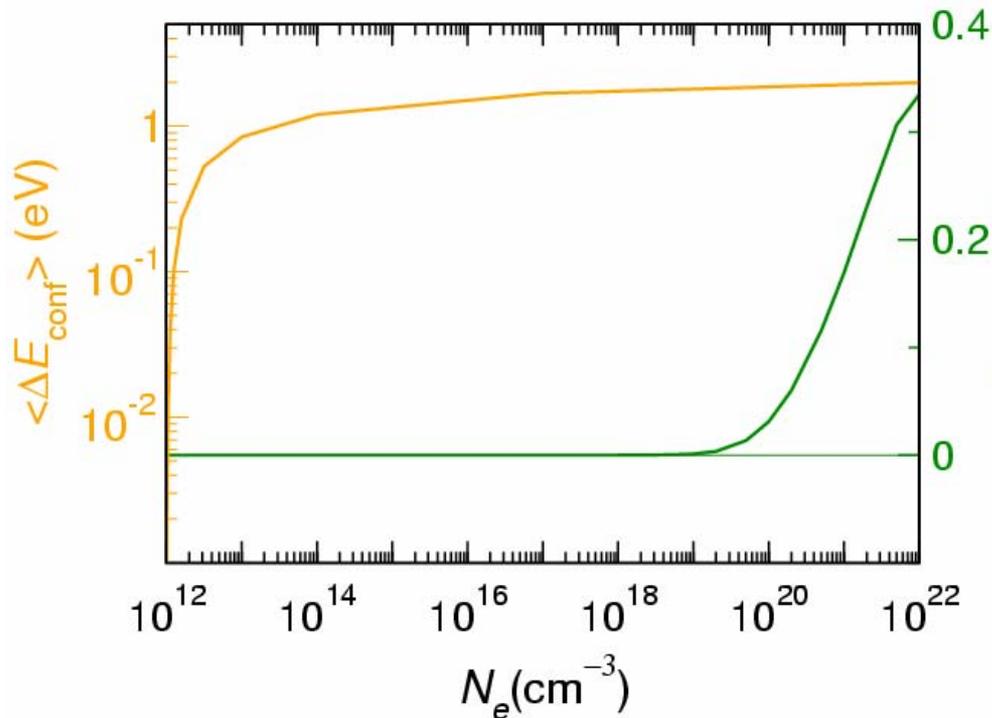
<ul style="list-style-type: none"><li>• code détaillé (NETL)</li><li>• tous les taux inclus (collisionnels et radiatifs)</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>• code moyenné en configurations (NETL)</li><li>• tous les taux inclus (collisionnels et radiatifs)</li></ul>
<ul style="list-style-type: none"><li>• code détaillé (<math>\equiv</math>ETL)</li><li>• taux collisionnels seuls (ionisation, excitation) test précision (<math>\leftrightarrow</math> SB)</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>• code moyenné en configurations (<math>\sim</math>ETL)</li><li>• taux collisionnels seuls (ionisation, excitation) <i>test validité moy. config.</i></li></ul>

# Plasma de carbone hors ETL

$T_e = 10 \text{ eV}$

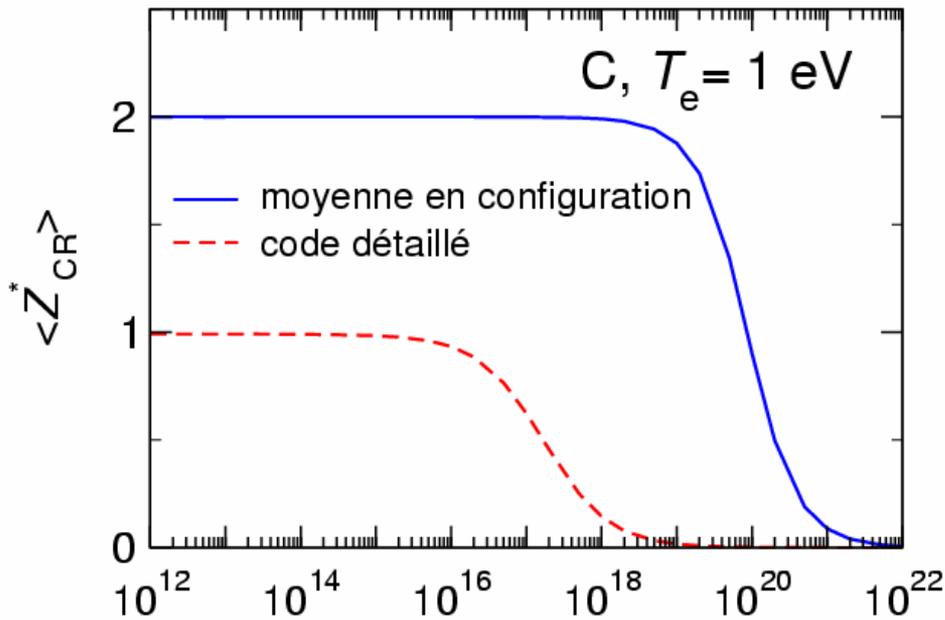


- (Très) bon accord entre la moyenne en configuration et le code détaillé à  $T_e = 10 \text{ eV}$ , pour toutes les densités
- Léger décrochage pour  $N_e$  grand ( $\Delta Z_{CR}^* = 10^{-2}$  si  $N_e = 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ )



- Critère « intuitif » de validité de la moyenne en configuration :  $\langle \Delta E_{conf} \rangle = \sum_{\alpha} N_{\alpha} \Delta E_{\alpha} \ll T_e$  non suffisant car  $\langle \Delta E_{conf} \rangle < 1.4 \text{ eV} \ll 10 \text{ eV}$

- *Nouveau critère* comparant  $\langle Z_{th}^* \rangle$  (système CR « partiel ») à  $\langle Z_{SB}^* \rangle$  (Saha-Boltzmann) : révèle la limitation de la moyenne en configurations pour  $N_e > 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ .



## Moyenne en configuration incorrecte : cas $T_e = 1$ eV

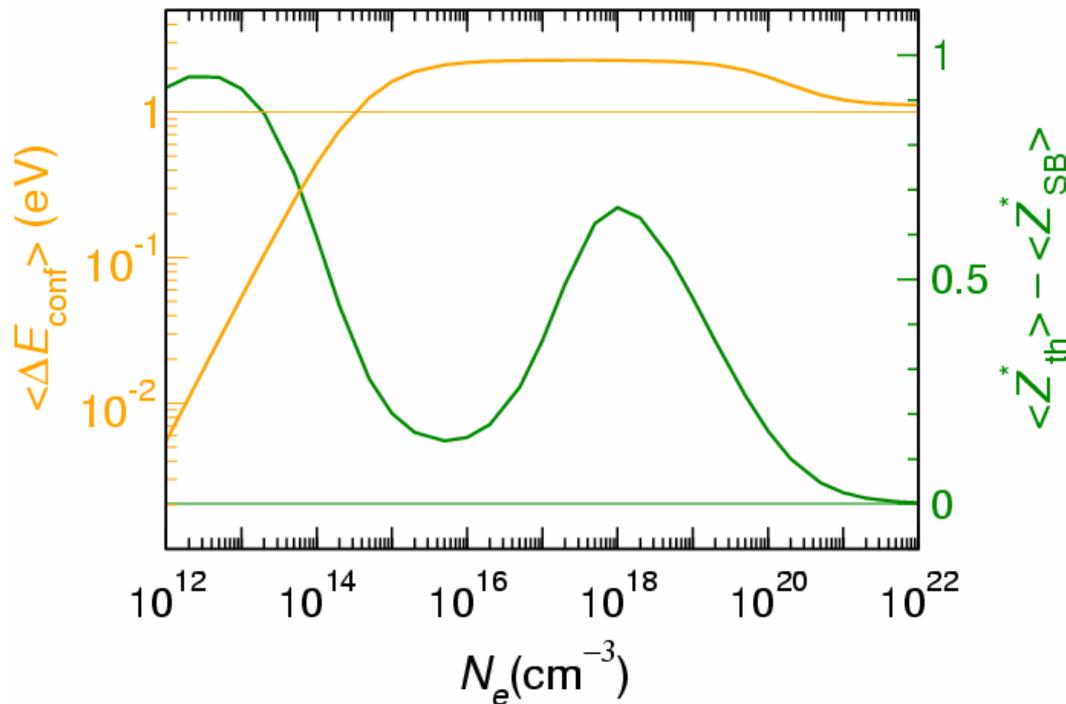
Si  $N_e \geq 10^{15}$  cm $^{-3}$ , 2 critères en défaut ;

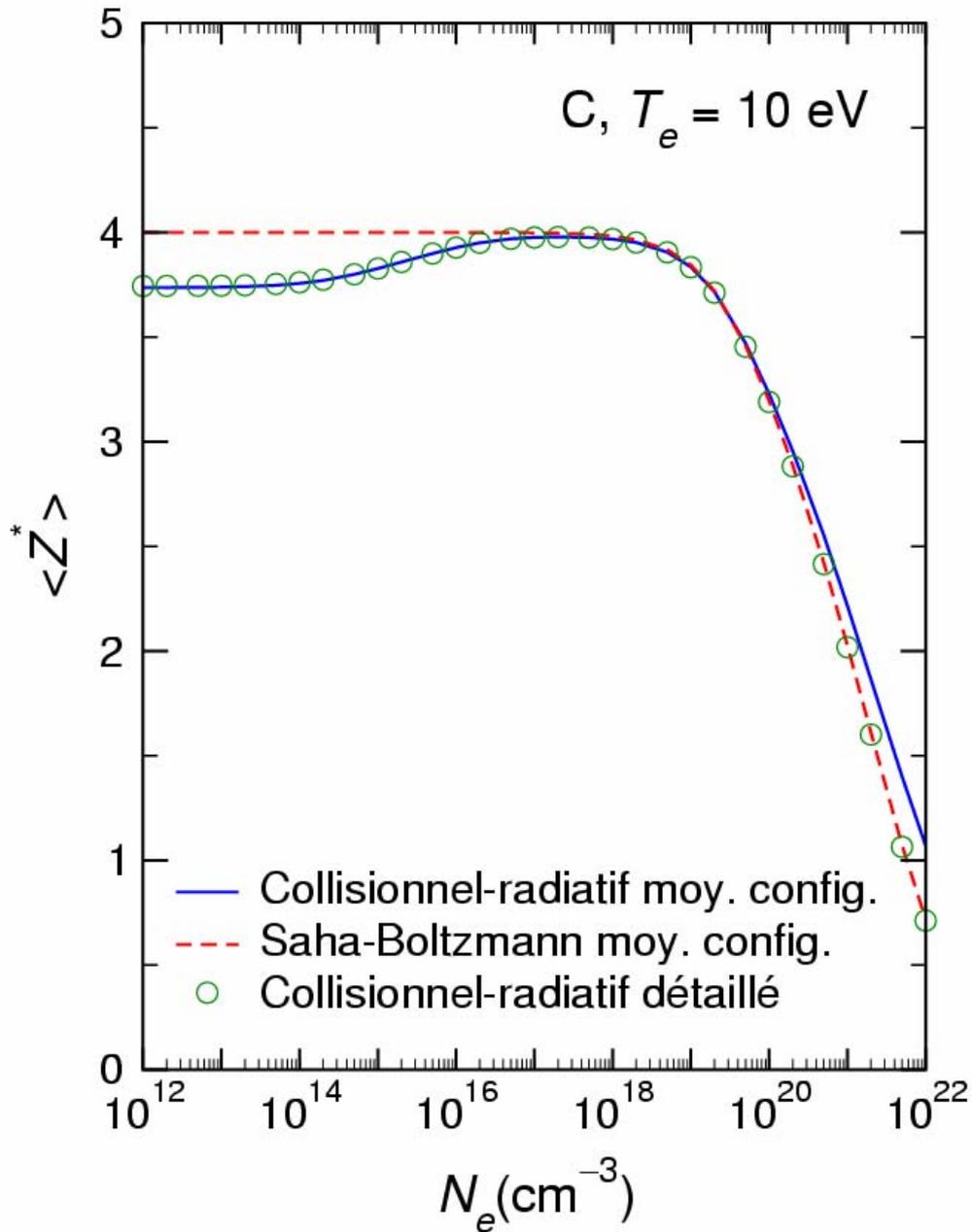
si  $N_e < 10^{14}$  cm $^{-3}$ , critère

$$\langle \Delta E_{\text{conf}} \rangle = \sum_{\alpha} N_{\alpha} \Delta E_{\alpha} \ll T_e \text{ vérifié}$$

*mais moyenne incorrecte*

*Dans ce cas, le nouveau critère fondé sur la valeur de  $\langle Z_{\text{th}}^* \rangle - \langle Z_{\text{SB}}^* \rangle$  révèle le défaut de l'approximation en configurations.*





## Code collisionnel-radiatif avec moyenne en configuration

- Écart mesurable avec la solution Saha-Boltzmann (ETL) notamment à basse densité ( $N_e < 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ) : *processus radiatifs importants, tendant à abaisser la charge et l'énergie moyenne*
- Écart également à haute densité ( $N_e > 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ ) : lié à la *moyenne en configurations* car disparaît si on utilise le *code collisionnel-radiatif détaillé*

# Conclusions et perspectives

- Élaboration et test de deux modèles CR, l'un détaillé, l'autre moyenné en configuration
- Définition d'un nouveau critère de validité de la moyenne en configuration, fondé sur la résolution d'un système CR « partiel » et sa comparaison avec la solution ETL
- Critère « intuitif »  $\langle \Delta E \rangle < T_e$  mis en défaut dans C à  $T_e = 10 \text{ eV}$ ,  $N_e > 10^{20} \text{ cm}^{-3}$  (et bien plus à  $T_e = 1 \text{ eV}$  !)
- Mise en évidence d'écarts assez significatifs / ETL
- Étude d'éléments plus complexes, par ex. Xe, Sn (EUV)
- Généralisation du formalisme pour inclure les propriétés d'absorption et d'émission d'un plasma hors ETL