

THESE

UNIVERSITE PARIS SUD

Sujet de la Thèse:

DIAGNOSTIC OPTIQUE DE PLASMAS A FORTE DENSITE D'ENERGIE.

Chloé BERENGUER

Membres du Jury:

Rapporteurs:	R.E.H. CLARK M. CORNILLE
Examineurs:	E. BIEMONT C. BOISSE-LAPORTE
Directeur de Thèse:	K. KATSONIS

Orsay, Février 2009

Je remercie Monsieur Gilles Maynard, Directeur du Laboratoire de Physique des Gaz et des Plasmas de m'avoir accueillie dans le laboratoire pour effectuer cette thèse dans les meilleures conditions. Je remercie aussi Monsieur Christian Boulet, Directeur de l'Ecole Doctorale Ondes et Matière de l'Université Paris XI et Monsieur Patrick Chapon de HORIBA Jobin Yvon pour l'intérêt qu'ils ont porté à ce travail.

Je tiens à remercier vivement mon directeur de thèse, Monsieur Konstantinos Katsonis, pour m'avoir proposé ce sujet, pour son aide, ses conseils et ses observations minutieuses et quotidiennes pendant toute la durée du travail.

Je remercie le Président et les membres du Jury de me faire l'honneur d'y participer. Ceci a pour moi une importance primordiale.

En ce qui concerne le développement du travail sur le plan théorique, je suis très reconnaissante à Madame Marguerite Cornille pour son aide à l'évaluation des données atomiques et pour sa contribution à la caractérisation des spectres des ions d'argon et de xénon. Je tiens aussi à remercier Monsieur R.E.H. Clark de l'Agence Internationale pour l'Energie Atomique (IAEA) qui nous a fourni durant cette thèse des résultats des codes CATS et ACE pour l'argon et le xénon quand ils demandaient un grand temps de calcul. Je le remercie également de m'avoir invitée en septembre 2007 à Vienne à la réunion du Projet de Recherche Coordonné (CRP) de l'IAEA en tant qu'observateur. Je tiens à remercier Monsieur Jun Yan et ses collaborateurs qui nous ont invités pour trois semaines à l'Institute of Applied Physics and Computational Mathematics de Pékin pour étudier ensemble les propriétés atomiques des plasmas. Je remercie notamment Monsieur Bin Duan qui a effectué pour nous des calculs de structure et de probabilités de transition pour les ions du xénon avec le code GRASP2. Enfin, je remercie Monsieur Rajesh Srivastava et Mademoiselle Lalita Sharma qui nous ont fourni des résultats de calculs de sections efficaces d'excitation obtenues par leurs codes RDWA.

Je suis reconnaissante envers toutes les personnes qui nous ont fourni des spectres expérimentaux d'argon et de xénon. Ainsi, je remercie Monsieur Jean Bonnet de l'ONERA de Palaiseau pour ses spectres de xénon. Je tiens aussi à remercier les personnes grâce auxquelles j'ai pu effectuer certaines mesures spectroscopiques, comme Monsieur Mihail Ganciu pour le développement des dispositifs expérimentaux permettant l'étude des plasmas d'argon et de

xénon et Madame Caroline Boisse-Laporte du laboratoire qui m'a encadrée lors des mesures dans ces dispositifs. Madame Caroline Boisse-Laporte m'a aussi donné l'occasion d'effectuer des mesures des spectres du réacteur DIVA, fonctionnant avec de l'argon. Je tiens aussi à exprimer ma reconnaissance à Monsieur Henri-Pierre Garnir et Monsieur Emile Biémont de l'IPNAS pour avoir accepté de faire des études expérimentales des ions du xénon dans la région VUV. Je remercie Monsieur Mathias Otte et l'Equipe WEGA de l'IPPG de Greifswald qui nous ont fourni des spectres d'argon et qui ont mis récemment à notre disposition le stellarator pour faire des mesures spectroscopiques d'argon et de xénon. Je tiens aussi à remercier Monsieur Périclis Tsekeris de l'Université de Ioannina pour sa participation à la campagne de mesures à Greifswald, ainsi que Monsieur Samuel Cohen qui nous a fourni des spectres d'argon. Madame Sophie Kroeger est à remercier pour ses spectres de décharge d'argon dans une cathode de niobium.

Enfin, je voudrais exprimer ma reconnaissance à tous ceux qui ont facilité mon travail et rendu plus agréables mes années de thèse au LPGP.

TABLE DES MATIERES

Remerciements	
Résumé.....	4
Nomenclature.....	9
<u>Chapitre 1. INTRODUCTION.....</u>	<u>11</u>
1.1. Plasmas à forte densité d'énergie.....	11
1.2. Les plasmas d'argon et de xénon.....	11
1.3. Les dispositifs expérimentaux.....	12
1.3.1. Espèces présentes et état des plasmas.....	12
1.3.2. Les dispositifs étudiés.....	13

Partie théorique

<u>Chapitre 2. DIAGNOSTIC PAR SPECTROSCOPIE D'EMISSION.....</u>	<u>15</u>
2.1. Utilisation de modèles C-R pour le diagnostic optique.....	15
2.2. Identification des raies expérimentales.....	16
2.3. Le xénon comme outil de diagnostic optique.....	17
2.4. Techniques de diagnostic optique.....	17
2.5. Impuretés et diagnostic optique.....	18
<u>Chapitre 3. MODELES C-R.....</u>	<u>20</u>
3.1. Equations statistiques de Boltzmann.....	20
3.2. Modélisation du xénon.....	21
3.3. Résultats obtenus par les modèles C-R.....	21
3.4. Processus intervenant le plus souvent dans le plasma.....	23
3.5. Modélisation du type Collisionnel-Radiatif (C-R).....	26
3.6. Inclusion des équations statistiques dans des modèles globaux.....	26
3.7. Elaboration d'un modèle de xénon.....	27
3.8. Raies théoriques et expérimentales.....	28

Chapitre 4. DONNEES ATOMIQUES POUR LES GAZ RARES

<u>XENON ET ARGON</u>	29
4.1. Structure et probabilités de transition du xénon et de l'argon.....	29
4.1.1. Les codes pour la structure et les probabilités de transition.....	30
4.1.2. Les couplages et les évaluations.....	31
4.1.3. Niveaux d'énergie du xénon I à VI.....	32
4.1.3.1. Structure des niveaux des configurations fondamentales.....	32
4.1.3.2. Les énergies des niveaux excités.....	32
4.1.3.2.a. Les niveaux excités du Xe I.....	32
4.1.3.2.b. Les niveaux excités du Xe II.....	36
4.1.3.2.c. Les niveaux excités du Xe III.....	36
4.1.3.2.d. Les autres niveaux excités des ions du Xe.....	37
4.1.3.3. Les niveaux moyennés et hydrogéoïdes.....	41
4.1.4. Probabilités de transition expérimentales et évaluations pour le xénon I à VI.....	41
4.1.5. Energies expérimentales des niveaux de l'argon I à V.....	45
4.1.6. Probabilités de transition expérimentales et évaluations pour l'argon I à V.....	46
4.2. Sections efficaces et taux des processus atomiques collisionnels.....	49
4.2.1. Les sections efficaces d'excitation par collision électronique.....	49
4.2.1.1. Les codes utilisés, les calculs, les évaluations et les formules quasi-classiques.....	49
4.2.1.2. Excitations depuis les niveaux métastables $1s_3/1s_5$ du xénon et de l'argon neutres	51
4.2.1.3. Excitations depuis les niveaux fondamentaux de l'argon I (xénon I).....	60
4.2.2. Sections efficaces d'ionisation par collision électronique.....	65
4.3. Coefficients de taux des processus collisionnels (dé-excitation électronique et recombinaison à trois corps), intégration et paramétrisation... ..	68
4.4. Sections efficaces et taux de photoionisation et de photorecombinaison; recombinaison diélectronique et à trois corps.....	69
4.5. Inversions de l'ordre des niveaux d'énergie théoriques	74

Partie expérimentale

Chapitre 5. DIAGNOSTIC OPTIQUE DU PROPULSEUR IONIQUE

<u>SPT-50</u>	75
5.1. Le propulseur ionique SPT-50 alimenté par du Xe.....	75
5.2. Etude des spectres.....	76

<u>Chapitre 6. SPECTRES DE DECHARGES A MICRO-ONDES DE XENON ET D'ARGON</u>	78
6.1. Spectres de xénon.....	78
6.1.1. Spectres du xénon I.....	78
6.1.2. Spectres du xénon II.....	81
6.1.3. Comparaison des spectres du Xe II donnés par LANL et par notre modèle.....	83
6.2. Spectres de l'argon neutre.....	85
6.3. Similitudes entre les spectres d'argon et de xénon.....	89
<u>Chapitre 7. SPECTRES DE DECHARGES A BARRIERE DIELECTRIQUE (DBD) DANS LE XENON</u>	90
7.1. Acquisition et étude des spectres (expériences i à iv)	90
<u>Chapitre 8. EXPERIENCE DE TYPE 'BEAM-FOIL': SPECTRES DE XENON DANS L'ULTRAVIOLET</u>	99
8.1. Dispositif expérimental.....	99
8.2. Analyse des spectres expérimentaux.....	99
8.3. Comparaison avec les spectres théoriques.....	102
<u>Chapitre 9. SPECTRES DU REACTEUR A PLASMA DIVA</u>	107
9.1. Dispositif expérimental.....	107
9.2. Analyse des spectres.....	108
<u>Chapitre 10. SPECTRES DU STELLARATOR WEGA</u>	111
10.1. Fonctionnement à l'argon.....	112
10.1.1. Prévisions suivant le modèle coronal.....	112
10.1.2. Analyse des spectres.....	112
10.1.3. Diagnostic optique.....	116
10.2. Fonctionnement au xénon.....	123
<u>Chapitre 11. CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES</u>	128
Références.....	131

RESUME

Le travail de cette thèse a été effectué à l'Université Paris-Sud à Orsay, au centre de données atomiques GAPHYOR du Laboratoire de Physique des Gaz et des Plasmas (LPGP). Elle concerne le développement de modèles Collisionnel-Radiatifs (C-R) des gaz rares, incluant principalement en plus des neutres, les quatre premiers ions d'argon et de xénon (Ar, Xe I-V) et les nombreuses applications des modèles C-R d'Ar et de Xe au diagnostic et à la modélisation. Les modèles prennent en considération la structure des atomes et de leurs ions ainsi qu'un grand nombre de données, notamment les probabilités de transition et les sections efficaces des différents processus intervenant dans le plasma. Ils sont indispensables pour la détermination par spectroscopie d'émission de la densité électronique n_e et de la température électronique T_e des plasmas hors de l'Equilibre Thermodynamique Local (ETL) et pour leur modélisation détaillée, quand les lois de Boltzmann pour les excitations et de Saha pour les ionisations ne sont plus valables. C'est le cas des plasmas présents dans les propulseurs ioniques, dans les dispositifs de fusion thermonucléaire (tokamaks, stellarators) et dans les réacteurs à plasmas entre autres. Le développement de modèles C-R est donc nécessaire pour l'analyse du fonctionnement et pour l'optimisation de ces dispositifs. Ils peuvent aussi décrire des plasmas dans lesquels les électrons ne suivent plus une seule distribution maxwellienne. Pour tenir compte des conditions présentes dans les applications visées, le domaine de validité des modèles développés ici s'étend de 0.1 eV à 100 eV. Comme les modèles C-R sont à 'zéro dimension', nous considérons les plasmas comme étant homogènes et stationnaires et nous résolvons le système des seconds membres des équations de Boltzmann (équations statistiques). La validation de nos modèles inclut une phase d'évaluation d'un nombre considérable de données atomiques et leur comparaison avec celles présentes dans la littérature. Les évaluations ont été réalisées en collaboration avec d'autres centres de données atomiques avec lesquels nous développons des projets conjoints. Les résultats des évaluations font l'objet de rapports GAPHYOR; ils sont présentés et discutés dans des réunions internationales spécialisées et occasionnellement disponibles en ligne.

Une spécificité de nos modèles est qu'ils fournissent des spectres théoriques directement comparables avec l'expérience. Nos spectres théoriques ont été comparés à ceux provenant du code C-R du Los Alamos National Laboratory (LANL), ainsi qu'aux spectres obtenus dans de nombreux dispositifs couvrant un large domaine spectral dans la région de l'infrarouge, du visible et de l'ultraviolet proche (UV) et lointain (VUV) typiquement de 25 nm à 1300 nm. Il s'agit des dispositifs tels que le propulseur ionique prototype de type SPT-50 disponible à l'ONERA alimenté au Xe, et des spectres de décharges dans des cathodes creuses, et de décharges à micro-ondes et luminescente contenant de l'Ar I ainsi que du Xe I et II, rapportés dans l'American Institut of Physics Handbook (AIP57). Des décharges à barrière diélectrique disponibles au LPGP ont été aussi étudiées ainsi que des expériences de type 'beam-foil' réalisées à l'Institut de Physique Nucléaire, Atomique et de Spectroscopie (IPNAS, Université de Liège) dans lesquelles des faisceaux de Xe entrent en collision avec des feuilles de carbone. Une étude spectroscopique expérimentale et théorique du réacteur à

plasma DIVA du LPGP a été aussi effectuée. Les mesures spectrales effectuées dans DIVA et dans d'autres dispositifs disponibles au LPGP font aussi partie du travail de la présente thèse qui comporte notamment un volet expérimental. Nous avons également étudié les spectres obtenus dans le stellarator WEGA (IPPG à Greifswald) fonctionnant à l'Ar ou bien avec du Xe. A travers ce grand nombre d'études théoriques et expérimentales nous sommes arrivés à une validation qui permet d'utiliser nos modèles comme un outil de diagnostic optique puissant, aussi bien à basse température qu'à plus forte densité d'énergie; il donne en premier lieu la densité et la température électroniques du plasma à l'endroit visé.

En plus du diagnostic, les codes qui sont à la base de nos modèles C-R permettent l'extension des modèles de transport disponibles (e.g. code EIRENE) pour tenir compte de l'influence des processus atomiques qui sont déterminants pour l'état du plasma (KAT03).

Le nombre total d'évaluations et d'applications des données que nous avons effectuées dans le cadre de cette thèse étant très élevé (voir: Liste de publications et communications) nous ne présentons ici qu'une partie du travail, illustrant le caractère original de nos recherches.

Liste de publications et communications relatives à cette thèse

Conférences Nationales

- [1] Ch. Berenguer, *Diagnostic Optique des Plasmas industriels à l'Aide de Modèles Collisionnels-Radiatifs (C-R)*, Colloque J.-L. Delcroix, mars 2006, Gif-sur-Yvette (France).
- [2] K. Katsonis, C. Dominique, C. Arnas, Ch. Berenguer, M. Cornille, *Diagnostic Optique des Plasmas des Gaz Rares*, Pôle Plasmas Froids, 3-6 octobre 2006, Bonascre (France).

Réunions Internationales de Coordination de Recherche

- [3] K. Katsonis, R.E.H. Clark, M. Cornille, Jun Yan, Ch. Berenguer, A. Ndiaye, *Application of Rare Gases Collisional-Radiative Models to Fusion Plasmas Optical Diagnostics and Modeling*, RCM Meeting, 26-28 septembre 2007, IAEA, Vienne (Autriche).
- [4] K. Katsonis, R.E.H. Clark, M. Cornille, Jun Yan, Ch. Berenguer, A. Ndiaye, D. Humbert, *Atomic Data for Rare Gases Collisional-Radiative Models for Optical Diagnostics and Modeling of Fusion Plasmas*, DCN Meeting, 3-5 octobre 2007, IAEA, Vienne (Autriche).

Conférences Internationales

- [5] Ch. Berenguer, K. Katsonis, R.E.H. Clark, M. Cornille, M. Ganciu, *Optical Spectroscopy of Lowly Ionised Xe Plasma*, conférence EGAS 38, 7-11 juin 2006, Ischia (Italie).
- [6] K. Katsonis, M. Cornille, R.E.H. Clark, J. Abdallah Jr., Ch. Berenguer, A. Ndiaye, *Transition Probabilities of Important Ar Ions Multiplets*, conférence EGAS 38, 7-11 juin 2006, Ischia (Italie).
- [7] K. Katsonis, M. Cornille, G. Maynard, R.E.H. Clark, J. Abdallah Jr., Ch. Berenguer, A. Ndiaye, *Xe I and Xe II Transition Probabilities and Excitation Cross Sections*, conférence EGAS 38, 7-11 juin 2006, Ischia (Italie).
- [8] K. Katsonis, D. Zhang, Ch. Berenguer, R.E.H. Clark, M. Cornille, WEGA Team, *A Collisional-Radiative Model for Ar I to VI Spectra Diagnostics*, conférence EGAS 38, 7-11 juin 2006, Ischia (Italie).
- [9] K. Katsonis, M. Cornille, D. Humbert, R.E.H. Clark, J. Abdallah Jr., Ch. Berenguer, M. Ganciu, G. Maynard, A. Ndiaye, *Evaluation of the Xe Transition Probabilities*, conférence ICAMDATA 05, 16-19 octobre 2006, Meudon (France).
- [10] K. Katsonis, M. Cornille, Ch. Berenguer, M. Ganciu, A. Ndiaye, M. Pascanou, A.M. Diany, G. Maynard, A. Ricard, J.-P. Sarette, J.R. Vacher, *The GAPHYOR Data Center*, conférence ICAMDATA 05, 16-19 octobre 2006, Meudon (France).
- [11] K. Katsonis, Ch. Berenguer, R.E.H. Clark, M. Cornille, *Collisional-Radiative Models of Low Ionized Rare Gas Plasmas*, conférence ICAMDATA 05, 16-19 octobre 2006, Meudon (France).
- [12] K. Katsonis, R.E.H. Clark, M. Cornille, J. Abdallah Jr., Ch. Berenguer, A. Ndiaye, *Atomic Data for Ar Ions*, conférence ICAMDATA 05, 16-19 octobre 2006, Meudon (France).

- [13] K. Katsonis, R.E.H. Clark, M. Cornille, Ch. Berenguer, D. Humbert, A. Ndiaye, G. Maynard, *Atomic Data for Fusion Reactor Impurities*, conférence ECAMP IX, 7-11 mai 2007, Crète (Grèce).
- [14] K. Katsonis, D. Zhang, R. König, WEGA Team, Ch. Berenguer, R.E.H. Clark, M. Cornille, *Application of Collisional-Radiative Models to Spectroscopic Diagnostics of WEGA*, conférence ECAMP IX, 7-11 mai 2007, Crète (Grèce).
- [15] K. Katsonis, Ch. Berenguer, R.E.H. Clark, M. Cornille, M. Ganciu, *Collisional-Radiative Models for Diagnosis of Xe Plasmas*, conférence ECAMP IX, 7-11 mai 2007, Crète (Grèce).
- [16] K. Katsonis, E. Biéumont, H.-P. Garnir, M. Cornille, Ch. Berenguer, R.E.H. Clark, *Lowly Ionized Xe Spectra in the UV Region*, conférence ECAMP IX, 7-11 mai 2007, Crète (Grèce).
- [17] K. Katsonis, J. Bonnet, D. Packan, Ch. Berenguer, A. Ndiaye, *An Indium Collisional-Radiative Model for Diagnostics of Plasma Thrusters*, conférence ECAMP IX, 7-11 mai 2007, Crète (Grèce).
- [18] K. Katsonis, Jun Yan, R.E.H. Clark, Bin Duan, Hong Zhang, Ch. Berenguer, *Evaluation of Xenon I to IX Main Multiplets Transition Probabilities*, conférence ICPEAC XXV, 25-31 juillet 2007, Freiburg (Allemagne).
- [19] K. Katsonis, Ch. Berenguer, R.E.H. Clark, M. Cornille, *A Collisional-Radiative Model Supporting Lowly Ionized Plasma Diagnostics*, conférence ICPEAC XXV, 25-31 juillet 2007, Freiburg (Allemagne).
- [20] K. Katsonis, R.E.H. Clark, M. Cornille, Ch. Berenguer, D. Humbert, A. Ndiaye, G. Maynard, *Atomic Data for Collisional-Radiative Models Used in Fusion Reactor Plasma Diagnostics*, conférence ICPEAC XXV, 25-31 juillet 2007, Freiburg (Allemagne).
- [21] K. Katsonis, J. Bonnet, D. Packan, Ch. Berenguer, R.E.H. Clark, M. Cornille, G. Maynard, *A Xenon Collisional-Radiative Model for Plasma Thruster Optical Diagnostics and Modeling*, conférence IEPC07, 17-20 septembre 2007, Florence (Italie).
- [22] K. Katsonis, J. Bonnet, D. Packan, Ch. Berenguer, M. Cornille, A. Ndiaye, *Field Emission Electric Thruster Optical Diagnostics Based on an Indium Collisional-Radiative Model*, conférence IEPC07, 17-20 septembre 2007, Florence (Italie).
- [23] A. Dezairi, D. Saifaoui, K. Katsonis, M. Samir, M. Eddahby, Ch. Berenguer, *Dusty Plasma Modeling of the Fusion Reactor Sheath Including Collisional-Radiative Effects*, dans 'Multifacets of Dusty Plasmas', T. Mendonça *et al.* Edts., ICPDP5, AIP Conference proceedings, **1041**, 251, 18-23 mai 2008, Açores (Portugal).
- [24] K. Katsonis, H.-P. Garnir, E. Biéumont, Jun Yan, Ch. Berenguer, R.E.H. Clark, *Xe II to V Spectra in the Far UV Region*, SPPT23, 16-19 juin 2008, Prague (République Tchèque).
- [25] Ch. Berenguer, K. Katsonis, M. Cornille, M. Ganciu, C. Boisse-Laporte, *Diagnosis of Xe Plasmas Using a Collisional-Radiative Model*, SPPT23, 16-19 juin 2008, Prague (République Tchèque).
- [26] R. Srivastava, L. Sharma, Ch. Berenguer, K. Katsonis, R.E.H. Clark, A.D. Stauffer, *Collisional Excitation of the First Two Ar I and Xe I Metastable Levels*, conférence MPS08, 30 juin - 2 juillet 2008, Paris (France).

- [27] K. Katsonis, Ch. Berenguer, R. Srivastava, L. Sharma, R.E.H. Clark, M. Cornille, A.D. Stauffer, *Ar I Transition Probabilities and Excitation Cross Sections Involving the 4s Metastable Levels and the 4/5p Configurations*, conférence EGAS40, 2-5 juillet 2008, Graz (Autriche).
- [28] Ch. Berenguer, K. Katsonis, R. Srivastava, L. Sharma, R.E.H. Clark, A.D. Stauffer, *Excitation of the Xe I 6s Metastables to the 6p and 7p Configurations*, conférence EGAS40, 2-5 juillet 2008, Graz (Autriche).
- [29] K. Katsonis, Ch. Berenguer, R.E.H. Clark, M. Cornille, Jun Yan, *Transition Probabilities in the Third Spectrum of Rare Gases Ar III and Xe III*, conférence ICAMDATA 06, 28-31 octobre 2008, Pékin (Chine).
- [30] K. Katsonis, Ch. Berenguer, R. Srivastava, L. Sharma, R.K. Gangwar, A.D. Stauffer, R.E.H. Clark, *Electron Collision Excitation of the Lower Ar I Levels*, conférence ICAMDATA 06, 28-31 octobre 2008, Pékin (Chine).
- [31] Ch. Berenguer, K. Katsonis, S. Danakas, S. Cohen, P. Tsekeris, M. Cornille, *Study of the First Three Ar I, II, III Spectra Using a C-R Model*, conférence ICAMDATA 06, 28-31 octobre 2008, Pékin (Chine).
- [32] K. Katsonis, Ch. Berenguer, M. Cornille, Jun Yan, *Xe Ions Data for Optical Plasma Diagnostics*, conférence ICAMDATA 06, 28-31 octobre 2008, Pékin (Chine).

Rapports

- [33] Ch. Berenguer, *Application des Modèles Collisionnels Radiatifs aux Plasmas d'Argon et de Xenon Faiblement Ionisés*, Rapport de Stage Master 2, Laboratoire LPGP, Université Paris Sud, juin 2006, Orsay (France).
- [34] K. Katsonis, C. Dominique, C. Arnas, Ch. Berenguer, M. Cornille, *Diagnostic Optique des Plasmas des Gaz Rares*, Rapport LPGP-GA-18, septembre 2006, Orsay (France).
- [35] K. Katsonis, Jun Yan, Ch. Berenguer, *Collaboration of the GAPHYOR Atomic Data Center with the Institut of Applied Physics and Computational Mathematics (IAPCM) of Beijing*, Rapport LPGP-GA-20, 20 mars 2007, Pékin (Chine).
- [36] K. Katsonis, Ch. Berenguer, *Excitation of the Xe I 6s Metastables to the 6p and 7p Configurations*, Rapport LPGP-GA-21, avril 2008, Orsay (France).
- [37] K. Katsonis, Ch. Berenguer, M. Cornille, *Ar I Transition Probabilities and Excitation Cross Sections Involving the 4s Metastable Levels and the 4/5p Configurations*, Rapport LPGP-GA-22, avril 2008, Orsay (France).
- [38] K. Katsonis, Ch. Berenguer, *Electron Collision Excitation of the Lower Ar I Levels*, Rapport LPGP-GA-23, octobre 2008, Orsay (France).

NOMENCLATURE

A_{ij}	=	probabilité de transition du niveau j vers le niveau i
ACE	=	'Atomic Collisions with Electrons', code pour l'excitation électronique
AIPH	=	'American Institut of Physics Handbook', livre dans lequel sont répertoriés des spectres standards (AIP57)
Ar / Xe I, II,..	=	spectres successifs de la séquence homo-nucléaire d'argon et de xénon
A+M	=	Atomique et Moléculaire
CATS	=	'Cowan ATomic Structure', code pour la structure atomique
CbA	=	'Approximation de Coulomb', code Quasi-Classique pour les probabilités de transition
C-R	=	Collisionnel – Radiatif, modèle hors ETL
CRP	=	'Coordinated Research Program', programme coordonné de recherche avec l'IAEA
CTMC	=	'Classical-Trajectory Monte-Carlo', code pour les collisions à peu de corps
CX	=	'Charge eXchange', processus d'échange de charges
DIVA	=	'Dispositif d'Ionisation de la VApeur', réacteur à plasma disponible au LPGP
DBD	=	dispositif de Décharge à Barrière Diélectrique
DW	=	'Distorted Wave', code dans l'approximation d'ondes déformées
EBIT	=	'Electron Beam Ion Trap', dispositif conçu pour l'étude de physique atomique à Shanghai
ECO	=	Equilibre COronal
E_i	=	Energie d'excitation
EIRENE	=	code pour l'étude du transport dans les plasmas
ETL	=	Equilibre Thermodynamique Local
FEPP	=	'Field Emission Electric Propulsion', propulseur électrique à émission de champ
FOMBT	=	'First Order Many Body Theory', code basé sur la théorie de premier ordre des systèmes à peu de corps
g	=	poids statistique
GAPHYOR	=	Centre de Données Atomiques 'GAz PHYsique ORsay'
GRASP	=	code 'General-purpose Relativistic Atomic Structure Package'
H-S	=	Homogène et Stationnaire
IAEA	=	'International Atomic Energy Agency', Agence Internationale pour l'Energie Atomique (AIEA)
IAPCM	=	Institut of Applied Physics and Computational Mathematics de Pékin
IC	=	couplage intermédiaire
ID08	=	code d'identification des raies spectrales, version 08
INTEG08	=	code d'intégration des sections efficaces des processus optimisé, version 08

IPNAS	=	Institut de Physique Nucléaire, Atomique et de Spectroscopie de Liège
IPPG	=	Max-Planck-Institute for Plasma Physics, Greifswald (Allemagne)
IR	=	région spectrale infrarouge
l	=	nombre quantique orbital, $s = 0, p = 1, d = 2, f = 3, \dots$
LANL	=	Los Alamos National Laboratory
LPGP	=	Laboratoire de Physique des Gaz et des Plasmas, Université Paris Sud XI, Orsay
LPTP	=	Laboratoire de Physique et Technologies des Plasmas, Ecole Polytechnique, Palaiseau
MCDF	=	approximation 'Multi-Configuration Dirac-Fock'
n	=	nombre quantique principal
n_e	=	densité électronique
NAGDIS-I	=	dispositif linéaire 'NAGoya University Diverter Simulator'
NIST	=	National Institute for Standards and Technology, Gaithersburg (USA)
ONERA	=	Office National d'Etudes et de Recherches Aéronautiques
PARAM08	=	code de paramétrisation des sections efficaces et des taux des processus optimisé, version 08
Q-C	=	Quasi-Classique
Formule QC	=	formule Quasi-Classique proposée par H.-W. Drawin pour l'ionisation et l'excitation à la base des formules de Gryziński et utilisée dans le cas des gaz rares par K. Katsonis par solution du problème à peu de corps
RDW	=	code dans l'approximation 'Relativistic Distorted Wave', relativiste d'ondes déformées
RR	=	Recombinaison Radiative
SPT-50	=	'Stationary Plasma Thruster', propulseur prototype de 50 mm de diamètre
SST	=	'SUPERSTRUCTURE', code pour la structure atomique
T_e	=	température électronique
TRG-OES	=	'Trace Rare Gas Optical Emission Spectroscopy', technique de spectroscopie d'émission qui consiste à injecter une faible quantité de gaz rare dans un plasma de constitution différente
UV / VUV	=	région spectrale de l'ultraviolet / ultraviolet lointain
Z	=	nombre atomique
α_{col}	=	coefficient de taux du processus collisionnel
α_{ij}	=	coefficient de taux du processus d'excitation par collision électronique
α_I	=	coefficient de taux du processus d'ionisation par collision électronique
λ	=	longueur d'onde
σ_{col}	=	section efficace d'un processus collisionnel
σ_{ij}	=	section efficace d'excitation par collision électronique d'un niveau i vers un niveau j
σ_I	=	section efficace d'ionisation par collision électronique

1. INTRODUCTION

1.1. Plasmas à forte densité d'énergie

Les plasmas à forte densité d'énergie émettent des spectres dans lesquels prédominent les raies des ions plusieurs fois ionisés. Dans la majorité des cas ils se trouvent en dehors de l'Equilibre Thermodynamique Local (ETL). Leur étude nécessite alors:

- i) L'extension des modèles C-R pour inclure les espèces ionisées (III, IV, V, ...) qui apparaissent, et qui prédominent lorsque la T_e est assez élevée. Un nombre suffisant d'espèces ioniques et de niveaux excités doit être introduit dans le modèle, avec les constantes correspondantes, de manière à obtenir des spectres théoriques à comparer avec tous les spectres expérimentaux. Ceci permet d'évaluer les populations des niveaux excités, notamment des métastables dans le cas des gaz rares. Ces populations sont indispensables pour tout diagnostic optique de gaz hors-ETL. Il permet aussi d'obtenir un diagnostic optique par comparaison des spectres théoriques avec les spectres expérimentaux en présence des différentes espèces présentes dans l'expérience. Les modèles C-R permettent aussi d'évaluer l'ionisation (recombinaison) des espèces présentes dans le plasma en présence des niveaux excités. On obtient ainsi une modélisation globale tenant compte des processus de toutes les espèces.
- ii) L'utilisation de modèles C-R valables pour les espèces neutres et une seule fois ionisées de manière à décrire le plasma dans des régions relativement froides comme c'est le cas des plasmas présents près des parois. Ces modèles doivent être aussi incorporés dans les modèles globaux, même pour le cas des plasmas chauds.
- iii) La possibilité technique d'enregistrer des spectres dans la région de l'ultraviolet proche (UV, où se trouve une grande partie du spectre d'émission des espèces faiblement ionisées) et de l'ultra violet lointain (VUV, notamment pour observer les raies des transitions résonnantes). En effet, l'augmentation du degré d'ionisation, donc de la densité d'énergie du plasma, décale les principaux spectres émis vers de plus petites longueurs d'onde.

Dans un plasma constitué d'un seul élément (le Xe neutre et ses ions par exemple), la condition de fermeture provenant du principe de la quasi-neutralité du plasma s'écrit sous la forme:

$$n_{Xe} + 2 n_{Xe}^+ + 3 n_{Xe}^{2+} + 4 n_{Xe}^{3+} + 5 n_{Xe}^{4+} + \dots + (q+1) n_{Xe}^{q+} = n_e$$

(voir e.g. ART66). Cela montre que chaque espèce multi-chargée joue, en plus de son abondance, un rôle proportionnellement pondéré à sa charge. Aussi, plus l'espèce prépondérante est ionisée, plus la densité électronique n_e du plasma est forte.

1.2. Les plasmas d'argon et de xénon

Les plasmas d'argon et de xénon sont très présents dans les applications contemporaines, aussi bien en laboratoire que dans l'industrie, ainsi que dans les études astrophysiques. Le spectre de xénon

neutre lui-même, contrairement aux spectres d'autres gaz rares tels que l'He et l'Ar, ainsi que ceux de leurs ions, qui furent étudiés assez tôt (KAT76 et références citées), est encore relativement mal connu. Pour le xénon, les probabilités de transition existantes, ainsi que les multiples sections efficaces de collision présentent même de nombreuses lacunes, faisant obstacle au développement de bons modèles C-R applicables aux plasmas faiblement et moyennement ionisés de xénon.

En dépit de son prix élevé, le Xe est très utile pour différentes applications car il possède des propriétés intéressantes comme:

- Un nombre atomique élevé ($Z=54$) qui permet de l'utiliser pour refroidir les plasmas des tokamaks, et pour faciliter leur diagnostic, spécialement dans la région du divertor. Mais notons que l'Ar est actuellement privilégié car, contrairement au Xe, il ne présente pas de risques de transmutation (CLA08).
- Une inertie chimique donc une qualité de gaz inerte, qui s'avère souvent utile dans les applications. Cette spécificité est due à la présence de deux électrons s et de six électrons p qui composent sa partie externe (couche extérieure $5s^25p^6$), comme c'est le cas pour l'argon ($3s^23p^6$).
- Une masse importante ainsi que huit électrons périphériques facilement ionisables (grâce à la présence de dix électrons $4d$ dans la couche inférieure), une structure qui diffère de celle de l'Ar et rend le Xe très adéquat à l'alimentation de certains propulseurs.
- La richesse de son spectre qui en fait un gaz très utilisé en éclairage.

En ce qui concerne l'Ar, il possède une structure externe similaire à celle du Xe et donc aussi une relative inertie chimique, c'est pourquoi il a été proposé pour être aussi utilisé en propulsion (KAT03). Il est aussi utilisé en fusion et généralement comme gaz de support de plusieurs dispositifs. Son prix peu élevé facilite son utilisation en grande quantité.

1.3. Les dispositifs expérimentaux

1.3.1. Espèces présentes et état des plasmas

Les densités électroniques rencontrées dans la plupart des dispositifs examinés ici, sont nettement inférieures à celles présentes dans les plasmas à pression atmosphérique. Tant la n_e que le degré d'ionisation varient beaucoup selon le dispositif et les conditions qui y prévalent:

- Dans les propulseurs à plasmas communs, fonctionnant au Xe ou à l'Ar, on observe couramment les raies des quatre premiers spectres (I à IV). Notons que dans les propulseurs à l'indium (FEPP) fonctionnant à températures plus basses, seulement le premier et le deuxième spectres de l'In sont présents.
- Les propulseurs plus puissants contiennent aussi du Xe (Ar) V et VI, les propulseurs actuels atteignant des températures de plus en plus hautes, ceci pour augmenter l'efficacité de la poussée et pour utiliser le combustible plus efficacement. Ainsi, des degrés

d'ionisation plus élevés du Xe (Ar) sont impliqués dans les propulseurs de puissance, nécessitant l'extension du nombre de degrés d'ionisation inclus dans les modèles C-R.

- Près des parois et dans la région du divertor des tokamaks (et des stellarators) contenant exclusivement ou partiellement du Xe (Ar), on observe facilement les spectres de Xe (Ar) I à IV. Au centre du tokamak, le Xe est plus de vingt fois ionisé et reste détectable. L'argon totalement ionisé ('strippé') dans cet endroit, n'est composé que de son noyau (Ar XIX totalement 'strippé') et devient indétectable directement par spectroscopie d'émission. Le Xe pourrait donc être utilisé comme outil de diagnostic au centre des dispositifs de fusion, s'il ne présente pas trop de risques de transmutation.
- Dans les lasers et dans les dispositifs conçus pour l'étude de physique atomique (e.g. EBIT), le Xe peut être jusqu'à plus que trente fois ionisé. Un exemple de dispositif de ce type est l'accélérateur Van de Graff utilisé à l'IPNAS pour l'expérience du type 'beam-foil'. Avec ce dispositif on obtient couramment du Xe et de l'Ar jusqu'à dix fois ionisés.
- Dans les réacteurs à plasmas, les n_e sont occasionnellement plus hautes que dans les autres dispositifs étudiés, et la densité des particules lourdes peut atteindre l'ordre de la densité atmosphérique.

1.3.2. Les dispositifs étudiés

Nous avons étudié systématiquement les premiers états d'ionisation du Xe et de l'Ar. Nous avons appliqué le diagnostic optique mentionné plus haut à un certain nombre de spectres soit mesurés par nous soit fournis par nos collaborateurs et enregistrés afin de diagnostiquer les dispositifs concernés. Il s'agit notamment de spectres acquis dans les dispositifs et conditions suivants:

- A. Un propulseur ionique prototype SPT-50 de l'ONERA de Palaiseau, alimenté par du xénon. Nous y avons identifié les principales raies de Xe I et II.
- B. Des décharges à micro-ondes et une décharge luminescente pour le Xe I et II. Ces mesures, principalement effectuées par Humphreys *et al.* (HUM33, HUM52) et par M. Thekaekara *et al.* (THE57) ont conduit à des spectres étalons qui sont rapportés en détail dans l'American Institut of Physics Handbook édité par D.E. Gray (AIP57). Les spectres d'une décharge de cathode creuse et d'une seconde décharge luminescente contenant de l'Ar I y ont aussi été répertoriés.
- C. Une décharge à barrière diélectrique (DBD) dans une atmosphère de Xe, disponible au Laboratoire de Physique des Gaz et des Plasmas (LPGP) d'Orsay. Ce dispositif a été conçu par M. Ganciu. Des mesures optiques ont été effectuées par M. Ganciu, C. Boisse-Laporte, et Ch. Berenguer. Notre diagnostic a permis de mettre en évidence le fait que la décharge contient principalement du Xe I et II et très peu de Xe III.
- D. Une expérience de type 'beam-foil' pour le Xe fonctionnant à l'Institut de Physique Nucléaire, Atomique et de Spectroscopie (IPNAS) de Liège en Belgique. Les spectres acquis

dans ce dispositif concernant la région de l'ultraviolet proche et lointain (de 25 à 110 nm). Notre modèle C-R a permis l'identification dans cette région des raies des principaux multiplets appartenant au Xe II à V. Un certain nombre de raies non présentes dans la littérature ont aussi pu être identifiées. Cette partie du travail a été présentée dans des congrès internationaux spécialisés (KAT07d, KAT08a) et fait l'objet d'une publication en préparation (BER09b).

- E. Le réacteur à plasma DIVA (Dispositif d'Ionisation de la VApeur) disponible au LPGP, fonctionnant avec de l'argon comme gaz de support. Ce réacteur contient une boucle alimentée en radio-fréquence, ainsi qu'une cathode de type magnétron.
- F. Le stellarator WEGA installé à l'Institut de Physique des Plasmas Max-Planck de Greifswald (IPPG) en Allemagne, dans le cas de son fonctionnement à l'argon pur. Ce dispositif est principalement utilisé pour le développement de nouveaux outils de diagnostic. Les spectres acquis ont été mis à notre disposition par D. Zhang dans le cadre de notre collaboration avec l'équipe 'WEGA Team'. Sur les spectres fournis, l'Ar II et III prédominent; on observe aussi des traces d'Ar IV. Une deuxième campagne d'expériences effectuée en décembre 2008 par Ch. Berenguer, K. Katsonis, P. Tsekeris et WEGA Team, aboutit à des spectres d'argon et aussi de xénon jusqu'à leurs quatrième spectre. La comparaison des spectres des espèces d'Ar avec ceux de Xe, rappellent les résultats obtenus précédemment dans le propulseur SPT-50 de l'école Polytechnique au Laboratoire LPTP, (voir KAT04a) et permettent un diagnostic comparatif du plasma.

L'essentiel du travail nécessaire pour la caractérisation de ces plasmas a été fourni à l'aide de codes que j'ai développés *ad hoc*. Une comparaison minutieuse des différentes acquisitions expérimentales avec nos spectres théoriques a permis de valider nos modèles et de les utiliser comme outils de base pour:

- i) l'étude des spectres des ions observés,
- ii) le calcul des populations des niveaux excités pour les besoins des diagnostics optiques,
- ii) le développement d'un diagnostic optique par comparaison des spectres théoriques avec les spectres expérimentaux.

2. DIAGNOSTIC PAR SPECTROSCOPIE D'EMISSION

2.1. Utilisation de modèles C-R pour le diagnostic optique

Le diagnostic optique que nous avons développé constitue une méthode non intrusive qui permet, en mesurant l'intensité des raies émises,

- a) de définir une n_e et une T_e locales qui résultent des différents processus intervenant dans le plasma étudié, ainsi que
- b) d'évaluer sa cinétique, ses particularités de transport et la dynamique globale.

Il constitue un outil puissant, étant donné qu'il n'est pas perturbateur en comparaison avec les sondes de Langmuir qui en constituent l'alternative. Il peut aussi être effectué en un temps très court. Si le diagnostic optique n'a pas été davantage utilisé, c'est qu'il nécessite l'établissement préalable de modèles C-R dans le cas le plus courant où le plasma n'est pas en équilibre. En leur absence, des évaluations approximatives mettant en jeu des cascades attribuées aux différents niveaux excités et/ou des modèles coronaux ont été essayés, avec des résultats souvent non fiables.

Par ailleurs, l'identification d'une raie devient possible après détermination des propriétés caractéristiques quantiques et des énergies des deux niveaux impliqués dans la transition; ce travail est rendu plus aisé par le calcul de l'intensité de la raie. Or, lorsque le plasma est en dehors de l'ETL, seuls les modèles C-R permettent de connaître les intensités théoriques des raies. La spectroscopie d'émission fournit aussi des informations sur les constituants du plasma et sur les processus y intervenant. C'est pourquoi, des modèles C-R (notamment ceux des gaz rares) ont déjà été utilisés pour le diagnostic. Citons quatre cas typiques:

- i) Celui du modèle C-R d'He I et II, développé en France en 1970 (DRA70) pour le diagnostic des plasmas de fusion.
- ii) Un modèle C-R d'He I, développé initialement en 1979 (FUJ79) et amélioré par la suite avec l'inclusion de nouvelles données atomiques. Ce travail est utilisé au Japon (SAS96) pour le diagnostic du dispositif linéaire NAGDIS-I (Nagoya University Divertor Simulator) qui produit un plasma de n_e variant de 10^{11} cm^{-3} à 10^{13} cm^{-3} et de T_e allant de 5 eV à 20 eV.
- iii) Un modèle C-R d'Ar II à IV qui a été appliqué aux Etats Unis pour diagnostiquer un plasma d'argon en expansion produit par un laser (CHU02). La n_e du plasma y était de l'ordre de 10^{19} cm^{-3} et la T_e était supérieure à 2 eV, allant jusqu'à 8 eV.
- iv) Enfin, pour le xénon, le cas le plus récent du propulseur TSNIMASH D-55 développé en Russie (KAR06) diagnostiqué avec un modèle C-R de Xe I qui se concentre sur les raies du multiplet $6s \leftarrow 6p$ présentes dans l'IR et le visible. La T_e varie de quelques eV loin de

l'axe jusqu'à 50 eV à 5 mm de l'axe. Ce modèle C-R est basé sur des énergies expérimentales comme décrit plus en détail dans le Chap. 3.

Pour obtenir un diagnostic satisfaisant, il est donc nécessaire d'utiliser un modèle C-R détaillé qui tienne compte de:

- i) la structure de l'atome et de ses ions, c'est à dire les niveaux d'énergie et les probabilités de transition (A_{ij}) des principaux multiplets. En effet, l'intensité des raies dans le modèle C-R dépend largement des valeurs de A_{ij} .
- ii) L'excitation par collision électronique (Q_{ij}) vers les différents niveaux excités de chaque espèce. Les taux correspondant jouent un rôle fondamental sur la forme des raies dans les multiplets.
- iii) Les ionisations (ionisation par collision électronique, ionisation par collision ion-neutre et photoionisation pour les plasmas les plus chauds) et les recombinaisons (recombinaison radiative, recombinaison diélectronique, recombinaison à trois corps pour les plasmas les plus denses) impliquant principalement les espèces ayant des états d'ionisation adjacents. L'abondance relative calculée pour chaque espèce dépend essentiellement de la qualité de l'évaluation de ces données.

Les principaux processus intervenant dans le plasma sont décrits plus en détail dans le chapitre suivant (Chap. 3).

2.2. Identification des raies expérimentales

Une comparaison détaillée des spectres théoriques provenant de notre modèle avec ceux obtenus expérimentalement est un travail fastidieux mais indispensable, puisqu'il donne beaucoup d'information sur l'état des plasmas étudiés. Les résultats de ce travail sont décrits dans les Chap. 5 à 10.

Un code FORTRAN (ID08) a été développé pour l'identification des raies expérimentales des différentes espèces et notamment d'argon, de xénon et de leurs ions. Ce code traite les spectres en sélectionnant les raies expérimentales qui sont classées par espèce et par multiplet. Ce code prend en considération un décalage éventuel entre les longueurs d'onde de l'expérience considérée et les longueurs d'onde connues (avec des valeurs données par nos modèles C-R ainsi que par NIST (RAL08)). La largeur des raies est aussi un paramètre d'entrée ajustable en fonction de l'expérience. Ce code a été utilisé pour traiter et analyser de nombreux spectres expérimentaux provenant de plusieurs dispositifs qui contiennent des espèces différentes. Une partie des résultats est présentée dans les Chap. 5 à 10. Le code ID08 a aussi été adapté et utilisé pour traiter des spectres enregistrés dans une lampe à cathode de niobium fonctionnant dans une atmosphère d'argon, fournis par notre collaboratrice S. Kroeger de l'Université de Berlin. Les principales raies de Nb I y ont été identifiées et retirées de manière à obtenir un spectre contenant exclusivement les raies d'Ar I et II.

2.3. Le xénon comme outil de diagnostic optique

Dans le visible, les raies spectrales du Xe I les plus intenses sont généralement les raies ‘rouges’ et ensuite les raies ‘bleues’ appartenant aux multiplets $6s \leftarrow 6p$ et $6s \leftarrow 7p$ respectivement. Les intensités des raies d’un troisième multiplet, le $6p \leftarrow 6d$ peuvent atteindre celles des raies ‘bleues’ lorsque la n_e et la T_e augmentent. La terminologie des couleurs utilisée ici provient du spectre traditionnel d’Ar I (BOG98), bien que le spectre du Xe soit légèrement déplacé vers le rouge par rapport à celui de l’Ar.

Les raies du Xe II prédominantes sont celles des multiplets $6s \leftarrow 6p$, $5d \leftarrow 6p$ et $6p \leftarrow 6d$; les intensités des raies $6p \leftarrow 6d$ peuvent ici dépasser ou égaler celles des raies $5d \leftarrow 6p$ et $6s \leftarrow 6p$ lorsque l’énergie augmente. Notons que par rapport à celui du Xe I, tout le spectre du Xe II est déplacé vers les énergies plus hautes donc ont été observés vers les longueurs d’onde plus petites.

Toujours dans le visible, dans la limite de l’UV en ce qui concerne le Xe III, IV et V, les raies les plus intenses sont celles des multiplets $5d \leftarrow 6p$ et $6s \leftarrow 6p$. La structure de ces trois espèces est telle que les énergies des niveaux $5d$ sont inférieures à celles des niveaux $6s$ (comparativement pour chaque noyau) et les niveaux $5d$ sont plus facilement excités que les $6s$. Les niveaux $4f$ sont aussi assez bas, donc relativement excités et créent des raies d’intensité non négligeable par transitions vers les $5d$ (ainsi que vers certains niveaux $6d$).

Dans les régions de l’ultraviolet proche et lointain (UV, VUV), on observe les raies résonnantes intenses dues à la dé-excitation directe impliquant des configurations faiblement excitées vers le(s) niveau(x) de la configuration fondamentale (un seul niveau pour le Xe I et VII, deux niveaux pour le Xe II, VI, cinq niveaux pour le Xe III, IV, V). Pour le Xe II à V, il s’agit principalement de raies des multiplets $5p \leftarrow 6s$ et $5p \leftarrow 5d$. Pour le Xe V, VI et VII, de nombreuses raies correspondant à des transitions ‘inner-shell’ sont aussi présentes voire occasionnellement prédominantes dans cette région spectrale pour des plasmas à suffisamment haute énergie. Notons que la situation est similaire pour les spectres de l’Ar dus à l’excitation des six électrons p , bien que le nombre quantique principal des niveaux excités soit ici $n = 4$ au lieu de $n = 6$, ce qui rend l’ensemble du spectre moins compact.

2.4. Techniques de diagnostic optique

Pour chaque espèce neutre ou ionisée et dans chaque région du spectre, nous comparons les résultats obtenus avec notre modèle pour une n_e et une T_e données avec les spectres expérimentaux des plasmas que nous souhaitons diagnostiquer. Ainsi nous comparons:

- le rapport des intensités des raies provenant d’espèces différentes, c’est à dire le rapport des raies les plus intenses d’une espèce avec celles des autres espèces présentes. Cela donne un premier diagnostic du plasma et son pourcentage d’ionisation.

- le rapport des intensités des raies d'un multiplet par rapport à celles d'un autre multiplet, pour une même espèce. Ce diagnostic, basé sur la comparaison des raies au sein de la même espèce pour différents multiplets doit donner des résultats concordants avec ceux obtenus lors de la comparaison précédente des raies d'une espèce à l'autre.
- l'intensité relative de chaque raie à l'intérieur d'un même multiplet, ce qui constitue l'aspect de ce multiplet. Cette forme varie avec la n_e et la T_e sauf si le plasma est dans un équilibre coronal.

Lorsque les spectres expérimentaux sont assez étendus, le diagnostic peut être réalisé dans plusieurs régions (diagnostic dans le VUV, l'UV, le visible et l'IR), permettant de confirmer le diagnostic, chaque étude de spectre devant aboutir aux mêmes conditions plasma décrites essentiellement par un couple n_e et T_e .

D'une manière générale, il faut aussi tenir compte du fait que les intensités enregistrées dans un spectre expérimental sont la moyenne des intensités des spectres émis dans les différents endroits du plasma se trouvant sur la ligne de mire de la fibre optique. Il faut donc être prudent en choisissant l'angle de visée. De plus, dans une grande partie des dispositifs, les raies provenant de la région UV sont sévèrement absorbées si le hublot est en verre, ou en partie seulement s'il est en quartz.

2.5. Impuretés et diagnostic optique

Considérons les appareils de fusion qui contiennent inévitablement des impuretés comme un exemple typique. Les impuretés proviennent notamment des parois (C, Fe, W) et à défaut de les éliminer totalement, il est nécessaire de les contrôler. Un autre type d'impuretés provient d'adjonctions parfois introduites délibérément dans le plasma. C'est le cas du Xe dont le potentiel d'ionisation faible en fait un excellent gaz de refroidissement. Dans d'autres cas, les gaz rares peuvent être introduits en faible quantité, pour ne pas perturber le reste du plasma et constituer ainsi un outil de diagnostic valable (HUL82). Tous les gaz rares peuvent en principe être utilisés pour un tel diagnostic nommé souvent 'Trace Rare Gas Optical Emission Spectroscopy' (TRG-OES) car grâce à leur inertie chimique, ils ne perturbent pas du tout ou très peu le plasma. Il est donc important de chercher à établir un modèle C-R pour ces gaz et de le valider en comparant de manière systématique les résultats théoriques avec les valeurs éventuellement mesurées dans des dispositifs expérimentaux et/ou disponibles dans la littérature.

Le diagnostic est aussi possible dans le cas où il y a un mélange de deux ou plusieurs gaz, qui sont introduits en faible proportion dans un plasma de constitution différente. Par exemple, il est possible d'injecter du Xe et de l'Ar dans un réacteur à plasma, permettant ainsi un double diagnostic. Les résultats obtenus à la base du diagnostic avec l'Ar doivent être similaires à ceux obtenus par le diagnostic basé sur le Xe. Dans ce sens là, nous avons conçu un diagnostic optique du stellarator WEGA en ajoutant du Xe dans le plasma d'Ar de base.

Rappelons que quand les plasmas sont très chauds, une grande partie des impuretés est ‘brûlée’ (HUL82). Nous entendons ici par ce terme que tous les électrons sont partis du noyau et il n’y a plus la possibilité d’enregistrer de spectres d’émission correspondants. Toutefois, les collisions de transfert de charge avec les ions de Xe (ou d’Ar si celui-ci n’est pas encore ‘brûlé’) donnent un moyen de diagnostic dans ce cas. Par ailleurs, les structures relativement stables s , s^2 , et p^6 donnent des espèces ‘persistantes’ du type H-like, He-like, Ne-like vers lesquelles nos études devraient s’étendre. Dans ce sens, une collaboration avec l’IPNAS pour étudier les spectres Xe VIII, IX et X est en cours.

3. MODELES COLLISIONNELS-RADIATIFS

3.1. Equations statistiques de Boltzmann

La majorité des plasmas industriels et de laboratoire se trouvent en déséquilibre. Par conséquent les lois de Boltzmann pour les excitations et de Saha pour les ionisations ne sont plus applicables. De plus, la loi de Planck pour les photons peut devenir caduque et les distributions électroniques s'écarter de la maxwellienne. Seul un modèle C-R permet de diagnostiquer de tels plasmas en résolvant l'ensemble des équations statistiques de Boltzmann pour des valeurs données des paramètres caractéristiques ($n_e, n_1, n_2, \dots, T_e, \dots$) du plasma. L'ensemble des équations dites statistiques s'écrit:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} f_i(\vec{r}, \vec{v}, t) + \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} f_i(\vec{r}, \vec{v}, t) + \vec{a}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{v}} f_i(\vec{r}, \vec{v}, t) = \left(\frac{\partial f_i}{\partial t} \right)_C \\ \frac{\partial}{\partial t} f_\nu(\vec{s}) + \frac{c}{n_\nu} \vec{s} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}} f_\nu(\vec{s}) = \left(\frac{\partial f_\nu}{\partial t} \right)_{C-R} \end{cases}$$

où $f_i(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ est une fonction de distribution valable pour l'ensemble des particules de l'espèce i et définie telle que $f_i(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3r d^3v$ soit le nombre probable moyen de particules de l'espèce i dans l'élément de volume d^3r centré en \mathbf{r} et dont la vitesse varie de d^3v autour de la vitesse \mathbf{v} . Pour l'ensemble des premières équations (collisionnelles), \mathbf{a}_i est l'accélération correspondante et l'indice 'C' se réfère aux interactions collisionnelles. En ce qui concerne la dernière équation, relative aux photons, $(c/n_\nu) \cdot \mathbf{s}$ est la vitesse caractéristique de chaque photon et \mathbf{s} le vecteur unitaire correspondant. c est la vitesse de la lumière et n_ν est l'indice de réfraction du milieu à la fréquence ν . L'indice 'C-R' se réfère aux interactions collisionnelles et aux processus radiatifs.

Dans ces équations, le premier membre concerne la variation spatio-temporelle du plasma et devient nul lorsque l'on considère des plasmas homogènes et stationnaires (HS). Le deuxième membre englobe un ensemble de données ayant été auparavant comparées et évaluées. Pour une espèce donnée, nous devons résoudre autant d'équations statistiques que l'on a inclus de niveaux d'énergie. Une équation supplémentaire est nécessaire pour tenir compte des photons.

D'une façon générale, nous avons considéré le plasma comme étant optiquement mince et négligé les coefficients d'échappement Λ décrits par Holstein (HOL47, HOL51), sauf dans certains cas spécifiques impliquant les niveaux résonnants dans les régions optiquement épaisses.

3.2. Modélisation du xénon

La modélisation du Xe (notamment du Xe I à X) est une tâche difficile. En effet, il n'existe que très peu (ou aucune, selon l'espèce) d'expérience(s) concernant les probabilités de transition et les sections efficaces des différents processus dont l'excitation collisionnelle. Or, comme nous l'avons vu, cette dernière est essentielle pour la formation du spectre. De plus, il existe très peu de données calculées et encore moins évaluées disponibles. Cela provient du fait que les résultats des différents codes quantiques ou quasi classiques (Q-C) existants ne sont pas souvent compatibles, rendant difficiles les évaluations. Une difficulté supplémentaire pour obtenir des valeurs raisonnables (notamment pour le Xe I à IV) avec ces codes, peut aussi apparaître du fait que le Xe a une grande masse et un grand nombre d'électrons, d'où des propriétés présentant un caractère relativiste. On voit donc que ce nombre élevé d'électrons ajoute une difficulté supplémentaire en alourdissant les calculs et en compliquant les expériences. Ainsi, même les énergies des niveaux excités, qui font partie des données atomiques les mieux connues, sont ici souvent inexactes, ce qui conduit à des erreurs dans le calcul des A_{ij} et des sections efficaces. Ce problème est décrit en détail dans le Chap. 4. Une raison supplémentaire est que les espèces I à VIII ont des énergies d'ionisation relativement basses, donc des niveaux d'excitation compacts et facilement excitables. Il devient alors nécessaire de tenir compte d'un grand nombre de configurations pour décrire correctement un tel spectre. Ajoutons que contrairement à l'Ar, les niveaux $4f$ (et $5f$) sont situés relativement bas et de ce fait ne peuvent pas être négligés ou considérés comme hydrogénoïdes.

3.3. Résultats obtenus par les modèles C-R

De manière générale, un modèle C-R, donne:

- Une des valeurs: T_e , n_e , n_1 (densité d'atomes ou d'ions de l'espèce considérée) lorsque les deux autres sont connues (voir KAT76). Cela permet de construire des 'diagrammes standard' qui représentent l'évolution de la n_e en fonction de la densité d'atomes ou d'ions n_0 pour des T_e données. Un tel diagramme est représenté sur la Fig. 1.1. Ce diagramme est tiré de KAT76. Il représente l'évolution de n_e en fonction de la densité du niveau du fondamental de l'Ar I pour des T_e variant de 4 à 120 kK. Lorsque la T_e et les n_e et n_1 du plasma sont faibles (en bas à gauche du diagramme), le régime est de type coronal (CO), c'est à dire que toutes les ionisations se font à partir des niveaux du fondamental et les recombinaisons se font vers les niveaux du fondamental. Ce régime est présent dans la couronne solaire d'où le terme 'coronal'. Dans l'absolu, les raies spectrales ne seraient pas visibles dans ce cas extrême, mais en réalité les spectres sont toujours présents bien que les niveaux soient peu peuplés. De ce fait, on peut faire une étude spectroscopique d'un plasma en équilibre coronal. Dans ce cas, la courbe représentant le plasma a une pente égale à 1 et les niveaux sont décrits par la loi de

Saha. Les résultats des modèles CO sont souvent utilisés pour comprendre en première approximation les propriétés du plasma.

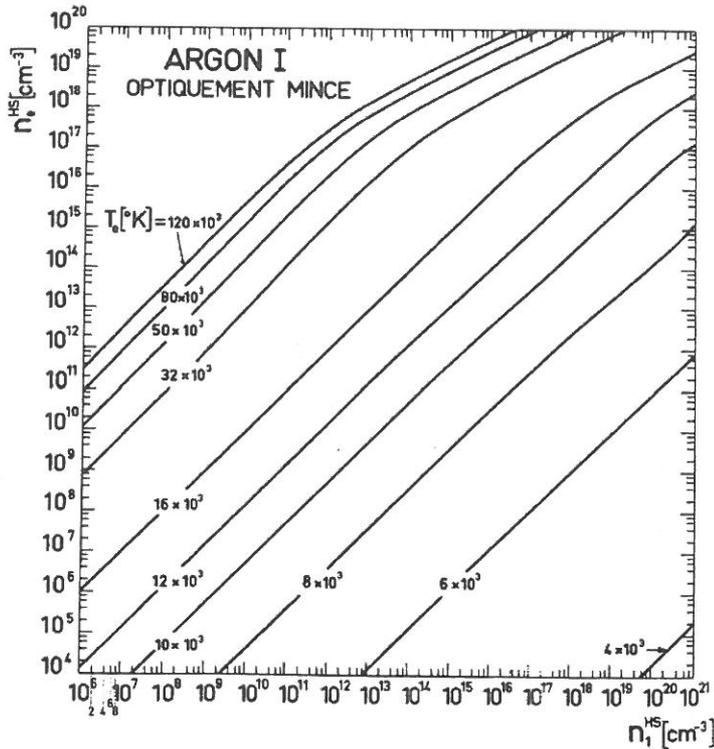


Fig. 1.1. Diagramme standard dans le cas de l'Ar I (plasma homogène et stationnaire). Variations de n_e en fonction de la densité du niveau fondamental de l'Ar I (n_1) pour différentes T_e .

Lorsque le plasma a une T_e et des n_e et n_1 suffisamment grandes (en haut à droite du diagramme), le plasma est en équilibre thermodynamique, au moins local. La pente de sa courbe représentative est alors égale à $\frac{1}{2}$ ce qui montre que la loi de Boltzmann est ici prépondérante. En dehors de ces deux cas, le plasma est en déséquilibre même local. Seul un modèle C-R tenant compte de la structure et des propriétés atomiques des particules le constituant peut alors donner sa composition, son état (c'est à dire ses T_e , n_e et n_1) et son évolution.

- Les densités de populations des niveaux excités des atomes ou des ions émetteurs. A l'aide de ces populations, on peut calculer les intensités des spectres théoriques qui correspondent à des situations variées de plasmas, qui sont en général hors ETL. Par ailleurs, l'identification d'une raie est rendue possible par la détermination des propriétés quantiques et des énergies des deux niveaux impliqués dans la transition ainsi que de l'intensité de la raie. Insistons sur le fait que lorsque le plasma est hors ETL, seuls les modèles C-R permettent de connaître les intensités des raies (KAT76, HUL82).

L'écart à l'ETL pour chaque niveau excité est donné par le rapport du peuplement des niveaux excités calculé par nos modèles C-R à celui correspondant aux conditions d'équilibre (i.e. Saha et Boltzmann); ce rapport est appelé généralement décrement de Saha. Il faut noter que lors de l'éloignement du plasma d'un état ETL ou CO certains niveaux des atomes (ou

ions) restent encore en équilibre, alors que d'autres passent dans un état hors équilibre. Le modèle C-R détermine l'écart éventuel à l'ETL qui n'est pas toujours le même pour chaque niveau. En ce qui concerne la largeur des raies, en général, elle n'a pas été prise en considération dans ce travail mais elle peut donner lieu à un diagnostic supplémentaire. Les spectres théoriques sont à comparer avec les spectres expérimentaux enregistrés dans différents dispositifs contenant des plasmas dans des situations variées. Lorsque la forme des deux spectres (théorique vs expérimental) coïncide, au moins approximativement, on peut prétendre avoir déterminé les populations présentes à l'endroit observé du plasma.

- L'évolution spatio-temporelle du plasma. Pour cela il faut résoudre le système en tenant compte des équations différentielles intervenant dans les premiers membres des équations statistiques de Boltzmann. Ceci n'est possible que pour un nombre très restreint d'équations, essentiellement que les niveaux du fondamental.

De plus, il est possible d'utiliser les modèles C-R comme outil d'évaluation de 'sets' de données. En effet, lorsque les différents calculs donnent des résultats incompatibles pour un multiplet et qu'aucune expérience concernant ces données n'existe, on peut insérer ces 'sets' dans le modèle C-R et calculer les intensités de raies qui en résultent. La comparaison des intensités des raies spectrales obtenues pour chaque 'set' avec celles de spectres expérimentaux permet d'évaluer la qualité du 'set' de données.

3.4. Processus intervenant le plus souvent dans le plasma

L'évaluation des populations dans le modèle C-R est intimement liée à l'état quantique du noyau dressé (e.g. du noyau atomique avec le cortège électronique restant après excitation d'un électron) auquel appartient chaque population. Tandis que la structure de l'ion émetteur est donnée par des paramètres de physique atomique, on doit traiter les particules perturbatrices à l'aide de la physique statistique de manière à décrire leur effet global.

Il est nécessaire de tenir compte d'un maximum de processus intervenant dans le plasma, dont nous décrivons sommairement les plus importants:

i) La dé-excitation spontanée décrite par les probabilités de transition A_{ji} entre un niveau j et un niveau i ayant une énergie inférieure. Un électron se trouvant dans un état excité j d'énergie d'excitation E_j peut tomber vers un état i d'énergie inférieure E_i ; un photon de fréquence ν_{ji} est alors émis. La probabilité de cet événement est appelée coefficient d'émission spontanée et est notée A_{ji} . Pour de nombreuses transitions, A_{ji} est de l'ordre de 10^6 à 10^9 s⁻¹. Ces transitions sont dites permises par opposition aux transitions interdites pour lesquelles A_{ji} est de l'ordre de 10^4 s⁻¹ ou inférieur.

ii) Dans le processus inverse, l'absorption spontanée, un atome dans l'état i peut absorber un photon de fréquence ν_{ji} et transiter vers l'état j d'énergie supérieure. Ce processus doit être considéré. Il est décrit par le coefficient B_{ij} .

iii) Un processus voisin, l'émission stimulée (décrit par le coefficient B_{ji}) apparaît lorsqu'un photon incident facilite une transition d'un niveau supérieur j vers un niveau inférieur i . Dans ce cas, le photon diffusé a une énergie supérieure à celle du photon incident.

Les trois coefficients, décrivant ces trois processus sont liés par les relations:

$$B_{ji}=B_{ij}=B$$

$$A_{ji}/B_{ji}=8\pi h\nu_{ji}^3/c^3$$

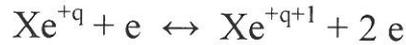
Cela provient du fait que le taux total des transitions j vers i doit être égal à celui des transitions inverses i vers j , car les processus d'absorption et d'émission doivent s'équilibrer.

iv) De même que l'émission spontanée, le processus d'excitation par collision électronique (et de dé-excitation) joue ici aussi un rôle très important dans la formation des spectres du plasma.

Les excitations par collision électronique sont caractérisées par les sections efficaces correspondantes σ_{ij} entre deux niveaux i et j . Le processus inverse, la dé-excitation électronique est aussi considéré. Dans le cas du Xe, on écrit:



v) L'ionisation par choc électronique et la recombinaison à trois corps (diélectronique). L'ionisation d'un atome ou d'un ion de charge q est principalement due à l'ionisation par impact électronique direct, soit pour le Xe:



On peut définir un taux d'ionisation global (I_q) pour un état d'ionisation donné q suivant l'équation:

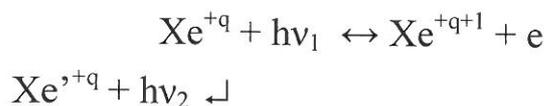
$$I_q = n_e k_q (T_e)$$

où k_q est le taux d'ionisation du niveau q .

Les coefficients caractéristiques des processus collisionnels peuvent s'exprimer en fonction de leurs sections efficaces (σ) intégrées sur la distribution des particules.

Dans ce travail, toutes les sections efficaces d'excitation et d'ionisation ont été intégrées sur de simples distributions maxwelliennes. Notons que les taux de photoionisation sont obtenus en intégrant sur des distributions de Planck. Pour étendre les cas d'applications, il serait possible, d'ajouter une deuxième distribution maxwellienne ou, éventuellement des distributions non-maxwelliennes et intégrer les σ sur ces nouvelles distributions (e.g. Druvestein) mais alors les résultats risquent de perdre leur signification physique et les équations statistiques ne seraient pas valables 'stricto sensu'. En effet, les équations statistiques de Boltzmann sont valables uniquement pour des fonctions de distribution composées d'une ou de plusieurs maxwelliennes.

vi) La photo-ionisation et le processus inverse, la recombinaison radiative. La recombinaison radiative (RR) procède par capture directe d'un électron depuis le continuum suivie de l'émission d'un ou plusieurs photons:



La deuxième étape implique le transfert de l'électron vers un état excité plus ou moins bas via une (ou plusieurs) raie(s) radiative(s); il peut arriver ainsi dans l'état fondamental. Il s'agit d'une cascade de l'électron capturé vers l'état fondamental dont le résultat est un ion (atome) recombinaison.

On peut définir un taux de recombinaison global (R_q) par impact électronique, qui peut s'écrire pour un état q :

$$R_q = n_e \alpha_q (T_e)$$

où α_q est le taux de recombinaison du niveau q .

Quand l'énergie du photon incident est inférieure à celle de l'ionisation, il ne peut y avoir qu'une absorption; elle est d'autant plus probable quand l'énergie du photon est assez proche de celle d'une énergie d'excitation entre deux niveaux.

Dans les dispositifs que nous avons étudiés, il est pratiquement impossible d'observer des collisions impliquant plusieurs photons. Ceci est le contraire de ce qui se passe dans les lasers, où des réactions à deux, trois photons ou plus sont courantes.

vii) Dans la constitution du modèle C-R, nous n'avons pas considéré les collisions élastiques de manière explicite. Leur influence est pourtant essentielle, car ce sont elles (notamment les collisions coulombiennes entre les électrons) qui rendent la fonction de distribution maxwellienne en dehors de l'ETL.

Pour l'ensemble des collisions inélastiques, nous ne considérons que les excitations des atomes et des ions par les électrons et les ionisations simples. Il y a d'autres processus pouvant intervenir dans le plasma dont nous n'avons pas tenu compte dans ce travail. Nous rappelons parmi eux:

viii) Le processus d'attachement dans lequel un électron est capturé par un atome. L'électron peut être capturé dans un état excité de l'atome placé plus haut que le continuum, ce qui crée un état autoionisant. Après un temps qui dépend de son temps de vie dans ce niveau, un photon peut être ré(émis). Il s'agit alors d'un processus d'autodétachement.

ix) L'excitation de niveaux autoionisants, qui peut dans certains cas jouer un rôle important. L'autoionisation est une ionisation par dé-excitation d'un niveau dit autoionisant d'une espèce Xe^{+q} vers un niveau du fondamental de l'espèce suivante Xe^{+q+1} qui dans le cas de l'autoionisation a une énergie inférieure. Une telle différence d'énergie est possible lorsque par exemple un deuxième électron d'une même espèce Xe^{+q} en s'excitant absorbe l'énergie donnée par l'ionisation du premier.

x) Un autre processus est l'échange de charges entre les différents constituants du plasma. Ce processus peut être négligé dans des plasmas de température moyenne dans lesquels les atomes et les ions sont considérés comme immobiles. La recombinaison d'un ion par échange de charges (CX) doit être prise en considération pour l'étude des plasmas très chauds dans lesquels les collisions entre les ions deviennent très fréquentes. Dans un tokamak par exemple l'échange de charges peut s'effectuer par collision entre deux ions du ou des gaz prépondérant(s) (H, He, D, T, Ar, Xe) ou entre le gaz prépondérant et une impureté (W, Fe, C, O, Ar, Xe) éventuellement déjà ionisée.

xi) Si l'énergie de l'électron incident est assez grande, plusieurs électrons peuvent quitter l'atome (ion) dans la collision. Ce processus est appelé ionisation multiple. Une autre possibilité à des énergies assez hautes est qu'un seul électron soit éjecté, mais qu'il provienne des couches internes au sein desquelles il est fortement lié. Ceci est l'ionisation 'inner-shell', qui joue un rôle important dans la génération des rayons X. En effet, un des électrons de la couche externe peut tomber dans la place vacante d'une couche interne et relâcher une quantité importante d'énergie sous forme de radiation.

3.5. Modélisation du type Collisionnel-Radiatif (C-R)

La validité d'un modèle C-R dépend en grande partie de la qualité des données atomiques que l'on y insère (KAT04a). La principale difficulté dans le développement d'un modèle C-R est donc la collection et l'évaluation d'un grand nombre de données atomiques qui sont nécessaires, entrant dans les coefficients du second membre des équations statistiques de Boltzmann appropriées, ce qui constitue la formulation du système d'équations statistiques.

Les modèles C-R homogènes et stationnaires (H-S) ainsi constitués sont des modèles à 'zéro dimension'. Cela signifie que les populations données par la solution du système linéaire sont des populations locales. Comme on l'a déjà dit, une fois que les coefficients d'un modèle sont validés dans l'état stable, l'extension à des plasmas transitoires et non-stationnaires peut être ramenée de manière conceptuelle à un simple problème de résolution d'un système d'équations différentielles, dont le premier membre dépend des variations spatio-temporelles de la fonction de distribution (KAT03). En fait, la solution adéquate du premier membre du système devient alors la contrainte principale. Toutefois, les équations différentielles ne tiennent pas pour autant compte de la géométrie du dispositif dans lequel se trouve le plasma ni de la présence des champs magnétiques, ou des instabilités. Pour cela, il faut utiliser des modèles hydrodynamiques simples ou des modèles du type PIC (Particle-In-Cell) ou des modèles hybrides tenant compte correctement du transport (comme EIRENE, DEGAS, etc.) auxquels il faut adjoindre une partie C-R comme cela est expliqué dans le § 3.6.

3.6. Inclusion des équations statistiques dans des modèles globaux

On peut obtenir une substantielle amélioration des codes de modélisation des plasmas en couplant les équations statistiques du modèle collisionnel-radiatif avec les équations de base du modèle cinétique détaillé incluant la géométrie du plasma et le transport des ions. Les modèles C-R de Xe ou d'Ar pourraient ainsi être adaptés aux codes existants (par exemple EIRENE, LIEN1 développé à l'Institute für Plasmaphysik de Jülich, DEGAS, HULAC, etc.). Ce travail a déjà été effectué pour les cas de l'H et de l'He ce qui constitue un outil puissant utilisé pour la modélisation des plasmas de fusion tant au centre que près des surfaces. Tout en tenant compte de la géométrie du plasma, c'est à dire de la forme des parois du tokamak (ou du stellarator), des champs magnétiques et des instabilités, il prend également en compte des processus atomiques des espèces concernées (H, He). Un tel modèle

pourrait donner une information sur la création locale et la circulation des impuretés d'Ar et de Xe dans des machines existantes (WEGA) ou en construction (ITER, WEDELSTEIN) une fois les modèles C-R d'Ar et/ou de Xe inclus. Le diagnostic optique des gaz rares que l'on pourrait obtenir à l'aide des équations statistiques donnera en plus des informations fiables sur les possibilités du code global pour décrire l'état réel du plasma dans le réacteur. Notons qu'un tel code peut être aussi adapté à la modélisation d'un propulseur ou d'un réacteur à plasma (KAT03).

3.7. Elaboration d'un modèle de xénon

Le présent travail a bénéficié de l'existence de modèles C-R qui avaient été développés précédemment pour l'Ar et le Xe I à III dans l'équipe d'accueil.

En ce qui concerne le Xe, les modèles C-R existants ont été améliorés par l'ajout d'un grand nombre de niveaux et des données associées. Précédemment des modèles de Xe étaient constitués pour les espèces Xe I, II et III de 140 niveaux réels en tout, (non moyennés ou non hydrogénoïdes), (SIS05) ou bien un seul état d'ionisation (CEL08). La dernière version de nos modèles pour le Xe I, II, III comporte 585 niveaux (115 pour le Xe I, 231 pour le Xe II et 169 pour le Xe III). Dans un travail antérieur, le modèle de Xe III ne prenait en compte que des transitions impliquant un seul noyau ($^2P_{3/2}$) alors que le spectre de Xe III est constitué de cinq noyaux et que le plus peuplé parmi eux est le $^2D_{5/2}$. Ainsi, le nombre de configurations et le nombre de multiplets considérés a largement augmenté, permettant une modélisation du spectre suffisamment réaliste.

En plus des niveaux expérimentaux, un grand nombre de niveaux théoriques a été évalué et ajouté. Un nombre important de données radiatives et collisionnelles calculées et mesurées ont fait l'objet d'évaluations améliorées détaillées dans trois rapports GAPHYOR récents (GA-21, GA-22, GA-23).

Pour traiter le cas des plasmas plus énergétiques, le code a été adapté pour inclure les espèces Xe IV et V. Pour le Xe IV, 128 niveaux correspondant aux configurations $4f, 5p, 5d, 6s, 6p, 6d, 7s$ ont été ajoutés et 59 pour le Xe V correspondant aux sept même configurations. Les données atomiques correspondantes ont été évaluées. Il faut noter que les configurations excitées du Xe V sont composées de moins de niveaux que celles du Xe II à IV étant donné qu'il n'y a que deux noyaux pour le Xe V, (voir Chap. 4), ce qui réduit la richesse du spectre et le nombre de niveaux dont il est absolument nécessaire de tenir compte.

Pour l'ensemble des espèces Xe I à V, des changements ont dû être faits dans le code en ce qui concerne le formatage et la manipulation des données. Un code d'intégration (INTEG08) et un code de paramétrisation (PARAM08) ont été développés, permettant de calculer de manière systématique les taux des différents processus (notamment pour les T_e très faibles) et de les paramétrer sous forme de polynômes adéquats. En tout, plus de six mille taux ont été ainsi inclus.

3.8. Raies théoriques et expérimentales

En ce qui concerne les plasmas contenant des espèces de Xe ou d'Ar peu à moyennement ionisées (Xe I à X), il n'existe qu'un seul modèle en plus du nôtre, celui qui est disponible au LANL. Ce code traite par ailleurs tous les éléments et tous les degrés d'ionisation. Il utilise entre autres les codes *ab initio* CATS et ACE (voir Chap. 4) pour le calcul des énergies des niveaux, des A_{ij} et des taux d'excitation et d'ionisation. Un des nombreux avantages de ce modèle est qu'il calcule la puissance perdue par radiation par le plasma au travers de n'importe quelle impureté. Nous verrons plus loin que les spectres donnés par ce modèle sont comparables aux nôtres et proches des spectres expérimentaux que nous avons obtenus. Toutefois, ce modèle n'étant basé que sur des valeurs d'énergies théoriques, certaines longueurs d'onde diffèrent substantiellement des expérimentales. Ainsi, de nombreuses raies sont déplacées (ou même occasionnellement inversées); leur identification devient alors malaisée. Par conséquent, nous avons dû déplacer certaines raies vers leur longueur d'onde expérimentale réelle afin de pouvoir comparer les résultats avec ceux de notre modèle. Un spectre ainsi modifié sera comparé plus loin (Chap. 6) avec celui obtenu par notre modèle et aussi avec celui provenant d'une expérience.

Le premier modèle C-R d'argon I basé sur des niveaux d'énergie expérimentaux fut développé par K. Katsonis (KAT76). Ce modèle a été étendu récemment aux deux premiers ions d'argon et de xénon (SIS05). Les modèles que nous avons développés ici sont basés sur les énergies expérimentales lorsqu'elles existent (les configurations incomplètes étant fermées avec des énergies évaluées). Ces modèles permettent donc de comparer directement les spectres théoriques obtenus aux spectres expérimentaux.

Un modèle C-R de Xe basé sur les énergies expérimentales a aussi été développé plus récemment par G.F. Karabadzak *et al.* (KAR06) pour le diagnostic optique d'un propulseur électrique fonctionnant avec du Xe.

4. DONNEES ATOMIQUES POUR LES GAZ RARES XENON ET ARGON

Un grand nombre de processus atomiques doit être considéré pour décrire correctement les plasmas des gaz rares et l'influence des impuretés éventuelles. Les données atomiques concernant ces processus sont alors fondamentales pour le diagnostic et la modélisation de ces plasmas. Par conséquent, l'évaluation des résultats des calculs et des mesures de ces données effectués par la communauté de physique atomique constitue une part fondamentale de l'ensemble de la présente étude.

Les données expérimentales existantes étant éparées, nous avons utilisé des codes théoriques pour évaluer une partie importante de l'ensemble des données nécessaires. Ce travail, soutenu par le Centre de Données Atomiques GAPHYOR, a bénéficié d'une collaboration avec l'Unité de Données Atomiques et Moléculaires (A+M Data Unit) de l'IAEA de Vienne. C'est ainsi que le Projet de Recherche Coordonné (CRP) de l'IAEA, intitulé '*Atomic Data for Heavy Element Impurities in Fusion Reactors*' qui concerne les applications relatives à la fusion contrôlée (CLA06, CLA08, KAT07g) est directement lié à ce travail. Nous avons également une collaboration avec le 'Laboratory of Computational Physics', Institut of Applied Physics and Computational Mathematics (IAPCM) de Pékin pour l'évaluation des énergies d'excitation et des probabilités de transition des ions du Xe (voir rapport GA-20). En ce qui concerne les données d'excitation collisionnelle, nous collaborons avec R. Srivastava de l'Université de Roorkee, en Inde. Enfin, au niveau national, l'évaluation d'une partie des données a profité des résultats obtenus par le code 'SUPERSTRUCTURE' dont une version est installée au laboratoire LUTH (Laboratoire de l'Univers et de ses Théories) de l'Observatoire de Paris à Meudon.

L'évaluation des données que nous effectuons bénéficie de résultats expérimentaux obtenus dans des laboratoires qui exploitent des dispositifs adéquats avec lesquels nous collaborons (voir Chap. 5, 8, 10). Nous avons aussi effectué un nombre d'expériences dans notre laboratoire (voir Chap. 7 et 9) et en collaboration avec l'Université de Ioannina (BER08b).

4.1. Structure et probabilités de transition du xénon et de l'argon

Lorsque l'énergie disponible dans le plasma augmente, la dé-excitation spontanée devient un processus important conduisant à un refroidissement significatif du plasma. En formulant les équations statistiques du modèle C-R, il est nécessaire d'introduire les niveaux d'énergie et les probabilités de transition le plus précisément possible car de ces valeurs dépend en grande partie la forme des spectres théoriques. En ce qui concerne les énergies, un certain nombre de configurations contenant des niveaux expérimentaux a été répertorié au NIST (RAL08), notamment pour les espèces du Xe et de l'Ar peu à moyennement ionisées. Certaines de ces configurations sont incomplètes et d'autres sont

mêmes absentes; il est donc nécessaire d'effectuer des calculs *ab initio* pour obtenir les énergies E_i manquantes de la configuration. En ce qui concerne les A_{ij} , il est nécessaire de faire des calculs et d'évaluer les probabilités de transition du Xe (Ar) et de leurs ions. Il existe déjà quelques A_{ij} expérimentales pour le Xe, l'Ar et leurs ions, mais l'état actuel d'évaluation n'est pas satisfaisant. Or, il est important d'obtenir des énergies E_i appropriées lorsqu'elles sont manquantes et des A_{ij} (BIE05a, BIE05b, BIE07) fiables, sans quoi l'identification des raies devient impossible. Qui plus est, l'obtention de valeurs de A_{ij} dépend grandement de la connaissance exacte des niveaux d'énergie expérimentaux. En effet les codes Q-C que nous avons souvent utilisés sont basés sur l'approximation de Coulomb introduite par Bates et Damgaard (BAT49); la connaissance précise des longueurs d'onde permet à ces codes d'optimiser les fonctions d'onde correspondantes et d'obtenir ainsi des probabilités de transition satisfaisantes.

4.1.1. Les codes pour la structure et les probabilités de transition

Nous avons principalement utilisé les trois codes suivants pour le calcul des E_i et des A_{ij} :

- 1) Pour les transitions non-résonnantes nous avons utilisé des données expérimentales existantes ainsi que le code CbA disponible à GAPHYOR, un code dans l'Approximation Quasi-Classique (Q-C) basé sur l'Approximation de Coulomb (CbA) décrite dans (BAT49). Ce code, développé par K. Katsonis pour le calcul des A_{ij} des gaz rares à partir des énergies des niveaux expérimentaux a été utilisé de manière systématique pour les transitions non résonnantes. Les valeurs obtenues par CbA ont été comparées aux valeurs expérimentales et aux résultats de codes *ab initio* qui donnent aussi les données pour les niveaux manquants. Dans le cas des transitions résonnantes, une comparaison des valeurs expérimentales avec les résultats des différents codes *ab initio* a aussi été faite.
- 2) Le code CATS (Cowan ATomic Structure) développé par Cowan (COW81) et modifié par Abdallah *et al.* (ABD88) au Los Alamos National Laboratory (LANL), disponible sur le web (LIEN2). Pour les calculs du Xe II à V par ce code, nous avons choisi des bases à 21 configurations: $5s^25p^k$; $5s^25p^{(k-1)}4f$, $5d,5f,5g$, $6s,6p,6d,6f,6g$, $7s,7p,7d,7f,7g$, $8s,8p,8d,8f,8g$, $9s$. Pour le Xe I nous avons ajouté les configurations $9p,9d,9f,9g$, $10s,10p$. En ce qui concerne les ions de l'Ar, nous avons choisi pour le calcul de l'Ar II à V une base similaire contenant les 21 configurations suivantes: $3s^23p^k$; $3s^23p^{(k-1)}3d$, $4s,4p,4d,4f$, $5s,5p,5d,5f,5g$, $6s,6p,6d,6f,6g$, $7s,7p,7d,7f,7g$. Pour l'Ar I nous avons ajouté les configurations $8s,8p$. Ainsi, le nombre de configurations utilisé pour l'Ar II à V et pour le Xe II à V est le même. Pour l'Ar I, l'ajout de six configurations supplémentaires ne s'est pas avéré nécessaire, les résultats obtenus avec 23 configurations étant déjà stabilisés. Nous avons comparé nos résultats avec ceux qui sont obtenus par le code CATS par R.E.H. Clark et fournis pendant les dernières années pour le Xe (Ar) I à V et plus dernièrement pour le Xe VI. A noter qu'un effort a été fait pour optimiser les résultats en utilisant des bases différentes, contenant des couches intérieures

et des excitations doubles. Toutefois, l'utilisation d'une base à 23 configurations donne déjà un résultat satisfaisant pour ce travail.

- 3) Le code SUPERSTRUCTURE (SST) développé par W. Eissner *et al.* (EIS74). Ce code, installé à l'Observatoire de Meudon, est utilisé pour le calcul *ab initio* des A_{ij} . Les valeurs ainsi obtenues par nos collaborateurs, données en couplage intermédiaire (*IC*), sont proches de celles obtenues par d'autres méthodes.
- 4) Le code GRASP2 (LIEN3) dont une version est disponible à l'IAPCM de Pékin. Il a été utilisé pour le calcul des A_{ij} du Xe III à VII dans le cadre de notre collaboration (KAT08e). Ce code, qui est basé sur l'approximation multi-configuration de Dirac-Fock (MCDF), donne des résultats plus satisfaisants pour les degrés d'ionisation élevés.

Les codes *ab initio* décrits en 2) à 4) donnent des énergies théoriques manquantes lorsqu'il n'existe pas d'énergies expérimentales. Toutefois, il faut éviter d'utiliser ces énergies pour l'évaluation des A_{ij} par le code CbA. En effet, les énergies calculées peuvent être trop éloignées des valeurs expérimentales, présentant même des inversions. Le code 1) adapte les paramètres des fonctions d'onde sur des énergies expérimentales exactes et n'aboutit à des résultats très satisfaisants que lorsque les énergies correspondantes sont connues expérimentalement avec la précision nécessaire.

Nous avons comparé en détail les résultats des calculs 1) à 4) entre eux et avec les valeurs existantes dans la littérature. Les évaluations des E_i sont données dans les § 4.1.3. et 4.1.5. Les A_{ij} correspondants sont dans les § 4.1.4. et 4.1.6.

4.1.2. Les couplages et les évaluations

Il faut noter que l'utilisation d'un couplage est souvent utile pour simplifier les calculs de spectres théoriques, de nature assez complexes pour les gaz rares à nombre atomique élevé. Cependant, chaque couplage est valable dans un certain contexte, et, aussi bien dans le cas du couplage *LS* (utilisé ici pour décrire les ions) que dans celui du couplage *jK* (utilisé pour décrire les atomes neutres Ar I, Xe I); quand on se limite par le couplage, on est amené à omettre certaines transitions considérées alors comme interdites. Toutefois, il existe des transitions hors couplage comme par exemple les transitions d'inter-combinaison; elles ont généralement des intensités faibles comparées aux transitions *jK* ou *LS*. A la différence de ce qui se passe pour l'astrophysique, ces transitions sont utilisées pour le diagnostic des plasmas de laboratoire. Nous avons vu qu'en ce qui concerne l'Ar I et le Xe I, les niveaux sont décrits par le couplage *jK*; l'utilisation du couplage *LS* n'est pas recommandée dans ce cas là. Or, de nombreux codes utilisent la description *LS* pour décrire aussi bien les ions que les atomes. Il en résulte que les données calculées par des codes *ab initio* pour une transition notée en couplage *LS* correspondent en réalité à des niveaux décrits en *LSj*. Ainsi deux des niveaux 4s de l'argon, décrits en notation de Paschen 1s₄ et 1s₂, sont en fait notés en *LS* comme ³P et ¹P. Il faut donc être prudent lorsqu'on a recours à des codes utilisant le couplage *LS* pour caractériser ou pour calculer les niveaux d'énergie de Xe I et d'Ar I.

Les différents codes théoriques ont été utilisés dans un effort d'évaluer les A_{ij} des multiplets contenant les transitions les plus importantes de chaque espèce. Les évaluations résultantes ont été présentées à plusieurs congrès (KAT06b, KAT07e, KAT08d, KAT08e).

4.1.3. Niveaux d'énergie du xénon I à VI

Nous présentons ici une description détaillée des caractéristiques des principaux niveaux du Xe neutre et faiblement ionisé.

4.1.3.1. Structure des niveaux des configurations fondamentales

Les configurations fondamentales $5s^25p^k$ (uniquement $5s^2$ pour le Xe VII qui a perdu les six électrons p) se composent d'un (Xe I, VII), deux (Xe II, VI), ou cinq (Xe III, IV, V) niveaux distincts. Ces niveaux sont représentés sur la Fig. 4.1. Le nombre de niveaux excités varie avec le degré d'ionisation qui définit la structure électronique de la couche extérieure. Alors, on s'attend à ce que le nombre de raies dans le spectre varie considérablement en fonction de l'atome ou de l'ion observé.

4.1.3.2. Les énergies des niveaux excités

Dans une compilation récente de Saloman (SAL04) faite au NIST on trouve un grand nombre de raies spectrales du Xe et de ses ions. Nous avons souvent utilisé les résultats de cette évaluation dans nos travaux.

4.1.3.2.a. Les niveaux excités du Xe I

Le spectre du Xe I est relativement bien connu par rapport à celui de ses ions. Le nombre de niveaux répertoriés est plus important dans ce cas là.

En ce qui concerne les niveaux ayant un $n < 9$, onze configurations sont connues complètement. Ce sont les $4f$, $5s, 5p, 5d, 5f$, $6s, 6p, 6f$, $7s, 7f$, $8f$. Il faut préciser que les niveaux f du noyau $^2P_{1/2}$ ne sont connus qu'au dixième de cm^{-1} près. Il en résulte que les quatre niveaux $^2P_{1/2}$ de chacune des configurations $6f'$, $7f'$ et $8f'$ sont pratiquement confondus. Cela était en partie à attendre, parce que ces configurations ont des $n = 6, 7, 8$ et $l = 3$ grands; il en résulte que ces niveaux sont presque hydrogénoïdes.

Huit configurations sont incomplètes pour $n < 9$. Ce sont les $5g$, $6d, 6g$, $7p, 7d$, $8s, 8p, 8d$. Il est donc nécessaire de faire des calculs précis pour obtenir les énergies théoriques les meilleures possibles, qui sont indispensables à la modélisation. En effet, d'abord les configurations introduites dans les modèles doivent être complètes, tous les niveaux de chaque configuration doivent y être présents. Par ailleurs, toutes les configurations correspondant à un nombre quantique n doivent être introduites, dans la mesure du possible.

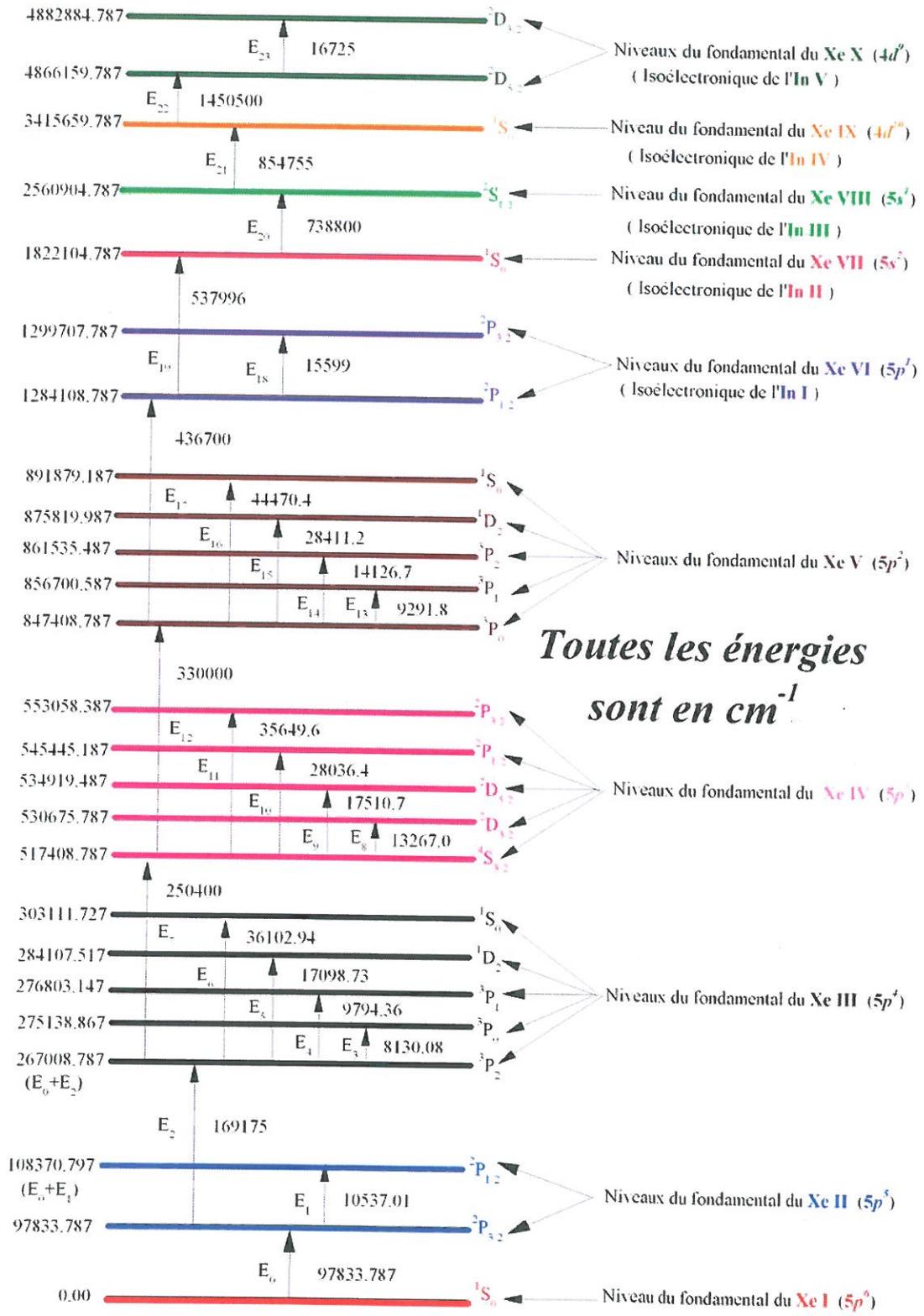


Fig. 4.1. Les composantes des niveaux des fondamentaux de Xe I à Xe X.

Nous avons observé des raies impliquant des niveaux $8p$ et $8d$ (notamment les raies du multiplet $6p \leftarrow 8d$) dans les spectres d'une décharge à barrière diélectrique (DBD) développée au LPGP. Nous avons inclus les niveaux $n = 8$ dans notre modèle ainsi que le nombre nécessaire d'énergies théoriques pour compléter les configurations $6d$, $7d$, $8s$, $8p$ et $8d$. En effet, il manquait trois énergies sur douze pour les configurations $6,7,8d$; un niveau sur quatre pour la configuration $8s$ et quatre niveaux sur dix pour la configuration $8p$. Tous ces niveaux manquants appartiennent au noyau $^2P_{1,2}$, ce qui s'explique en partie par le fait qu'il est placé plus haut en énergie. Les niveaux de ce noyau sont donc plus difficilement excités et moins visibles dans les spectres. En ce qui concerne la configuration $7p$, seuls trois des quatre niveaux $7p'$ ($j_c=1/2$) ont été répertoriés au NIST, bien que les quatre niveaux aient été mesurés précédemment (GRA81). Celui qui n'a pas été répertorié a une imprécision d'à peu près 5 cm^{-1} ce qui dans le spectre optique représente une imprécision de 0.05 nm pour une transition $6s \leftarrow 7p$ située approximativement dans la région de 300 nm . Une comparaison des niveaux expérimentaux $7p$ avec ceux que nous avons calculés à l'aide du code CATS est donnée dans le tableau 4.1. 'E CATS27' et 'EC' sont des énergies théoriques données par le calcul de CATS basé sur 27 configurations.

conf.	termejk	LS	J	g	E expér.	E CATS27	EC+544cm ⁻¹
7p	[1/2]1	3S1	1	3.	87927.131	87813.	
7p	[5/2]2	3D2	2	5.	88351.681	88211.	
7p	[5/2]3	3D3	3	7.	88469.213	88295.	
7p	[3/2]2	3P2	2	5.	88686.500	88441.	
7p	[3/2]1	1P1	1	3.	88744.559	88499.	
7p	[1/2]0	1S0	0	1.	88842.256	88551.	
7p'	[3/2]1	3D1	1	3.	98855.0	98359.	98903.
7p'	[1/2]1	3P1	1	3.	99052.8	98485.	99029.
7p'	[3/2]2	1D2	2	5.	99068.4	98499.	99043.
7p'	[1/2]0	3P0	0	1.	99241. (GH)	98736.	99280.

GH = Grandin et Husson (GRA81)

Tableau 4.1. Energies de la configuration $7p$ du Xe I

Dans la dernière colonne du tableau 4.1 nous avons décalé les quatre énergies $7p'$ de CATS de 544 cm^{-1} en fonction des trois énergies connues expérimentalement de manière à optimiser la valeur de l'énergie manquante. La valeur 544 cm^{-1} utilisée pour le décalage est la moyenne des différences entre les trois énergies $7p'$ données par CATS 27 par rapport à l'expérience. Nous avons ensuite cherché la raie de la transition $6s' (^3P_1) \leftarrow 7p' (^3P_0)$ dans les spectres expérimentaux que nous avons mesurés. Nous l'avons identifiée dans l'un des spectres dont nous avons fait l'acquisition au LPGP dans une décharge à barrière diélectrique. Sur la Fig. 4.2, nous présentons ce spectre dans la région allant de 451.5 à 561.5 nm . En plus de la raie $6s' (^3P_1) \leftarrow 7p' (^3P_0)$ on y voit les raies les plus intenses qui sont identifiées. On observe les raies du Xe I provenant notamment de transitions entre niveaux de grandes

énergies ($6s \leftarrow 7p$, $5d \leftarrow 5f$) ainsi que les raies provenant de transitions entre les niveaux les plus bas du Xe II ($6s \leftarrow 6p$) entre autres. Les longueurs d'onde ont été calibrées avec la raie du Xe II à 460.303 nm. Les longueurs d'onde indiquées sur la Fig. 4.2 sont celles provenant du NIST qui sont utilisées dans nos modèles. La raie notée en bleu et en gras est la raie impliquant le niveau non répertorié par NIST. La longueur d'onde mesurée est approximativement 453.3308 nm (plus ou moins 0.044 nm). Nous avons alors attribué au niveau $7p'$ (3P_0) l'énergie $E_i = 99243.988 \text{ cm}^{-1}$ (plus ou moins 2.2 cm^{-1}). Ce résultat est en accord avec celui obtenu par les mesures existantes (GRA81), qui donnent une énergie de $E_i = 99241. \text{ cm}^{-1}$ (plus ou moins 5 cm^{-1}).

En ce qui concerne les niveaux de notre modèle, nous avons introduit pour les niveaux réels (c'est à dire non moyennés et non hydrogénoïdes) du Xe I, les quatorze configurations suivantes: $4f$, $5s, 5p, 5d, 5f$, $6s, 6p, 6d$, $7s, 7p, 7d$, $8s, 8p, 8d$, soit 115 niveaux, le niveau de la configuration fondamentale ($5p$) inclus. A ces configurations, nous avons ajouté neuf configurations moyennées (voir § 4.1.3.3.) pour chaque noyau ($6f$, $7f$, $8f$, $9s, 9p, 9d$, $10s, 10p$) ainsi que vingt quatre configurations hydrogénoïdes moyennées pour chaque noyau et pour des nombres n et l distincts ($5g$, $6g, 6h$, $7g, 7h, 7i$, $8g, 8h, 8i, 8k$, $9f, 9g, 9f, 9h, 9i, 9k, 9l$, $10f, 10g, 10h, 10i, 10k, 10l, 10m$,) et trois configurations hydrogénoïdes moyennées même pour les configurations avec des nombres l différents ($n=11, 12, 13$), ce qui nous amène à un total de 185 niveaux.

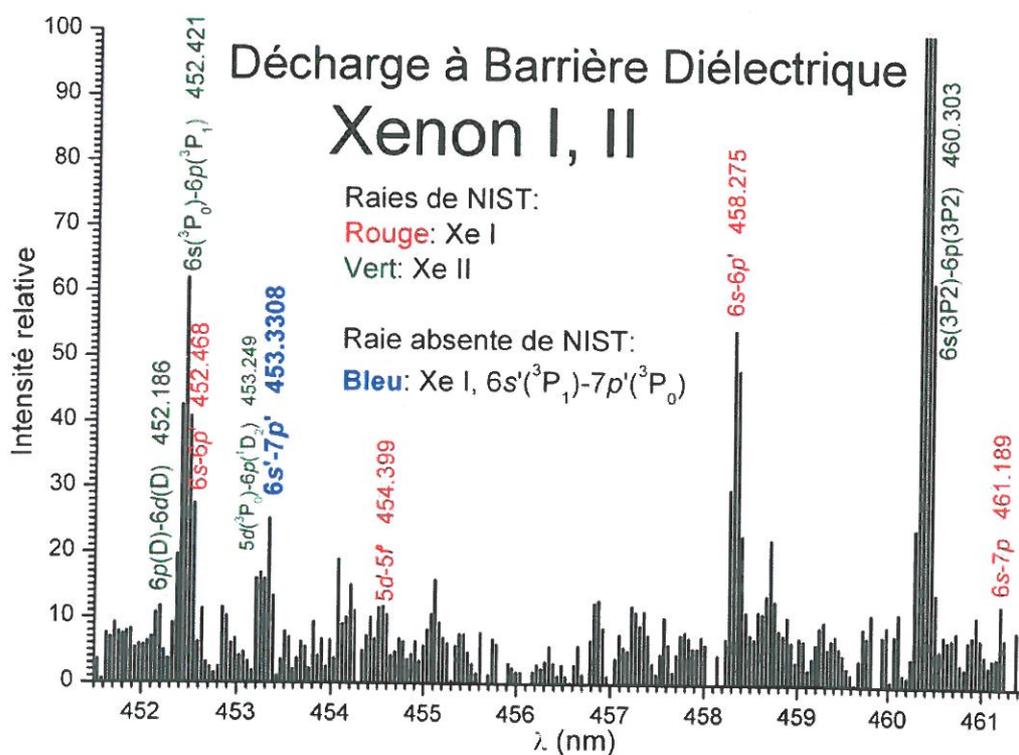


Fig. 4.2. Spectre d'une décharge à barrière diélectrique contenant du xénon enregistré au LPGP.

4.1.3.2.b. Les niveaux excités du Xe II

Le Xe II est moins bien connu que le Xe I. En effet, il y a pour le Xe II plus de raies par multiplet que pour le Xe I, ce qui complique considérablement leur identification. Seulement trois configurations (en plus de la configuration fondamentale) sont connues complètement. Ce sont les $5d$, $6s$ et $6p$, contenant respectivement 28, 8 et 21 niveaux, soit en tout 57 niveaux. La connaissance des six autres configurations est incomplète. Ce sont les $4f$ et $5g$ (avec toutes deux 27 niveaux connus sur 30), les $6d$ (25 niveaux sur 28), les $7s$ (7 niveaux sur 8), les $7p$ (6 niveaux sur 21) et les $8s$ (4 niveaux sur 8). Quelques niveaux des quatre configurations supplémentaires ($5f$, $6f, 6g$, $7g$) sont aussi connus, mais ils sont très épars. Tous ces niveaux ont été introduits dans le modèle (à l'exception des niveaux g ($l = 4$) et des niveaux des couches internes), soit 132 niveaux expérimentaux. Les configurations $7s$, et $6d$ (et $7p$, $8s$ éventuellement) ont du être complétées par des calculs *ab initio*, car ce sont des configurations relativement importantes pour le diagnostic et la modélisation qui ne peuvent pas être absentes du modèle.

Nous avons introduit dans notre modèle les niveaux appartenant aux configurations $4f$, $5p, 5d, 5f$, $6s, 6p, 6d, 6f$, $7s, 7p, 7d$, $8s$, soit 231 niveaux pour le Xe II, les deux niveaux du fondamental inclus. Nous avons cherché à identifier les niveaux $6d$ et $7s$ manquants de NIST dans des spectres UV et VUV (voir détails dans le Chap. 8). Les raies résonnantes connues des multiplets $5p \leftarrow 6d, 7s$ correspondants se trouvent entre 63.5 nm et 67.5 nm. D'après nos calculs d'énergie, nous nous attendons à trouver le reste des raies de ces deux multiplets dans la région allant de 57.0 nm à 63.5 nm. Nous avons tenté de les identifier dans les spectres 'beam-foil' enregistrés à l'IPNAS par nos collaborateurs de l'Université de Liège mais ceci a été impossible, puisque ces raies sont mélangées ('blended') avec celles des multiplets $5p \leftarrow 6s, 5d$ du Xe III, très intenses. En ce qui concerne les raies $5p \leftarrow 8s, 7d$ impliquant des niveaux non connus, nous ne les avons pas observées. Ces raies sont prévues par notre modèle comme étant encore moins intenses.

4.1.3.2.c. Les niveaux excités du Xe III

Pour le Xe III, en plus des cinq niveaux du fondamental et les niveaux 'inner-shell', on trouve des niveaux de la couche extérieure ('outer-shell') appartenant à sept configurations dans la compilation de Saloman. Il s'agit des niveaux des configurations $4f$, $5d, 5f$, $6s, 6p, 6d$, $7s$. Nous les avons tous inclus dans notre modèle à l'exception des niveaux $5f$ puisque la connaissance de la configuration $5f$ est pour le moment très incomplète (cinq niveaux observés sur quarante). Nous arrivons ainsi à 147 niveaux expérimentaux. Ensuite, nous avons été obligés d'y ajouter des niveaux calculés. Exceptées deux configurations, les $6s$ et les $6p$ dont les niveaux sont tous connus expérimentalement, nous avons fait des calculs *ab initio* pour obtenir des énergies pour les niveaux pour lesquels nous n'avons pas d'expérience. En ce qui concerne le niveau $5d(^2D_{3/2})^1S_0$ nous n'avons pas de valeur d'énergie expérimentale. D'après nos calculs de A_{ij} , ce niveau n'est impliqué que dans

des transitions dont les A_{ij} correspondantes sont faibles. Nous n'avons donc pas pu l'identifier dans les spectres optiques.

En ce qui concerne les transitions vers les niveaux du fondamental, le niveau $5d(^2D_{3/2})\ ^1S_0$ ne peut pas donner une transition permise dans l'UV, car c'est un métastable. Notons que l'énergie correspondante donnée par les codes *ab initio* n'est pas précise, ce qui rend difficile son identification.

L'identification de tous les niveaux de cette espèce Xe III est rendue difficile à cause du nombre encore plus important de niveaux dans chaque configuration (cinq niveaux pour le fondamental et cinq continua, voir Fig. 4.1). Nous avons introduit dans nos modèles les configurations $4f, 5p, 5d, 6s, 6p, 6d, 7s$, soit 169 niveaux en tout.

Pour les niveaux $6d$ (27 niveaux connus sur 38) et $7s$ (6 niveaux sur 10), nous avons utilisé l'expérience 'beam-foil' de Liège pour tenter d'identifier certaines raies des multiplets $5p \leftarrow 6d, 7s$, notamment celles appartenant à des niveaux non connus. Nous avons pu identifier quelques raies non connues, mais une incertitude subsiste pour certaines transitions. Un compte rendu détaillé des résultats de cette étude est donné dans un article en préparation (BER09b).

En ce qui concerne les trois espèces Xe I à III, nous avons comparé nos résultats avec ceux provenant d'autres calculs et expériences plus anciens. On peut trouver une liste de références plus anciennes dans SIS05.

4.1.3.2.d. Les autres niveaux excités des ions du Xe

(i) Pour le Xe IV, quatre configurations sont connues en plus des cinq niveaux constituant le fondamental. A l'exception des $4f$ (vingt quatre sur trente), les configurations données par Saloman sont complètes. Il s'agit des configurations $5d$ (28 niveaux), $6s$ (8 niveaux) et $6p$ (21 niveaux). Les niveaux des configurations plus élevées $6d, 7s, 7p, 8s$ sont manquants. Nous avons introduit dans notre modèle les configurations $4f, 5p, 5d, 6s, 6p, 6d, 7s$ soit en tout 128 niveaux. Il faut observer que les configurations du Xe IV ont le même nombre de niveaux que celles de Xe II pour un l donné. Cela est dû au fait que les deux espèces ont les cinq mêmes noyaux d'ionisation ($^3P_2, ^3P_0, ^3P_1, ^1D_2, ^1S_0$) car, ils ont une structure similaire. Pour obtenir une vue claire, nous avons représenté les structures électroniques du Xe II et du Xe IV sur la Fig. 4.3.

Nous pouvons constater que l'électron excité du Xe II (représenté en vert) 'voit' quatre électrons et deux trous sur la couche électronique $5p$. Par ailleurs, l'électron excité du Xe IV 'voit' quand à lui quatre 'trous' et deux électrons dans la couche inférieure $5p$. Il en résulte une similitude entre les structures atomiques de ces deux ions.

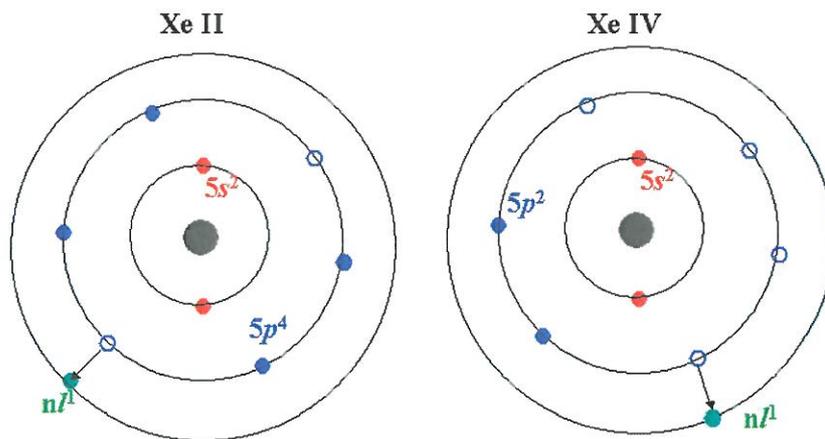


Fig. 4.3. Symétrie dans les structures électroniques du Xe II et IV.

En ce qui concerne l'identification des raies, de même que pour le Xe III, nous avons identifié dans les spectres VUV des raies non répertoriées appartenant à des transitions impliquant des niveaux inconnus. Les résultats de cette étude sont aussi présentés dans (BER09b).

(ii) En ce qui concerne le Xe V, quatre configurations 'outer-shell' complètes sont répertoriées par Saloman, représentant 38 niveaux. Il s'agit des configurations $4f$ (12 niveaux), $5d$ (12 niveaux), $6s$ (4 niveaux) et $6p$ (10 niveaux). Le nombre de niveaux par configuration est analogue à celui du Xe I. En effet le Xe I, comme le Xe V ont les deux mêmes noyaux d'ionisation (notés $^2P_{3/2}$ et $^2P_{1/2}$) provenant de la symétrie électrons-trous de leur structure. Notons que l'ordre d'apparition des deux noyaux est inversé. Sur la Fig. 4.4, nous avons aussi représenté cette symétrie.

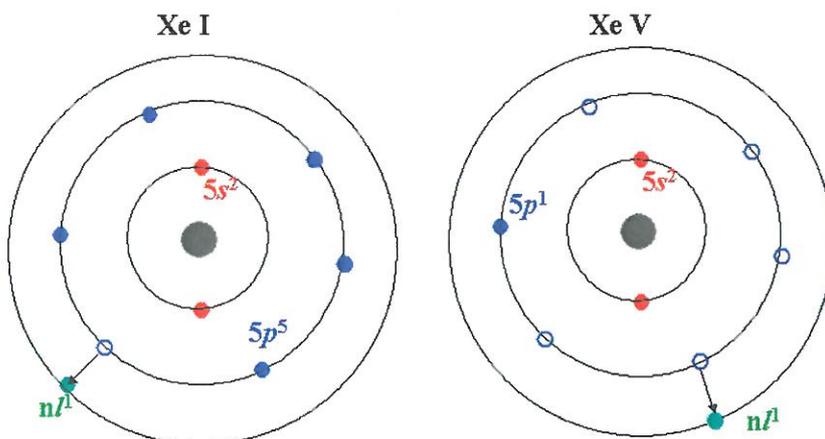


Fig. 4.4. Symétrie dans les structures électroniques du Xe I et V.

Pour le Xe I, l'électron excité 'voit' cinq électrons et un 'trou' dans la couche inférieure. De manière symétrique, l'électron excité du Xe V 'voit' cinq 'trous' et un électron dans la couche inférieure $5p$. Ces similitudes dans les structures sont aussi valables pour les ions de l'Ar I à V car ils

ont la même structure extérieure que les ions du Xe I à V. La structure du Xe (Ar) III, est unique car dans ce cas, l'électron excité 'voit' trois électrons et trois trous.

Pour le Xe V, nous n'avons inclus que des niveaux 'outer-shell' dans notre modèle en plus des cinq niveaux du fondamental. Nous avons fait des calculs de structure pour les configurations manquantes $6d$ et $7s$ et nous avons introduit dans nos modèles les configurations $4f, 5p, 5d, 6s, 6p, 6d, 7s$ complètes.

(iii) Des analyses partielles du spectre et des niveaux d'énergie du Xe VI sont répertoriées dans la compilation de Saloman. Vingt configurations 'outer-shell' sont connues englobant 39 niveaux. Ce sont les $4f, 5p$ (qui composent le fondamental), $5d, 5f, 5g, 6s, 6p, 6d, 6g, 6h, 7s, 7p, 7d, 7h, 7i, 8s, 8p, 8d, 8h, 8i, 8k$. Ces configurations se composent chacune d'un seul niveau (c'est le cas des $6, 7, 8s$) ou de deux niveaux. Cela provient notamment du fait que le Xe VI n'a qu'un seul noyau d'ionisation. Les configurations $6f, 7f, 7g, 8f, 8g$ sont inconnues. En effet, ces niveaux sont positionnés trop bas dans le diagramme de Grotrian pour être hydrogénoïdes et trop haut pour être facilement observables dans les spectres, puisque les deux électrons $5s^2$ sont écrantés par l'électron $5p$ restant. Dans ce contexte, les multiplets 'inner-shell' et ceux provenant de la double excitation jouent un rôle plus important.

En totalité pour les espèces Xe I à V, ce sont près de 700 niveaux qui ont été introduits dans nos modèles. Leurs énergies proviennent des expériences rapportées dans la compilation de Saloman lorsqu'elles existent et des calculs de CATS à 27 et 21 configurations décrits dans le paragraphe 4.1.1. Nous avons aussi comparé ces énergies à celles provenant des calculs effectués avec GRASP, mais celles provenant des calculs de CATS 21/27 ont ici été retenues, puisqu'elles sont plus proches des expériences.

Nous avons déjà vu que la connaissance des niveaux d'énergie est importante pour la modélisation et surtout pour le diagnostic. Les caractéristiques (structures, énergies) des niveaux que nous avons introduits dans nos modèles ont fait l'objet d'un rapport GAPHYOR (GA-24). La précision des énergies varie évidemment avec le degré d'ionisation. La majorité des énergies pour le Xe I est donnée au millième de cm^{-1} près (soit environ 10^{-6} %), au centième pour le Xe II et III (soit environ 1.5×10^{-5} %) et au dixième pour le Xe IV et V (soit environ 2×10^{-4} %). Certaines raies de Xe I (noyau $j_c=1/2$) ont une précision moindre. Par conséquent, certains niveaux sont parfois donnés avec des énergies qui coïncident numériquement. En ce qui concerne le Xe VI, les énergies des niveaux situés plus bas sont connus au dixième de cm^{-1} près (soit environ 2×10^{-4} %) tandis que les énergies situées plus haut ne sont connues qu'au cm^{-1} près (soit environ 2×10^{-3} %). On voit donc que les espèces les plus ionisées sont connues avec moins de précision que les espèces neutres ou peu ionisées. Notons que le spectre des espèces les plus ionisées est plus condensé. D'autre part, les raies sont décalées vers des longueurs d'onde plus petites, souvent plus difficiles à mesurer.

En ce qui concerne la description quantique et la position des niveaux pris en considération, des diagrammes de Grotrian permettent d'en visualiser les énergies et la description quantique. Un tel diagramme illustre l'ensemble de la structure connue d'un ion. Il indique aussi l'énergie des photons émis lors d'une transition entre deux niveaux connus et permet de prévoir dans quelle région du spectre se trouvera la raie d'émission correspondante. A titre d'exemple, nous donnons ci-après le diagramme de Grotrian du Xe IV (Fig. 4.5).

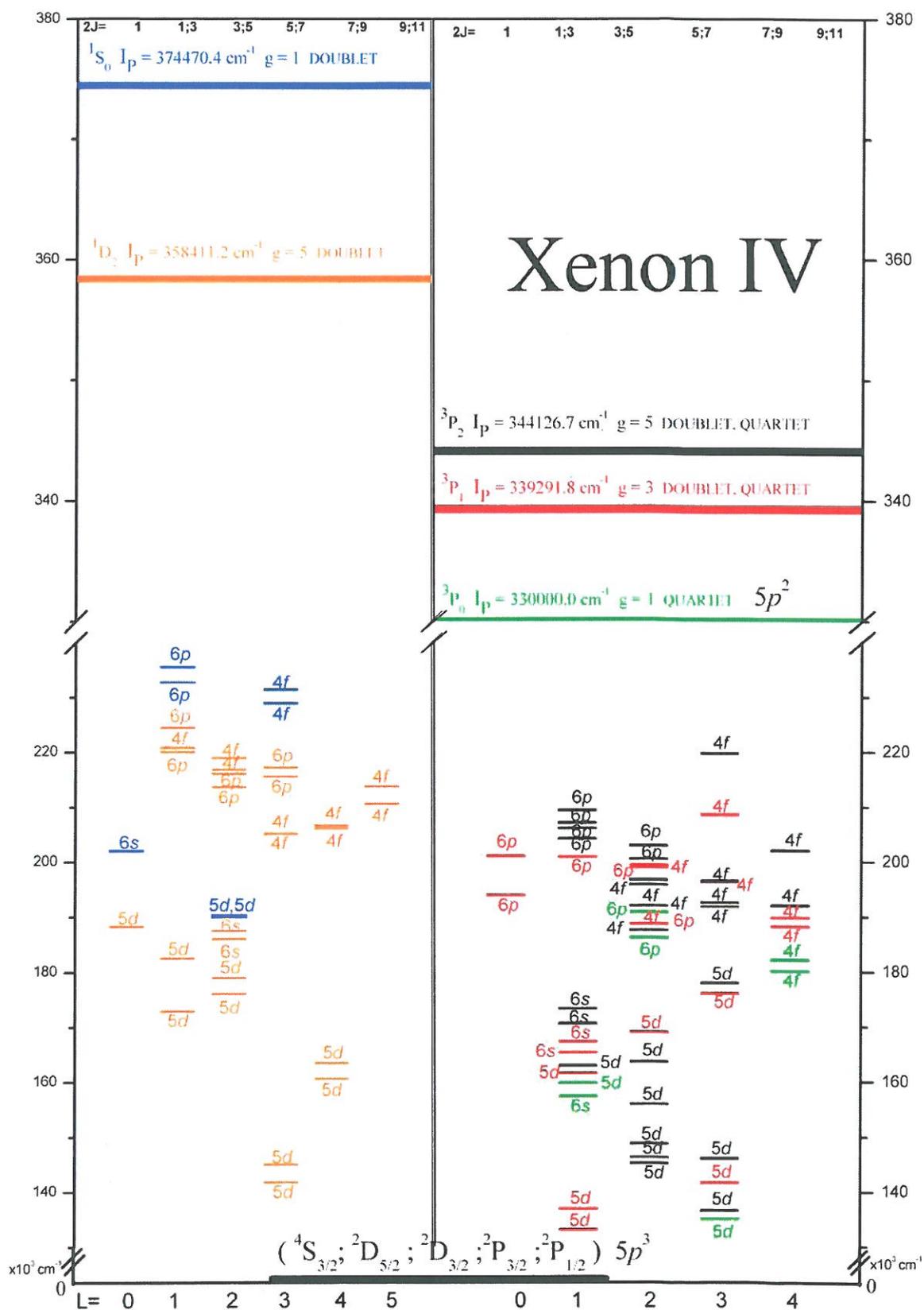


Fig. 4.5. Diagramme de Grotrian du Xe IV.

4.1.3.3. Les niveaux moyennés et hydrogéoïdes

Les niveaux ayant des nombres quantiques élevés nécessitent plus d'énergie pour être excités. De plus, leur peuplement est faible car ils sont proches du continuum et un électron qui s'y trouve peut, s'il absorbe même une petite quantité d'énergie, se détacher en donnant lieu à une ionisation. Il en résulte que le rayonnement provenant des transitions entre ces niveaux est très peu ou pas visible dans les spectres. Nous avons alors considéré ces niveaux comme des moyennes ou des hydrogéoïdes traités ensemble pour deux mêmes nombres quantique l et n .

Pour moyenner les niveaux, nous avons utilisé d'une part les énergies expérimentales lorsqu'elles existent et celles provenant des calculs de CATS lorsque des énergies expérimentales ne sont pas disponibles. On peut alors calculer une énergie unique pour un l et un n donnés. Les énergies et les poids statistiques des niveaux moyennés sont toujours calculés séparément pour chaque noyau.

Pour attribuer les valeurs hydrogéoïdes à certains niveaux moyennés, nous avons utilisé les énergies d'excitation expérimentales de l'H disponibles au NIST. Une formule a été utilisée pour positionner par exemple les énergies des niveaux hydrogéoïdes du Xe neutre excités dans notre modèle:

$$E_{\text{ex}}^{\text{Hoides}} = E_{\text{inf, Xe}} - (R_y - E_{\text{ex}}^{\text{H}}) \times E_{\text{inf, Xe}} / R_y \quad \text{pour le noyau } ^2\text{P}_{3/2}$$
$$E'_{\text{ex}}{}^{\text{Hoides}} = E'_{\text{inf, Xe}} - (R_y - E_{\text{ex}}^{\text{H}}) \times E'_{\text{inf, Xe}} / R_y \quad \text{pour le noyau } ^2\text{P}_{1/2}$$

L'énergie d'ionisation du Xe ($E_{\text{I Xe}} = 12.1$ eV) étant plus basse que celle de l'H ($E_{\text{I H}} = 13.6$ eV), le facteur $E_{\text{inf, Xe}} / R_y$ a été ajouté pour éviter que les niveaux hydrogéoïdes aient des énergies inférieures à celles des niveaux réels (et ne soient excités artificiellement).

En ce qui concerne l'Ar, son énergie d'ionisation ($E_{\text{I Ar}} = 15.8$ eV) étant plus haute que celle de l'H, nous avons utilisé des formules analogues décrites dans (KAT76, p.31).

4.1.4. Probabilités de transition expérimentales et évaluations pour le xénon I à VI

Nous avons comparé en détail les A_{ij} que nous avons obtenues avec les A_{ij} expérimentales et théoriques disponibles dans la littérature.

Pour le Xe I et II, nous avons comparé les résultats des calculs obtenus avec les codes CbA, CATS et SST. Pour le Xe I, il existe quelques valeurs expérimentales répertoriées par le NIST. Il s'agit de vingt trois probabilités de transition dont quinze concernant les transitions résonnantes $5p \leftarrow 5d$; $6s,6d$; $5p \leftarrow 7s,7d$; $5p \leftarrow 8s,8d$; $5p \leftarrow 9d$. En plus, huit probabilités concernant les transitions permises (trois pour le multiplet $6s \leftarrow 6p$, quatre pour le $6s \leftarrow 7p$ et une pour le $6p \leftarrow 7d$). En ce qui concerne les transitions résonnantes du Xe I, le nombre de données disponibles est assez satisfaisant, mais pour les transitions non résonnantes de la région visible, les probabilités

expérimentales existantes sont extrêmement éparpillées. Pour le Xe II, vingt deux A_{ij} expérimentales ont été répertoriées sur le site du NIST. Elles concernent les transitions $6s \leftarrow 6p$; $6p \leftarrow 6d$ et $5d \leftarrow 6p$ dans le visible. Le nombre de A_{ij} expérimentales de Xe II est donc insuffisant pour établir des modèles satisfaisants pour les plasmas de Xe.

Pour le Xe III et IV la situation est encore moins claire. Nous avons comparé systématiquement les A_{ij} des principaux multiplets obtenues avec les codes CbA, CATS, GRASP et SST. Les résultats des évaluations de la structure et des A_{ij} du Xe III et IV sont présentés dans un article en préparation (BER09c). A titre d'exemple, sur la Fig. 4.6. nous présentons le diagramme utilisé pour comparer les valeurs correspondantes du multiplet $6s \leftarrow 6p$ du Xe III. Il n'existe aucune valeur expérimentale de A_{ij} pour ce multiplet, de même d'ailleurs que pour les autres multiplets du Xe III et IV.

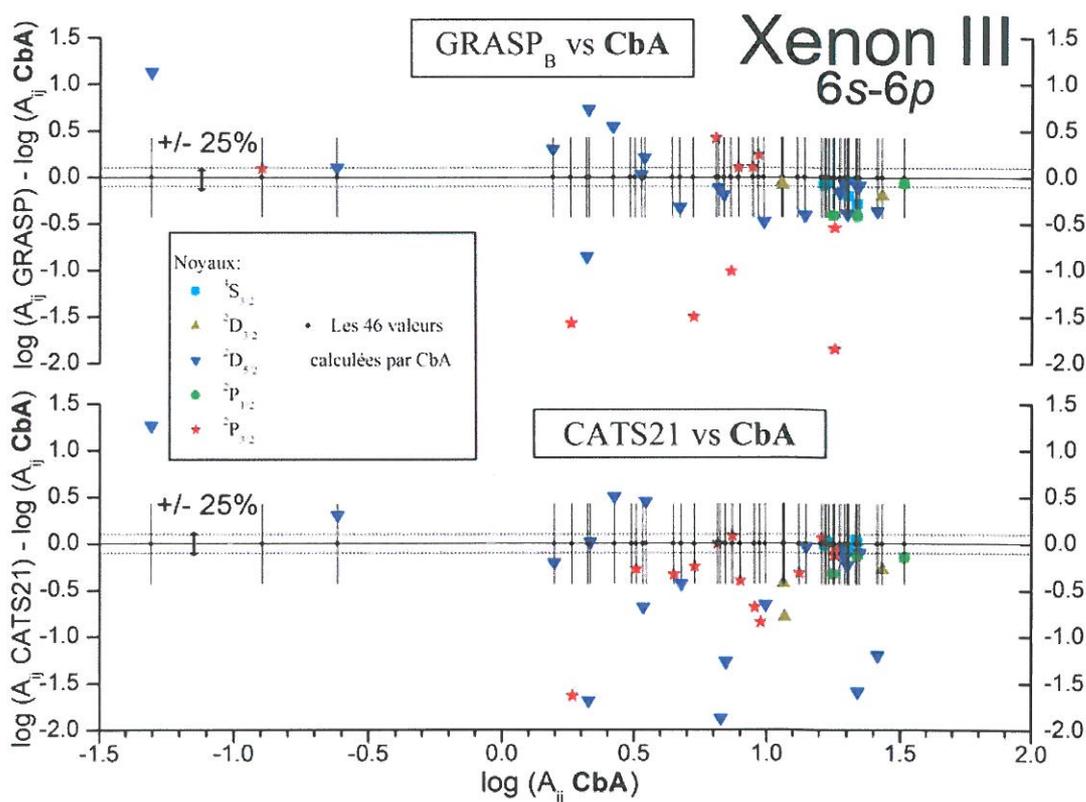


Fig. 4.6. Diagramme d'évaluation des A_{ij} du multiplet $6s \leftarrow 6p$ du Xe III. Comparaison avec les valeurs données par le code CbA. En haut: valeurs calculées avec le code GRASP2 (jauge de Babushkin). En bas: valeurs calculées avec le code CATS à 21 configurations.

L'examen du diagramme montre que:

- i) les valeurs de probabilités obtenues sont en majorité relativement correctes, mais
- ii) il y a un certain nombre de transitions pour lesquelles on obtient des valeurs inexactes.
- iii) Ces transitions ne sont souvent pas les mêmes lorsque l'on utilise le code GRASP ou CATS.

Il s'avère donc nécessaire d'utiliser plusieurs codes; c'est la comparaison des résultats qui permet de juger de la qualité des valeurs obtenues.

Pour le Xe V, nous avons aussi utilisé les codes CbA, CATS et GRASP pour le calcul des A_{ij} des principaux multiplets. Nous avons comparé les A_{ij} des multiplets $5p \leftarrow 5d$, $6s$ et $6s \leftarrow 6p$, $5d \leftarrow 6p$, $5d \leftarrow 4f$ provenant de ces calculs avec celles calculées dans l'approximation Hartree-Fock pseudo-relativiste incluant les effets de polarisation de cœur (CP) par E. Biémont *et al.* (BIE05a). Sur les Figs. 4.7 (a), (b) et (c), nous présentons trois autres diagrammes dans lesquels nous comparons les résultats de ces différents calculs pour les multiplets $6s \leftarrow 6p$, $5d \leftarrow 6p$, $5d \leftarrow 4f$ en fonction des valeurs obtenues avec le code Q-C CbA. Le choix de ces trois multiplets provient du fait que ce sont les seuls que l'on peut constituer avec les énergies expérimentales connues. Il n'existe pas de A_{ij} expérimentales pour le Xe V. Ces trois diagrammes montrent que les codes *ab initio* utilisés donnent un grand pourcentage de valeurs correctes. Néanmoins, pour certaines transitions les résultats provenant de un, de deux ou des trois calculs sont inexacts. Cela montre que:

- i) l'utilisation de plusieurs codes *ab initio* est nécessaire ainsi que l'évaluation les résultats,
- ii) certaines transitions restent mal connues quelque soit le code *ab initio* utilisé. Quand ces transitions ont des énergies connues expérimentalement avec la précision nécessaire, les A_{ij} peuvent être avantageusement évaluées à l'aide d'un code Q-C.

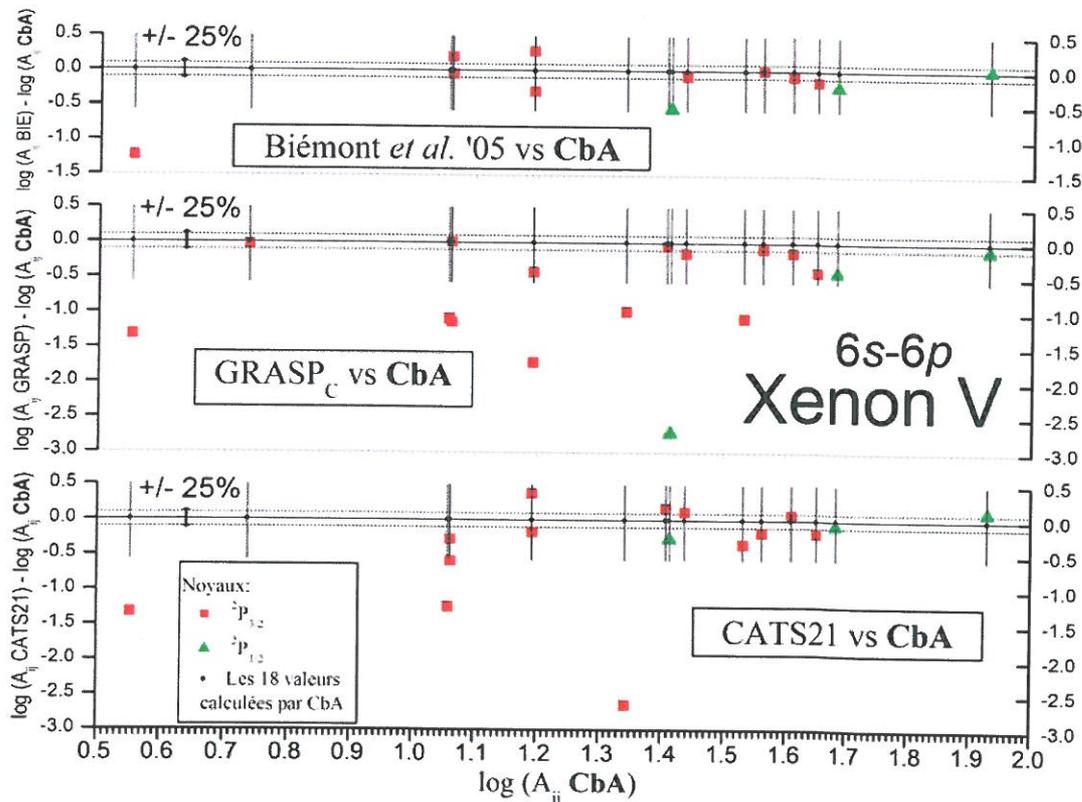


Fig. 4.7 (a) Diagramme d'évaluation des A_{ij} du multiplet $6s \leftarrow 6p$ du Xe V. Comparaison avec les valeurs données par le code CbA. En haut: valeurs calculées par E. Biémont. Au centre: valeurs calculées avec le code GRASP2 (jauge de Coulomb). En bas: valeurs calculées avec le code CATS à 21 configurations.

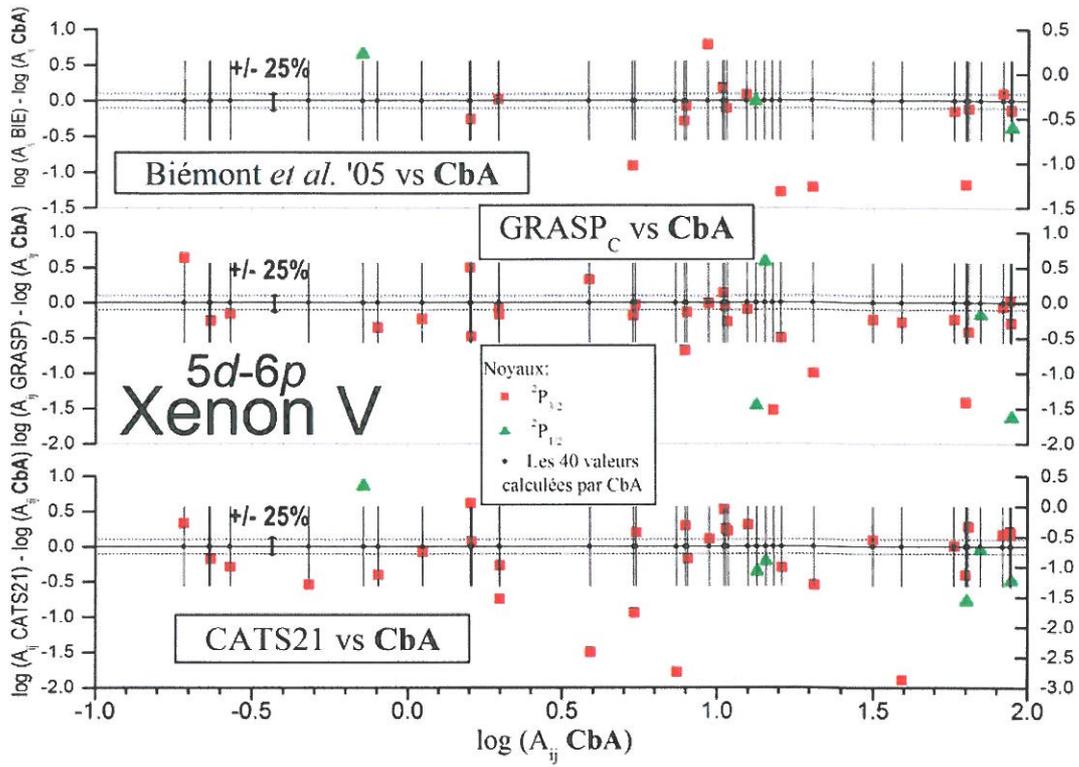


Fig. 4.7 (b) Comme Fig. 4.7 (a) mais pour le multiplet 5d←6p.

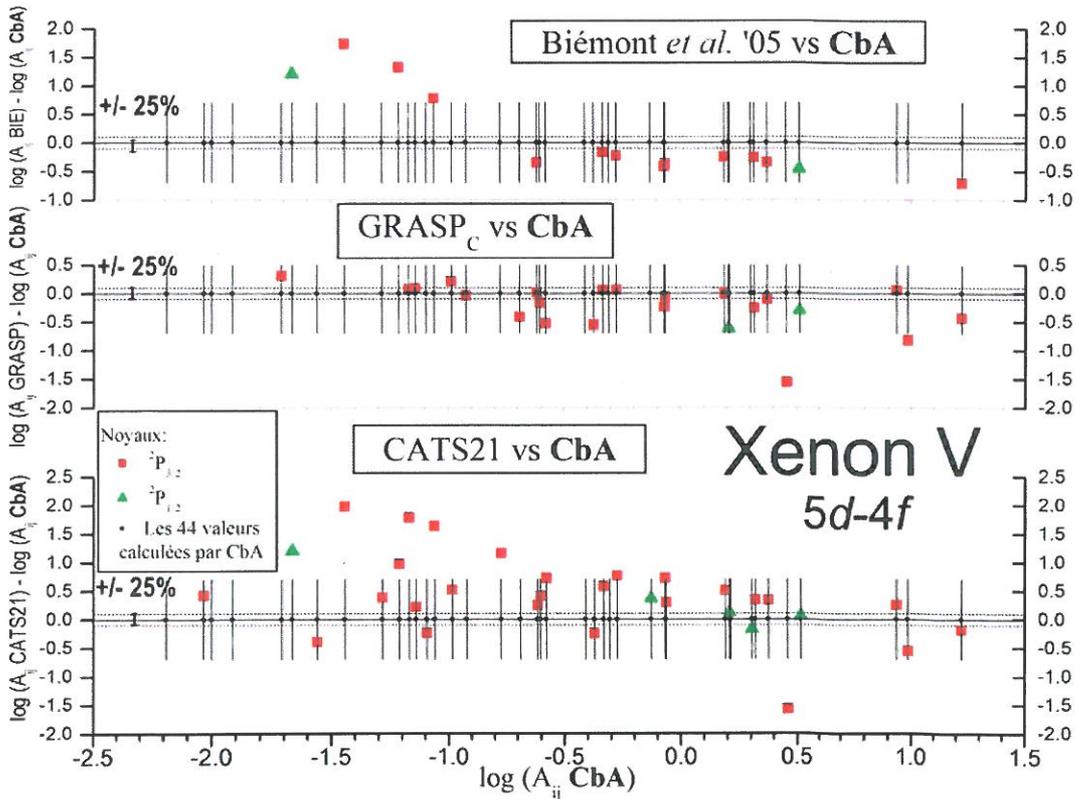


Fig. 4.7 (c) Comme Fig. 4.7 (a) mais pour le multiplet 5d←4f.

Les 'sets' de A_{ij} calculés par les méthodes décrites plus haut et évalués, ont été introduits dans nos modèles C-R pour comparer les intensités des spectres ainsi obtenus avec celles des spectres expérimentaux. Lorsque les intensités coïncident, cela permet d'apprécier la qualité des 'sets' de A_{ij} .

Le calcul d'une A_{ij} renvoie à une 'demi-collision' pour laquelle on ne tient pas compte de la partie décrivant l'approche de l'électron actif. Il ne reste alors que l'étude de la 'fixation' de l'électron à un autre niveau, situé plus bas (dé-excitation) ou plus haut (excitation). Il en résulte que les valeurs de A_{ij} , B_{ij} et σ_{ij} pour une transition donnée sont corrélées. L'évaluation de ces trois données va donc de pair, ce qui est corroboré par l'importance des A_{ij} et σ_{ij} pour définir la forme générale du spectre.

4.1.5. Energies expérimentales des niveaux de l'argon I à V

L'évaluation de NIST en cours n'ayant toujours pas abouti, nous décrivons ici l'état actuel des connaissances des niveaux d'énergie d'argon qui fait l'objet d'évaluations en cours. Une compilation partielle et provisoire des niveaux excités et des principales transitions observées dans les spectres des expériences d'Ar est disponible sur le site du NIST (LIEN4).

Evidemment, les niveaux des configurations fondamentales d'Ar I à X ont une structure similaire à ceux présentés sur la Fig. 4.1 pour le Xe, en raison des six électrons $3p^6$ et des deux électrons $3s^2$ de la couche extérieure.

Notre étude des niveaux excités des espèces d'Ar montre que:

I. Les niveaux d'Ar I sont assez bien connus; en effet, plus de cinq cent niveaux identifiés ont été répertoriés au NIST. Pour les niveaux avec $n < 8$, les données de toutes les configurations sont complètes, à l'exception des configurations $6h$, $7g$ et $7h$. Les niveaux situés le plus bas ont été mesurés avec une grande précision et sont donnés au dix millième de cm^{-1} près. Nous avons inclus dans notre modèle les configurations $3p, 3d, 4s, 4p, 4d, 4f, 5s, 5p, 5d, 5f, 5g, 6s, 6p, 6d, 6f, 6g$ et $7s, 7p, 7d, 7f$, soit 189 niveaux au total. Nous y avons ajouté 12 niveaux moyennés, représentant les configurations $8s, 8p, 8d, 8f, 9s, 9p, 10s$ et 52 niveaux hydrogénoïdes pour les configurations $6h, 7g, 7h, 7i, 8g, 8h, 8i, 8k, 9d, 9f, 9g, 9h, 9i, 9k, 9l, 10p, 10d, 10f, 10g, 10h, 10i, 10k, 10l, 10m, n=11, n=12, n=13$.

II. Plus de 400 niveaux d'Ar II sont référencés par NIST, contre 160 niveaux pour le Xe II avec une précision atteignant toujours le dix millième de cm^{-1} . Cependant, seules les données pour quatre configurations sont complètes. Il s'agit des configurations $3d$ (28 niveaux), $4, 5s$ (8 niveaux pour chacune), et $4p$ (21 niveaux). Pour les autres configurations avec $n < 8$ possibles ($4d, 4f, 5p, 5d, 5f, 5g, 6s, 6p, 6d, 6f, 6g, 6h, 7s, 7p, 7d, 7f, 7g, 7h, 7i$) les données sont donc incomplètes. Or, un grand nombre d'entre elles sont des configurations importantes pour la modélisation (principalement les $4d, 4f, 5p, 5d, 6s, 6p, 6d$). Il devient alors nécessaire de faire des calculs supplémentaires pour obtenir les niveaux manquants.

III. Les niveaux d'Ar III sont beaucoup moins bien connus que ceux d'Ar I et II. Seuls 116 niveaux ont été répertoriés par NIST. Les données ne sont complètes que pour les configurations $4s$ (10 niveaux) et $4p$ (28 niveaux). Il existe quelques données pour les configurations $3d, 4d$ (33 et 27

niveaux sur 38) et 5s (7 niveaux sur 8). Les valeurs pour les autres configurations ‘outer-shell’ (4f, 5p,5d, 6s,6p,6d notamment) ne sont pas connues. Ceci constitue un obstacle au développement de bons modèles C-R pour les plasmas d’Ar.

IV. Les données relatives aux niveaux d’Ar IV sont elles aussi très peu connues. En dehors des niveaux constituant le fondamental et de quelques niveaux ‘inner-shell’, trois configurations ont été répertoriées. Ce sont les 3d (21 niveaux sur 28), 4s (7 niveaux sur 8) et 4p (16 niveaux sur 21). Les données pour ces configurations sont nettement insuffisantes pour couvrir le spectre des raies utilisées pour le diagnostic des plasmas d’Ar IV.

V. Les données pour les niveaux d’Ar V présentent d’importantes lacunes. Quatre configurations en plus du fondamental ont été répertoriées représentant 25 niveaux seulement. Ce sont les 4,5s (4 et 3 niveaux sur 4), 3,4d (9 niveaux sur 12). Les 4p n’ont pas été répertoriés. Ces lacunes ne permettent pas de faire un diagnostic optique correct des plasmas basé sur le spectre de l’Ar V.

Notons que selon le degré d’ionisation, les spectres d’Ar I à V contiennent en moyenne moins de raies que leurs analogues de Xe I à V. En effet, dû au nombre quantique principal de la couche extérieure $n = 3$, l’Ar dispose de moins de niveaux en général que le Xe avec $n = 5$.

Pour résumer la situation de l’Ar I à V, en ce qui concerne les niveaux excités d’Ar I et II, un nombre important de niveaux a été répertorié, tandis que pour les espèces III, IV et V de grandes lacunes persistent. Nous avons donc fait des calculs étendus de structure et d’évaluation des constantes atomiques relatives à de nombreux processus pour compléter les données des espèces d’Ar et en étudier les spectres. Les listes des niveaux d’énergie que nous avons utilisés ont fait l’objet d’un rapport GAPHYOR (GA-25).

4.1.6. Probabilités de transition expérimentales et évaluations pour l’argon I à V

Pour l’Ar I, nous avons comparé les résultats de nos calculs CbA et CATS avec les A_{ij} expérimentales présentes dans le serveur du NIST. En effet, de nombreuses valeurs (428) y sont répertoriées pour l’Ar I. Cela concerne les cinq multiplets résonnants $3p \leftarrow 3,4,5d$; $3p \leftarrow 4,5s$ et les neuf multiplets non résonnants $3d \leftarrow 4f$; $4s \leftarrow 4,5p$; $4p \leftarrow 5,6s$; $4p \leftarrow 3,4,5d$ et $4d \leftarrow 4f$. Quatre valeurs ont aussi été répertoriées pour le multiplet $4p \leftarrow 6d$ et deux valeurs pour le $4s \leftarrow 6p$. Les A_{ij} expérimentales sont proches de celles qui proviennent de nos calculs CbA. Cela s’explique par le fait que les énergies d’Ar I sont connues avec une grande précision, ce qui permet une meilleure optimisation dans le calcul CbA. De plus, la comparaison de ces résultats avec ceux du calcul de CATS à 23 configurations est satisfaisante.

Pour l’Ar II, 307 A_{ij} sont répertoriées sur le site du NIST. Mis à part trois valeurs ‘inner-shell’ et interdites, les A_{ij} répertoriées appartiennent aux multiplets $3p \leftarrow 4s$; $3d \leftarrow 4p$; $4s \leftarrow 4p$; $4p \leftarrow 4d,5s$. Certains multiplets, notamment les $3p \leftarrow 3d$ et $4s \leftarrow 5p$, sont toujours absents. Nous avons comparé les valeurs données par NIST avec celles de nos calculs CbA et de nos calculs CATS à 21 configurations.

Pour l'Ar III, 80 valeurs ont été répertoriées dont 62 appartenant aux multiplets $3d\leftarrow 4p$; $4s\leftarrow 4p$. Le nombre de multiplets connus est donc largement insuffisant pour le diagnostic à l'aide du spectre d'Ar III. La Fig. 4.8 illustre la comparaison des valeurs connues avec celles provenant de nos calculs CbA et CATS21 et aux résultats des calculs SST à 16 configurations.

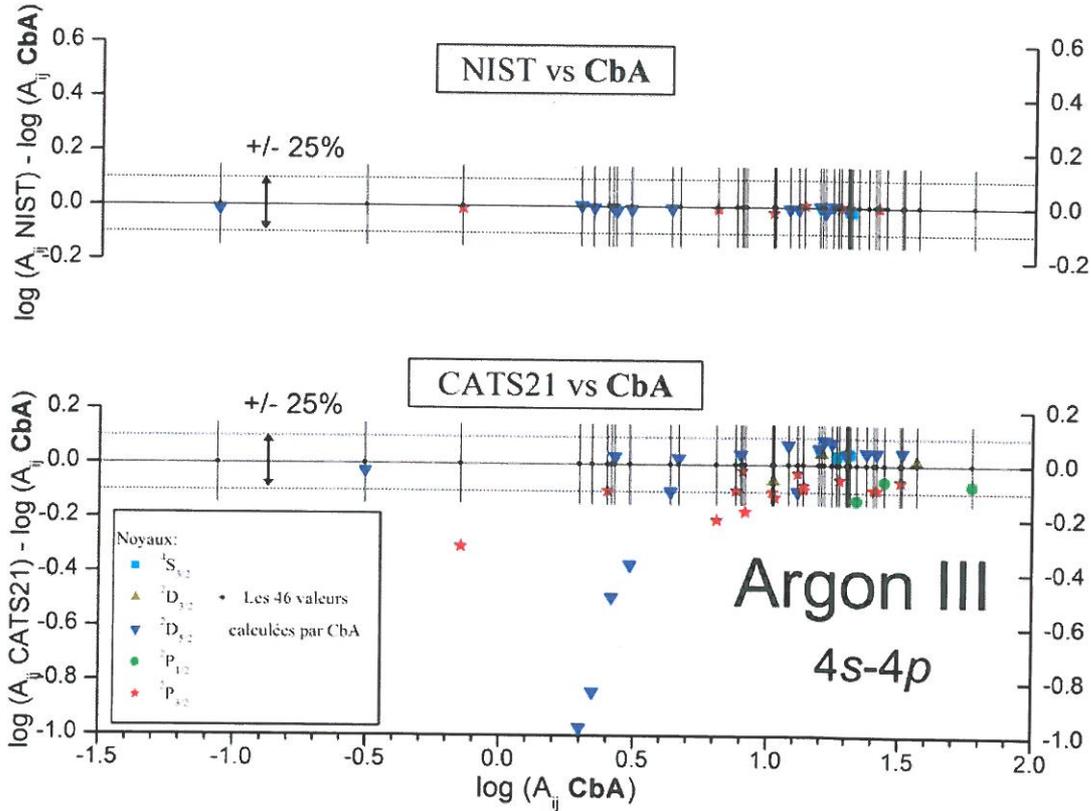


Fig. 4.8. Diagramme d'évaluation des A_{ij} du multiplet $4s\leftarrow 4p$ de l'Ar III. Comparaison avec les valeurs données par le code CbA. En haut: valeurs données par NIST. En bas: valeurs calculées avec le code CATS à 21 configurations.

La comparaison de ce diagramme avec le diagramme similaire pour le Xe III (Fig. 4.6) montre que les valeurs de A_{ij} $4s\leftarrow 4p$ d'Ar III données par CATS sont largement meilleures que celles du multiplet analogue $6s\leftarrow 6p$ du Xe III. Ce travail d'évaluation pour le multiplet $4s\leftarrow 4p$ a été présenté récemment à Pékin (KAT08d). L'étude de la partie haute de ce diagramme montre que:

i) les valeurs données par NIST sont très proches (moins de 5 %) de celles que nous avons calculées avec notre code CbA,

ii) les A_{ij} provenant de NIST sont incomplètes et ne concernent que trois noyaux sur cinq.

L'étude de la partie inférieure du diagramme montre que la grande majorité des A_{ij} provenant de CATS21 est correcte, dans la limite de plus ou moins 25 %. Quatre transitions diffèrent de plus de 100% par rapport aux valeurs de CbA. Elles appartenant toutes les quatre au noyau $^2D_{5/2}$ (triangles bleus). Cela montre que la qualité des résultats varie dans ce cas avec le noyau des niveaux de la transition.

Pour l'Ar I à III, nos résultats ont aussi été comparés avec d'autres valeurs expérimentales et théoriques existantes dont une description peut être consultée dans SIS05.

En ce qui concerne l'Ar IV, 21 valeurs ont été répertoriées sur le site du NIST concernant le multiplet $4s \leftarrow 4p$ uniquement. Les autres données concernent des transitions interdites et 'inner-shell'. Nous avons comparé ces résultats pour le multiplet $4s \leftarrow 4p$ avec ceux de nos calculs. Pour ce multiplet ainsi que pour les quinze multiplets principaux du spectre d'Ar IV obtenus, nous avons comparé les résultats de nos calculs CbA (lorsque des valeurs expérimentales existaient), à ceux de CATS21 et de SST16. Ces codes donnent souvent des résultats en accord.

Pour l'Ar III et IV, nous avons aussi comparé nos résultats avec ceux obtenus précédemment expérimentalement par Djenize et Bukvič (DJE01).

Pour l'Ar V, aucune valeur n'a été répertoriée au NIST concernant des transitions 'outer-shell' permises. Pour étoffer notre modèle, nous avons évalué les constantes nécessaires par comparaison des résultats de nos calculs CbA, CATS21 avec ceux provenant de SST16.

De manière générale, on peut dire que l'état des connaissances des A_{ij} expérimentales pour l'Ar I est assez satisfaisant. Les données sont très éparses pour l'Ar II à IV et inexistantes pour l'Ar V. Il a donc été nécessaire de faire des calculs Q-C et *ab initio* pour évaluer les A_{ij} manquantes des principaux multiplets d'Ar.

4.2. Sections efficaces et taux des processus atomiques collisionnels

Les sections efficaces des processus étudiés n'entrent pas directement dans les équations statistiques, mais interviennent par l'intermédiaire des taux correspondants. C'est ainsi que l'importance des processus augmente en général quand le niveau le plus bas de la transition est peuplé de manière significative. C'est le cas de l'ensemble de niveaux constituant les fondamentaux et des nombreux métastables d'Ar et de Xe et de leurs ions. Une fois que la section efficace d'un processus est évaluée, la section efficace du processus inverse peut être aisément évaluée grâce au principe de micro-réversibilité qui relie les populations de deux états concrets entre eux modifiés suite aux deux processus en jeu.

4.2.1. Les sections efficaces d'excitation par collision électronique

L'excitation par collision électronique est importante pour les modèles C-R car ce processus constitue un des principaux mécanismes de peuplement des niveaux excités. C'est pourquoi nous avons donné beaucoup d'importance à son évaluation. Les sections efficaces d'excitation (σ_{exc}) et les A_{ij} étant comme ont l'a vu précédemment corrélées, le calcul et l'évaluation de ces données doivent être faits conjointement.

4.2.1.1. Les codes utilisés, les calculs, les évaluations et les formules quasi-classiques

Pour l'évaluation des sections efficaces sur lesquelles est basé le calcul des taux des réactions utilisés dans nos modèles, nous avons eu recours aux codes suivants:

1) Le code ACE développé au LANL (CLA88), disponible sur le web (LIEN2). Ce code donne des sections efficaces calculées dans les approximations First Order Many Body Theory (FOMBT), et Distorted Wave (DW). Nous avons souvent utilisé ce dernier pour des comparaisons avec des résultats provenant de codes relativistes.

2) Les codes CTMC basés sur le problème à peu de corps, développés par K. Katsonis.

3) Les formules semi-empiriques pour l'excitation et l'ionisation par collision électronique des atomes proposées par Drawin (DRA66) et utilisées pour les gaz rares par Katsonis (KAT76, DIM01). Ces formules sont conformes aux sections efficaces données par Gryziński (GRY59). Celui-ci a obtenu une solution approximative du problème à trois corps aux limites des grandes et petites énergies. Les formules proposées par Drawin sont notamment en accord avec l'approximation de Born aux grandes énergies. Elles donnent près du seuil une variation conforme à la formule de Rost (voir SAT03).

De manière générale, on peut distinguer trois types d'excitation correspondant aux transitions:

- i) permises,
- ii) interdites à cause de la parité ($\Delta l \neq 1$) (e.g. $4s \rightarrow 5s$)

- iii) interdites à cause du spin ($\Delta s \neq 0$) ou du nombre J ($\Delta J \neq 1$) qui apparaît explicitement dans le couplage ‘généralisé’ LSJ .

Pour l’Ar et le Xe neutres, quand l’atome est décrit dans le couplage LS les niveaux donnent des transitions permises ou interdites en fonction des valeurs de J . Les excitations collisionnelles correspondantes ont des formes différentes et bien distinctes. Les σ_{ij} permises atteignent un pic à une énergie d’environ trois-quatre fois l’énergie du seuil et suivent la loi de Born pour les grandes énergies, en décroissant lentement. Quand des conditions imposées par la mécanique quantique interviennent, cette décroissance peut être bien plus abrupte. Les transitions interdites par la parité ont des pics plus étroits, typiquement pour une énergie de deux fois l’énergie du seuil. Elles ont une pente beaucoup plus raide, due justement à des restrictions quantiques. Pour les grandes énergies elles sont proportionnelles à E^{-1} . Les σ_{ij} des transitions interdites par le spin atteignent leur maximum très près du seuil et pour les grandes énergies elles sont proportionnelles à E^{-3} (BOF04).

Les formules donnant les σ_{ij} permises peuvent être exprimées en fonction de deux paramètres (notés α et β) qui tiennent compte de la différence d’énergie entre les deux niveaux impliqués dans la transition ainsi que de la probabilité de transition correspondante. Une telle formule utilise le paramètre α pour fixer la valeur maximale de σ_{ij} tandis que le paramètre β définit l’énergie pour laquelle le maximum est atteint. Les valeurs α et β peuvent se calculer par la solution CTMC du problème à peu de corps (voir DIM01). Les expériences éventuelles et les résultats de différents calculs dans la mesure où ils sont en accord, permettent de choisir les valeurs de α et β auxquels on attribue la valeur 1 dans la formule empirique de Drawin. Lorsqu’il n’existe pas d’expériences et si les énergies sont connues, l’évaluation de la σ_{ij} dépend uniquement de la qualité des ‘sets’ de A_{ij} calculés. Evidemment, lorsque la transition considérée est interdite dans le couplage utilisé pour les A_{ij} , la valeur de σ_{ij} est donnée comme nulle. Une A_{ij} adaptée très petite peut alors être introduite dans la formule. Cette probabilité, qui est aussi ajoutée dans les données radiatives, joue un rôle de régulation du couplage et tient compte du mélange des niveaux.

Dans la formule simplifiée de Drawin (voir KAT76) les σ_{ij} des transitions non permises pour la parité Δl et pour le spin Δs , dépendent d’un seul paramètre noté Q_{ij}^P ou Q_{ij}^S (Q_{ij}^J) qui fixe la valeur maximale de la σ_{ij} . On peut obtenir la valeur de ce paramètre suivant Sobelman et ses collaborateurs (voir SOB72) sous la forme d’une somme de symboles 6- j de Wigner des nombres quantiques des deux niveaux.

Nous avons fait une étude comparative des résultats obtenus par les formules empiriques avec ceux provenant de calculs récents ‘Relativistic Distorted Wave’ RDW (SRI06, SHA07) et les résultats expérimentaux (JUN05). Les résultats des excitations des niveaux métastables de Xe I ont été présentés dans le rapport GAPHYOR GA-21. Ceux concernant les métastables de l’Ar I ont été présentés dans le rapport GA-22. Enfin, l’étude des transitions résonnantes de l’Ar I ont fait l’objet du rapport GA-23.

4.2.1.2 Excitations depuis les niveaux métastables $1s_3/1s_5$ du xénon et de l'argon neutres

Les σ_{exc} qui impliquent les niveaux métastables doivent être connues avec précision car les métastables, peuplés préférentiellement, jouent un rôle important dans le peuplement des autres niveaux excités.

Les raies les plus intenses de l'atome de Xe (Ar) appartiennent au multiplet $6s \leftarrow 6p$ ($4s \leftarrow 4p$). Or, les niveaux $6p$ ($4p$) sont fortement peuplés à partir des niveaux métastables $6s$ ($4s$). Les transitions spontanées de ces dernières vers les niveaux $5p$ ($3p$) sont interdites en ce qui concerne les métastables entre eux. Il est donc nécessaire pour la description des spectres des atomes neutres de Xe (Ar) de connaître correctement les populations des métastables $6s$ ($4s$) et donc les σ_{exc} des transitions résonnantes et interdites $5p \rightarrow 6s$ ($3p \rightarrow 4s$) d'une part et des multiplets $6s \rightarrow 6p,7p$ ($4s \rightarrow 4p,5p$) d'autre part.

Nous avons étudié en détail les transitions $6s \leftarrow 6p,7p$ pour le Xe I ($4s \leftarrow 4p,5p$ pour l'Ar I) impliquant les deux niveaux métastables $1s_3/1s_5$ de la configuration $6s$ ($4s$). Les transitions depuis les niveaux $6s$ ($4s$) $1s_3/1s_5$ vers le niveau fondamental $5p$ ($3p$) n'étant pas permises, ces niveaux sont métastables au vu du fait qu'ils sont situés en bas du diagramme de Grotrian. Ils ne contribuent pas aux transitions résonnantes comme nous le verrons dans le paragraphe suivant. Généralement, les deux configurations $6p,7p$ ($4p,5p$) donnent les raies les plus intenses de la partie visible du spectre (les raies 'rouges' et 'bleues' respectivement). Une comparaison a été faite entre les σ_{ij} provenant de calculs récents basés sur l'approximation d'ondes déformées relativiste (RDW) par Srivastava *et al.* (SRI06, SHA07) et ceux que nous avons calculés avec le code ACE, lequel est basé sur l'approximation DW non relativiste, des évaluations CTMC et des formules empiriques. Pour le multiplet $4s \rightarrow 4p$ d'Ar I, ces résultats ont aussi été comparés avec les calculs existants dans la littérature (MAL00, BAR99, DAS02). Les résultats de trois des quatre multiplets ont aussi été comparés avec des expériences lorsqu'elles étaient disponibles (MIT93, JUN05 et JUN07, PIE98, BOF96 et BOF99) et ont fait l'objet de deux rapports dans lesquels nous donnons des listes exhaustives des références. Une comparaison des A_{ij} correspondantes provenant de différents calculs et d'expériences lorsqu'elles existent, se trouve dans le rapport GA-21 pour le Xe I, et GA-22 pour l'Ar I. Les σ_{ij} et les A_{ij} ainsi évaluées ont été introduites dans nos modèles. Sur les Fig. 4.9. (a à h), nous présentons les comparaisons des σ_{ij} provenant des calculs et expériences citées. Ces courbes ont été présentées et discutées aux conférences EGAS40 (KAT08b, KAT08c) et MPS08 (SRI08).

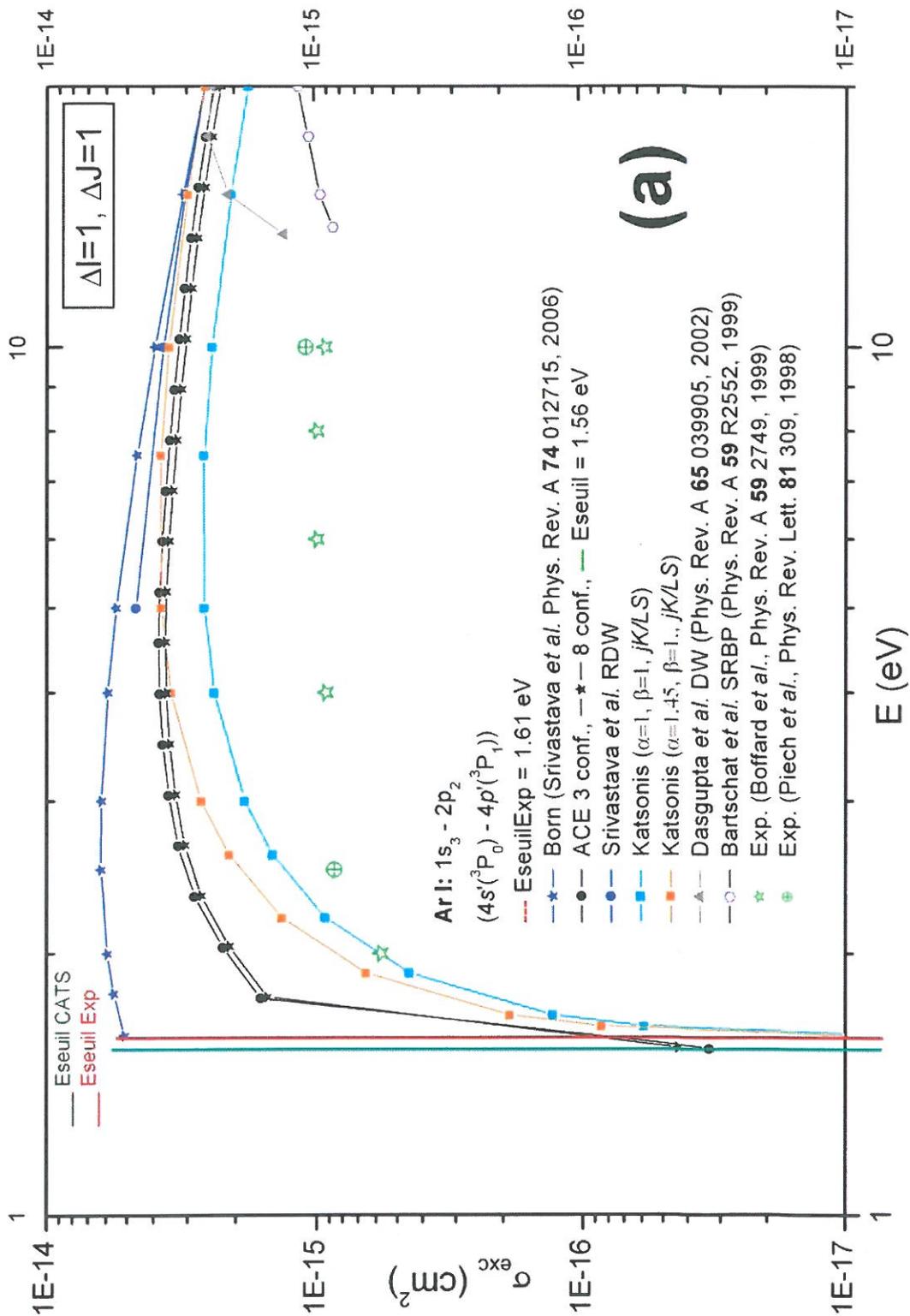


Fig. 4.9 (a) Ar I: Sections efficaces d'excitation par collision électronique, excitation de $4s(^3P_0)$ vers $4p(^3P_1)$.

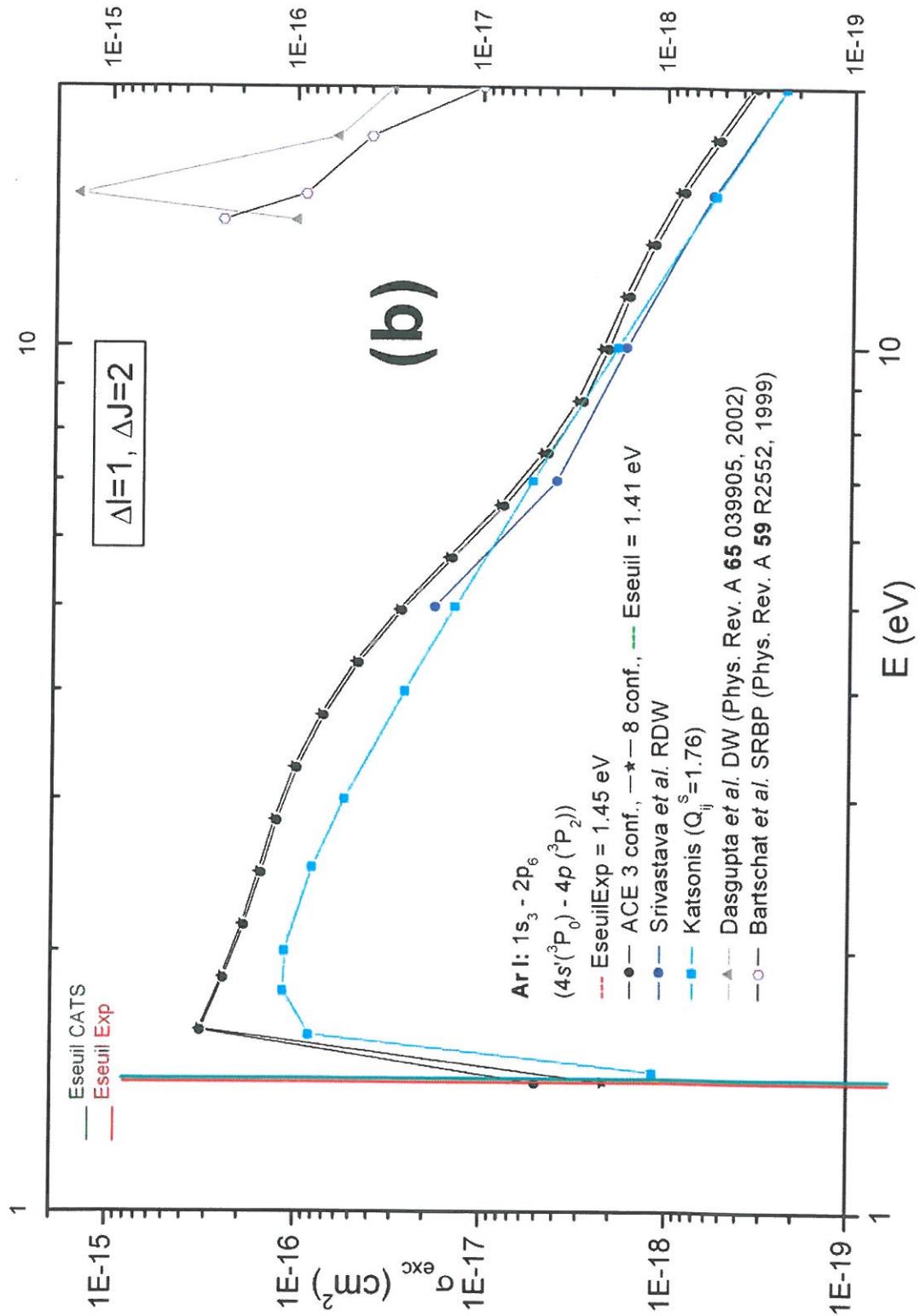


Fig. 4.9 (b) Comme Fig. 4.9 (a) mais excitation de $4s(^3P_0)$ vers $4p(^3P_2)$.

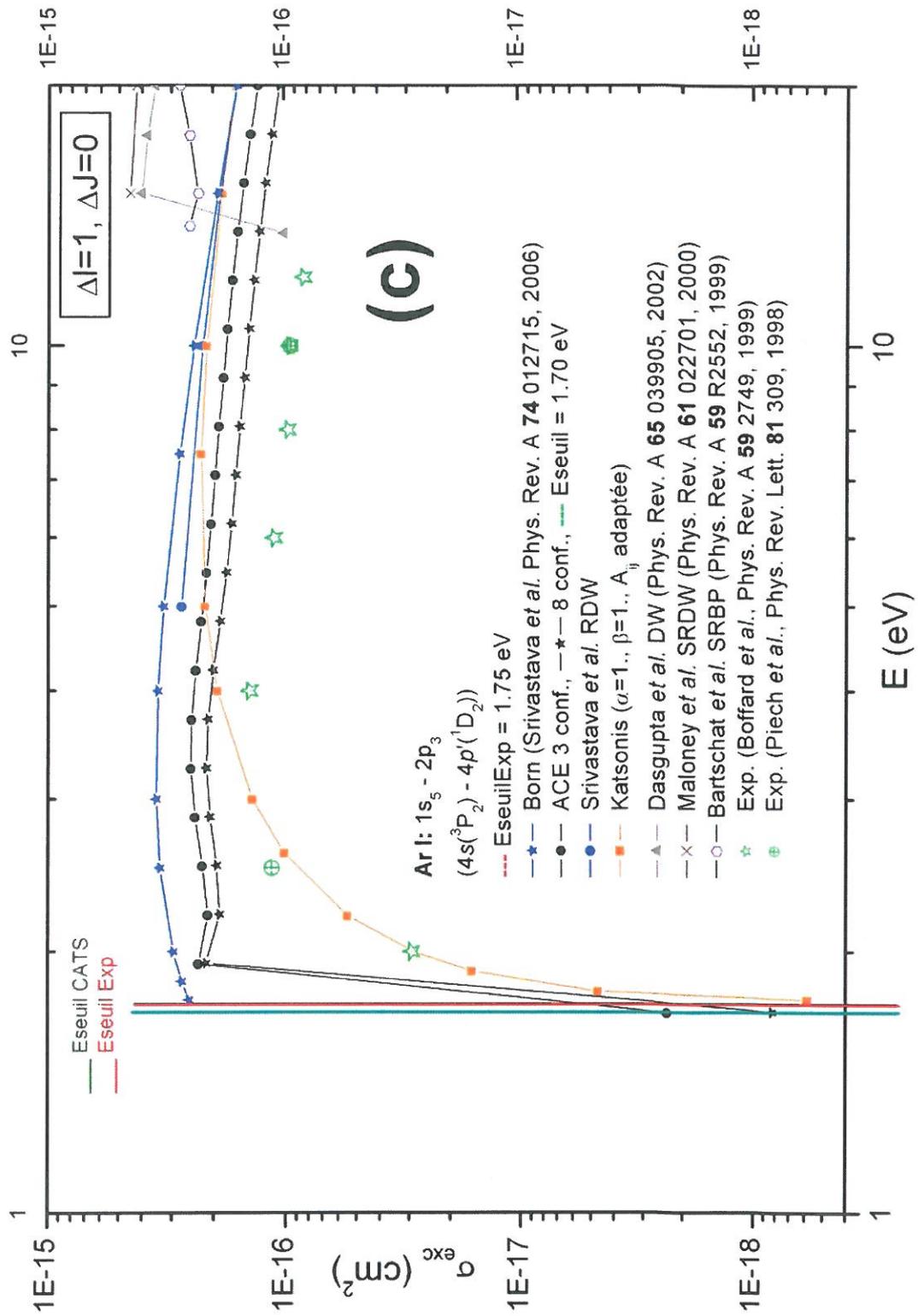


Fig. 4.9 (c) Comme Fig. 4.9 (a) mais excitation de $4s^3P_2$ vers $4p^1D_2$.

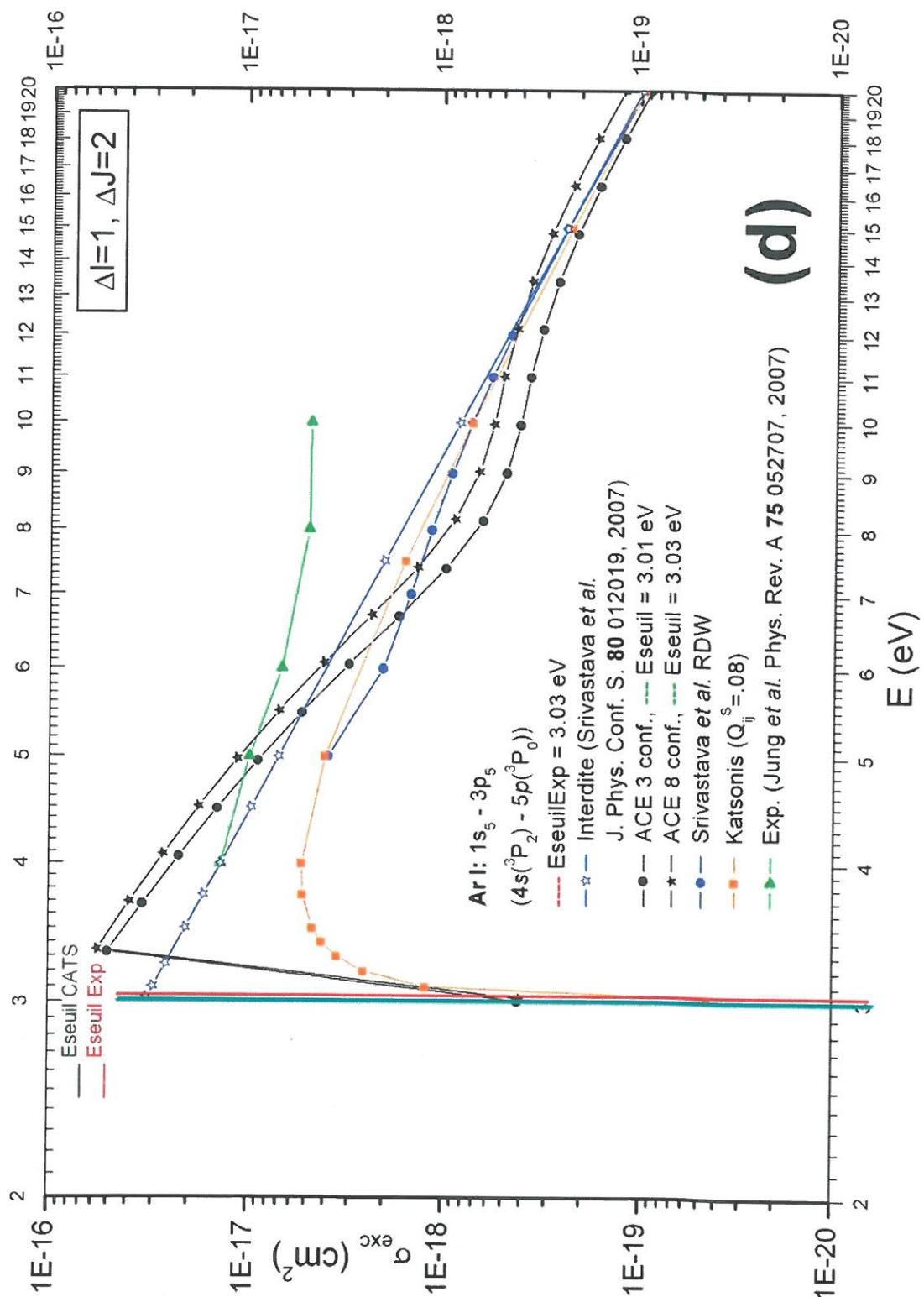


Fig. 4.9 (d) Comme Fig. 4.9 (a) mais excitation de $4s^3P_2$ vers $5p^3P_0$.

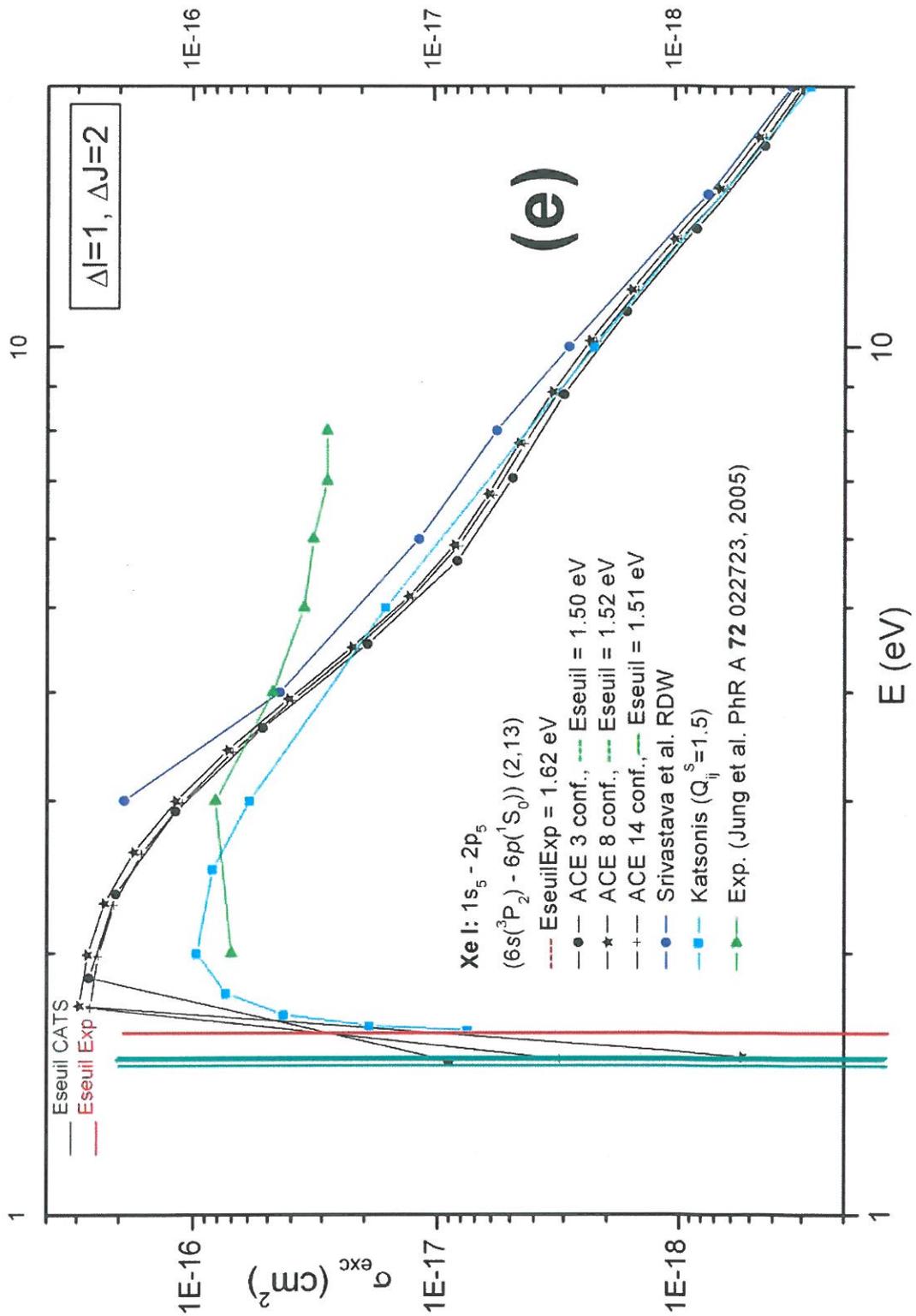


Fig. 4.9 (e) Xe I: Sections efficaces d'excitation par collision électronique, excitation de $6s(^3P_2)$ vers $6p(^1S_0)$.

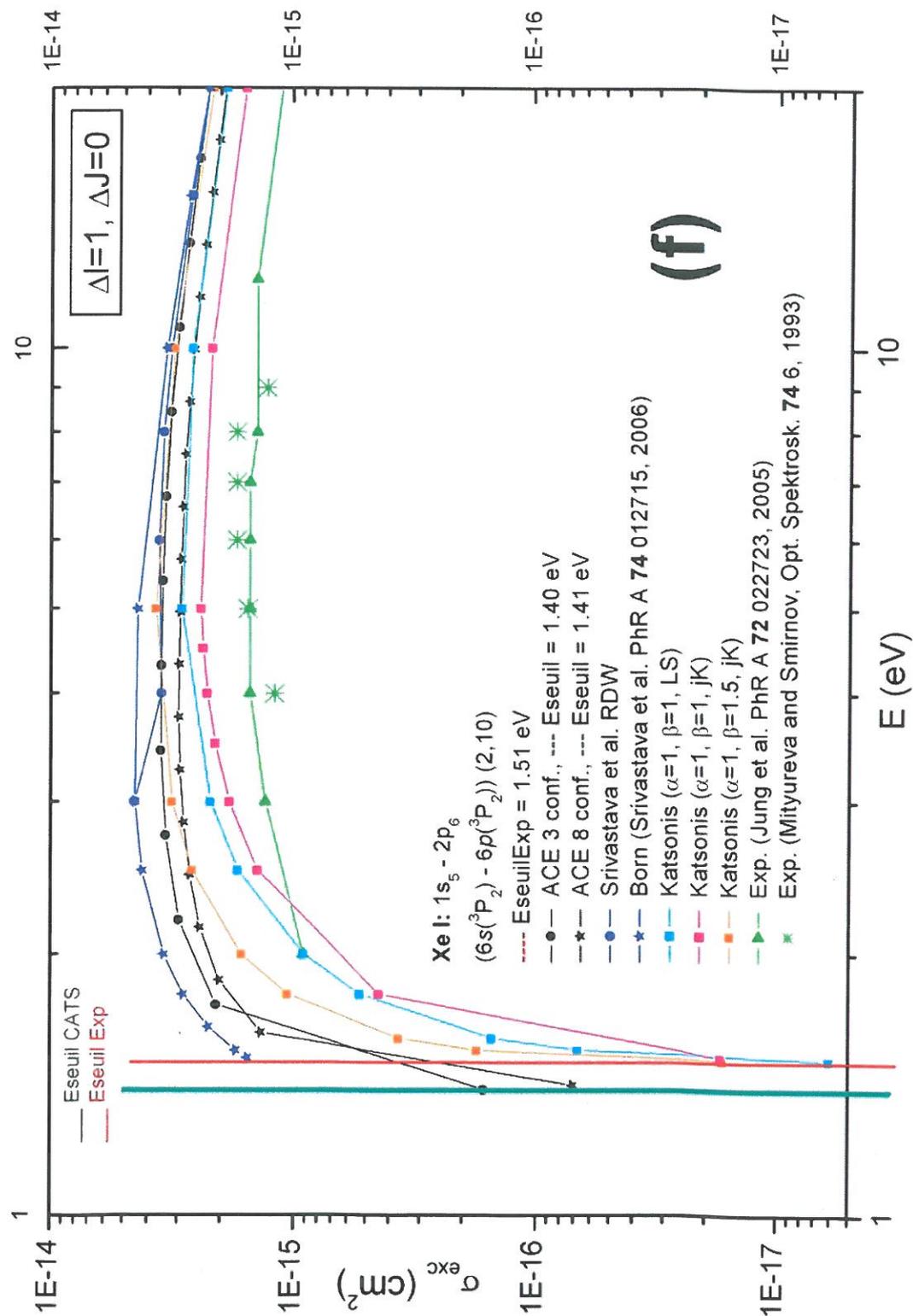


Fig. 4.9 (f) Comme Fig. 4.9 (e) mais excitation de $6s(^3P_2)$ vers $6p(^3P_2)$.

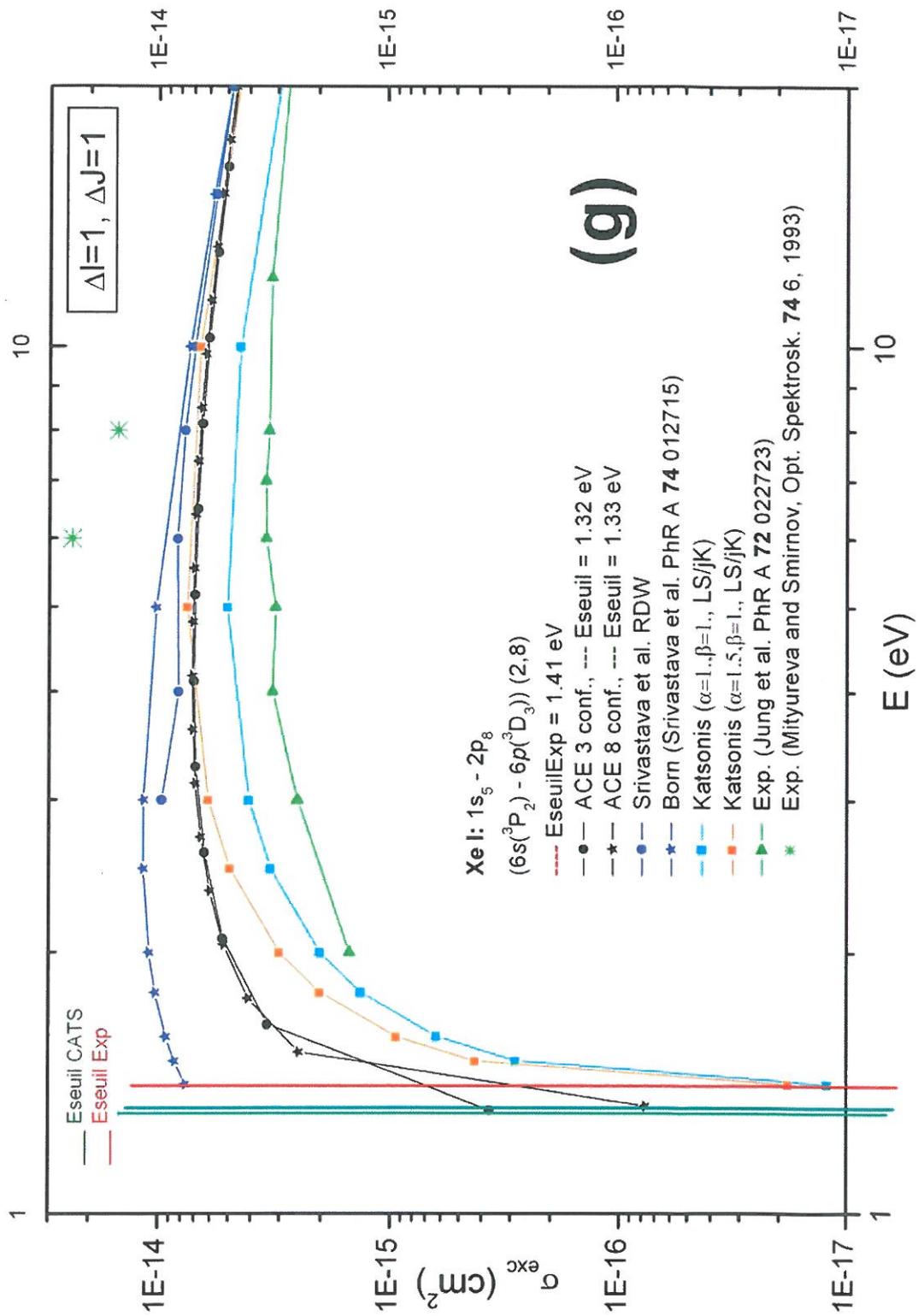


Fig. 4.9 (g) Comme Fig. 4.9 (e) mais excitation de $6s^3P_2$ vers $6p^3D_3$.

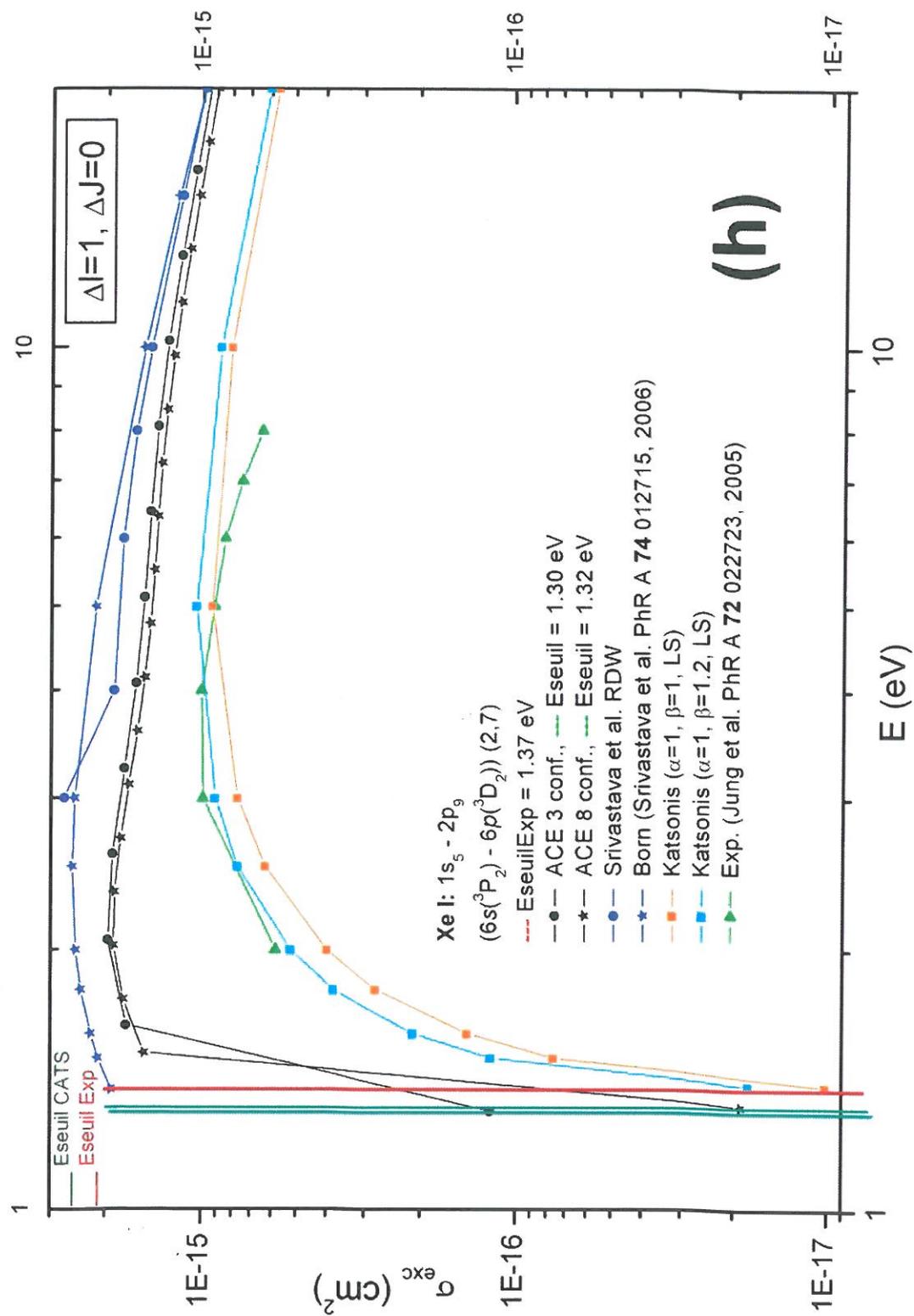


Fig. 4.9 (h) Comme Fig. 4.9 (e) mais excitation de $6s^3P_2$ vers $6p^3D_2$.

4.2.1.3 Excitations depuis les niveaux fondamentaux de l'argon I (xénon I)

Ces transitions sont en rapport avec les raies résonnantes de l'argon I (xénon I). Ces raies provenant des transitions qui ont comme niveau inférieur le niveau du fondamental de l'Ar (Xe) se situent dans la région VUV du spectre entre 80 nm et 110 nm (90 nm et 150 nm) et sont très intenses. Le calcul et l'évaluation des A_{ij} de ces raies et des σ_{exc} qui peuplent les niveaux transitoires à partir du fondamental mais aussi les niveaux métastables (auxquels correspondent les transitions interdites) sont importants pour une bonne modélisation du plasma.

De nombreux calculs et plusieurs expériences existent pour le cas de l'Ar (voir Rapport GA-23 et références citées). Nous avons évalué récemment les σ_{exc} correspondant aux transitions permises et interdites des multiplets $3p \leftarrow 4s, 5s$ et $3p \leftarrow 3d$ et celles correspondant aux transitions du multiplet $3p \leftarrow 4p$ qui sont toutes interdites par la parité. Nous avons comparé les données théoriques et expérimentales présentes dans la littérature avec les calculs récents RDW effectués par R. Srivastava et FOMBT obtenus par R.E.H. Clark. Nous avons aussi fait des calculs en DW et FOMBT avec le code ACE pour une base n'incluant que dix configurations. Ces résultats ont été comparés à ceux donnés par les formules Q-C. Les résultats de cette évaluation, qui fait l'objet du rapport GAPHYOR GA-23, ont été présentés et discutés à la conférence ICAMDATA 06 (KAT08f). On peut avoir un aperçu de ce travail à l'aide des Figs. 4.10 (a) à (d) qui présentent une comparaison des σ_{ij} des quatre transitions $3p \leftarrow 4s$ qui font l'objet de cette évaluation. Dans ces figures, comme cela a été dit précédemment, le prime sur les multiplets dénote un niveau apparenté au noyau $j_c=1/2$. Sur les Figs. 4.10 (a) et (c) on a représenté les sections efficaces des transitions permises ΔJ et sur les Figs. 4.10 (b) et (d) celles relatives aux transitions interdites, $1p_0-1s_3$ et $1p_0-1s_5$. Parmi les transitions $3p \leftarrow 4s$ les niveaux $1s_3$ et $1s_5$ qui sont métastables sont très peuplés par excitation via les collisions électroniques et ne peuvent pas se dé-exciter spontanément vers le fondamental. Ceci explique le rôle important qu'ils jouent dans le plasma, bien qu'ils ne contribuent pas à des raies résonnantes, dans les cas des plasmas que nous avons étudiés.

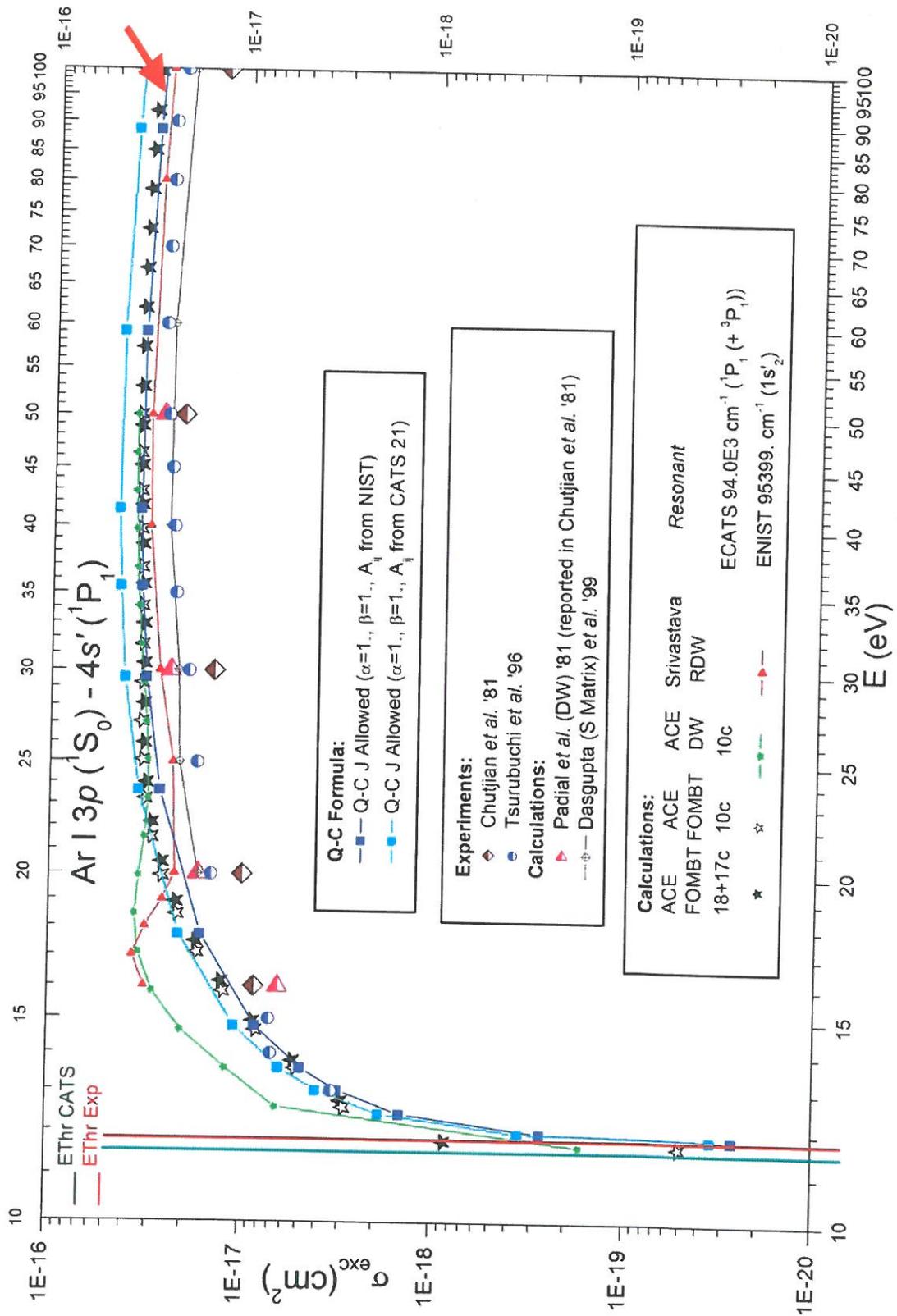


Fig. 4.10. (a) Multiplet $3p \rightarrow 4s$ d'Ar I. Sections efficaces d'excitation vers le niveau $4s (^1P_1)$ (transition correspondante permise). ➔ Valeur retenue.

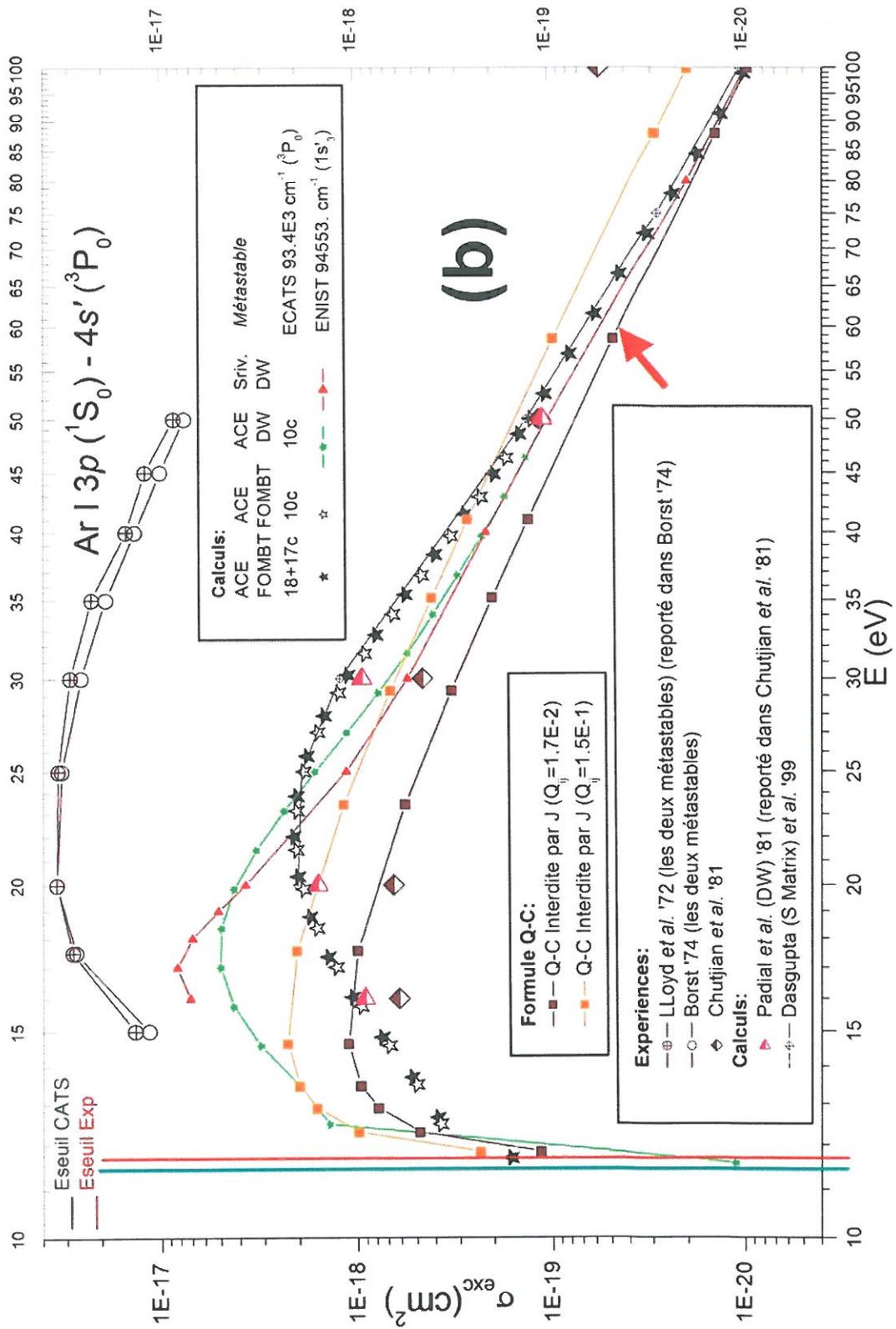


Fig. 4.10. (b) Multiplet $3p \rightarrow 4s$ d'Ar I. Sections efficaces d'excitation vers le niveau $4s'(^3P_0)$ (transition correspondante interdite). ➔ Valeur retenue.

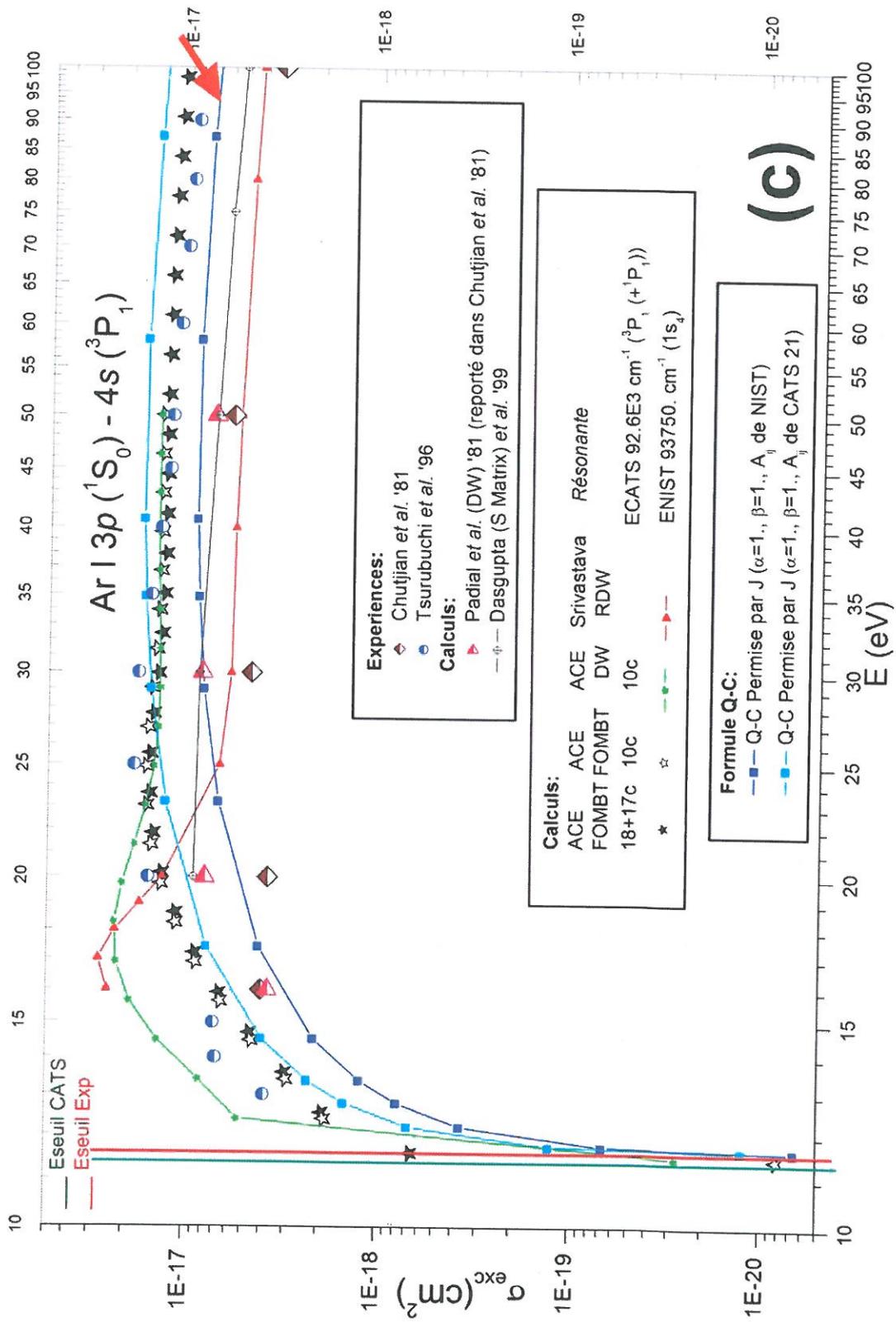


Fig. 4.10. (c) Multiplet 3p→4s d'Ar I. Sections efficaces d'excitation vers le niveau 4s(3P_1) (transition correspondante permise). ➔ Valeur retenue.

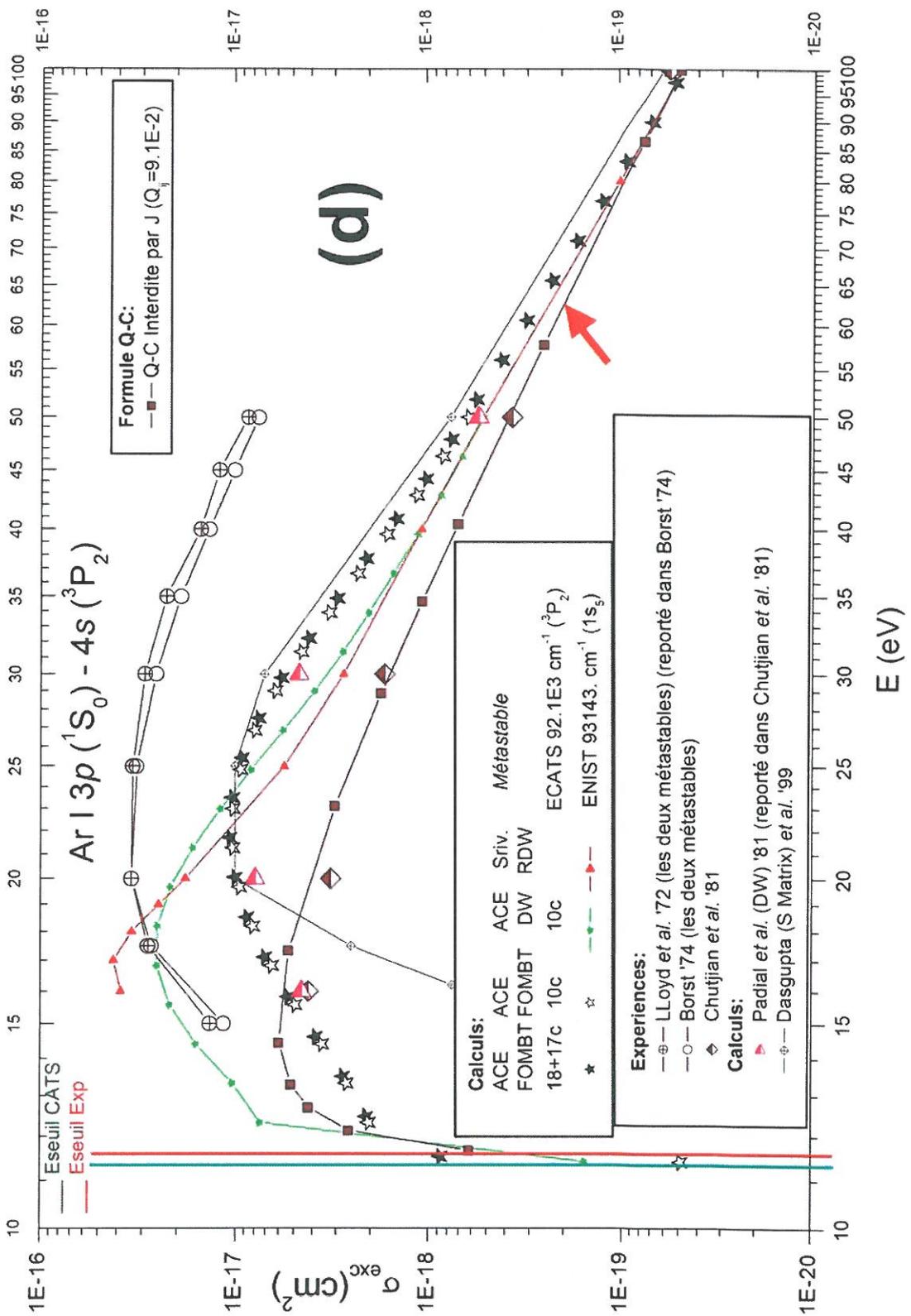


Fig. 4.10. (d) Multiplet $3p \rightarrow 4s$ d'Ar I. Sections efficaces d'excitation vers le niveau $4s(^3P_2)$ (transition correspondante interdite). ➔ Valeur retenue.

En ce qui concerne le Xe, une seule expérience pour évaluer l'excitation par collision électronique est disponible (MIT94). Peu de calculs de sections efficaces ont été faits précédemment. Par conséquent, pour calculer les σ_{ij} correspondantes, nous avons utilisé en général le code ACE dans l'approximation DW ou FOMBT.

4.2.2. Sections efficaces d'ionisation par collision électronique

Nous présentons les calculs réalisés pour évaluer les sections efficaces d'ionisation (σ_1). Nous décrivons les codes utilisés, les formules quasi-classiques disponibles et les évaluations que nous avons effectuées.

Le code ACE donne des résultats dans les approximations Scaled Hydrogenic (SH), Binary Encounter (BE) et Distorted Wave (DW). Les résultats des deux premiers codes sont trop approximatifs et insuffisants pour obtenir une bonne description des σ_{ij} dans notre cas. Nous n'avons alors retenu pour l'évaluation des sections efficaces que l'approximation DW.

Nous avons aussi utilisé la formule empirique donnée par Drawin (voir KAT76). Les courbes donnant les σ_1 en fonction de l'énergie doivent suivre une variation en $\log(E)/E$ en accord avec l'approximation de Born pour les grandes énergies et la loi de Wannier en accord avec les résultats de Gryziński (GRY59) près du seuil. Des calculs CTMC (KAT03) ont corroboré cette variation. On peut ainsi obtenir une évaluation de la σ_1 par une formule à deux paramètres. On a en plus besoin d'un facteur (noté ξ) qui est le nombre effectif d'électrons de la couche électronique à ioniser. Ce paramètre dépend de l'espèce considérée: pour l'Ar et le Xe I à VI, il vaut $(6-n)$, n étant le degré d'ionisation. Ici encore le premier paramètre fixe la valeur maximum de la σ_1 tandis que le deuxième paramètre définit l'énergie pour laquelle la σ_1 est maximale. Dans une première approximation, on peut prendre pour ces deux paramètres une valeur égale à 1. Pour une évaluation détaillée, cette valeur peut être modifiée en fonction des expériences, lorsqu'elles existent, ou à l'aide de calculs CTMC utilisant des hamiltoniens relatifs à peu de corps (ici trois, quatre et cinq), que nous avons effectués. La formule tient bien compte de la différence d'énergie entre les deux niveaux que la transition implique. Des valeurs d'énergies suffisamment approchées sont donc nécessaires, non seulement pour décrire correctement la σ_1 près du seuil, mais aussi pour déterminer sa valeur près du maximum. Une partie de notre évaluation utilise le code ACE pour le calcul des σ_1 entre les niveaux des fondamentaux successifs de Xe I à VI et la comparaison des résultats ainsi obtenus avec ceux donnés par la formule Q-C.

Nous rappelons que pour décrire correctement l'évolution d'une espèce il est nécessaire de tenir compte de l'ionisation de l'ensemble des niveaux du fondamental de l'espèce vers l'espèce suivante, mais aussi de l'ionisation depuis des niveaux excités.

Pour le Xe I, nous avons fait tous les calculs avec le code ACE dans l'approximation DW. Il est important de connaître les σ_1 depuis leur seuil jusqu'à environ 1000 eV (énergie à partir de laquelle on peut considérer que la σ_1 suit sensiblement la loi de Born) pour que les taux correspondants soient valides jusqu'à une T_e suffisamment grande. Nous avons observé que les σ_1 calculées pour les niveaux

excités d'une même configuration sont comparables quand ils s'ionisent vers le noyau auquel ils appartiennent. On a vu que l'énergie de seuil et la valeur maximale changent, mais les σ_1 sont paramétrables avec une formule adéquate à deux paramètres, comme celle proposée par Drawin, ce que nos calculs CTMC avaient démontré. Toutefois, les σ_1 en DW par ACE donnent généralement un maximum plus important que la formule de Drawin; nous pensons que ceci constitue une tendance générale des calculs de σ_1 dans l'approximation DW. L'utilisation systématique des formules Q-C pour les σ_1 du Xe et de ses ions est une alternative valable. Une comparaison des valeurs données par le code ACE et celles des formules Q-C est montrée à titre d'exemple sur les Figs. 4.11 (a) et (b).

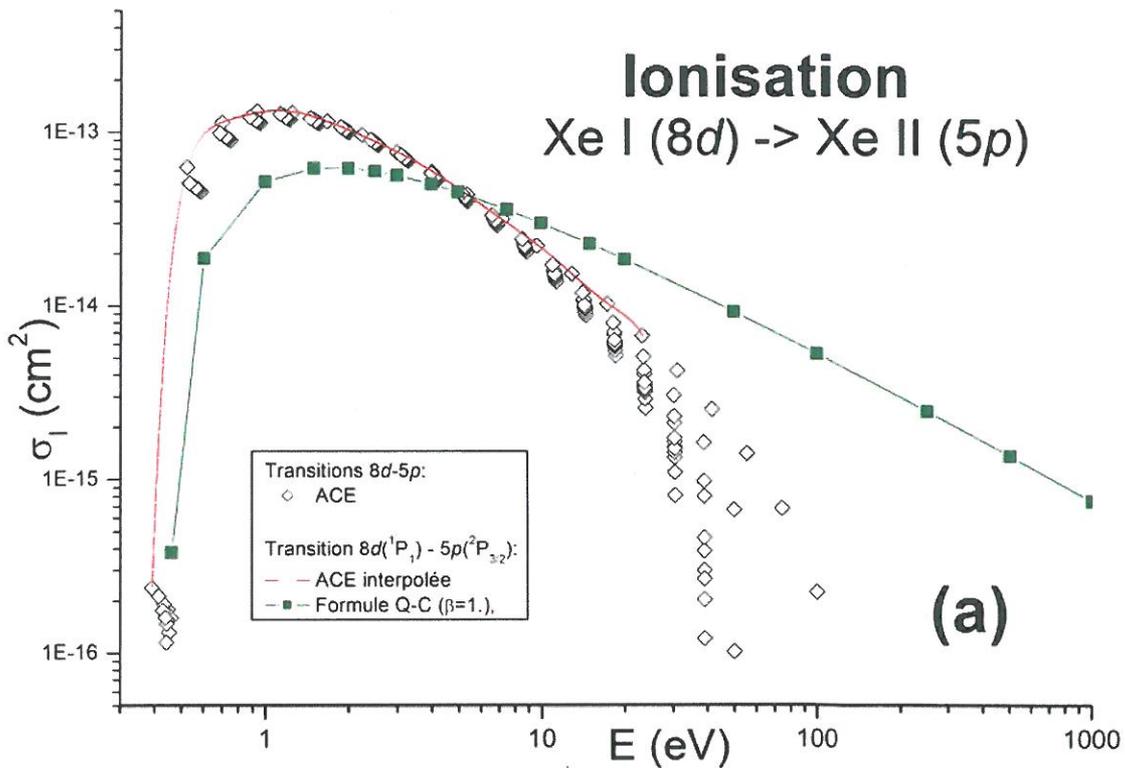


Fig. 4.11 (a) Sections efficaces d'ionisation par collision électronique depuis les douze niveaux 8d du Xe I vers le niveau fondamental du Xe II (5p).

Sur la Fig. 4.11 (a) sont représentées des courbes de σ_1 depuis les niveaux 8d du Xe I. En noir (losanges vides) sont données les valeurs pour l'ionisation dans le même noyau provenant du code ACE. On peut remarquer qu'à partir de 10 eV, ces valeurs obtenues ici chutent. La courbe en rouge représente l'ionisation obtenue par ACE pour la transition Xe I 8d (1P_1) paramétrée sous forme polynomiale. Pour obtenir une paramétrisation détaillée, nous avons développé un code FORTRAN (PARAM08). Les carrés verts représentent les valeurs calculées à l'aide de la formule Q-C pour la même transition 8d(1P_1) vers 5p($^2P_{3,2}$). Les valeurs des σ_1 des niveaux 8d vers des niveaux 5p ayant un noyau différent, beaucoup plus faibles, n'apparaissent pas sur cette figure. Notons que pour des grandes énergies, la formule Q-C vérifie l'approximation de Born. Cela montre que près du seuil, les

valeurs de ACE sont plus grandes que celles de la formule Q-C ce qui constitue une tendance générale de l'approximation DW.

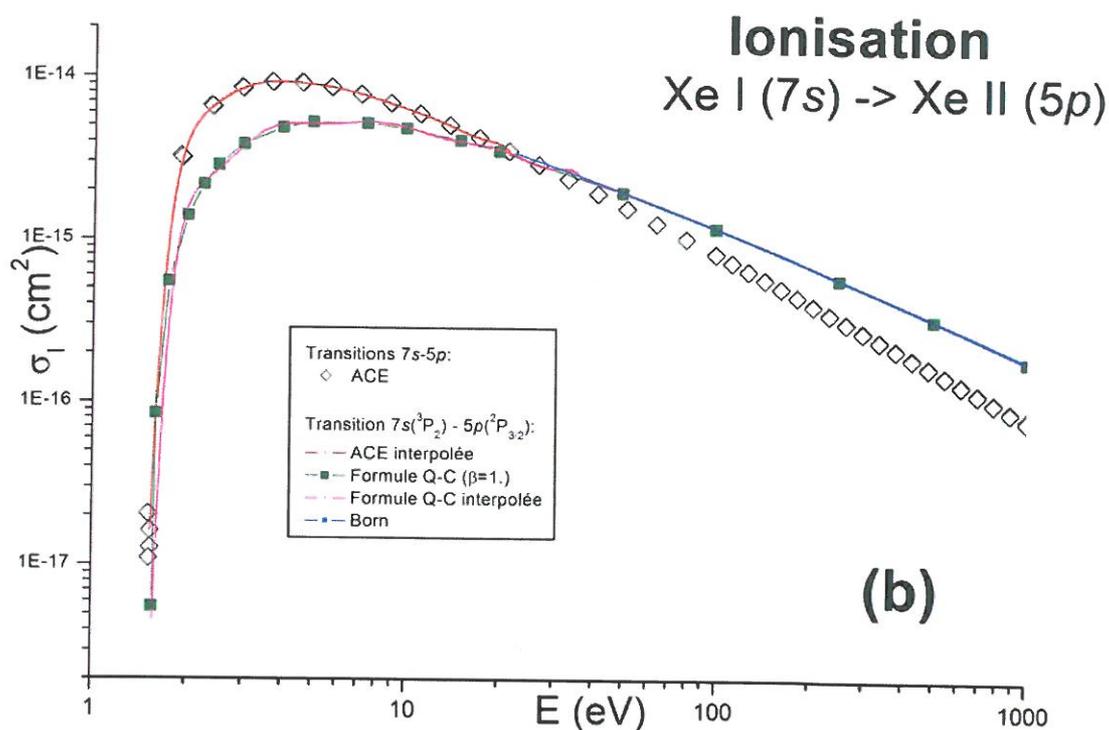


Fig. 4.11 (b) Comme Fig. 4.11 (a) mais depuis les quatre niveaux 7s.

Sur la Fig. 4.11 (b) sont représentées les courbes relatives à l'ionisation du niveau 3P_2 vers le niveau $5p$ ayant le même noyau $^2P_{3/2}$ pour les transitions importantes $7s$ (Xe I) \rightarrow $5p$ (Xe II). Pour les énergies supérieures à 20 eV, nous avons calculé les valeurs données par l'approximation de Born en extrapolant la valeur commune de ACE et Q-C pour 20 eV. Ces valeurs sont aussi représentées en bleu mais sont couvertes par les valeurs Q-C obtenues pour la transition $7s(^3P_2) \rightarrow 5p(^2P_{3/2})$ représentées aussi en vert. On peut voir que les valeurs obtenues dans l'approximation DW pour des grandes énergies de collisions sont ici encore trop petites, puisque entre 100 eV et 1000 eV on s'attend à ce que l'approximation de Born soit vérifiée. L'interpolation obtenue par PARAM08 pour les valeurs Q-C représentée en magenta est à peine discernable étant donné qu'elle est très voisine des valeurs Q-C. Pour ACE, nous avons obtenu une interpolation donnée ici en rouge, montrée jusqu'à 20 eV. En réalité les valeurs obtenues par DW pour les quatre transitions vers le même noyau sont pratiquement confondues pour toutes les valeurs d'énergie sauf près du seuil, où elles sont distinctes. En ce qui concerne les résultats Q-C les valeurs qu'on voit sur la Fig. 4.11 (b) sont aussi pratiquement les mêmes pour toutes les quatre transitions, comme c'est le cas des résultats *ab initio*.

4.3. Coefficients de taux des processus collisionnels (dé-excitation électronique et recombinaison à trois corps), intégration et paramétrisation

Lorsque l'on connaît la section efficace d'un processus collisionnel σ_{col} , le taux correspondant α_{col} s'obtient en intégrant σ_{col} sur la fonction de distribution choisie. Les formules Q-C ont pour caractéristique commune d'être facilement intégrables; les formules des α_{col} sont données dans KAT76 suivant la formule empirique de Drawin (DRA66).

Pour calculer les coefficients des processus qui nous intéressent à partir de σ_{col} on peut avoir recours à l'un des plusieurs codes existants. Il s'agit le plus souvent des codes standard pour l'intégration sur une maxwellienne. Cependant, les résultats des intégrations sont généralement donnés à partir de températures trop hautes (quelques eV) alors que pour certaines applications nous avons ici besoin de les connaître à partir d'une T_e de 0.1 eV. Il a donc été nécessaire de développer un code adéquat pour intégrer les sections efficaces et calculer ainsi les taux (α_{col}) correspondants. Le code INTEG08 que nous avons développé utilise pour chaque transition les valeurs de σ_{col} comme entrée et un ensemble d'énergies comme paramètres associés. Ces taux sont calculés en intégrant la section efficace sur la fonction de distribution des électrons choisie. Dans ce travail, nous avons utilisé une distribution maxwellienne pour l'intégration de σ_{col} , mais il est aussi possible d'introduire dans le code plusieurs distributions maxwelliennes ou même des distributions non maxwelliennes.

A titre d'exemple, nous présentons les résultats de l'intégration des σ_{exc} concernant le multiplet $5p \rightarrow 7s$ du Xe II sur les Figs. 4.12. Sur la Fig. 4.12 (a) on a représenté les sections efficaces d'excitation des huit transitions du multiplet $5p(^2P_{3/2}) \rightarrow 7s$ du Xe II données par ACE (en rouge) et interpolées par notre code PARAM08 (en noir). Les Fig. 4.12 (b) à (d) représentent les huit taux correspondants donnés par ACE (en rouge) et intégrés par nous avec le code INTEG08 (représentés en noir). Nos codes étant valides à partir de 0.1 eV, nous avons calculé les taux à partir de cette énergie. Les Figs. 4.12 (a), (b) et (c) montrent que l'utilisation directe des valeurs de taux provenant des calculs DW n'est pas adéquate pour une modélisation à des énergies inférieures à 3 eV pour ces transitions. Sur les Fig. 4.12 (b) et (c) on a aussi représenté (en vert) les courbes provenant de la paramétrisation des taux intégrés à l'aide du code PARAM08. Ces comparaisons montrent que nos deux codes PARAM08 et INTEG08 sont corrects pour des énergies plus grandes puisqu'ils calculent dans ce cas des valeurs interpolées et intégrées respectivement quasiment identiques à celles données par ACE. En ce qui concerne les taux, on voit qu'il est souvent nécessaire d'utiliser pour notre étude notre code d'intégration plutôt que celui de ACE, car notre code peut calculer les valeurs de taux à partir de températures électroniques suffisamment basses pour nos applications.

Notre code de paramétrisation donne huit coefficients polynomiaux que nous avons utilisés dans le modèle C-R. Il faut s'assurer que les polynômes donnant les taux, ne divergent pas entre ou près des bornes de la paramétrisation sinon certaines raies pourraient avoir des intensités fausses, beaucoup trop grandes ou trop faibles, voire même négatives. Pour éviter les erreurs d'interpolation (extrapolation) nous avons écrit un sous-programme qui teste les valeurs des polynômes de taux entre

et au delà des bornes de validité du modèle dans la plage 0.1 à 100 eV. Au delà de 500 eV, certains des polynômes divergent; pour utiliser le modèle il faut alors faire une paramétrisation dédiée. Etant donné qu'à 10 eV, le Xe V a déjà presque totalement disparu pour laisser place aux espèces plus ionisées, la limite de 100 eV est amplement suffisante pour l'étude des plasmas de Xe I à X.

Les taux de dé-excitation $\alpha_{\text{col}}^{\text{D}}$ (et de recombinaison à trois corps $\alpha_{\text{col}}^{\text{R}}$) correspondants sont des fonctions de α_{ij} (α_i) et de la T_e . Ces taux ont été obtenus à l'aide du principe du bilan détaillé (voir JEF68) comme expliqué dans (KAT76).

4.4. Sections efficaces et taux de photoionisation et de photorecombinaison; recombinaison diélectronique et à trois corps

Pour le calcul des sections efficaces de photoionisation nous avons utilisé le code ACE et les formules semi-empiriques données par K. Katsonis (KAT76) pour les sections efficaces de photorecombinaison (ou recombinaison radiative), basées sur les formules de Kramers pour les ions hydrogénéoïdes. Nous avons uniquement étudié la photoionisation pour sa relation avec la recombinaison et nous avons négligé son influence globale sur l'état du plasma, surtout dans l'hypothèse de plasma optiquement mince. Dans le modèle, nous avons introduit les formules semi-empiriques et utilisé des coefficients de séparation des nombres quantiques orbitaux (voir BUR58) répertoriés dans (KAT76). Ceci nous a permis d'éviter un calcul détaillé beaucoup plus long, qui en principe pourrait s'effectuer à l'aide des codes disponibles par le site du LANL. Dans la recombinaison à trois corps, le troisième corps peut être un atome (ion) ou un électron (recombinaison diélectronique). Les procédures de calculs des coefficients de recombinaison diélectronique ont été présentées dans le paragraphe 4.3. La recombinaison à trois corps impliquant un atome (ion) a été considérée comme négligeable dans les plasmas que nous avons étudiés.

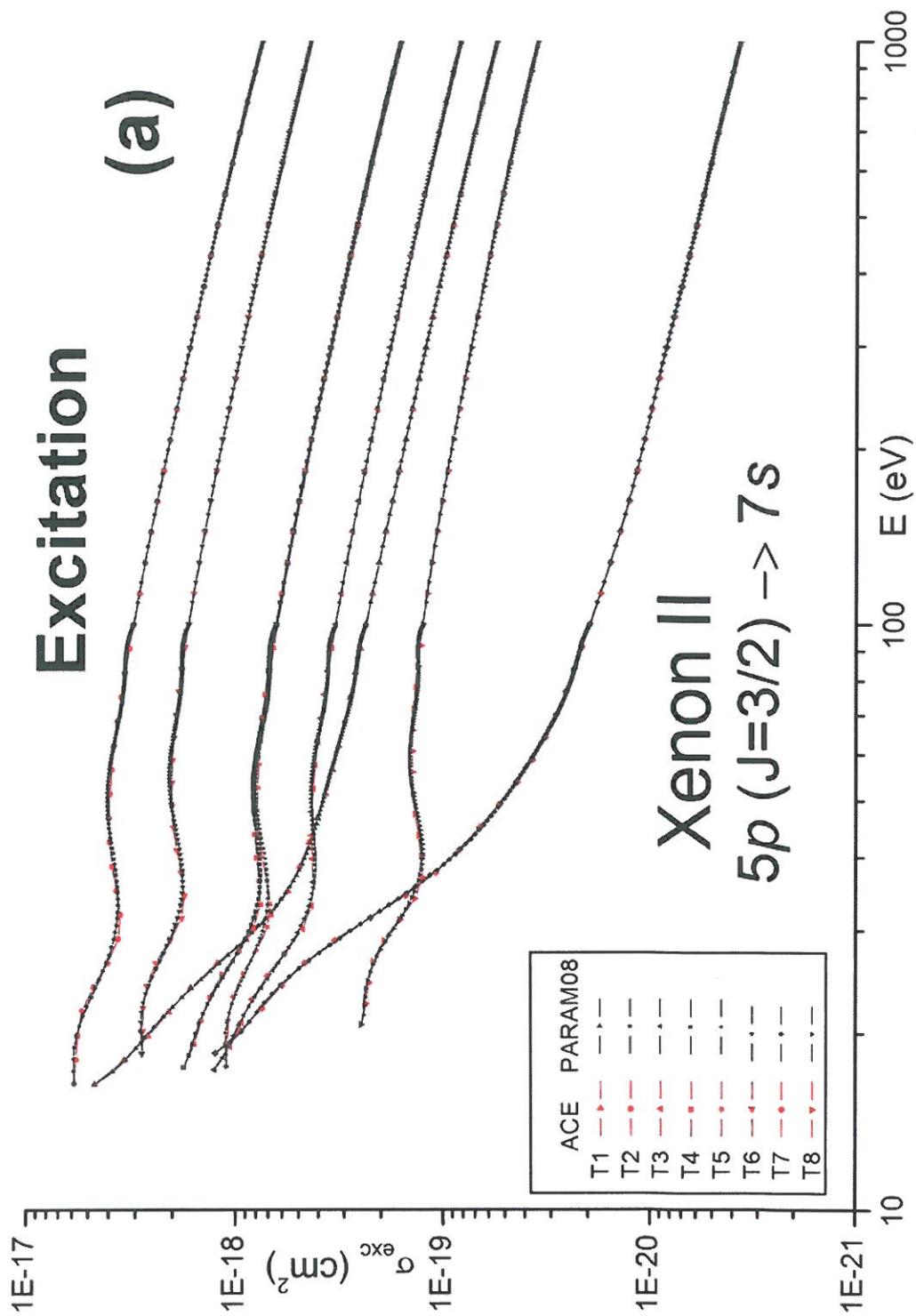


Fig. 4.12. (a) Sections efficaces d'excitation du niveau $5p(J=3/2)$ vers les niveaux $7s$ données par ACE et interpolées par notre code PARAM08. T1: niveau $5p^4(^3P_2)7s(^4P_{5/2})$, T2: niveau $5p^4(^3P_2)7s(^2P_{3/2})$, T3: niveau $5p^4(^3P_0)7s(^4P_{1/2})$, T4: niveau $5p^4(^3P_1)7s(^4P_{3/2})$, T5: niveau $5p^4(^3P_1)7s(^2P_{1/2})$, T6: niveau $5p^4(^1D_2)7s(^2D_{5/2})$, T7: niveau $5p^4(^1D_2)7s(^2D_{3/2})$, T8: niveau $5p^4(^1S_0)7s(^2S_{1/2})$.

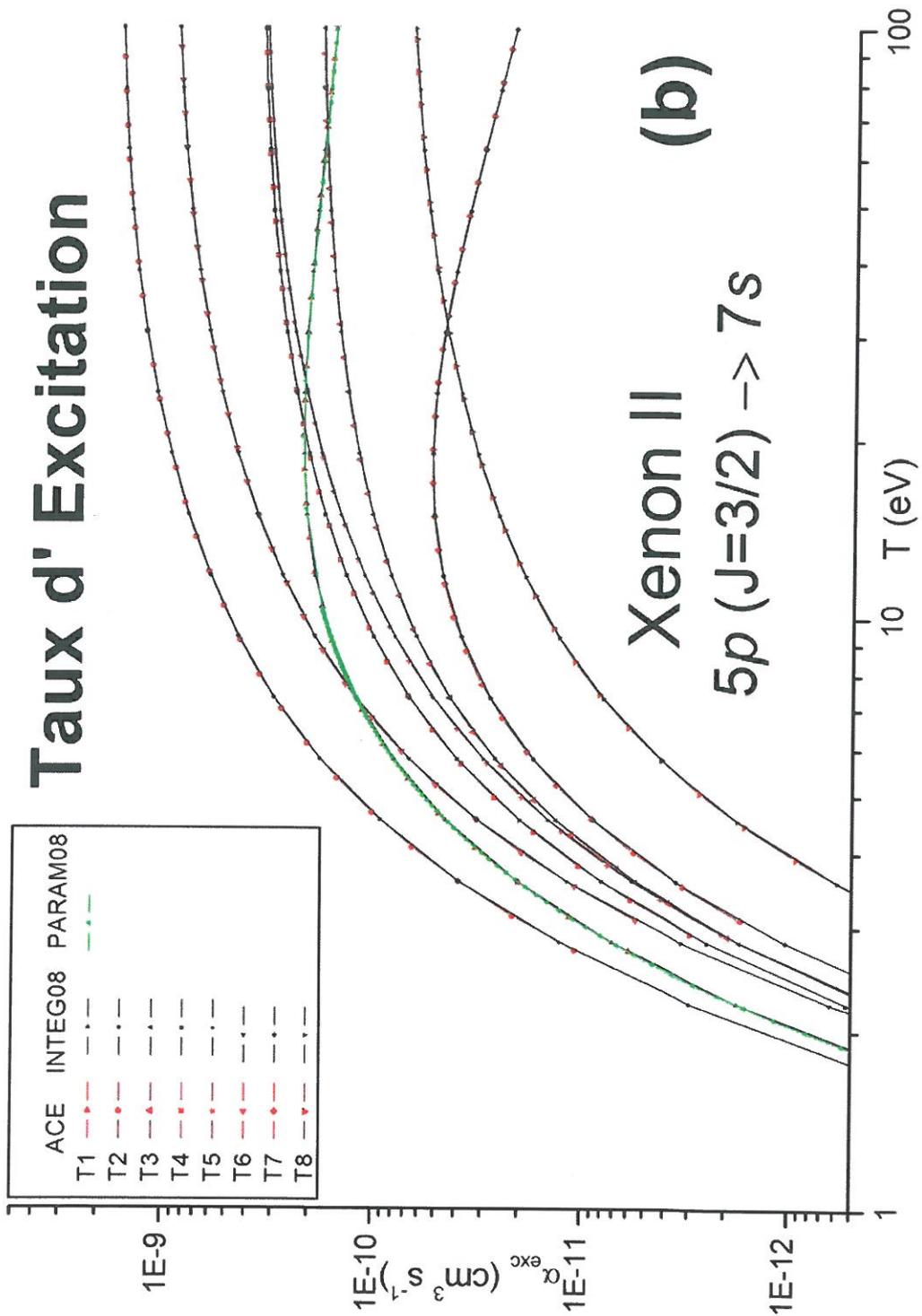


Fig. 4.12. (b) Taux d'excitation obtenus par intégration des sections efficaces de la Fig. 4.12 (a) à l'aide de notre code INTEG08 (noir) et par ACE (rouge); températures plus petites que 100 eV.

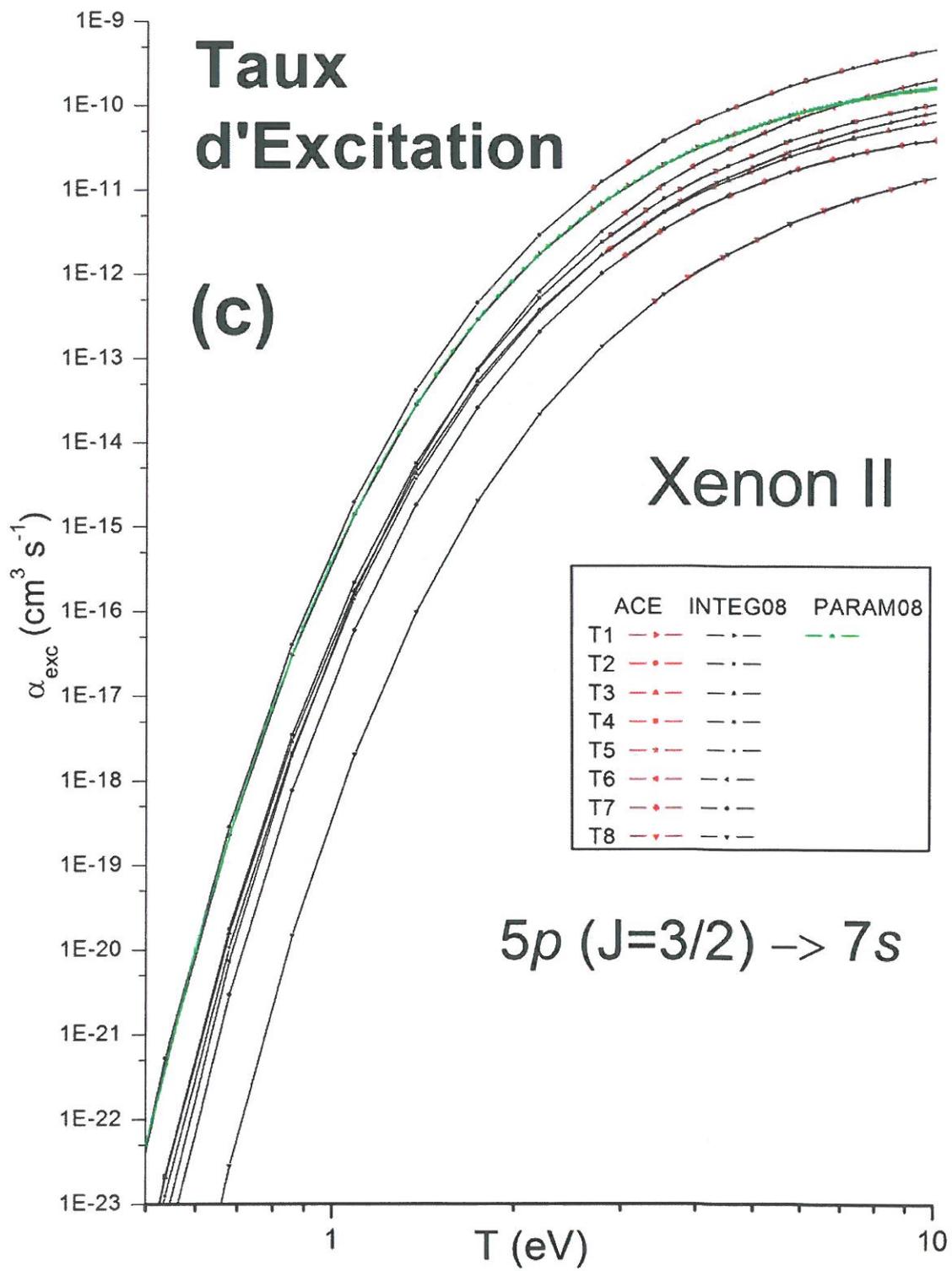


Fig. 4.12. (c) Comme Fig. 4.12 (b) mais pour de petites températures.

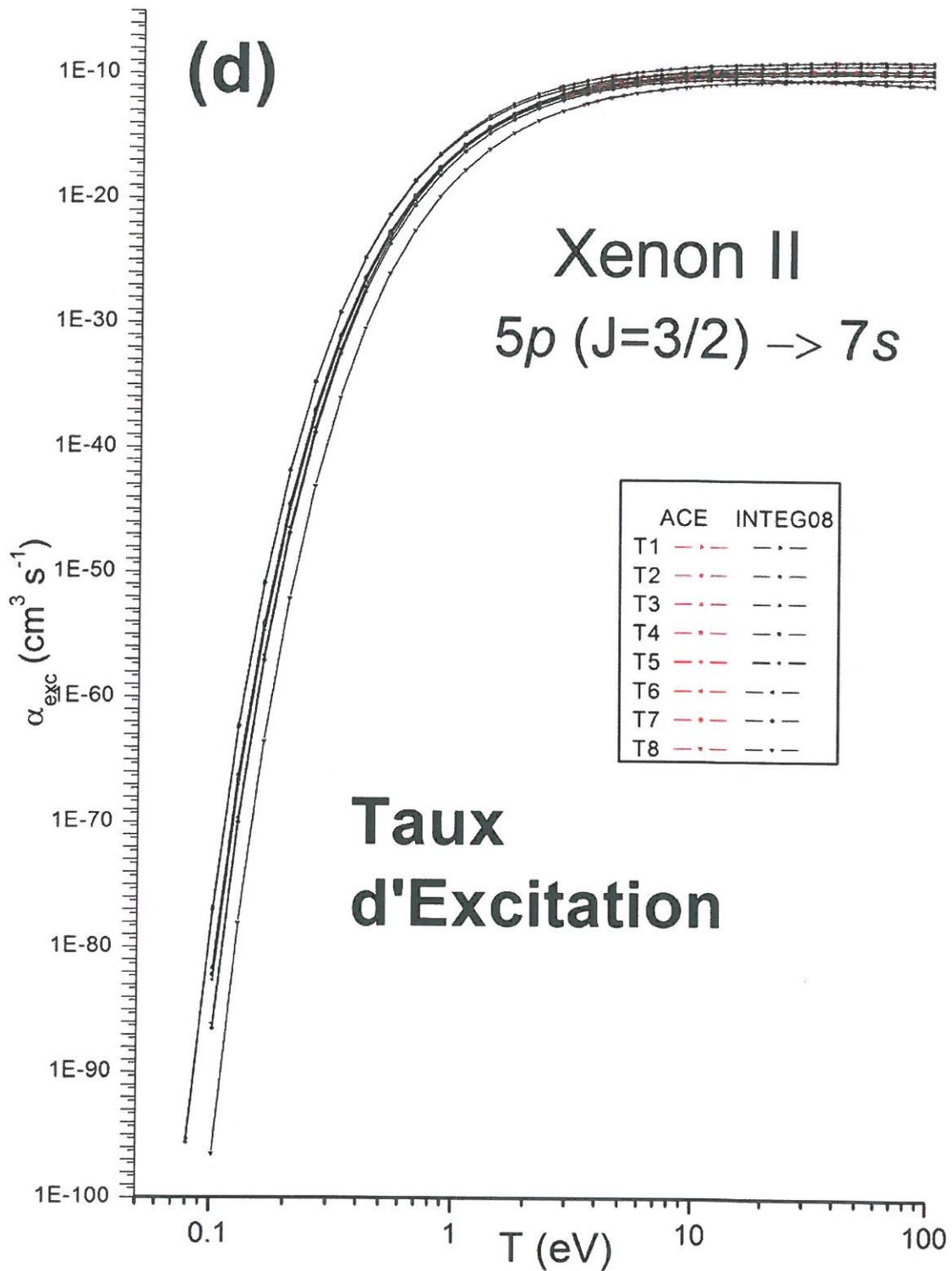


Fig. 4.12. (d) Comme Fig. 4.12 (b) mais incluant les valeurs pour des températures de l'ordre de 0.1 eV.

4.5. Inversions dans l'ordre des niveaux d'énergie théoriques

En comparaison avec des niveaux d'énergie expérimentaux, ceux calculés par des codes *ab initio* comme c'est le cas de CATS, résultent en des séquences d'énergies qui peuvent présenter des inversions par rapport aux valeurs expérimentales. Ces inversions concernent deux niveaux d'une même configuration ou bien deux niveaux appartenant à deux configurations différentes. Le calcul des σ_{exc} avec le code ACE étant basé sur les énergies du code CATS, une inversion entre deux niveaux d'une même configuration induit une imprécision dans les résultats concernant les multiplets qui incluent ces niveaux. En ce qui concerne le calcul d'une transition entre deux niveaux i et j ($E_i < E_j$) qui seraient inversés dans CATS (on a alors $E_j < E_i$), on obtient avec le code ACE une σ_{exc} d'un niveau en fait plus élevé vers un niveau moins élevé. Nous avons donc retiré les σ_{exc} correspondant à des transitions dont les deux niveaux sont inversés entre eux. Ils ont été remplacés par des σ_{exc} obtenues avec d'autres méthodes de calcul basées sur les énergies expérimentales, qui ne présentent pas cette inversion. Le choix d'une base de calcul adéquate pour les calculs par ACE est basé sur la diminution des inversions observées. Pour des raisons d'économie du temps de calcul, nos calculs avec ACE sont souvent restreints à des bases contenant une dizaine de configurations tout au plus, ce qui n'est pas toujours consistant avec des bases contenant 20-30 configurations selon les espèces, utilisées pour les calculs des A_{ij} . Même si les A_{ij} basées sur les énergies entre les niveaux expérimentaux sont calculées pour les transitions non résonnantes avec le code CbA, les σ_{exc} sont aussi calculées *ab initio* par DW et/ou FOMBT. Il arrive qu'on rencontre alors des inversions éventuelles, lesquelles ont été corrigées. Les A_{ij} du code CATS ont été utilisées pour toutes les transitions résonnantes, mais dans ce cas les niveaux appartenant aux configurations fondamentales n'étaient jamais inversés entre eux. Dans les calculs DW et FOMBT que nous avons effectué par ACE, nous avons rencontré des inversions uniquement au sein des configurations excitées.

5. DIAGNOSTIC OPTIQUE DU PROPULSEUR IONIQUE SPT-50

Après avoir exposé les bases du travail théorique effectué et décrit l'essentiel des données atomiques utilisées, nous allons présenter dans les chapitres suivants l'essentiel des expériences qui ont été étudiées et les principaux résultats que nous avons obtenus par l'application de notre travail théorique sur le diagnostic des plasmas de Xe et d'Ar. Nous commençons par l'étude d'expériences antérieures; ce chapitre concerne l'étude du spectre du propulseur ionique prototype SPT-50.

5.1. Le propulseur ionique SPT-50 alimenté par du Xe

Nous disposons de spectres d'émission dans le visible (400 nm à 900 nm) du plasma présent dans le propulseur SPT-50 qui a fonctionné à l'ONERA de Palaiseau; ce prototype était alimenté avec du xénon. Les spectres étudiés nous ont été fournis par J. Bonnet. Ces spectres du SPT-50 ont déjà fait dans le passé l'objet d'une étude dans les régions spectrales allant de 405 à 465 nm et de 763 à 870 nm (SIS05).

Pour effectuer une étude systématique, nous avons partitionné ce spectre en morceaux contigus de 50 nm d'étendue chacun. Parmi ces morceaux, nous présentons à titre d'exemple sur la Fig. 5.1 les raies du Xe I du spectre expérimental obtenu dans le dispositif SPT-50 correspondant à la gamme de longueurs d'onde allant de 450 à 500 nm.

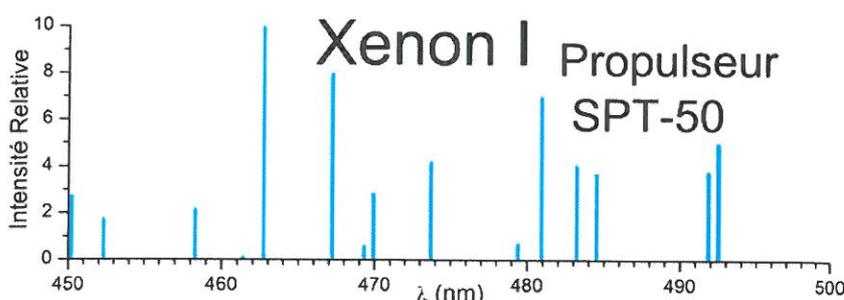


Fig. 5.1. Spectre expérimental du propulseur SPT-50 dans la région allant de 450 à 500 nm et fonctionnant au Xe, raies du Xe I uniquement.

Sur ce spectre, nous montrons ici uniquement les raies du Xe I de manière à illustrer le diagnostic optique effectué. Ce choix provient du fait que les raies du Xe I sont les plus intenses parmi celles qui ont été observées dans le spectre visible du SPT-50. Nous avons comparé le spectre expérimental avec celui provenant de notre modèle C-R du Xe I. Nous avons aussi examiné les caractéristiques communes de ces spectres avec le spectre expérimental du Xe I obtenu en utilisant uniquement les E_i et les intensités données par NIST (LIEN2), provenant de la compilation de Saloman (SAL04).

5.2. Etude des spectres

Sur la Fig. 5.2, nous présentons le spectre théorique du Xe I provenant de notre modèle C-R pour $n_e = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ et $T_e = 10 \text{ kK}$.

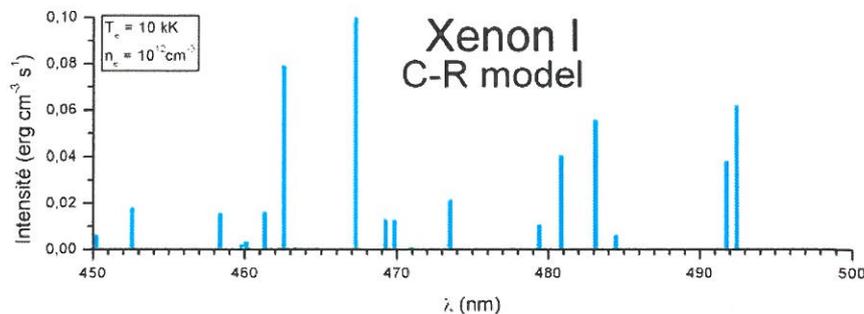


Fig. 5.2. Spectre théorique du modèle C-R pour le Xe I dans la région allant de 450 à 500 nm.

Ces valeurs sont à comparer à celles données dans la compilation de Saloman du NIST pour le Xe I dans cette région, présentées sur la Fig. 5.3 et aux valeurs expérimentales pour le propulseur SPT-50 illustrées sur la Fig. 5.1.

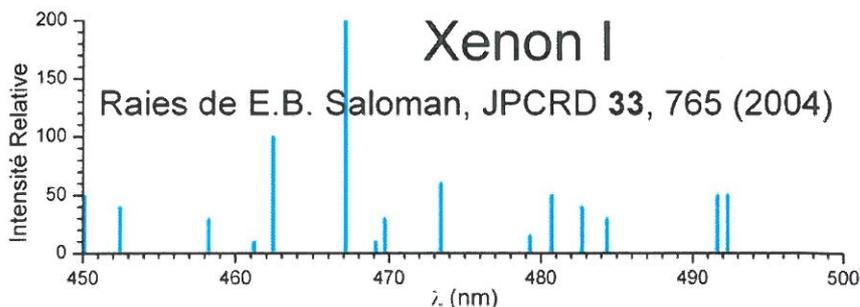


Fig. 5.3. Spectre expérimental du Xe I provenant de la compilation de NIST.

La présence de raies intenses du Xe I dans le propulseur dans l'intervalle allant de 450 à 500 nm en comparaison avec celles du Xe II montre que le plasma est ici relativement froid, de l'ordre de 10 kK suivant les résultats de notre modèle. Ce spectre est aussi à comparer à celui d'un plasma sensiblement plus chaud obtenu e.g. dans le cas du stellarator WEGA fonctionnant au Xe pur (voir Chap. 10).

La comparaison de l'intensité des raies dans les trois spectres présentés ici montre que:

- i) d'une part, les intensités du Xe I données par NIST sont en accord avec celles qui proviennent de notre modèle. Ceci contribue à étayer la validation de ce modèle.

- ii) d'autre part, les intensités des raies données par notre modèle pour $n_e = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ et $T_e = 10 \text{ kK}$ sont en accord avec celles de l'expérience SPT-50. Cela permet d'évaluer les conditions du plasma du propulseur.

En effet, les raies du Xe I qui se trouvent dans cette région (appelées souvent raies 'bleues') appartiennent au multiplet $6s \leftarrow 7p$. Il s'agit généralement du deuxième multiplet du Xe I par ordre d'intensité des raies, le premier étant le $6s \leftarrow 6p$ (raies 'rouges'). Rappelons que ce multiplet 'bleu' est toutefois nettement plus faible que celui donnant les raies 'rouges' du Xe I (BOG98). Toutes les transitions observées dans le spectre du plasma du propulseur acquis dans cette région étaient bien présentes dans notre spectre théorique de xénon I.

En conclusion, les intensités du spectre expérimental et du spectre théorique du Xe I à $n_e = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ et $T_e = 10 \text{ kK}$ sont relativement proches, mais il faut préciser que le plasma contenu dans le propulseur n'est pas parfaitement homogène et stationnaire (H-S), ce qui est dû au transport des espèces constituant le plasma et au mouvement turbulent des particules présentes. Ainsi, les intensités des raies d'émission qui sont calculées pour un plasma H-S peuvent différer de celles mesurées dans le plasma réel. De plus, il faut préciser que les mesures expérimentales présentées ici ont été faites à l'aide d'un spectromètre non numérisé. Cela a pu introduire des décalages de longueurs d'onde ou des erreurs de précision pour les intensités. Toutefois, cette étude illustre le fait que le diagnostic du plasma s'avère possible même dans ces conditions. Bien que la température électronique soit estimée à 10 kK dans la région visée, il est possible d'affiner le diagnostic en considérant les rapports d'intensité au sein des multiplets ou en faisant un diagnostic comparatif à l'aide des raies d'émission du Xe II.

Cette étude spectroscopique du SPT-50 a été présentée et discutée à la conférence ECAMP IX (KAT07a).

6. SPECTRES DE DECHARGES A MICRO-ONDES DE XENON ET D'ARGON

Nous avons ici utilisé des données expérimentales antérieures présentées comme des spectres typiques dans le manuel de l' *American Institut of Physics Handbook*. Nos résultats sont comparés à ceux obtenus par le code C-R du LANL, seul code disponible étendu de ce type, abstraction faite du notre.

6.1. Spectres de xénon

Nous avons étudié les spectres expérimentaux du Xe I et II pour des décharges à micro-ondes de 0.002 mm, 0.07 mm et 16.0 mm ainsi que pour une décharge luminescente de 4.1 mm Hg. Les longueurs d'onde et une partie de l'identification des raies proviennent des mesures antérieures de Humphreys et Meggers (HUM33) pour le visible (de 350 nm à 1000 nm) et de Humphreys et Kostkowski (HUM52) pour l'infrarouge proche (de 1100 nm à 1500 nm). Une partie des raies du Xe I et la totalité des raies du Xe II n'avaient pas été identifiées par les expérimentateurs. Nous les avons identifiées à l'aide de nos modèles C-R. Les résultats ont été comparés à ceux de la récente compilation de Saloman (SAL04). La mesure des intensités dans ces dispositifs et dans les conditions citées ont été faites par Thekaekara *et al.* (THE57). Les résultats de ces mesures étaient publiés dans le manuel bien connu *American Institut of Physics Handbook*, AIPH (AIP57), qui contient, entre autres spectres standards, ceux des gaz rares.

6.1.1. Spectres du xénon I

En ce qui concerne le spectre de Xe I, parmi les quatre spectres expérimentaux qui sont présentés dans l'AIPH, trois ont été obtenus dans des décharges à micro-ondes et la dernière dans une décharge luminescente. L'aspect des spectres varie d'une expérience à l'autre, ce qui montre que les conditions de n_e et de T_e sont assez différentes. Les longueurs d'onde et les intensités de chacun de ces quatre spectres ont été répertoriées dans la table 7g.5 de l'AIPH. Un des quatre spectres (celui de la décharge à micro-ondes de 16.0 mm) est aussi donné sur la figure 7g.4 de l'AIPH. De nombreuses raies, peu intenses et donc non identifiées par les expérimentateurs, y sont aussi présentes. Nous avons identifié un grand nombre de ces dernières à l'aide des raies théoriques données par notre modèle. Le spectre expérimental est très étendu et contient un très grand nombre de raies. Bien que le spectre acquis s'étende de 350 nm à 1500 nm, les raies des multiplets les plus intenses se trouvent dans la partie qui s'étend de 400 jusqu'à 1100 nm. C'est cette partie du spectre que nous avons représenté sur la Fig. 6.1. Ce spectre est à comparer à celui de la Fig. 6.2 qui représente le spectre théorique provenant de notre modèle pour $n_e = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ et $T_e = 10 \text{ kK}$ dans la même région. Nous comparons les

raies 'rouges' du multiplet principal $6s \leftarrow 6p$ du spectre du Xe I fourni par notre modèle avec les raies correspondantes du spectre expérimental du Xe I acquis dans la décharge.

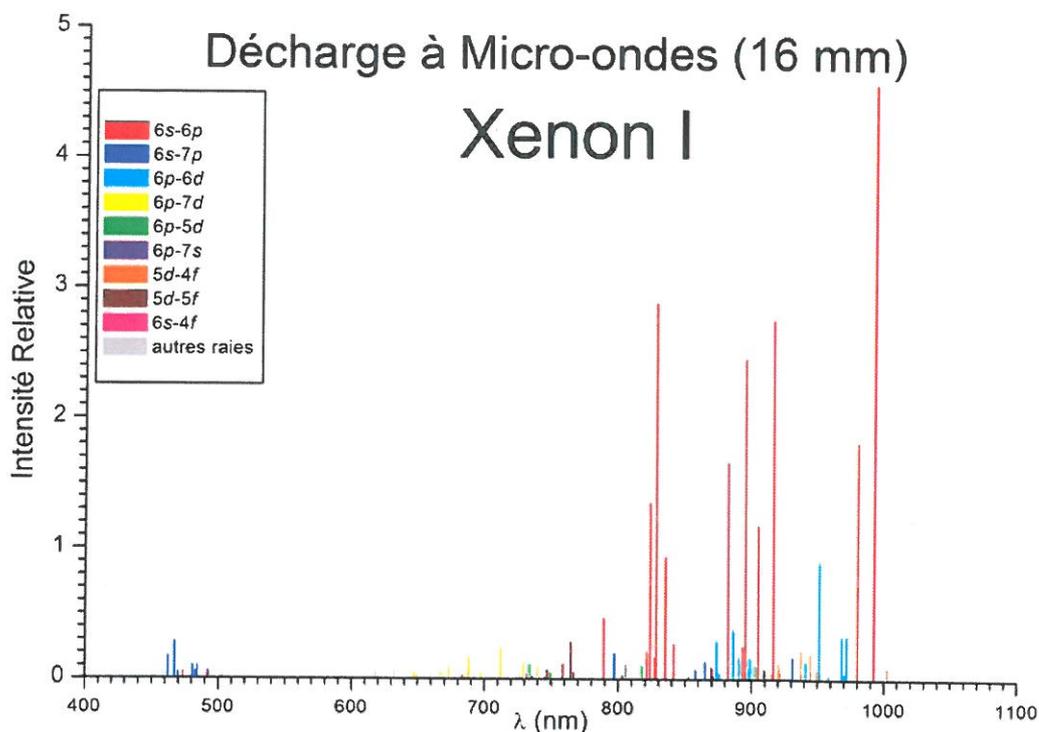


Fig. 6.1. Spectre expérimental du Xe I, raies identifiées par multiplets.

Selon la température de l'expérience, le rapport des intensités des deux multiplets $6s \leftarrow 7p$ (raies 'bleues') et $6p \leftarrow 6d$ (raies que nous appelons 'oranges' représentées dans la figure en bleu clair pour mieux les distinguer des raies 'rouges') varie. En plus des raies $6s \leftarrow 6p$, $6p \leftarrow 6d$ et $6s \leftarrow 7p$ mentionnées, on trouve dans l'AIPH de nombreuses raies qui appartiennent principalement aux multiplets $6s \leftarrow 8p$; $5d \leftarrow 4f, 5f, 6p$; $6p \leftarrow 7s, 7d, 8s, 8d$; des raies en principe interdites $6s \leftarrow 4f$ y apparaissent aussi. Sur la figure, les raies de trois multiplets sont représentées en gris car elles ont des intensités très faibles. Nous observons ainsi douze multiplets en tout. Tous ces multiplets ont été inclus dans notre modèle, ce qui nous permet de bien modéliser le spectre de cette expérience dans la région étudiée.

Comme nous l'avons noté précédemment, dans les spectres donnés sur les Fig. 6.1 et 6.2 une multitude de raies est contenue. Ces raies n'apparaissent pas toutes dans ces figures, étant donné que leurs intensités sont relativement faibles, mais elles sont présentes dans nos fichiers informatiques et ont été exploitées. Ceci est aussi vrai en général pour un grand nombre de spectres calculés, dont souvent seulement les raies les plus intenses sont visibles dans les figures présentées dans ce travail.

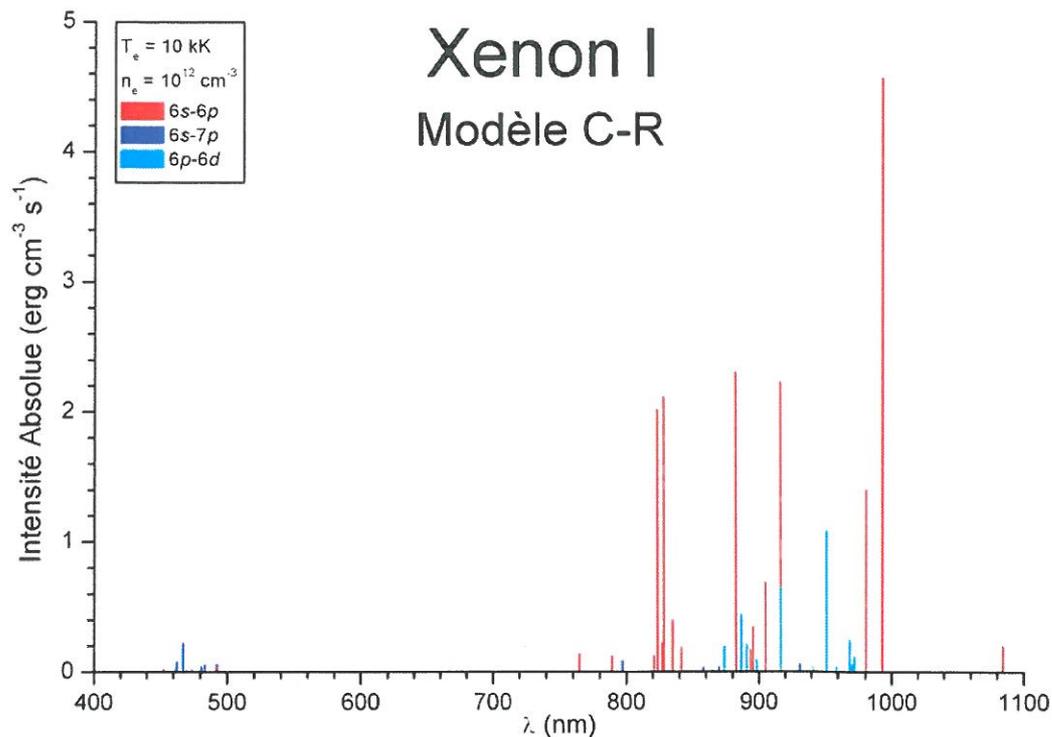


Fig. 6.2. Spectre théorique du Xe I provenant du modèle C-R montrant les raies des multiplets sélectionnés.

Pour les multiplets $6s \leftarrow 6p$ (raies 'rouges'), et $6s \leftarrow 7p$ (raies 'bleues'), les raies provenant du modèle sont en accord avec celles des raies expérimentales. Ceci est généralement le cas, puisque des valeurs d'énergies expérimentales et évaluées ont été utilisées en grande partie dans nos modèles. En ce qui concerne le multiplet $6p \leftarrow 6d$ (raies 'orange', ici montrées en bleu clair en conformité avec la Fig. 6.1), la présence de certaines raies théoriques n'a pas pu être démontrée dans le spectre expérimental, car elles proviennent de niveaux non suffisamment connus. Elles sont présentes dans les spectres théoriques obtenus par notre modèle car nous y avons utilisé des énergies théoriques évaluées pour obtenir les valeurs de certains niveaux d'énergie manquants.

Nous constatons qu'il y a un accord relativement bon entre les intensités des raies théoriques et expérimentales pour une n_e de 10^{12} cm^{-3} et une T_e de 10 kK, valeurs auxquelles on a abouti par ce diagnostic. Notons que certaines des différences sont généralement observées, qui peuvent provenir:

- a) de la réabsorption et/ou,
- b) du choix de la ligne de visée, qui traverse des régions où la n_e et la T_e varient,
- c) de la connaissance des σ_{exc} et des A_{ij} (dans la limite de 20 % pour les multiplets les mieux connus) et, plus généralement,
- d) de la validité approximative de la supposition de présence d'une seule fonction de distribution électronique maxwellienne.

La comparaison des spectres expérimentaux acquis dans la décharge à micro-onde de 16.0 mm à nos spectres théoriques pour les trois multiplets principaux ($6s \leftarrow 6p$, $6s \leftarrow 7p$, $6p \leftarrow 6d$) a été présentée et discutée à la conférence sur la propulsion IEPC07 (KAT07f) et à la réunion du Projet de Recherche Coordonné (CRP) de l'IAEA CRP07 (KAT07g).

6.1.2. Spectres du xénon II

Parmi les expériences reportées dans l'AIPH, il y en a une seule qui concerne aussi le Xe II, la décharge à micro-ondes de 0.002 mm. Les expérimentateurs n'ont pas répertorié l'appartenance des raies du Xe II y apparaissant, qui donnerait les configurations d'origine. Nous avons utilisé notre modèle C-R pour identifier ces raies et les classer par multiplets. Le spectre expérimental de la décharge est donné sur la Fig. 6.3 après identification de chaque raie dans son multiplet.

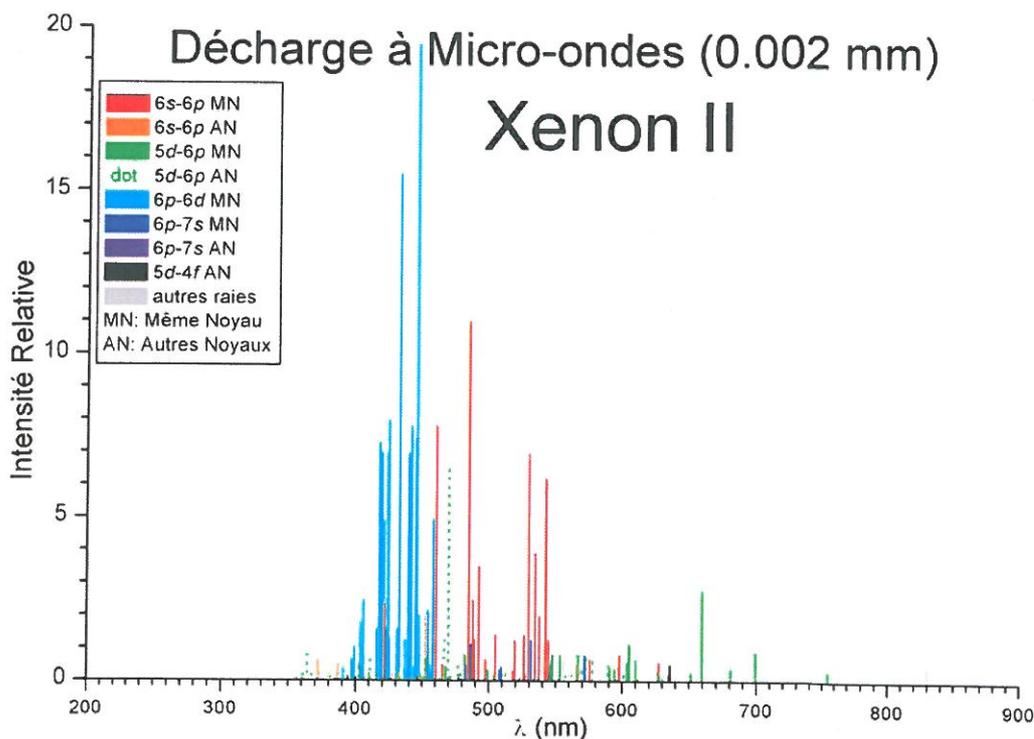


Fig. 6.3. Spectre du xénon II dans une décharge à micro-ondes, raies identifiées par multiplets.

Les valeurs du spectre publié dans le manuel de l'AIPH concernent exclusivement la région allant de 350 nm à 870 nm. Les raies des principaux multiplets ont ici été représentées avec des couleurs différentes. De plus, les raies de chaque multiplet ont été ici séparées en deux sous ensembles:

- i) transitions entre des niveaux ayant le même noyau (j_c) et
- ii) transitions impliquant deux niveaux qui appartiennent à des noyaux différents (AN) présentées en pointillés sur la Fig. 6.3. Ces raies sont sauf exception moins intenses, comme attendu.

Le spectre donné par notre modèle qui présente ici uniquement des raies provenant de niveaux qui ont des noyaux j_c identiques (MN) pour une n_e de 10^{12} cm^{-3} et une T_e de 20 kK est représenté sur la Fig. 6.4. Les intensités des raies du multiplet $5d \leftarrow 4f$ ont été ici multipliées par trois pour qu'on puisse les distinguer.

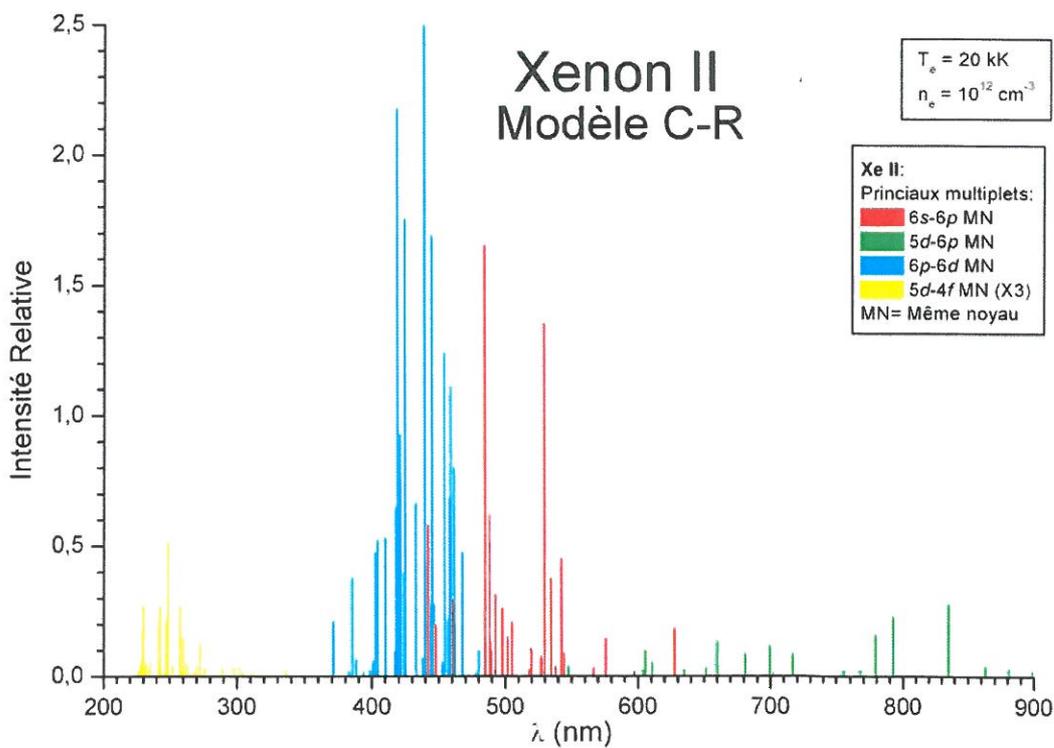


Fig. 6.4. Spectre du Xe II du modèle C-R; uniquement certains multiplets sélectionnés.

Nous observons que notre spectre théorique s'étend au début dans une région plus large que celle qui concerne le spectre expérimental que nous présentons ici. Rappelons que seulement les raies des transitions dans le même noyau appartenant à quatre multiplets sont montrées dans le spectre théorique. Les quatre multiplets $6s \leftarrow 6p$, $5d \leftarrow 6p$, $6p \leftarrow 6d$ et $5d \leftarrow 4f$ sont les plus intenses dans les conditions de l'expérience. Les rapports et les formes des trois premiers multiplets sont similaires à celles provenant de l'expérience. Ceci nous permet d'attribuer les valeurs $n_e = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ et $T_e = 20 \text{ kK}$ à ce plasma suivant notre diagnostic. En ce qui concerne le multiplet $5d \leftarrow 4f$, donné par notre modèle, il n'est pas visible sur le spectre expérimental car celui-ci commence à 350 nm alors que les raies entre les niveaux ayant le même noyau se situent entre 200 et 300 nm. Les quelques raies de ce multiplet

sont présentes dans la plage d'énergie de l'expérience correspondent à des transitions de faible intensité entre noyaux différents. Bien que nous attendons des raies entre noyaux différents en général très peu intenses (c'est pourquoi nous ne les avons pas toujours incluses dans notre modèle) nous envisageons l'introduction des plus intenses parmi elles dans notre modèle.

6.1.3. Comparaison des spectres du Xe II donnés par LANL et par notre modèle

Nous comparons ici les spectres provenant du code C-R du LANL fournis par R.E.H. Clark avec ceux obtenus par notre modèle pour les expériences diagnostiquées plus haut. Comme indiqué dans le Chap. 4, les spectres théoriques provenant du LANL ont des longueurs d'onde éventuellement déplacées par rapport aux valeurs expérimentales car ce code utilise des niveaux théoriques, donnant des énergies plus ou moins conformes aux énergies expérimentales. Sur la Fig. 6.5 nous représentons le spectre théorique du Xe II donné par le code du LANL, où l'on distingue facilement les cinq raies les plus intenses pour une n_e de 10^{12} cm^{-3} pour une T_e de 2.0 eV dans la région allant de 460 nm à 545 nm. Comme on peut l'observer sur la Fig. 6.5, le code du LANL permet de modéliser aussi la largeur des raies ce qui n'est pas le cas pour notre modèle. Les raies dépourvues de leur épaisseur ont été aussi légèrement replacées de façon à devenir conformes aux valeurs réelles de l'expérience. Elles sont alors représentées sur la Fig. 6.6.

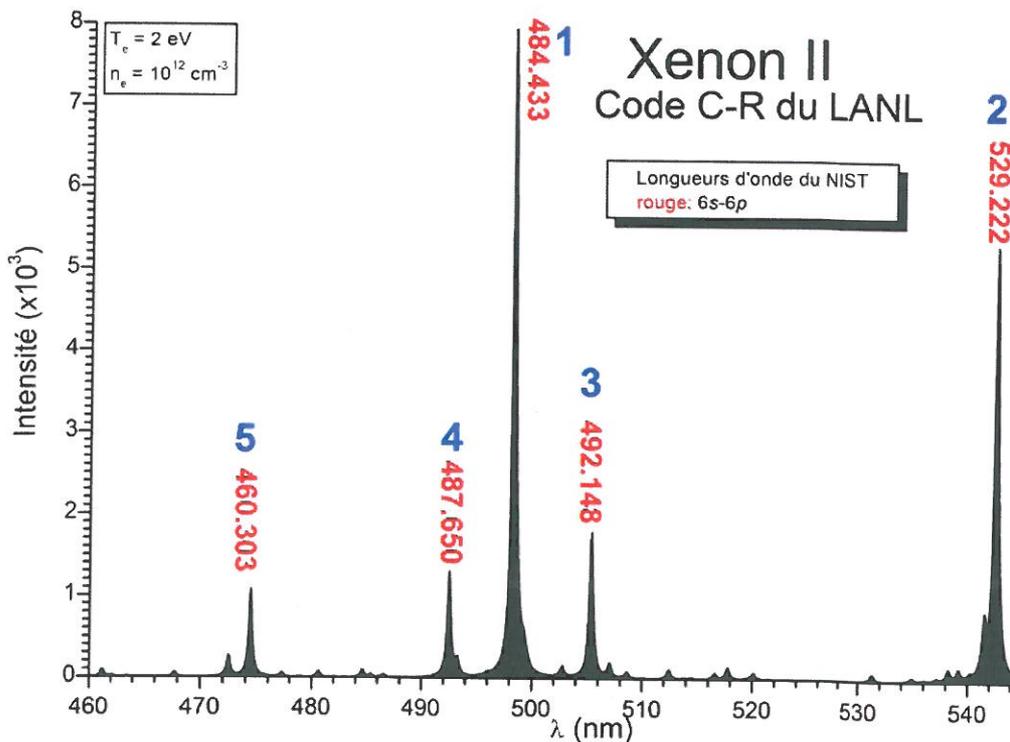


Fig. 6.5. Spectre du Xe II provenant du code C-R du LANL.

Une inspection des spectres donnés dans les Figs. 6.5 et 6.6 montre que le déplacement des raies provenant des niveaux théoriques n'est pas une procédure banale. Le spectre de notre modèle pour cette région à une n_e de 10^{12} cm^{-3} et une T_e de 20 kK est représenté sur la Fig. 6.7.

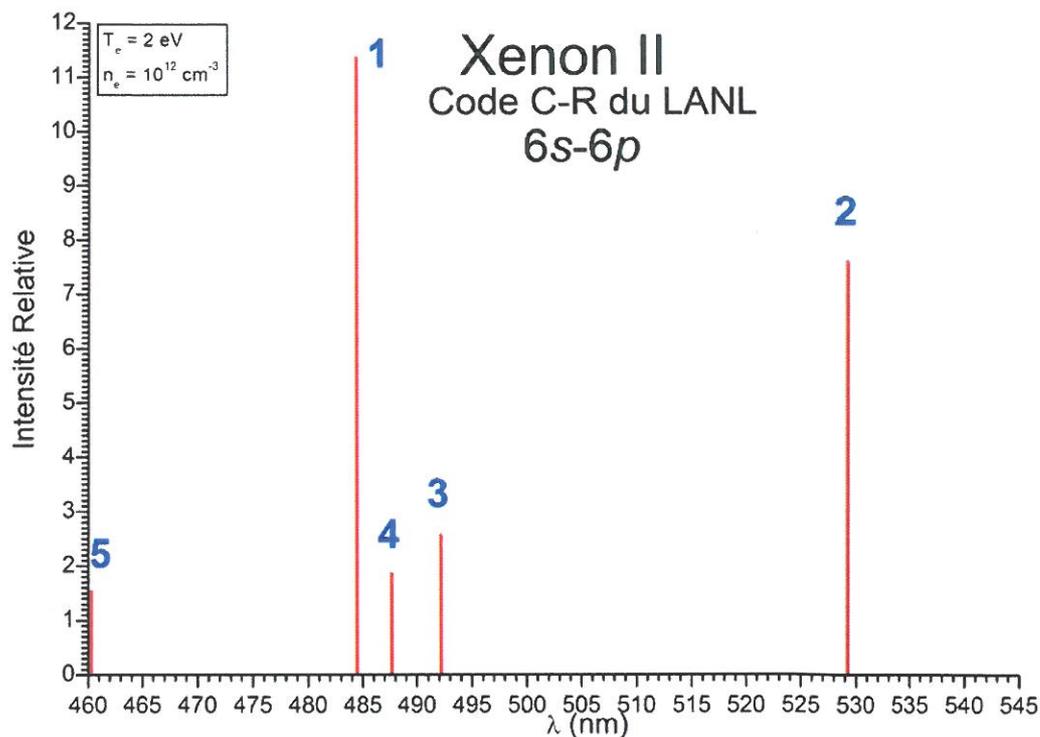


Fig. 6.6. Spectre modifié du Xe II obtenu avec le modèle C-R du LANL.

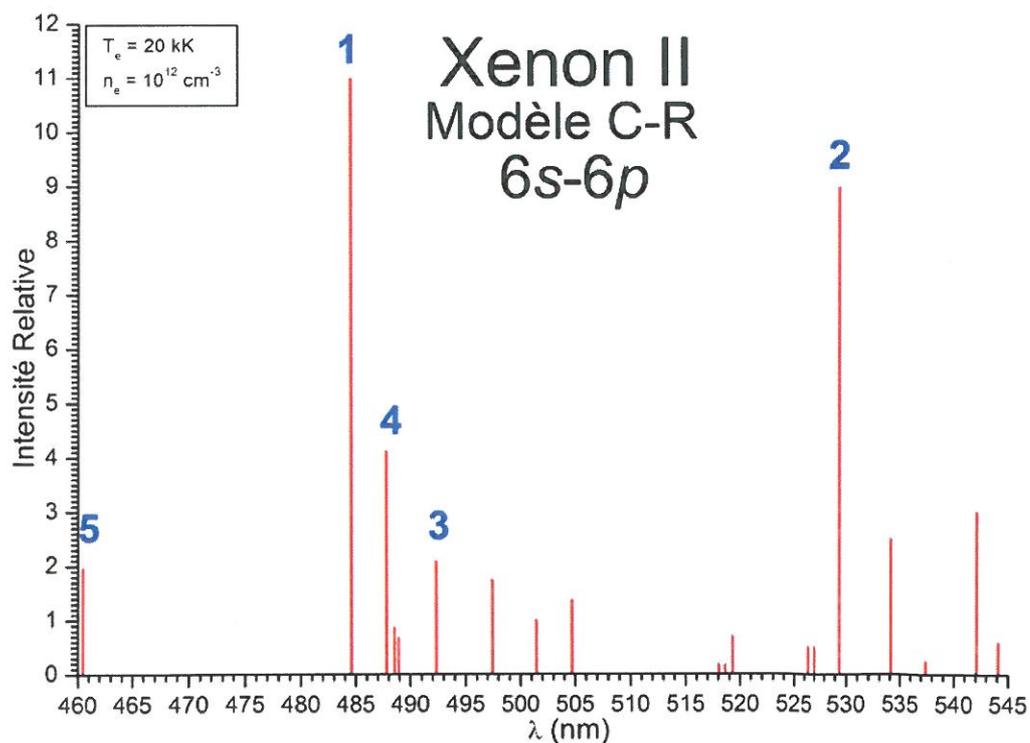


Fig. 6.7. Notre spectre théorique du Xe II pour le multiplet 6s-6p.

Nous remarquons que les deux spectres des Figs. 6.6 et 6.7 présentent une forme assez similaire. Sur la Fig. 6.8 est représenté le spectre expérimental provenant de la décharge à micro-ondes de 0.002 mm diagnostiquée plus haut. La comparaison des trois spectres (Figs. 6.6, 6.7 et 6.8) montre que les cinq raies les plus intenses du spectre du LANL font partie des sept raies les plus intenses dans le spectre théorique de notre modèle et dans l'expérience. En ce qui concerne les intensités des raies, elles ont une forme assez similaire. La Fig. 6.5 n'est pas quand à elle directement (e.g. avant repositionnement des niveaux) comparable aux Figs. 6.7 et 6.8. Des comparaisons de ce type ont été présentées et discutées à la réunion pour la recherche coordonnée du CRP de l'IAEA (KAT07g).

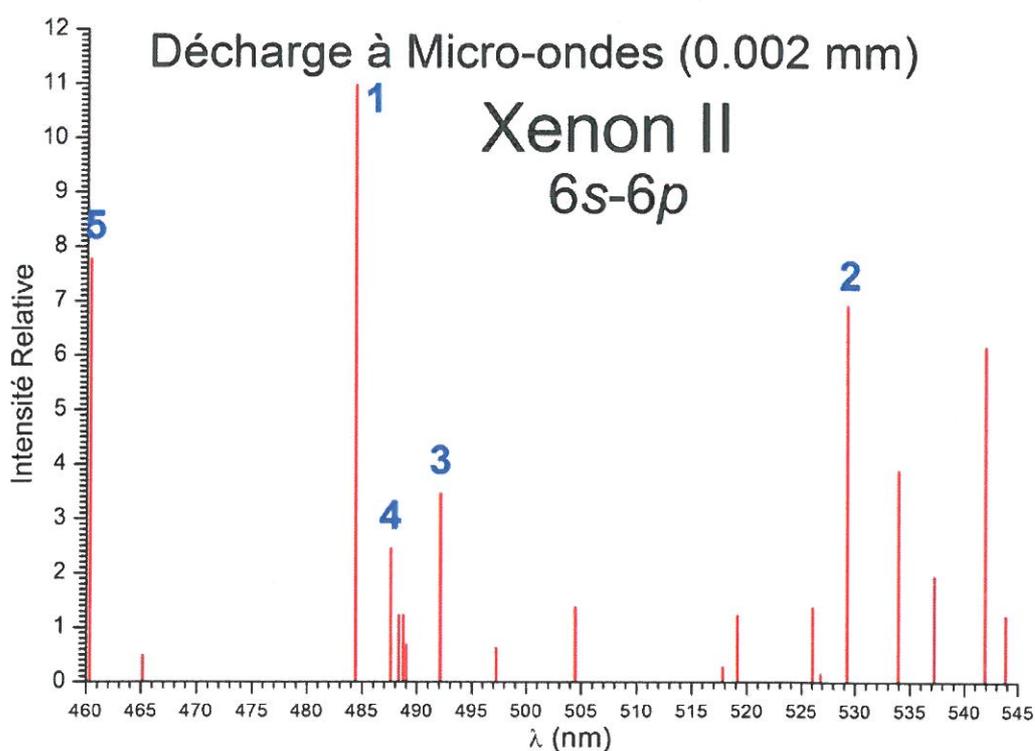


Fig. 6.8. Spectre expérimental d'une décharge à micro-ondes, multiplet $6s\leftarrow 6p$ du Xe II.

6.2. Spectres de l'argon neutre

Le manuel cité de l'AIPH contient aussi deux expériences qui concernent l'Ar I:

La première est une décharge lumineuse de courant alternatif de soixante cycles. L'intensité du courant est de 60.0 mA et la pression d'argon est de 3.0 mm Hg. Le spectre enregistré et rapporté dans l'AIPH pour cette décharge est représenté sur la Fig. 6.9. Ici encore, nous rappelons la remarque précédente qui concerne l'invisibilité de certaines raies des multiplets due à leur intensité moindre. Les raies de dix multiplets y ont été identifiées par les expérimentateurs à l'aide de spectres provenant de trois sources différentes alors disponibles. Nous avons remplacé les longueurs d'onde que les auteurs

avaient données initialement dans l'AIPH par celles, plus exactes, disponibles actuellement au NIST (RAL08). Les raies des multiplets $4s \leftarrow 4,5,6p$; $4p \leftarrow 6,7,8s$ et $4p \leftarrow 4,5,6,7d$ sont représentés dans la Fig. 6.9 avec des couleurs différentes. Une grande partie de ces raies n'est pas visible dû à leur faible intensité. Les raies du multiplet $4s \leftarrow 4p$ (raies 'rouges' de l'Ar I) sont très intenses par rapport à celles des autres multiplets, comme c'était précédemment le cas pour les raies du multiplet similaire $6s \leftarrow 6p$ du Xe I (Fig. 6.1).

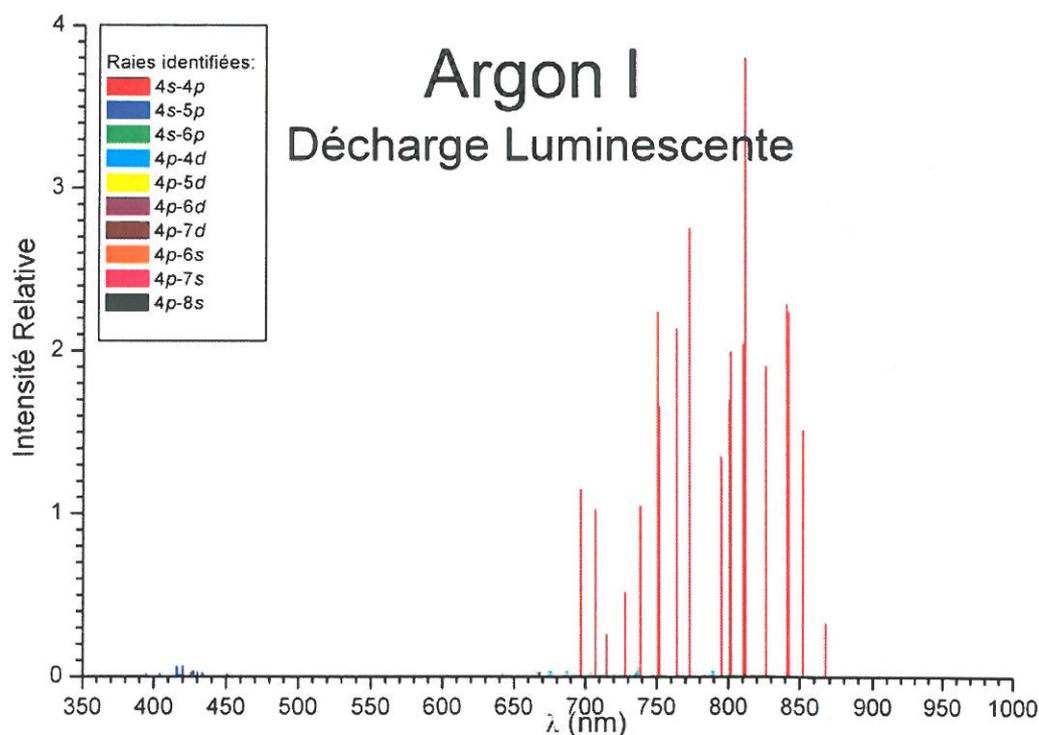


Fig. 6.9. Spectre expérimental d'une décharge lumineuse d'Ar, avec la liste des multiplets dont les raies ont été identifiées.

Une seconde expérience concerne une cathode creuse ayant des électrodes en fer. Le courant était de 150.0 mA et la pression d'argon de 1.0 mm Hg. Le spectre acquis dans cette expérience rapporté lui aussi dans l'AIPH est représenté sur la Fig. 6.10. Dans cette expérience, les raies de sept multiplets d'Ar I ont été identifiées. Ce spectre s'étend sur une gamme de longueurs d'onde plus large que le précédent. Le multiplet $4s \leftarrow 4p$ est dans ce cas visible en totalité. En ce qui concerne la forme du spectre, nous remarquons qu'elle ne diffère que peu de celle de l'expérience précédente. Nous pouvons en déduire que les conditions du plasma sont relativement proches dans les deux expériences. La prédominance du multiplet $4s \leftarrow 4p$ indique que la température est relativement basse. Pour affiner le diagnostic, nous avons agrandi l'échelle des intensités relatives des raies dans ces spectres (les raies du multiplet $4s \leftarrow 4p$ deviennent ainsi saturées) de manière à examiner les intensités relatives des raies des autres multiplets. Sur les Fig. 6.11 et 6.12 on peut voir les spectres expérimentaux ainsi modifiés.

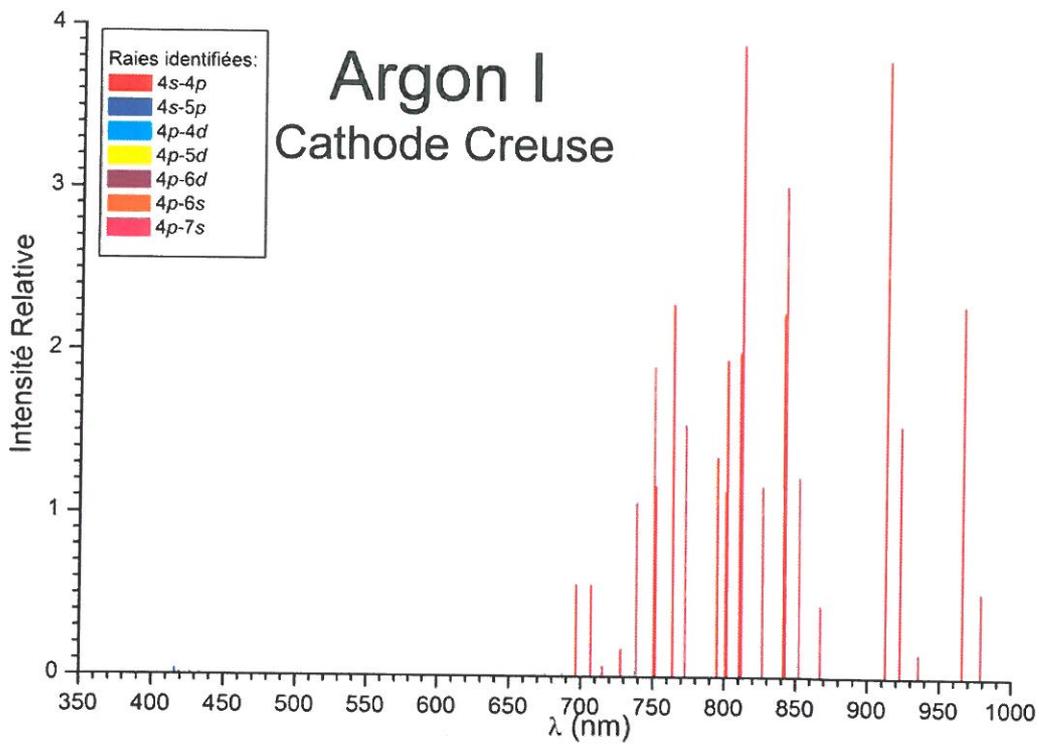


Fig. 6.10. Spectre expérimental d'une cathode creuse d'Ar.

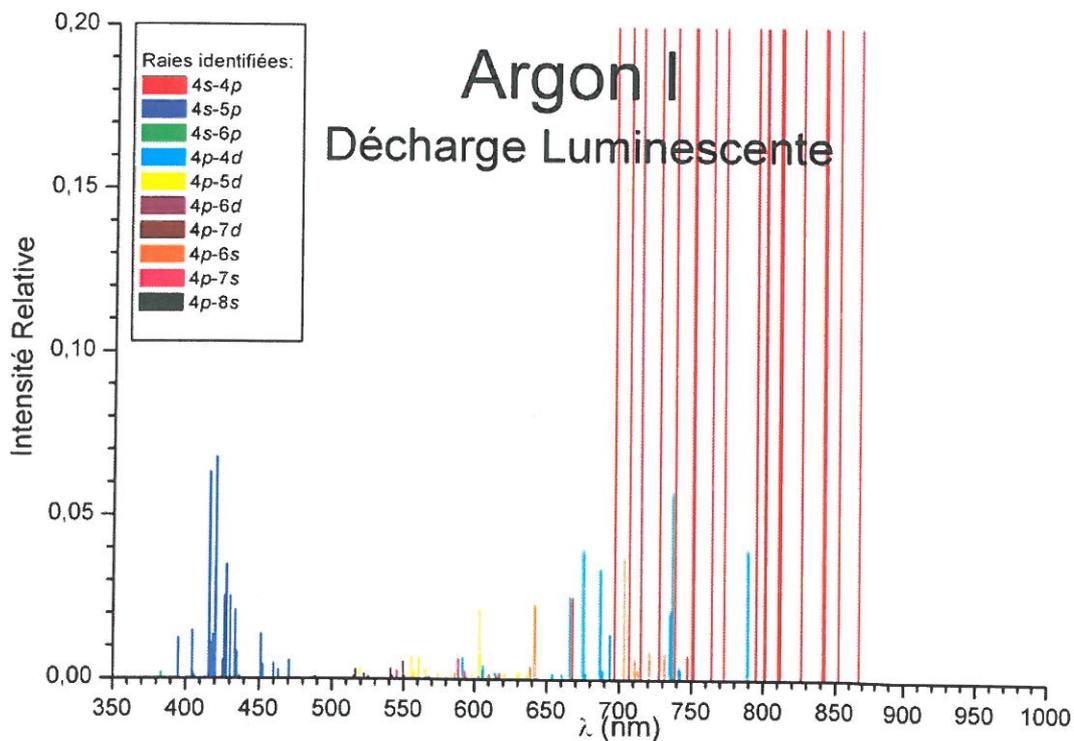


Fig. 6.11. Spectre expérimental d'une décharge lumineuse d'Ar, dont les raies du multiplet $4s \leftarrow 4p$ sont saturées.

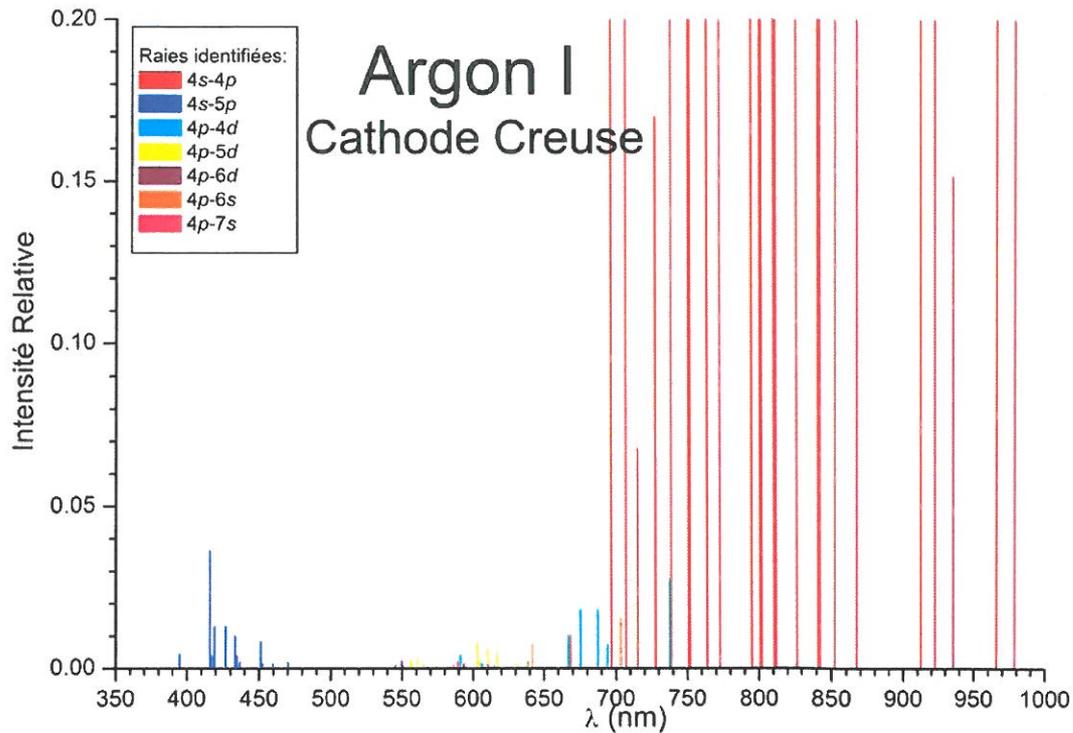


Fig. 6.12. Spectre expérimental d'une cathode creuse d'Ar, dont les raies du multiplet $4s \leftarrow 4p$ sont saturées.

Une comparaison des deux spectres des Figs. 6.11 et 6.12 montre que dans la décharge luminescente les raies des multiplets qui nécessitent plus d'énergie pour être excités que celles du multiplet 'rouge' ($4s \leftarrow 4p$) sont plus intenses dans le spectre de la cathode creuse. Cela montre que la température du plasma de la décharge luminescente était plus grande que celle du plasma présent dans la cathode creuse.

Le spectre correspondant donné par notre modèle est représenté sur la Fig. 6.13. La comparaison de ce spectre avec les spectres expérimentaux montre que les intensités sont assez similaires pour une n_e de 10^{12} cm^{-3} et une T_e de 9 kK; nous avons attribué ces valeurs au plasma de l'expérience. Dans le spectre théorique (Fig. 6.13), nous observons que les formes des quatre multiplets sont ici similaires à celles obtenues dans les deux expériences. De plus, le rapport des intensités des raies des multiplets $4s \leftarrow 4p$ et $4p \leftarrow 4d$ est le même que celui constaté dans les expériences, ce qui suggère une fiabilité de notre diagnostic. En ce qui concerne les multiplets $4s \leftarrow 5p$ et $4p \leftarrow 5d$, leurs intensités sont plus faibles dans les expériences; nous attribuons cette différence à une réabsorption probable. Nous pouvons aussi supposer que les parois des dispositifs expérimentaux ont probablement une absorption différente en fonction de la longueur d'onde.

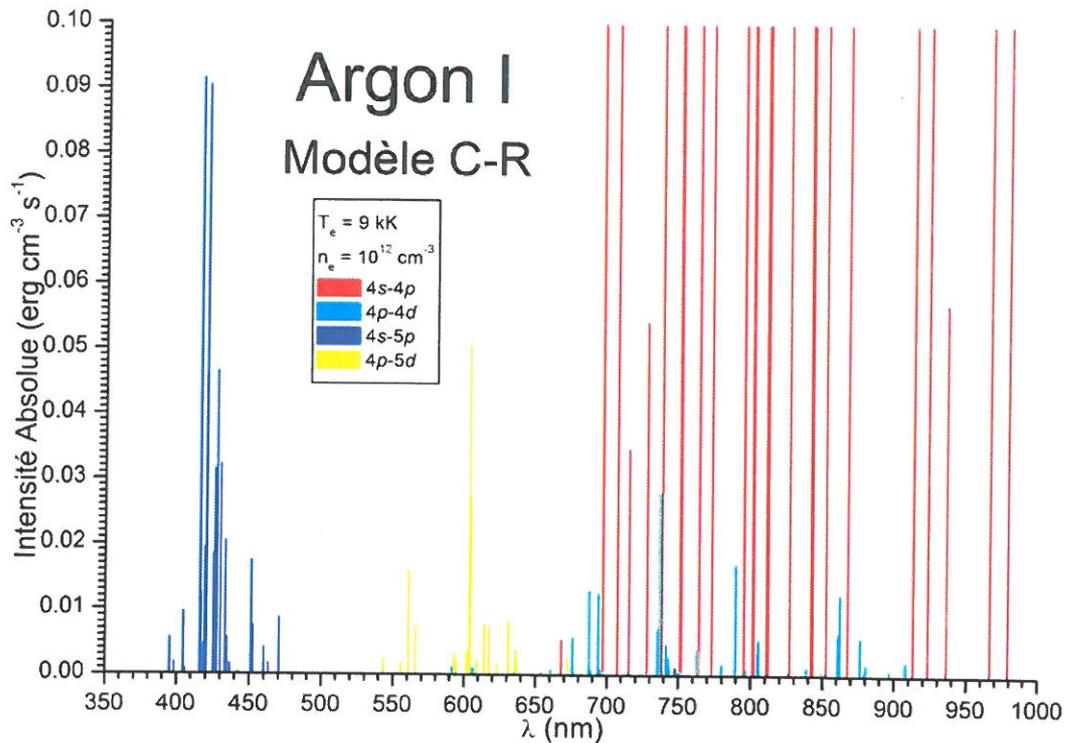


Fig. 6.13. Spectre théorique provenant du modèle C-R d'Ar I, multiplets sélectionnés.

6.3 Similitudes entre les spectres d'argon et de xénon

Comme nous pouvons le remarquer en comparant les spectres du Xe I et de l'Ar I (Fig. 6.2 et Fig. 6.13 par exemple), les raies du Xe I sont décalées vers les plus grandes longueurs d'onde par comparaison à celles de l'Ar I. Ce décalage est en accord avec le fait que la différence d'énergie entre les niveaux 6s et 6p du Xe I est plus faible que celle entre les niveaux 4s et 4p de l'Ar I, au vu de la différence substantielle entre les énergies d'ionisation correspondantes. Nous pouvons aussi noter l'analogie entre la forme des raies du multiplet 6s←6p 'rouge' du Xe I et leurs analogues de l'Ar I i.e. les raies 4s←4p. Une similitude des formes générales des deux spectres est aussi suggérée.

7. SPECTRES DE DECHARGES A BARRIERE DIELECTRIQUE (DBD) DANS LE XENON

Pour compléter notre étude, nous avons aussi étudié des dispositifs expérimentaux spécialement conçus pour ce travail par M. Gançiu. Nous avons ainsi étudié les spectres d'une décharge à barrière diélectrique dans le xénon. Certains spectres nous ont été fournis dans ce cas et nous en avons acquis un grand nombre, prélevés sous différents angles et à différents endroits dans les tubes des décharges à barrière diélectrique remplis de xénon. Nous disposons de plusieurs tubes de ce type contenant parmi d'autres gaz du xénon et de l'argon.

7.1. Acquisition et étude de spectres (expériences i à iv)

i) La première séance de mesures a été réalisée par M. Gançiu qui a enregistré un spectre de Xe dans la région s'étendant de 300 nm à 800 nm. Ce spectre est représenté sur la Fig. 7.1.

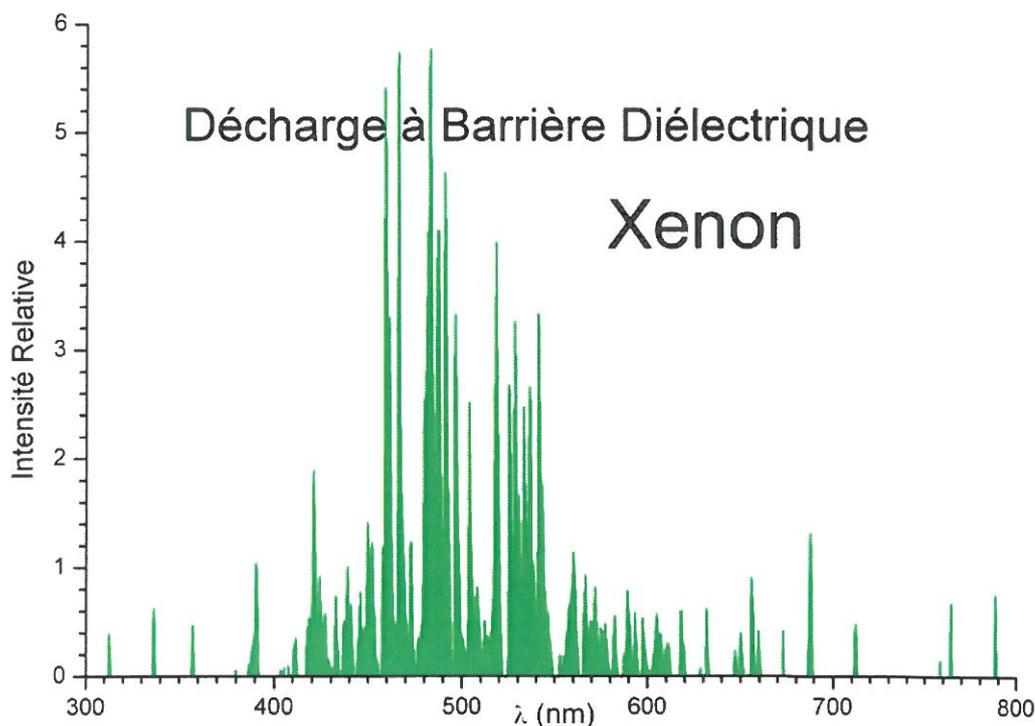


Fig. 7.1. Spectre d'une décharge à barrière diélectrique au Xe enregistré au LPGP.

A l'aide de nos modèles C-R, nous avons pu déterminer que le plasma correspondant à ce spectre était composé de Xe II pour l'essentiel. En effet, nous avons comparé le spectre acquis au

spectre théorique du Xe II (Fig.7.2.) provenant de notre modèle pour une n_e de 10^{12} cm^{-3} et une T_e de 20 kK.

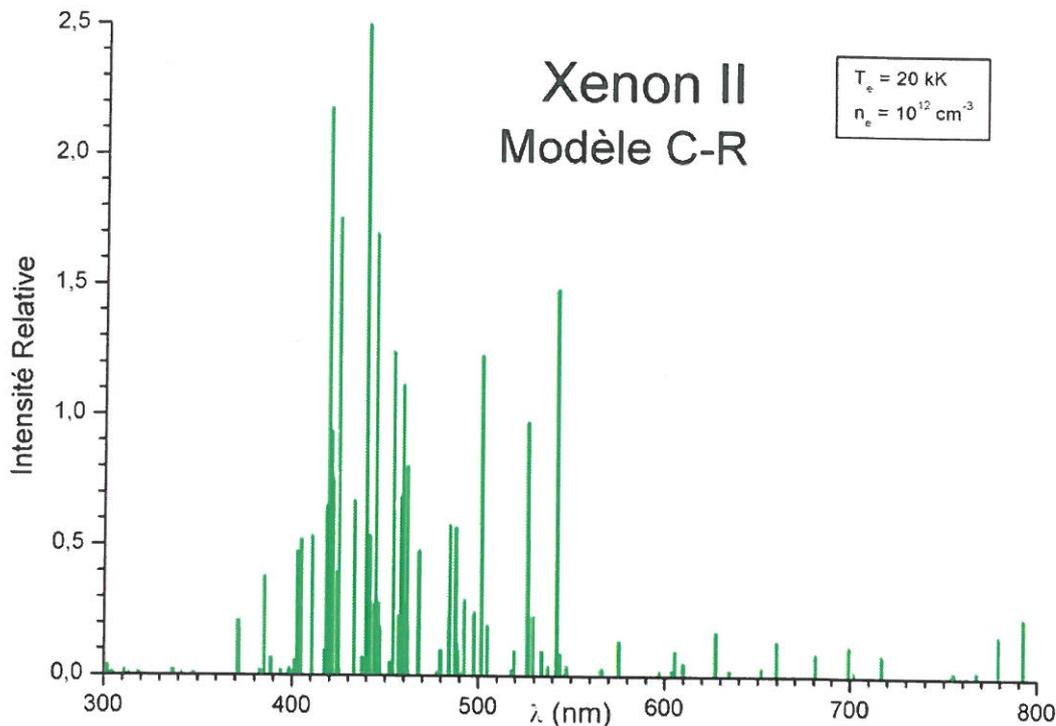


Fig. 7.2. Spectre théorique du modèle C-R du Xe II.

Nous remarquons que les intensités des raies du spectre théorique du Xe II (Fig.7.2) sont similaires à celles du spectre expérimental de la décharge (Fig. 7.1). Une analyse plus détaillée de la forme des multiplets a été faite, qui a montré que les raies intenses présentes dans la région spectrale allant de 380 à 480 nm appartiennent au multiplet $6p \leftarrow 6d$. Les raies intenses qui se situent entre 480 et 600 nm sont celles du multiplet $6s \leftarrow 6p$ du Xe II. La prédominance du Xe II ainsi que les intensités des raies des multiplets $6s \leftarrow 6p$ et $6p \leftarrow 6d$ montre que la température est d'environ 20 kK.

ii) Durant la seconde série de mesures, j'ai pu être initiée à l'acquisition des spectres par C. Boisse-Laporte. Nous avons utilisé un spectromètre Jobin Yvon HR460 dont le pas est de 0.4 \AA et la résolution de l'ordre de 1 \AA (0.8 \AA pour une fente de $70 \text{ }\mu\text{m}$). Nous avons placé une fibre optique de manière à mesurer l'intensité émise par le plasma, moyennée sur toute la longueur du tube. Ainsi la fibre optique était placée à une extrémité du tube. Généralement, dans un tel dispositif, la température électronique est estimée à 1.0 eV environ. Nous pouvons donc nous attendre à ce que le plasma soit relativement froid. Nous avons fait l'acquisition d'un spectre dans la région allant de 300 nm à 900 nm . Ensuite, notre travail a consisté à identifier les raies présentes puis à les classer par multiplets pour les espèces du Xe I, II et III. Le résultat de cette identification est présenté sur la Fig. 7.3.

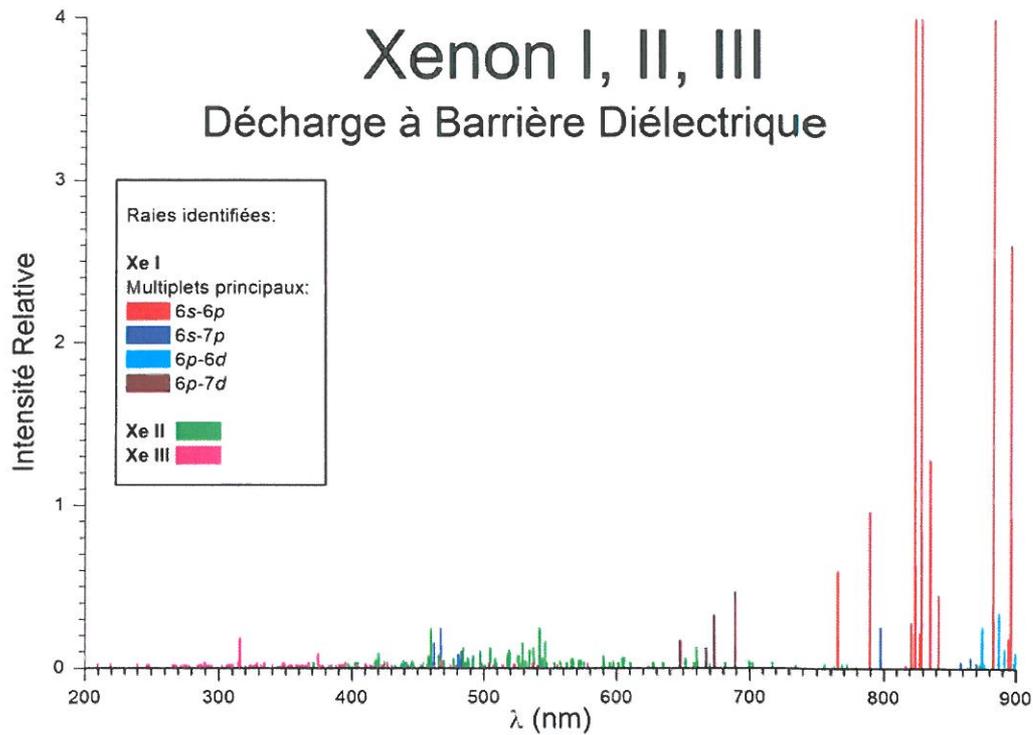


Fig. 7.3. Spectre d'une décharge à barrière diélectrique enregistré au LPGP, principaux multiplets identifiés.

La première information clairement visible dans ce spectre est la prédominance du xénon I indiquant que la T_e est basse, de l'ordre de 10 kK. La région allant de 760 nm à 900 nm dans laquelle le spectre est le plus intense, a été agrandie et est représentée séparément sur la Fig. 7.4. Nous pouvons observer sur ce spectre les raies de trois multiplets: les $6s \leftarrow 6p$ (raies 'rouges'), les $6s \leftarrow 7p$ d'intercombinaison (raies 'bleues'), et les $6p \leftarrow 6d$ (raies 'oranges' représentées ici en bleu clair) que nous avons identifiées. Sur la Fig. 7.5, nous présentons les résultats de notre modèle C-R du Xe I pour une n_e de 10^{12} cm^{-3} et une T_e de 11 kK dans la région allant de 760 à 900 nm. Le spectre théorique de notre modèle a une forme très similaire à celle du spectre enregistré dans la décharge. Nous pouvons donc en déduire les conditions de n_e et T_e présentes dans l'expérience qui sont celles de la Fig. 7.5.

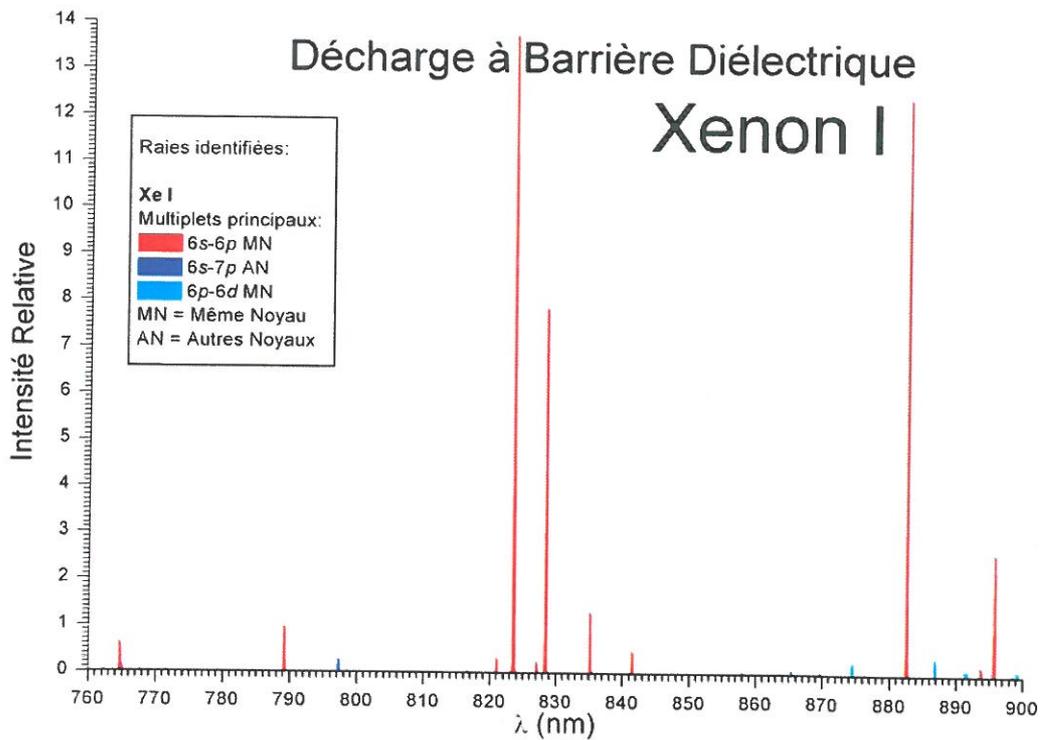


Fig. 7.4. Spectre d'une DBD dans la région allant de 760 nm à 1000 nm, principaux multiplets identifiés.

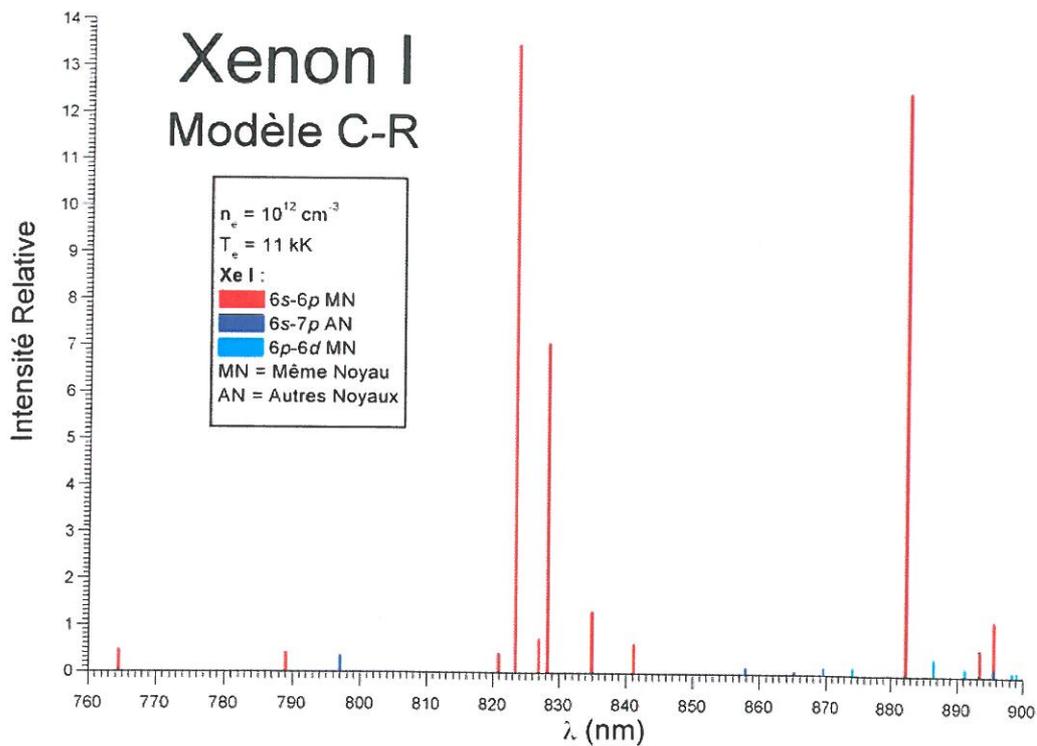


Fig. 7.5. Spectre théorique du modèle C-R du Xe I dans la région allant de 760 nm à 900 nm, principaux multiplets sélectionnés.

Sur la Fig. 7.6, nous présentons en détail les raies du Xe II que nous avons identifiées dans l'expérience.

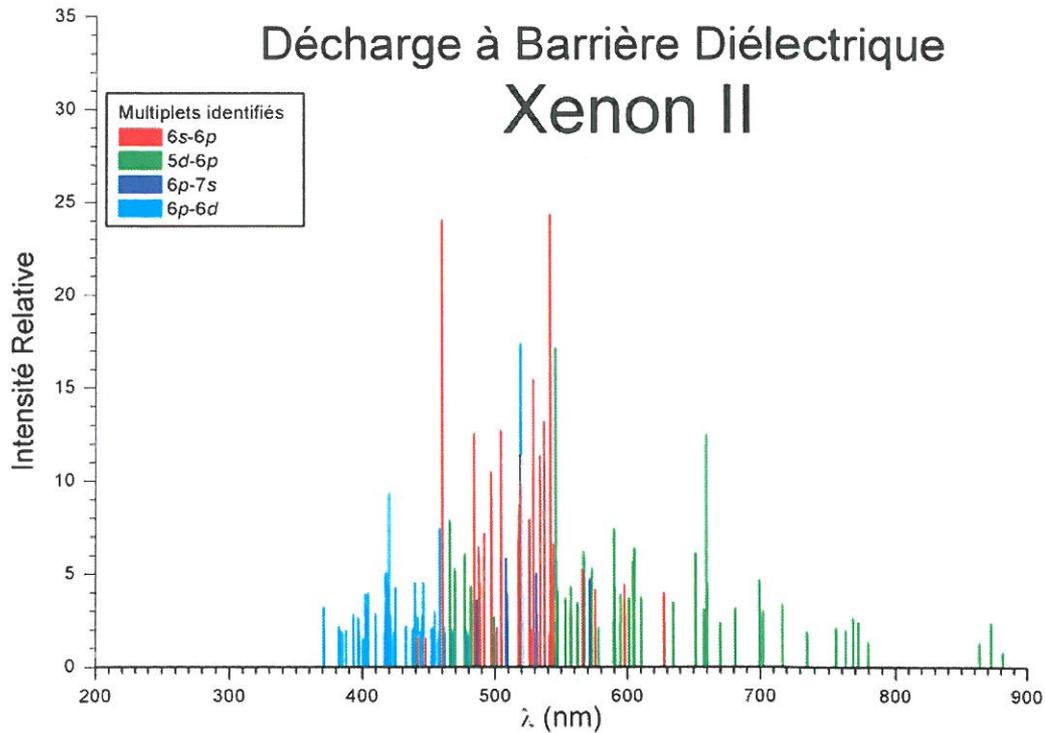


Fig. 7.6. Spectre d'une DBD, multiplets du Xe II sélectionnés.

La comparaison de la forme des raies de la Fig. 7.6 avec celle des raies de la décharge à micro-ondes étudiée dans le chapitre précédent (Chap.6, Fig. 6.3) montre que les rapports des intensités des raies des trois multiplets $6s \leftarrow 6p$, $5d \leftarrow 6p$ et $6p \leftarrow 6d$ sont très différents. Dans le spectre présenté sur la Fig. 7.6, les raies les plus intenses sont celles du multiplet $6s \leftarrow 6p$ impliquant des niveaux dont l'énergie est basse comparée à celle des autres niveaux excités. Nous pouvons en déduire que le spectre est relativement froid ce qui est en accord avec notre diagnostic basé sur le Xe I.

Ce début d'étude introduit ici indique que le plasma présent dans la décharge à barrière diélectrique peut aussi être diagnostiqué de manière suffisamment précise lorsque l'on considère les intensités des raies des principaux multiplets des espèces Xe I à Xe III. De plus, la comparaison des résultats des deux premières décharges i) et ii) montre que la température change énormément en fonction de la position et de l'angle de visée de la fibre optique.

Une partie de ce travail a été présentée et commentée à la conférence ECAMP IX (KAT07c).

iii) J'ai participé à une troisième étude dirigée par C. Boisse-Laporte au cours de laquelle j'ai pu faire l'acquisition de spectres provenant d'un autre tube contenant lui aussi du Xe pur. Ici aussi, nous avons pris la précaution d'enfermer le dispositif dans une boîte noire, pour éviter d'observer dans les spectres des raies d'impuretés environnantes comme le mercure (notamment la raie à 404.79 nm). Nous avons utilisé un spectromètre Jobin Yvon HR460 équipé d'une CCD utilisant un système de refroidissement qui abaisse la température de l'eau à 3°C par effet Peltier. La fibre optique a été placée au milieu du tube, entre les deux électrodes. Cette fois ci, le spectre mesuré correspond à l'intensité émise par le plasma au milieu du tube et moyenné sur sa largeur. En ce qui concerne les paramètres d'acquisition des spectres, nous avons choisis une fente de 30 μm d'épaisseur et un temps d'acquisition variant de 8 à 40 s selon les régions spectrales observées. Dans les régions où les raies sont très intenses, il faut choisir des temps d'acquisition courts sans quoi les intensités des raies seront saturées. Alternativement, dans ces régions il est aussi possible de choisir des temps d'acquisition très longs pour observer en détail les raies dont les intensités sont faibles et qui sont aussi présentes. Les spectres que nous avons enregistrés s'étendent de 200 nm à 1000 nm. Nous avons tenté d'observer des raies de longueurs d'onde inférieures à 200 nm, mais nous ne les avons pas vues, bien que le dispositif soit en quartz, car le spectromètre n'est pas conçu pour l'étude du rayonnement dans l'UV.

Sur la Fig. 7.7 est représenté le spectre expérimental acquis dans la région allant de 760 nm à 1000 nm. C'est dans cette région que se trouvent les raies les plus intenses du spectre du Xe I.

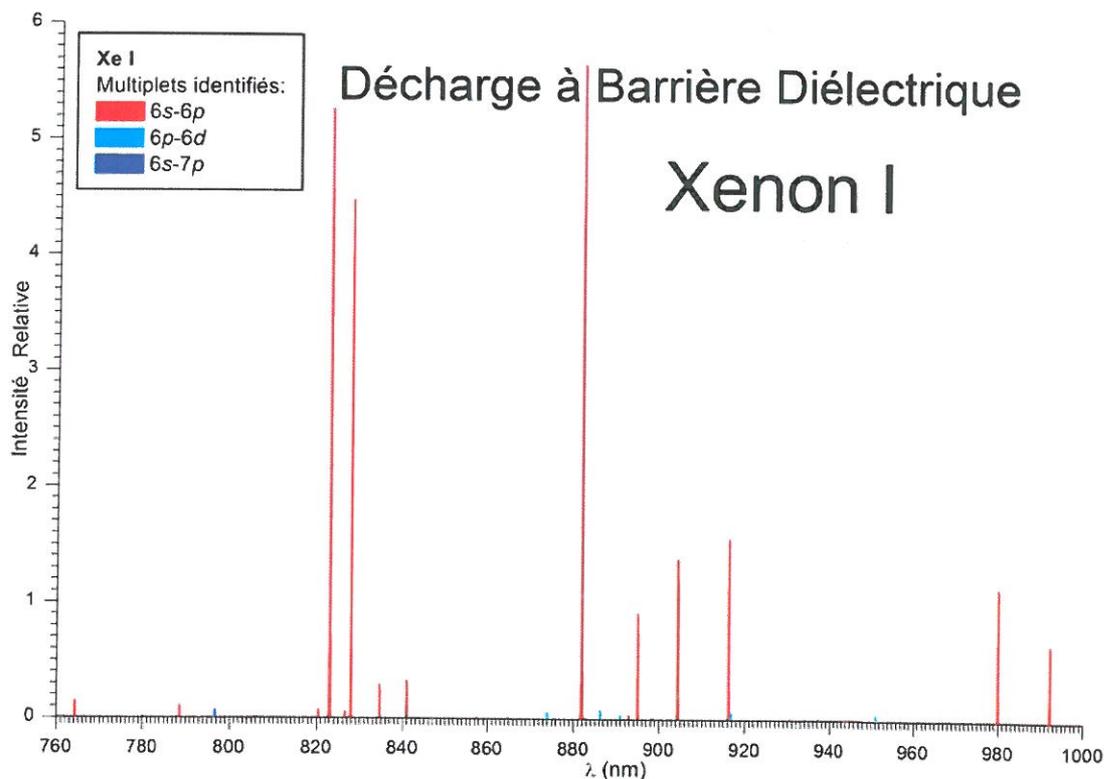


Fig. 7.7. Spectre expérimental acquis dans une DBD dans un tube contenant du Xe.

Nous avons identifié dans ce spectre (Fig. 7.7) les raies les plus intenses comme appartenant au Xe I. On observe les raies du multiplet $6s \leftarrow 6p$ qui sont les plus intenses, représentées ici en rouge, ainsi que les raies des multiplets $6p \leftarrow 6d$ (représentées en bleu clair) et des raies $6s \leftarrow 7p$ provenant de transitions inter-combinaison (en bleu foncé). Ce spectre est assez similaire à celui de la Fig. 7.4 obtenu lors de la séance ii). Les raies des multiplets $6p \leftarrow 6d$ et $6p \leftarrow 7s$ sont moins intenses dans ce spectre, ce qui suggère que la température électronique est plus faible que dans la décharge ii). Le spectre de notre modèle pour une n_e de 10^{12} cm^{-3} et une T_e de 10 kK est représenté sur la Fig. 7.8.

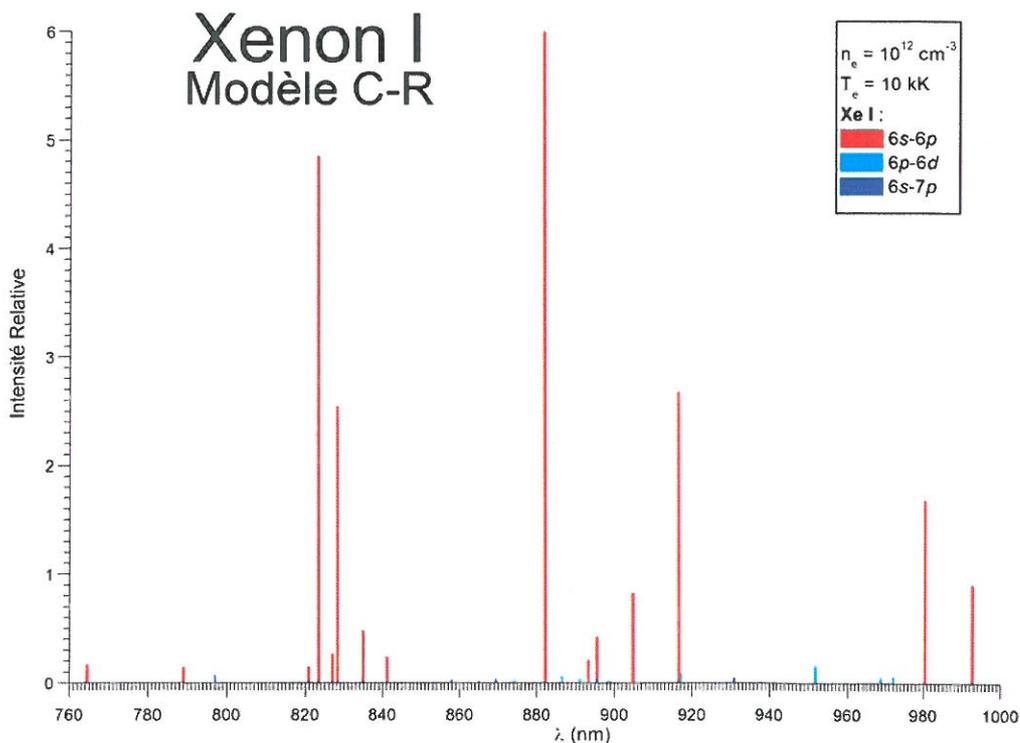


Fig. 7.8. Spectre théorique du modèle C-R du Xe I dans la région allant de 760 nm à 1000 nm, principaux multiplets sélectionnés.

La similarité entre la forme du spectre théorique (Fig. 7.8) et celle du spectre expérimental (Fig. 7.7) confirme notre diagnostic. La comparaison de nos spectres théoriques et expérimentaux dans cette région a été présentée et discutée à la conférence SSPT08 (BER08a).

Plus généralement, nous avons identifié les raies de nombreux multiplets de Xe I et II dans la région allant de 400 nm à 800 nm. Comme un exemple, nous présentons sur la Fig. 7.9 le spectre expérimental dans la région allant de 560 à 590 nm. Dans cette région, les raies impliquant des niveaux ayant des $n > 7$ ont été identifiées.

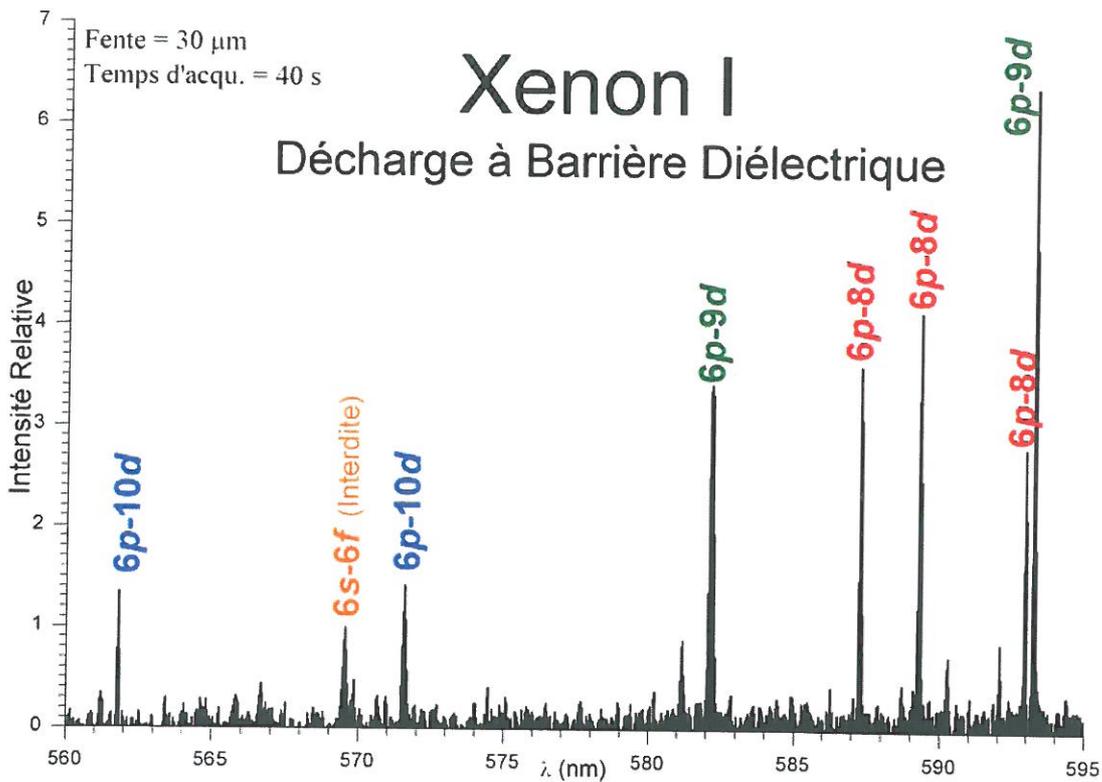


Fig. 7.9. Spectre d'une DBD, raies des multiplets $6p \leftarrow 8,9,10d$ du Xe I identifiées.

Dans la Fig. 7.9 on observe les raies des trois multiplets $6p \leftarrow 8d,9d,10d$ ainsi qu'une raie interdite du multiplet $6s \leftarrow 6f$. La présence de ces raies indique que les niveaux du Xe I ayant des $n = 8,9,10$ sont relativement peuplés. Cela montre que, bien que la température du plasma soit généralement relativement froide, il y a dans cette région du tube des électrons relativement excités qui peuplent les niveaux de grande énergie du Xe I. Le plasma que nous observons ici est composé d'un mélange de régions froides situées au bord du tube et d'une région plus chaude située au centre; la température moyenne reste très inférieure à celle de la région de la cathode.

iv) Lors de la quatrième série de mesures, deux spectres ont été enregistrés par M. Gançiu dans des régions du tube différentes. Un spectromètre Jobin Yvon miniature a été utilisé dont la résolution est de l'ordre du nanomètre. Dans le premier spectre se trouvent principalement des raies du Xe I tandis que le deuxième acquit au niveau de la cathode contient des raies de Xe I et II. Nous avons soustrait le premier spectre au deuxième de manière à obtenir un spectre contenant essentiellement des raies de Xe II. Le spectre ainsi obtenu est présenté sur la Fig. 7.10.

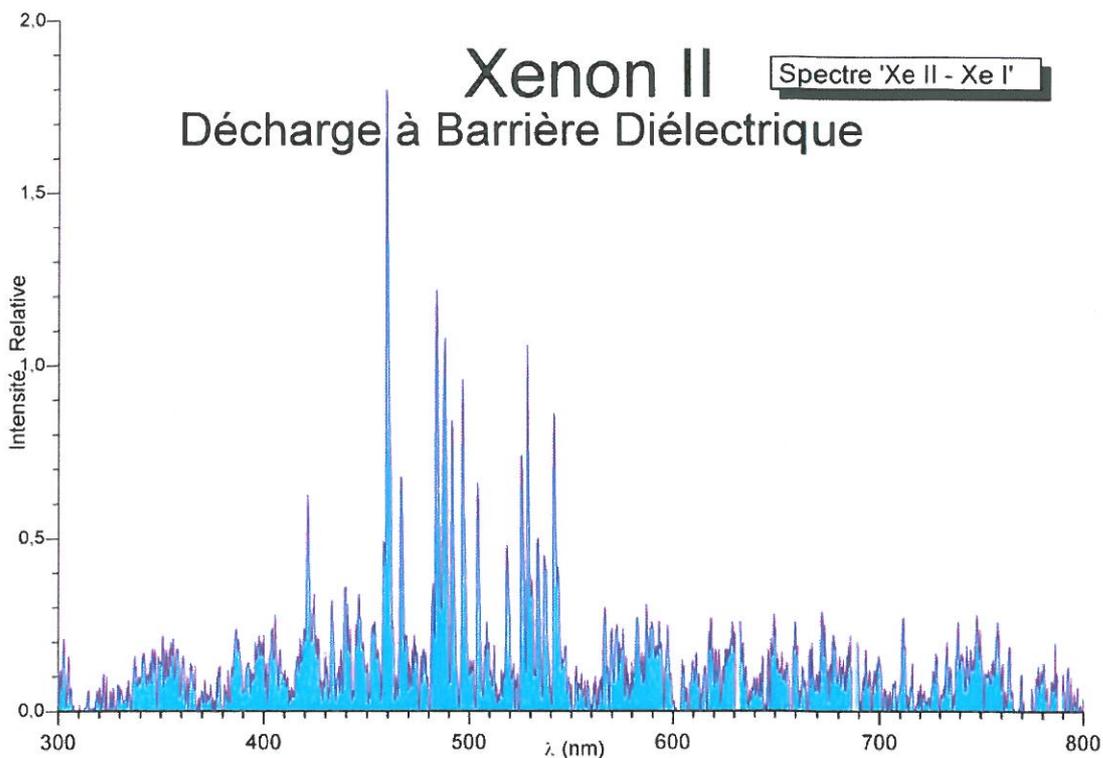


Fig. 7.10. Spectre expérimental d'une DBD dans un tube contenant du Xe.

Les raies intenses sont localisées dans la région allant de 400 nm à 600 nm. Ce spectre est assez similaire à celui présenté sur la Fig. 7.1, acquis lors de la séance i). Nous pouvons en déduire que:

- a) les raies observées ici sont des raies du Xe II et
- b) le plasma était donc relativement chaud. Une étude plus approfondie montre que ce spectre est plus froid que celui acquis lors de la séance décrite en i).

En effet, les raies les plus intenses se trouvent dans la région allant de 450 nm à 550 nm. En nous appuyant sur les données représentées sur les Figs. 6.2 et 6.4 du Chap. 6, nous pouvons en déduire qu'il s'agit des raies du multiplet $6s \leftarrow 6p$. Les raies qui se situent entre 400 et 450 nm appartiennent au multiplet $6p \leftarrow 6d$. Le rapport des intensités des raies de ces deux multiplets montre que la température du plasma n'excède pas ici les 15 kK.

Une partie des résultats provenant des expériences décrites en iii) et iv) a été présentée et discutée à la conférence SPPT23 (BER08a).

Nous pouvons déduire de la série d'expériences i) à iv) que les conditions du plasma varient beaucoup à l'intérieur des tubes étudiés. En effet, la température moyenne varie de 10 à 20 kK selon la position et l'axe de visée de la fibre optique. De plus, nous pouvons dire qu'au niveau de la cathode la température atteint 15 à 20 kK. Entre les deux électrodes, la T_e varie de 10 à 15 kK et dans le reste du tube la température du plasma est inférieure à 10 kK. Nous pensons continuer l'étude de ce type de plasmas en collaboration avec l'Université de Ioannina en Grèce.

8. EXPERIENCE DE TYPE 'BEAM-FOIL': SPECTRES DE XENON DANS L'ULTRAVIOLET

Plusieurs spectres des ions du Xe ont été enregistrés récemment par notre collaborateur H.-P. Garnir de l'Institut de Physique Nucléaire, Atomique et de Spectroscopie (IPNAS) de l'Université de Liège en Belgique. Parmi ces spectres, nous nous sommes intéressés à ceux des espèces une à quatre fois ionisées du Xe, dans la région de l'ultraviolet proche et lointain (UV/VUV). Nous commentons dans ce chapitre une partie des spectres expérimentaux que nous avons pu étudier sur la base de notre travail théorique.

8.1. Dispositif expérimental

Le dispositif expérimental qui nous intéresse ici met en oeuvre des techniques de pointe pour obtenir le confinement des ions dans des conditions minimisant les effets des collisions, ainsi qu'une analyse sophistiquée des spectres obtenus. Un faisceau d'ions Xe^+ de 1 μA , produit par l'accélérateur Van de Graaff de l'IPNAS a été envoyé à travers une fine feuille de carbone. Après avoir traversé la feuille, la lumière émise dans l'UV et le VUV par les ions excités et ionisés a été analysée avec un spectromètre de type Seya-Namioka qui contient un fin détecteur refroidi dans l'azote liquide, spécialement développé pour les mesures UV/VUV. Les spectres du Xe dans la région allant de 30 nm à 110 nm ont été enregistrés pour différentes énergies du faisceau, correspondant à différentes énergies d'excitation. Cinq spectres nous ont été fournis pour des énergies du faisceau de 300, 700, 1000, 1400 et 1700 MeV. On s'attend généralement à ce que la réabsorption des raies résonnantes soit importante, mais l'effet est ici minimisé grâce aux précautions prises dans l'installation expérimentale.

Le dispositif expérimental utilisé ne constitue pas une source de plasma typique, mais la présence d'électrons dans l'espace où les ions sont générés permet de parler de densité électronique et de température électronique. La fonction de distribution électronique n'est pas obligatoirement thermalisée dans ce dispositif.

8.2. Analyse des spectres expérimentaux

Pour le Xe II à V, les transitions résonnantes qui ont été enregistrées dans les régions UV/VUV ont été étudiées. Les spectres théoriques incluant les multiplets ($5p \leftarrow 6s, 7s, 5d, 6d$) ont été comparés aux spectres expérimentaux. Les raies provenant de transitions entre niveaux excités sont beaucoup moins énergétiques que celles engendrées par les transitions résonnantes.

Les raies résonnantes les plus intenses sont celles des multiplets $5p \leftarrow 6s$ et $5p \leftarrow 5d$; elles ont été clairement identifiées pour les espèces Xe II à V. Les multiplets $5p \leftarrow 7s$ et $5p \leftarrow 6d$, donnent des raies ioniques moins intenses. Ces raies sont décalées vers de plus petites longueurs d'onde par rapport

aux précédentes. Elles ont été identifiées pour le Xe II, et en partie seulement pour les Xe III et IV. La définition de la majorité des niveaux $7s$ et $6d$ attribués a été obtenue à l'aide de calculs théoriques; une incertitude subsiste encore pour certaines transitions. Les raies des multiplets $5p \leftarrow 6d,7s$ situées autour de 35 nm pour le Xe V sont très peu visibles dans le spectre expérimental de 1000 keV et ne sont quasiment pas visibles dans les autres spectres obtenus par des faisceaux moins énergétiques. Des mesures avec des faisceaux plus énergétiques et plus précises entre 30 nm et 40 nm permettraient d'identifier la partie des raies de ces deux multiplets que nous n'avons pas pu identifier jusqu'à présent, et dont on ne parle pas dans la littérature. Nous avons cherché pour le Xe II les raies des multiplets $5p \leftarrow 8s,7d$ données comme encore moins intenses par nos modèles; elles n'apparaissent pas clairement dans les spectres fournis, ou bien étaient 'blended' avec les raies $5p \leftarrow 6s,5d$ du Xe III et n'ont donc pas été résolues.

Sur les Figs. 8.1 (a) à (c) nous présentons trois spectres expérimentaux dans lesquels nous avons identifié les raies des principaux multiplets de chaque espèce.

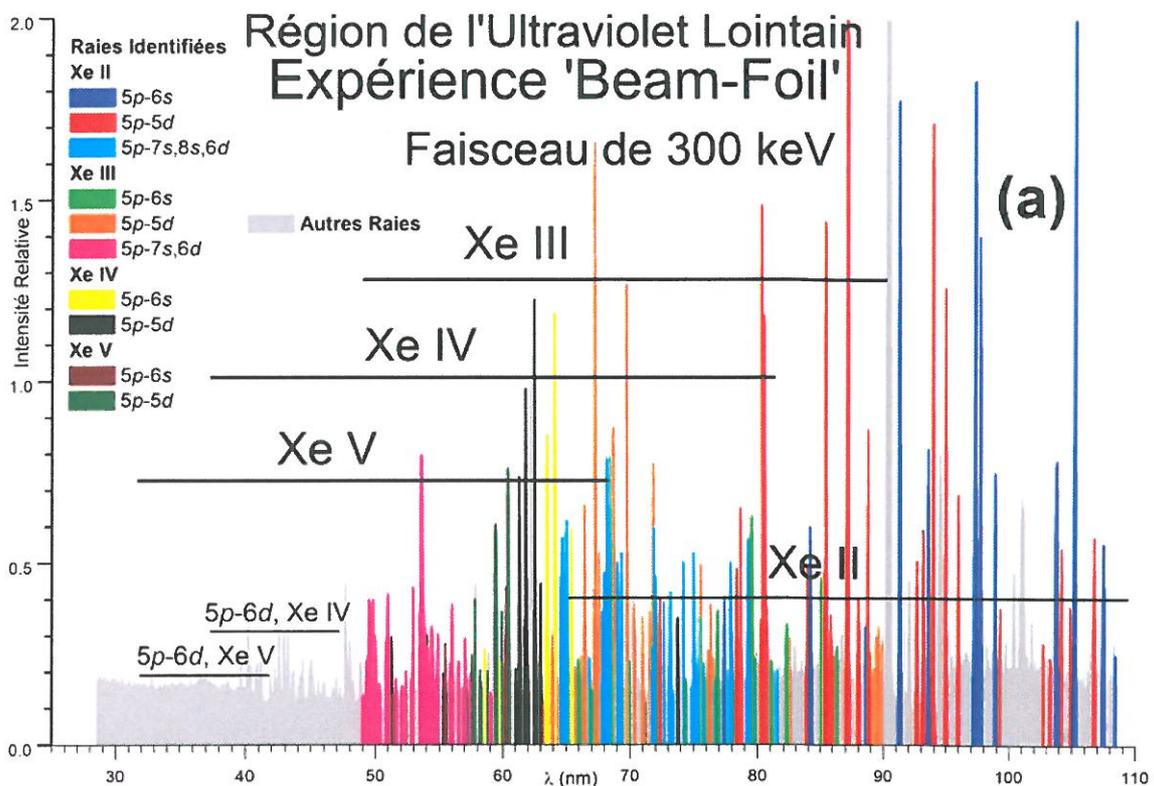


Fig. 8.1 (a) Spectres expérimentaux de type 'Beam-Foil' du Xe dans la région UV/VUV, faisceau de 300 keV.

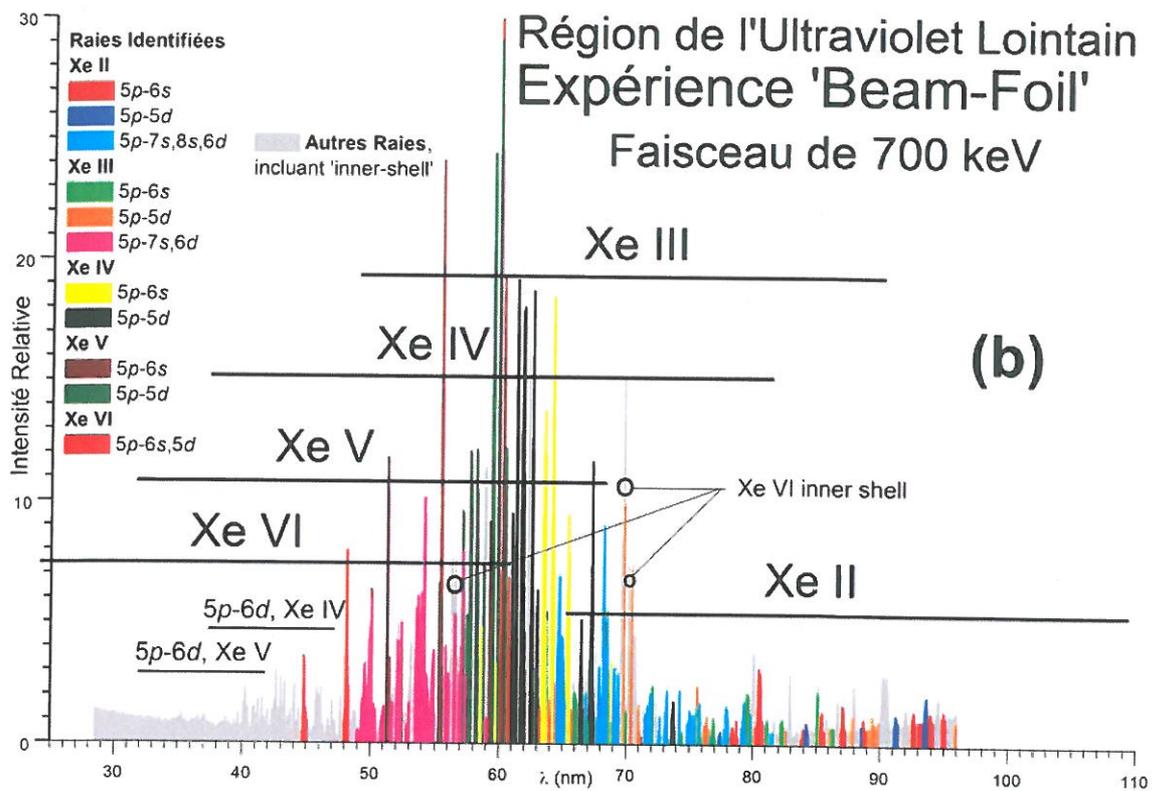


Fig. 8.1 (b) Spectres expérimentaux de type 'Beam-Foil' du Xe dans la région UV/VUV, faisceau de 700 keV.

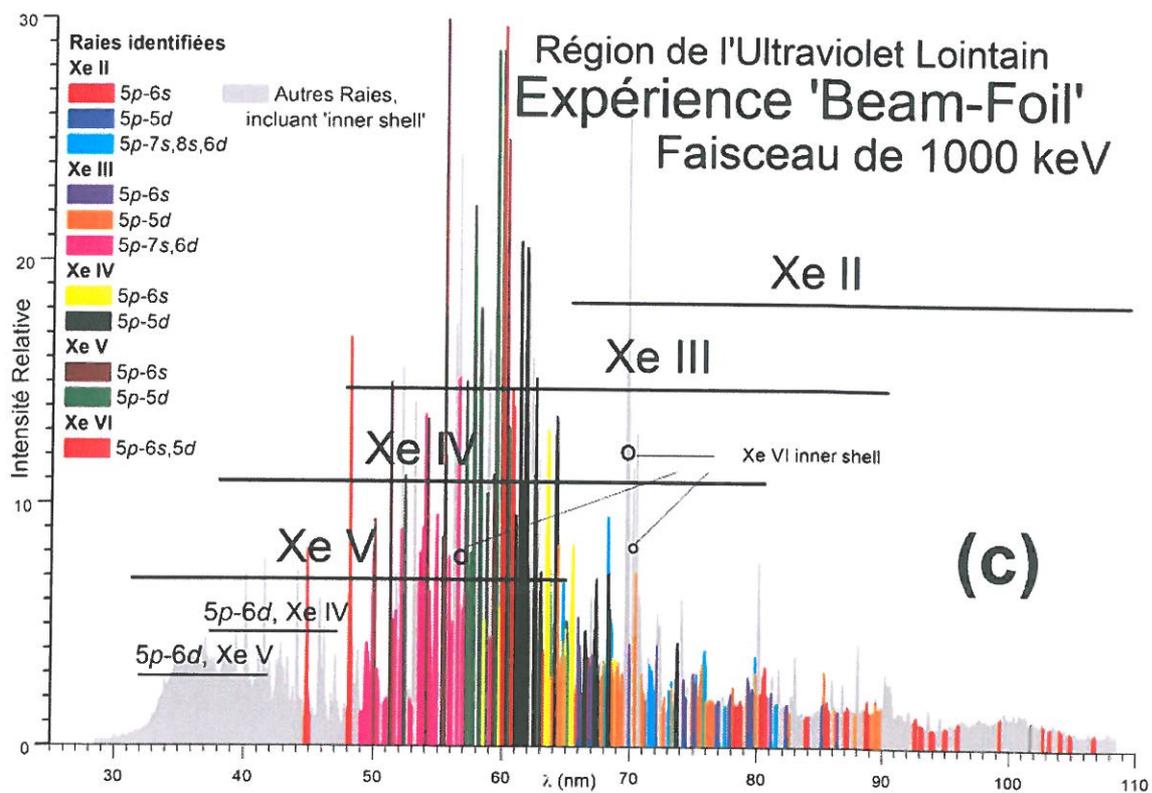


Fig. 8.1 (c) Spectres expérimentaux de type 'Beam-Foil' du Xe dans la région UV/VUV, faisceau de 1000 keV.

Le Xe II est dominant sur le spectre enregistré à 300 keV représenté sur la Fig. 8.1 (a). On distingue également des raies du Xe III, un peu de raies du Xe IV et très peu de raies du Xe V. A 700 keV (Fig. 8.1 (b)), la présence de Xe V prédomine; à 1000 keV (Fig. 8.1 (c)) les espèces Xe V et VI sont présentes en grande quantité, bien que l'on distingue encore des raies du Xe III.

En comparaison avec les faisceaux moins énergétiques, nous observons sur le spectre obtenu par le faisceau de 1000 keV que toutes les raies identifiées du Xe II et une partie des raies du Xe III ayant des intensités moindres disparaissent, et laissent place aux raies des espèces Xe IV, V et VI, ce qui confirme notre identification de raies. Ces spectres ont été présentés et commentés à la conférence SPPT23 (KAT08a). Ils sont aussi disponibles dans le serveur de l'IPNAS:

http://www.ipnas.org/garnir/posters/2008Xe_spectra.pdf

8.3. Comparaison avec les spectres théoriques

Nous présentons dans la suite une comparaison des spectres expérimentaux avec nos spectres théoriques pour le cas du plasma généré par le faisceau de 300 keV:

- Sur la Fig. 8.2 est donné le spectre expérimental obtenu avec le faisceau de 300 keV, dans lequel nous avons identifié les raies de quatre multiplets du Xe II. Ce sont les $5p \leftarrow 6s, 7s$ et $5p \leftarrow 5d, 6d$. Quatre raies des multiplets $5p \leftarrow 6d$ et $5p \leftarrow 7s$ sont mélangées avec des raies plus intenses du multiplet $5p \leftarrow 5d$ du Xe III et sont notées 'bl' sur la figure 8.2.

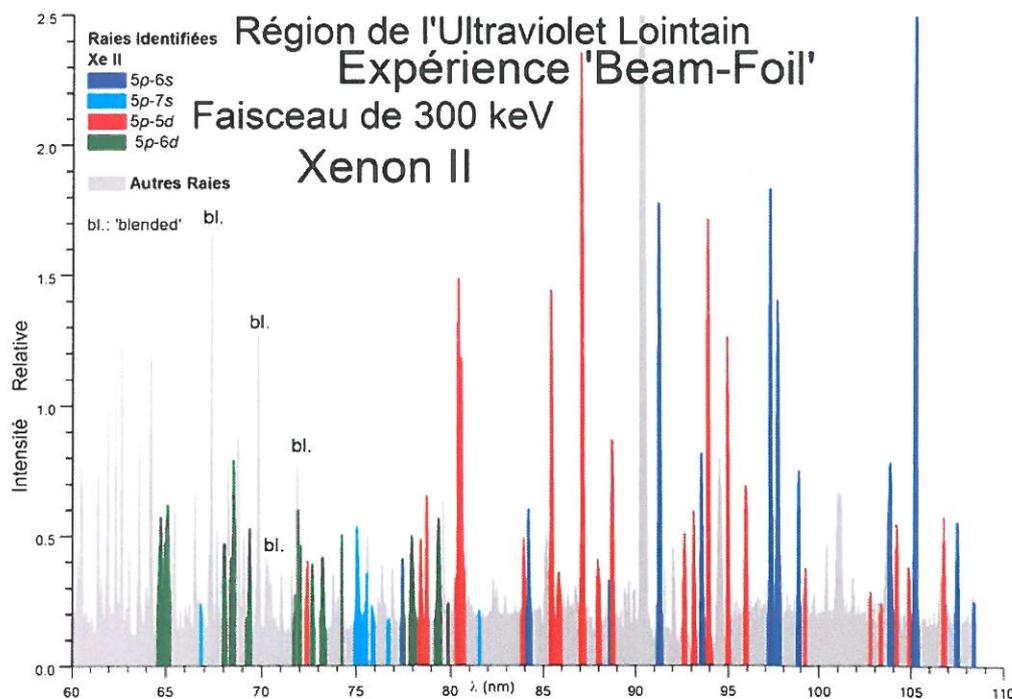


Fig. 8.2. Spectre expérimental du Xe II dans la région UV/VUV obtenu avec un faisceau incident de 300 keV, multiplets $5p \leftarrow 6s, 7s, 5d, 6d$.

Le spectre expérimental présenté sur la Fig. 8.2 est à comparer avec celui qui provient de notre modèle (Fig. 8.3) pour ces quatre mêmes multiplets; ce spectre a été obtenu pour une densité électronique de 10^{12} cm^{-3} et une température de 25 kK.

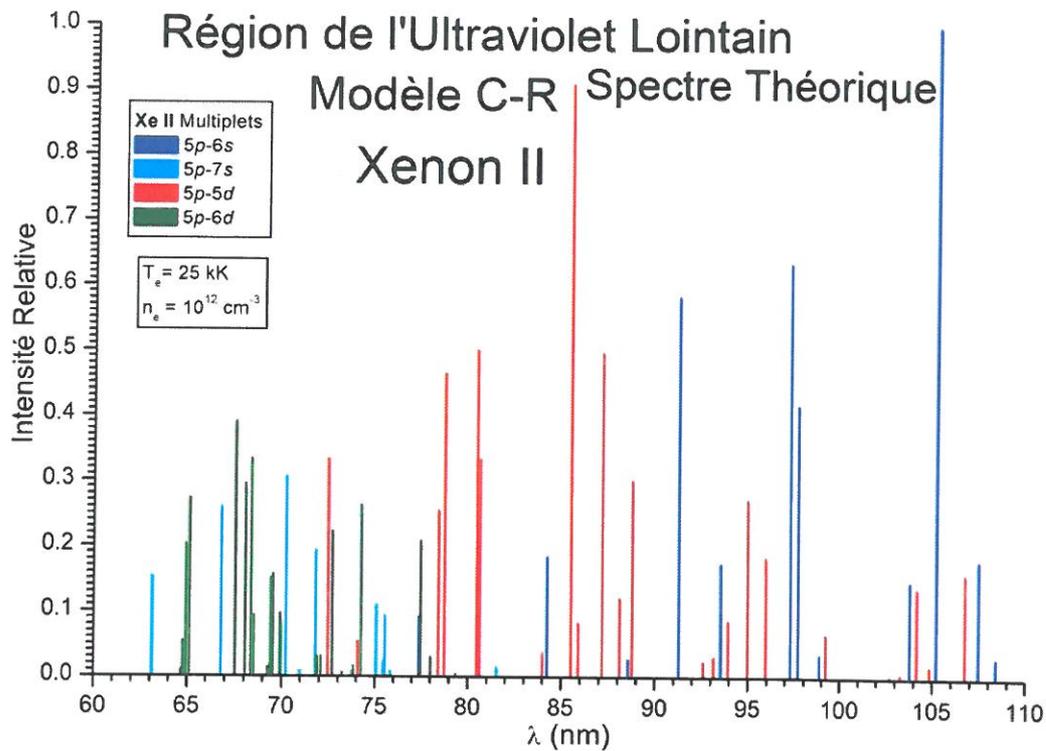


Fig. 8.3. Spectre théorique du Xe II dans la région UV/VUV, multiplets $5p \leftarrow 6s, 7s, 5d, 6d$.

- La Fig. 8.4 montre le spectre expérimental obtenu aussi avec le faisceau de 300 keV mais il est ici restreint aux raies de quatre multiplets du Xe III que nous avons identifiées. Il s'agit des raies des multiplets $5p \leftarrow 6s, 7s$ et $5p \leftarrow 5d, 6d$.

Ce spectre expérimental est à comparer avec celui obtenu par notre modèle (représenté sur la Fig. 8.5) pour une densité électronique de 10^{12} cm^{-3} et une température de 25 kK pour ces quatre mêmes multiplets.

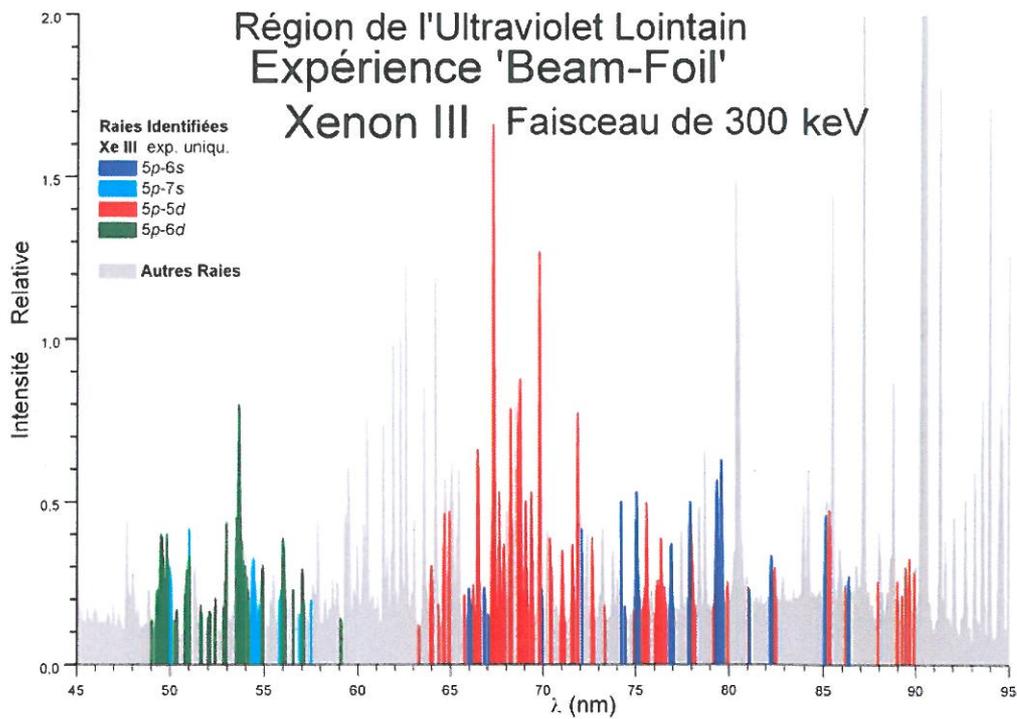


Fig. 8.4. Spectre expérimental du Xe III dans la région UV/VUV obtenu avec un faisceau incident de 300 keV, multiplets $5p \leftarrow 6s, 7s, 5d, 6d$.

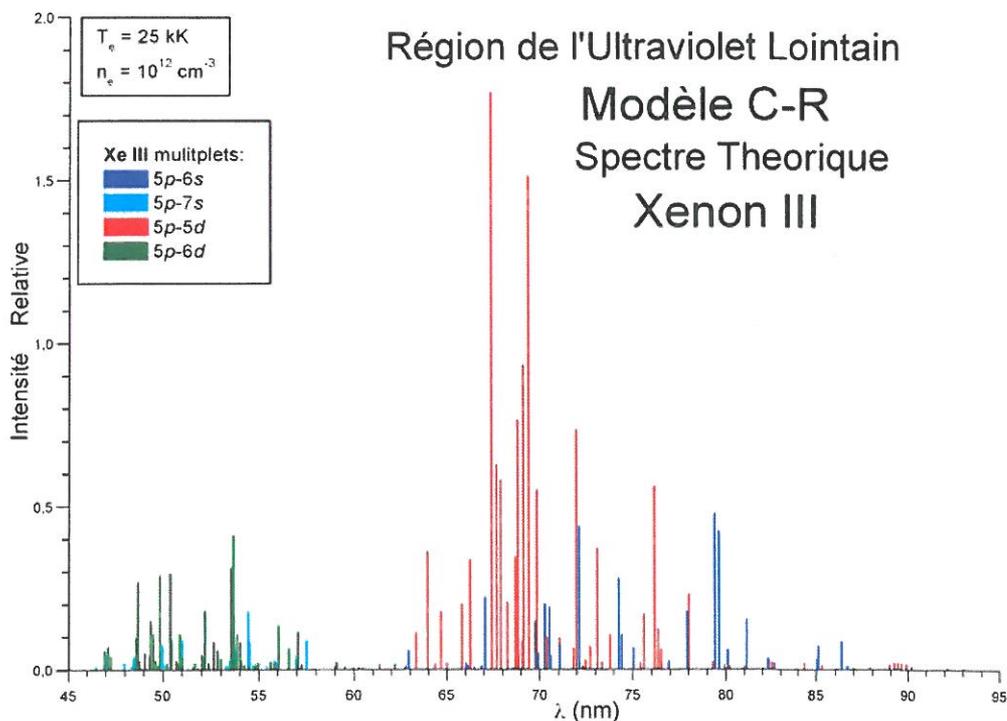


Fig. 8.5. Spectre théorique du Xe III dans la région UV/VUV, multiplets $5p \leftarrow 6s, 7s, 5d, 6d$.

L'étude théorique n'est pas toujours aussi satisfaisante que celle valable pour les cas du Xe II et III présentés pour le cas du faisceau de 300 keV. Examinons par exemple les spectres expérimentaux en comparaison aux spectres théoriques du Xe IV. La Fig. 8.6 présente le spectre expérimental obtenu par le faisceau de 700 keV dans la région de 55 nm à 80 nm. Parmi les raies du Xe IV, seules les raies des deux multiplets $5p \leftarrow 6s, 5d$ ont été clairement identifiées et sont montrées sur cette figure. Le spectre théorique du Xe IV pour ces deux mêmes multiplets est aussi donné sur la Fig. 8.7. Suivant la structure des ions du Xe examinée précédemment (Fig. 4.1), les multiplets du Xe IV sont ici moins riches, et donnent lieu à moins de raies que ceux du Xe III dans la Fig. 8.4. Rappelons que le Xe III, dont le fondamental a cinq niveaux, s'ionise vers les cinq niveaux du fondamental du Xe IV, lesquels s'ionisent également vers un fondamental à cinq niveaux (Xe V) dont les niveaux excités correspondants appartiennent à deux seuls noyaux. Dans le spectre théorique présenté sur la Fig. 8.7, la n_e est de 10^{12} cm^{-3} et la T_e est de 30 kK. Pour le Xe IV, plusieurs niveaux $6s$ ont des énergies plus grandes que les $5d$; il faut alors plus d'énergie pour exciter ces niveaux $6s$ que certains niveaux $5d$. Cette situation est clairement mise en évidence sur la Fig. 8.7. Nous n'avons pas pu identifier plus de raies, car dans notre modèle, les énergies sont ici souvent théoriques et par conséquent ne sont pas assez fiables.

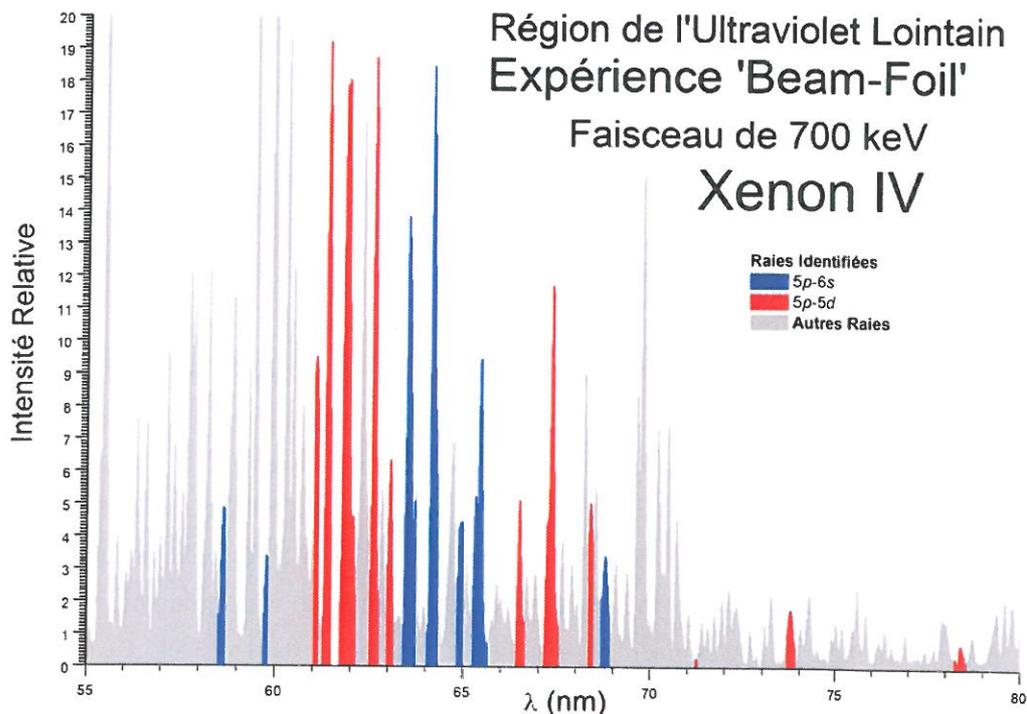


Fig. 8.6. Spectre expérimental du Xe IV dans la région UV/VUV obtenu avec un faisceau de 300 keV, multiplets $5p \leftarrow 6s, 5d$.

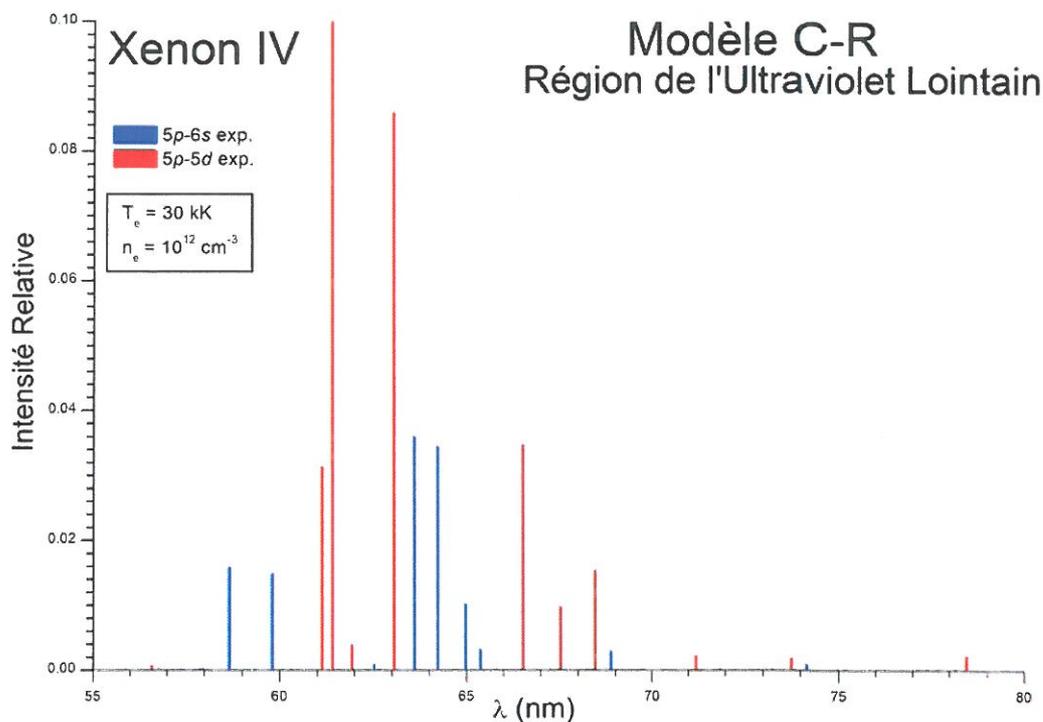


Fig. 8.7. Spectre théorique du Xe IV dans la région UV/VUV, multiplets $5p \leftarrow 6s, 5d$.

Nous résumons ici les observations sur les spectres correspondant aux deux faisceaux:

Spectre généré par le faisceaux de 300 keV; nous avons observé que:

- i) Les raies les plus intenses sont celles du Xe II. Les raies du Xe III sont relativement intenses. Cela montre que la T_e doit être d'environ 25 kK.
- ii) La comparaison des spectres théoriques et expérimentaux du Xe II a montré que la n_e devrait être de l'ordre de 10^{12} cm^{-3} et la T_e de 25 kK.
- iii) La comparaison des spectres théoriques et expérimentaux du Xe III a montré que la n_e devrait être de l'ordre de 10^{12} cm^{-3} et la T_e de 25 kK environ.

Spectre généré par le faisceaux de 700 keV; nous avons observé que:

- i) Les raies les plus intenses sont celles du Xe IV et V. Cela indique que la température électronique doit être plus élevée que celle du plasma créé par le faisceau de 300 keV.
- ii) La comparaison des spectres théoriques et expérimentaux du Xe IV ne nous permet pas pour le moment de déterminer les conditions du plasma dans ce cas. Cette absence provisoire de conclusion provient de la connaissance insuffisante des données de structure et de probabilités du Xe IV et V, notamment en ce qui concerne les niveaux des configurations $7s$ et $6d$ impliqués dans les multiplets $5p \leftarrow 7s$ et $5p \leftarrow 6d$ qui sont importants pour le diagnostic optique dans la région VUV. Nous travaillons actuellement sur l'évaluation des données concernant ces multiplets.

9. SPECTRES DU REACTEUR A PLASMA DIVA

Pour appliquer notre étude à des plasmas présents dans les réacteurs à plasma, nous nous sommes intéressés au diagnostic du réacteur à plasma DIVA. Nous avons ainsi effectué une étude théorique du spectre de ce dispositif. L'acquisition de ce spectre a été faite en vue d'illustrer les possibilités d'application de notre modèle pour le diagnostic optique.

9.1. Dispositif expérimental

Le dispositif DIVA (Dispositif d'Ionisation de la VApeur) est un réacteur à plasma disponible au LPGP. Ce réacteur consiste en un cylindre en acier inoxydable de 50 cm de diamètre et de 45 cm de hauteur. Lors des mesures que nous avons effectuées, il contenait une cible magnétron de 10 cm de diamètre en titane et une boucle à une seule spire en acier inoxydable de 15 cm de diamètre alimentée en radiofréquence de 13.56 MHz. Le chauffage du plasma était fourni par le biais de cette spire dont la puissance maximale peut atteindre 1600 W. Nous avons utilisé ici l'argon comme gaz de support. L'utilisation d'un mélange d'argon et de xénon est aussi possible. La pression d'argon est réglée à l'aide de deux vannes. Nous avons observé le plasma ainsi créé à travers un hublot de quartz de 8 cm

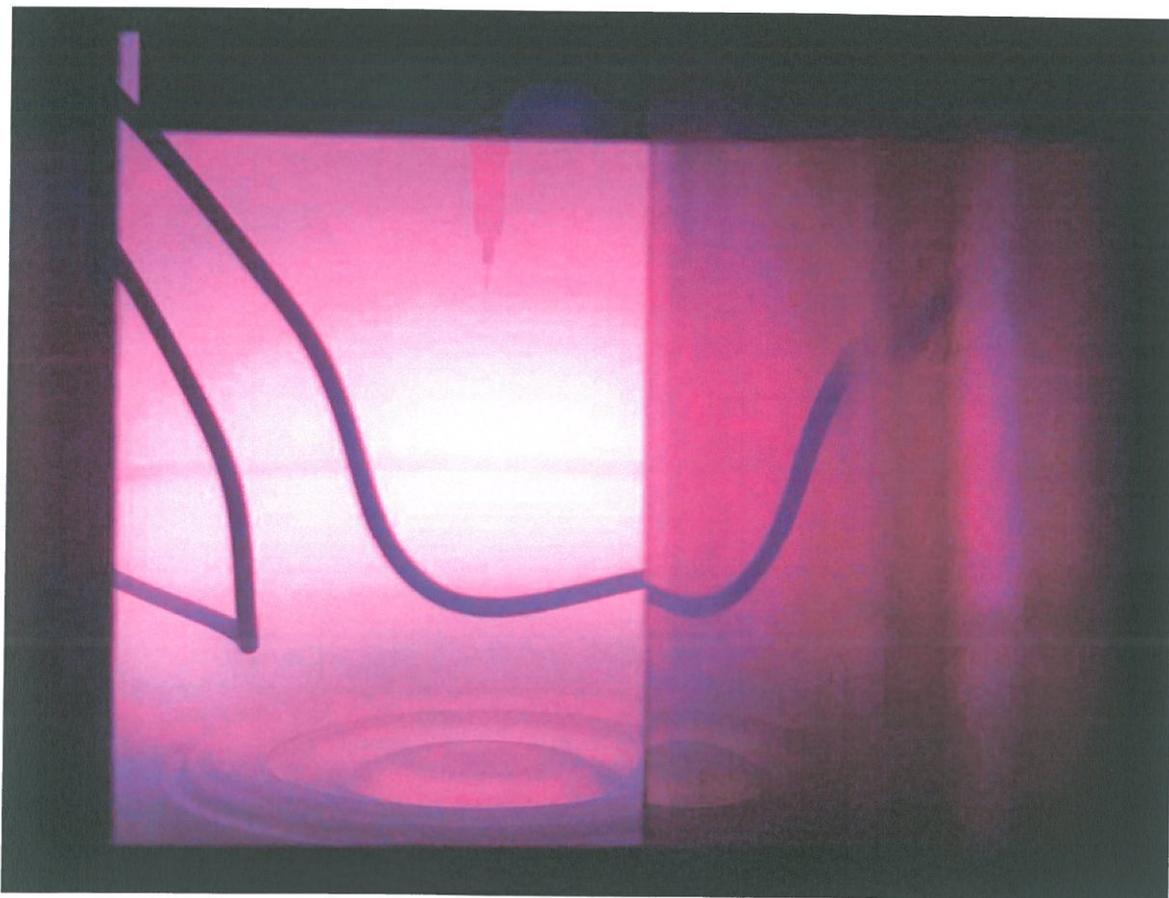


Fig. 9.1. Vue du plasma d'Ar contenu dans le réacteur DIVA à travers un hublot en quartz.

de largeur, situé au dessus du réacteur (voir Fig. 9.1). On distingue sur la Fig. 9.1 de haut en bas une sonde de Langmuir, la boucle radiofréquence et la cible de titane mentionnées ci-dessus. C'est devant ce hublot que nous avons placé la fibre optique du spectromètre. Dans une première approximation, on considère que le plasma contenu dans ce réacteur est homogène. Par conséquent, la densité et la température varient alors peu en fonction de la direction de la fibre. La situation est totalement différente quand on observe le voisinage de la boucle, qui, étant alimentée en RF, est parcourue par un champ électromagnétique qui fournit de l'énergie aux électrons se trouvant à sa proximité. D'après la modélisation de DIVA déjà disponible (IMB06) le courant électrique a une épaisseur de pénétration du plasma de 0.7 cm (pour $n_e = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$). Ainsi, dans une section d'environ 1.5 cm^2 le long de la spire on peut considérer que la T_e est plus élevée que dans le reste du réacteur. Nous avons donc, pour nos mesures, orienté la fibre optique vers le voisinage de la boucle. Nous avons utilisé le même spectromètre Jobin Yvon HR460 que celui utilisé pour obtenir le spectre décrit dans le Chap. 7.1 iii).

9.2. Analyse des spectres

Nous avons enregistré des spectres dans une gamme de longueurs d'onde allant de 330 nm à 1300 nm. Sur la Fig. 9.2 nous présentons un spectre acquis dans une région allant de 330 à 405 nm.

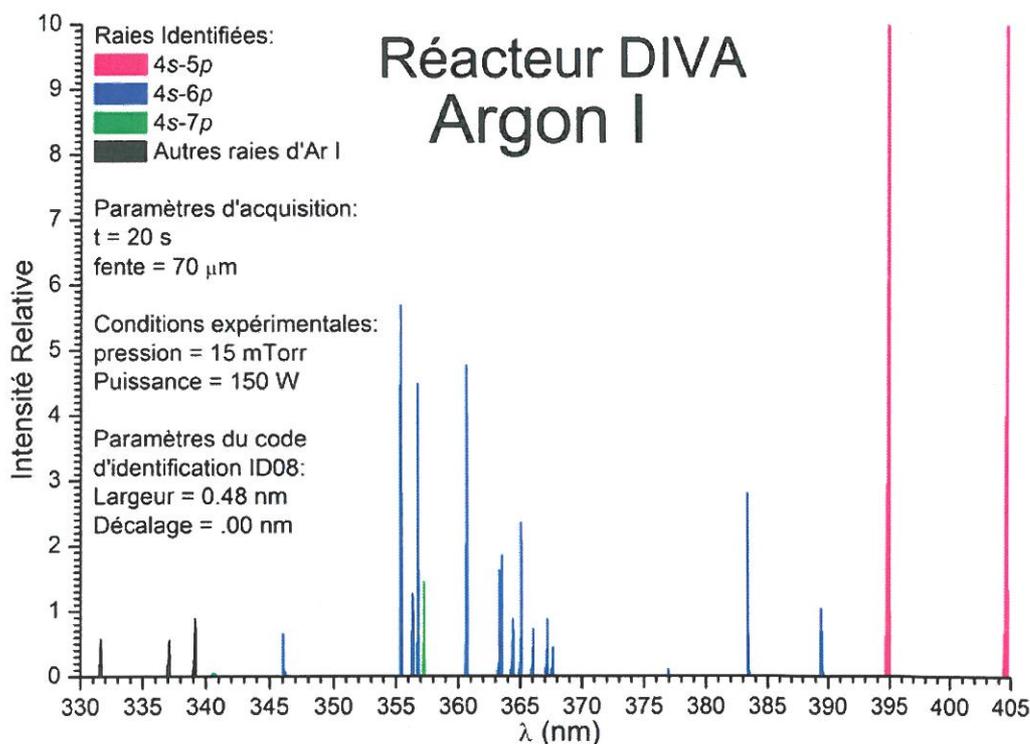


Fig. 9.2. Spectre d'argon enregistré dans le réacteur DIVA, raies identifiées de trois multiplets d'Ar I.

Nous avons utilisé le code ID08 mentionné précédemment (Chap. 2.2.) pour identifier les raies montrées sur la Fig. 9.2, mesurées dans l'expérience. Les raies identifiées dans la région allant de 330 à 405 nm sont celles des multiplets $4s \leftarrow 5,6,7p$ d'Ar I. Dans cette région on peut observer des raies d'Ar II, notamment celles du multiplet $4p \leftarrow 4d$ mais nous n'en n'avons pas vu. Cela montre que la température du plasma est assez faible, n'excédant pas 10 kK pour une n_e de 10^{12} cm^{-3} .

Sur la Fig. 9.3 nous présentons le spectre expérimental dans la région allant de 415 à 435 nm, dans lequel nous avons identifié les raies les plus intenses.

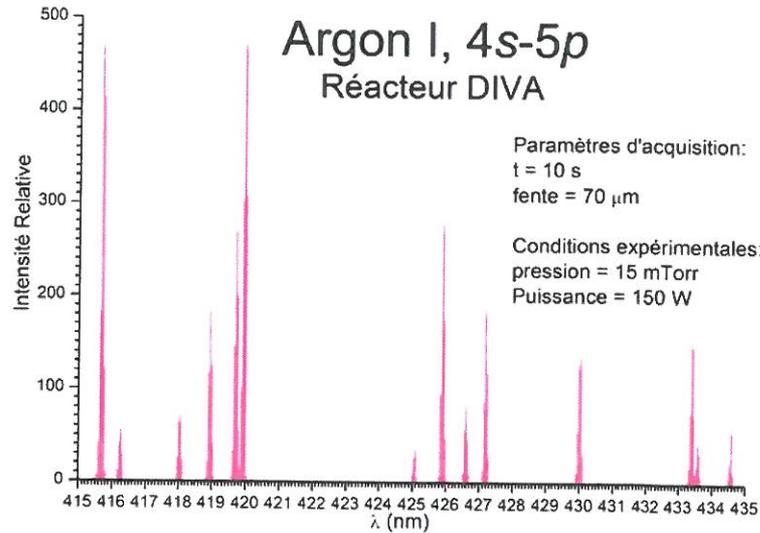


Fig. 9.3. Spectre du réacteur DIVA, raies du multiplet $4s \leftarrow 5p$ d'Ar I identifiées.

Les raies identifiées sur la Fig. 9.3 appartiennent au multiplet $4s \leftarrow 5p$ de l'Ar I. Dans la région étudiée se situe aussi une partie des raies $4s \leftarrow 4p$ de l'Ar II. Nous n'y avons pas observé des raies autres que celles d'Ar I, ce qui montre aussi que le plasma est relativement froid.

Des mesures antérieures (IMB06) ont donné une n_e d'environ 10^{11} cm^{-3} et une densité totale d'Ar n_{Ar} de 10^{14} cm^{-3} . Si on suppose que la densité totale d'Ar est égale à la densité du niveau fondamental de l'Ar I (car ici la température basse conduit à un très faible peuplement des niveaux excités), on obtient (c.f. le diagramme standard de la page 22, Fig.1.1.) une T_e de 10 kK. En effet, pour ces conditions de n_e et T_e le modèle C-R donne une densité totale d'argon pratiquement égale à la densité du niveau fondamental de l'Ar I (à un millième près). Notons que dans le cas général pour des températures plus élevées, les niveaux excités et surtout les niveaux métastables peuvent être beaucoup plus peuplés.

En comparant le spectre expérimental enregistré avec plusieurs spectres théoriques d'Ar I provenant de notre modèle, nous avons sélectionné les spectres montrés sur les Figs. 9.4 (a) et (b), valables respectivement pour les couples $n_e = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$, $T_e = 9 \text{ kK}$ et $n_e = 10^{11} \text{ cm}^{-3}$, $T_e = 10 \text{ kK}$ qui lui sont assez proches. Pour les conditions $n_e = 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ et $T_e = 10 \text{ kK}$ choisies en examinant le diagramme standard, on constate que la similitude entre spectres expérimental et théorique, est ici plus satisfaisante pour $T_e = 10 \text{ kK}$.

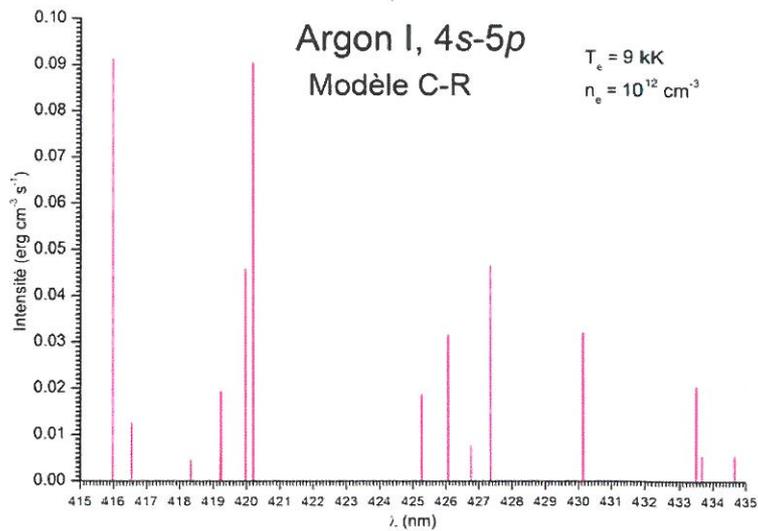


Fig. 9.4 (a) Spectre théorique de l'Ar I, montrant les raies sélectionnées du multiplet 4s←5p, pour $n_e = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ et $T_e = 9 \text{ kK}$.

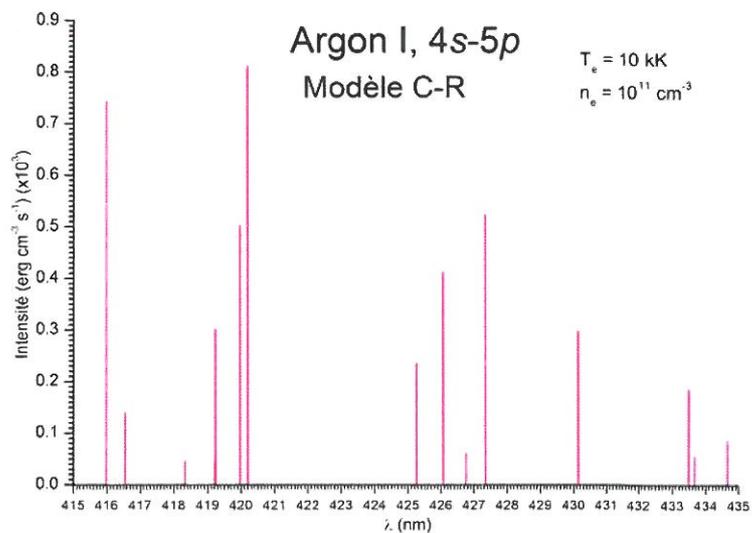


Fig. 9.4 (b) Comme Fig. 9.4 (a) mais pour $n_e = 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ et $T_e = 10 \text{ kK}$.

On peut envisager d'effectuer une cartographie du plasma, qui indiquera la variation de la température au voisinage de la boucle en déplaçant la fibre optique de quelques centimètres et en variant son orientation. On peut aussi vérifier le degré d'ionisation au voisinage de la cathode avec le dispositif magnétron en fonctionnement. Dans ce cas, la fibre optique doit être orientée vers la région de la cathode; une présence de raies du titane en plus de celles d'argon est alors à attendre. Nous pouvons identifier dans ce spectre les raies du titane à l'aide de notre code ID08. Le diagnostic de l'état du plasma dans ces conditions sera alors possible.

10. SPECTRES DU STELLARATOR WEGA

Nous faisons ici le point sur le travail effectué pour le diagnostic par spectroscopie d'émission du plasma du stellarator WEGA alimenté avec de l'argon ou bien avec du xénon. Cette machine, disponible à l'Institut für Plasma Physik de Greifswald (IPP) est principalement utilisée pour la recherche de base en physique des plasmas, incluant la formation pédagogique et le test de nouveaux équipements de diagnostic (OTT03). Ces équipements pourraient être utilisés pour diagnostiquer le plasma du stellarator WEDELSTEIN qui est en construction sur le site. Le diagnostic optique que nous mettons au point pourrait aussi servir à diagnostiquer et à modéliser le plasma du stellarator WEDELSTEIN.

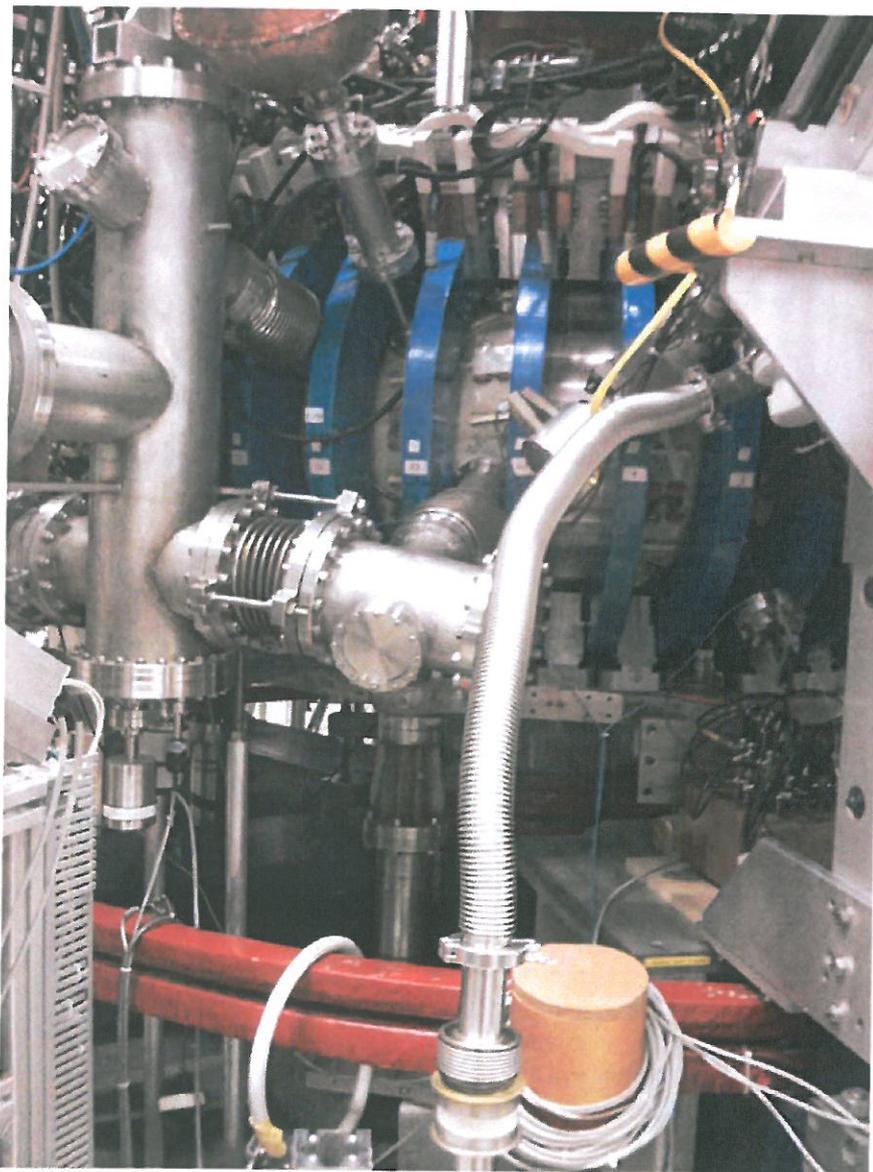


Fig. 10.1. Vue du stellarator WEGA

L'étude spectrale que nous présentons ici a une forme assez générale et peut être utilisée pour d'autres cas expérimentaux. Dans le cas présent, elle vise la caractérisation et l'optimisation des plasmas de WEGA (HOR05) ainsi que l'amélioration de sa modélisation. Dans le passé, plusieurs spectres d'argon nous ont été fournis par D. Zhang qui a aussi effectué des mesures bolométriques (ZHA06). Très récemment, nous avons été invités à Greifswald pour faire des mesures complémentaires des spectres du plasma dans le cas du fonctionnement du stellarator avec de l'argon et du xénon. Le diagnostic par spectroscopie d'émission a été étendu aux décharges de xénon, comme planifié dans KAT07b, et sera prochainement étendu aux décharges de mélanges d'Ar et de Xe.

WEGA est un stellarator de taille moyenne; sa partie essentielle consiste en un tore dont le grand rayon mesure 72 cm et de petit rayon 19 cm. Les plasmas y sont générés par un système de chauffage par micro-ondes fonctionnant à la fréquence de 2.45 GHz qui peut atteindre la puissance maximale de 26 kW. La Fig. 10.1 montre la partie du dispositif WEGA où nous avons introduit la fibre optique.

10.1. Fonctionnement à l'argon

10.1.1. Prévisions suivant le modèle coronal

Quand WEGA fonctionne en argon, d'après les mesures faites à l'IPPG, la température électronique près du centre est d'environ 10 eV et la densité électronique est d'environ 10^{12} cm^{-3} . Une première évaluation basée sur des résultats de calculs antérieurs obtenus par un simple modèle coronal montre que dans les conditions citées nous devons nous attendre à voir des spectres d'Ar I à V, ainsi que quelques raies provenant du spectre d'Ar VI (KAT06a, KAT07b). En général, il n'est pas attendu que tous ces spectres soient simultanément présents dans toutes les régions d'un plasma hors ETL inhomogène et dont la T_e n'est pas la même partout. Dans le cas du diagnostic de la région près de la séparatrice et/ou des plasmas du limiteur de WEGA, un 'mélange de températures' pourrait expliquer la détection des signatures de toutes les espèces d'argon, aussi bien du neutre qu'éventuellement ionisé jusqu'à l'Ar VI. Une variation de la température conduit à une altération de l'énergie totale radiée. Pour obtenir une modélisation détaillée, on ne peut donc pas se baser sur une seule distribution maxwellienne, pour quelques ou pour toutes les espèces présentes.

10.1.2. Analyse des spectres

I. Un certain nombre de spectres nous a été fournis par D. Zhang en 2006. Plusieurs spectres ont été mesurés, correspondant à des régions et à des décharges différentes. Pour trouver la présence et le pourcentage de chaque espèce ionisée et pour juger de la température électronique en supposant une seule distribution maxwellienne, nous avons fait une comparaison détaillée

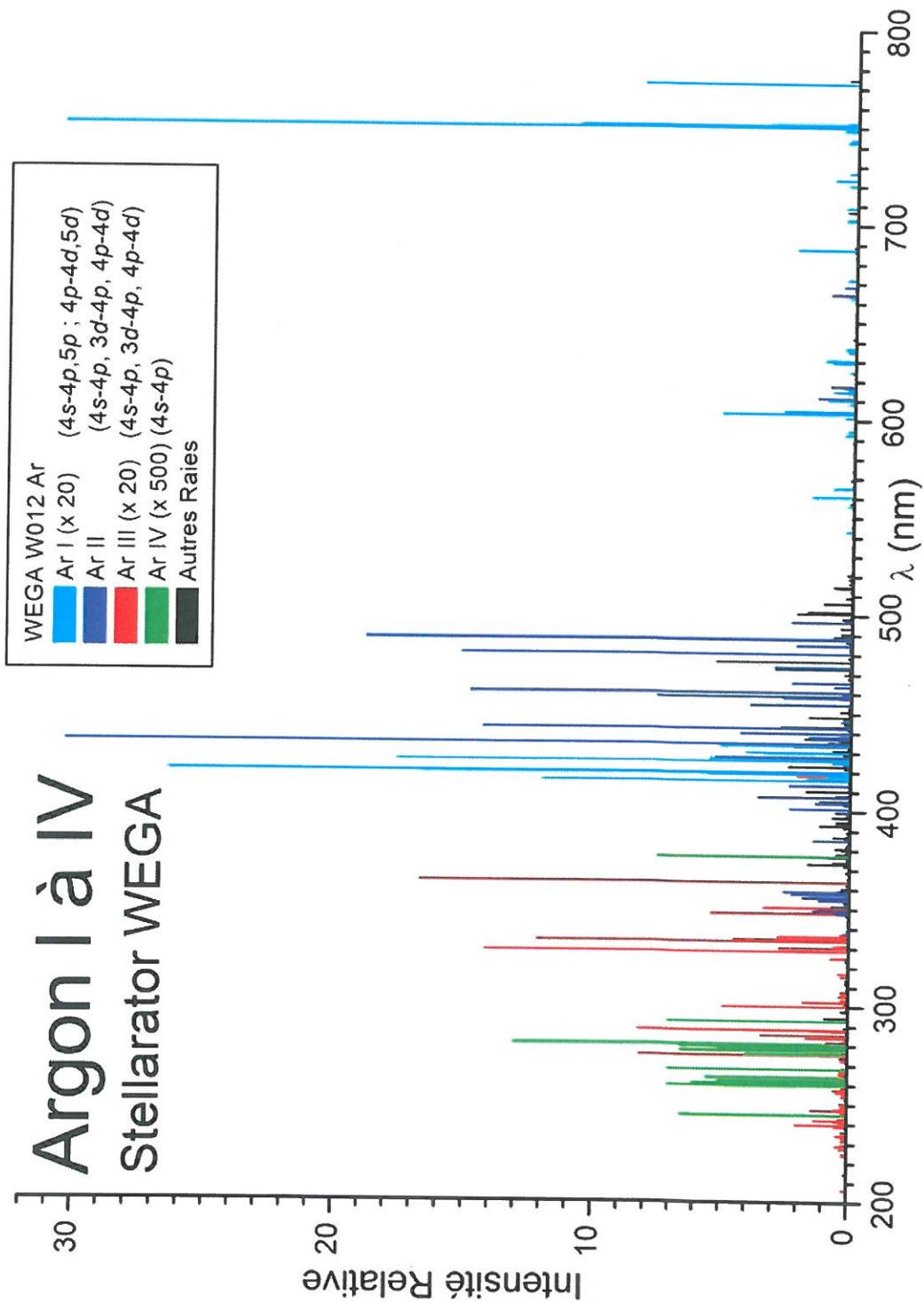


Fig. 10.2 Vue d'ensemble du spectre enregistré dans WEGA, principales raies d'Ar I à IV identifiées. Certaines raies représentées en noir ne sont pas identifiées.

des spectres théoriques venant de notre modèle C-R. Suivant notre étude, les lignes spectrales typiques de l'Ar I à IV ont été identifiées. Le spectre de la décharge 'W012' observé dans WEGA, dans lequel les raies d'Ar I à IV ont été identifiées, est montré sur la Fig. 10.2. Ce spectre a été présenté et discuté dans la réunion ECAMP IX (KAT07b).

Sur la Fig. 10.2, les raies sont classées par espèce (couleur différente pour chaque ion). Une simple inspection des figures montre que l'espèce prédominante dans la décharge est l'Ar II (représenté en bleu). Le pourcentage des espèces présentes indique que la T_e dans la région observée, c'est à dire sur le bord de WEGA, est de l'ordre de 2 à 3 eV. Les intensités des espèces Ar I, III et IV ont été multipliées par des facteurs convenables pour qu'on puisse distinguer les raies les moins intenses. Le spectre d'Ar IV, bien qu'assez faible est clairement présent.

Nous pouvons observer qu'un certain nombre de raies n'avait pas été identifié dans le passé; elles sont représentées en noir sur la Fig. 10.2. Depuis, le code ID08 que nous avons développé, nous a permis d'attribuer ces raies à des multiplets d'Ar I, II et III; 4 raies d'Ar I, 65 raies d'Ar II, et une raie d'Ar III. Ces raies identifiées sont représentées sur la Fig. 10.3. Le spectre provenant de la décharge et incluant les résultats de cette récente identification est représenté sur la Fig. 10.4.

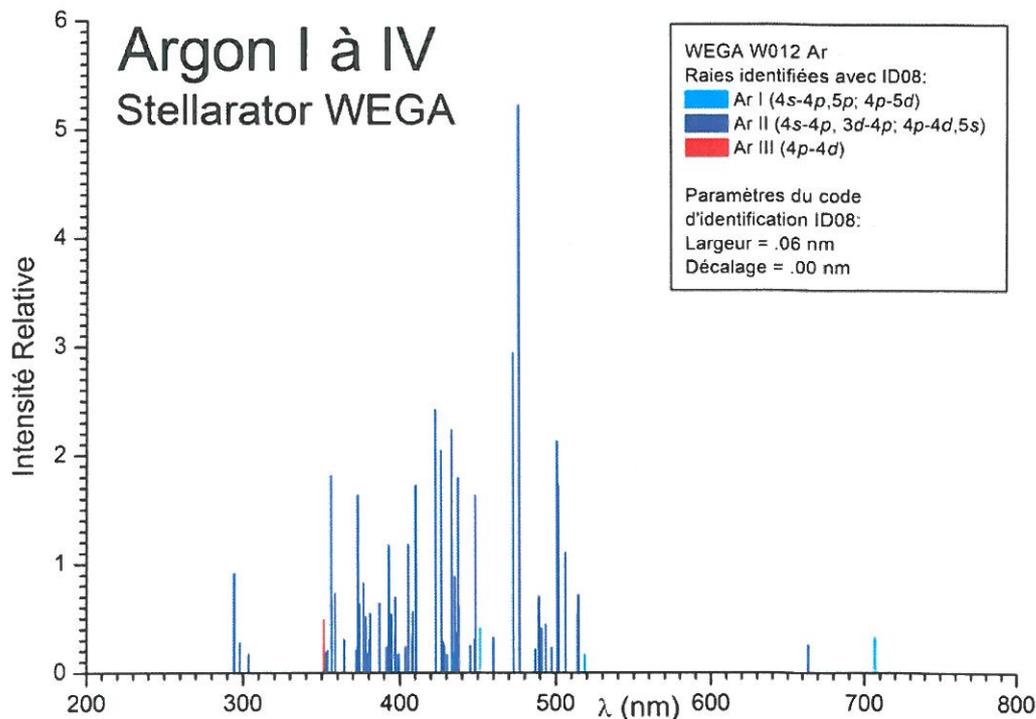


Fig. 10.3 Spectre enregistré dans WEGA, les raies d'Ar I à III ont été identifiées avec le code ID08.

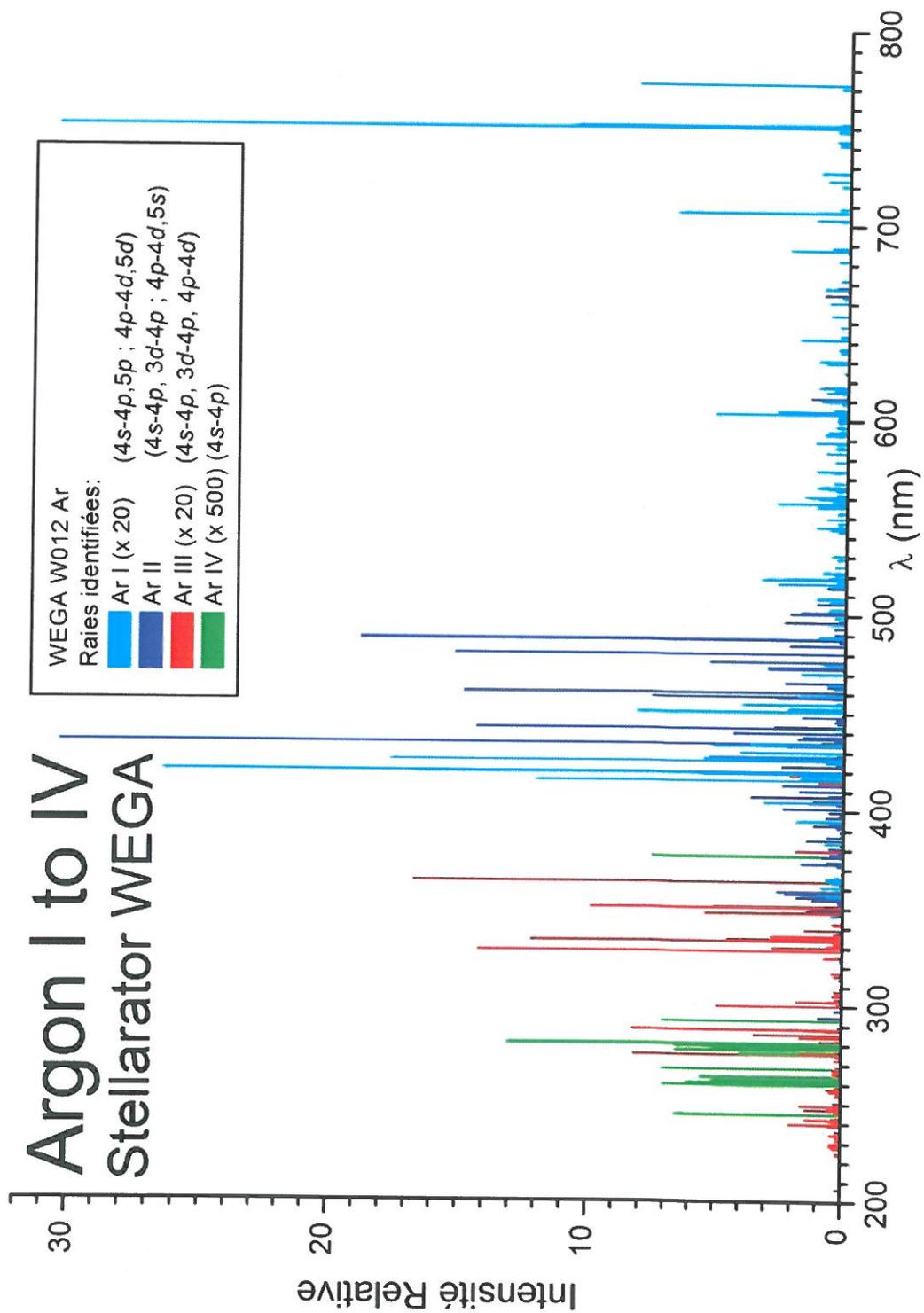


Fig. 10.4 Vue d'ensemble du spectre enregistré dans WEGA, raies d'Ar I à IV identifiées en partie à l'aide du code ID08.

10.1.3. Diagnostic optique

Les spectres expérimentaux dans lesquels les raies ont été identifiées sont comparés à nos spectres théoriques pour juger des conditions du plasma. Dans un premier temps, nous comparons le spectre expérimental de la décharge 'W012' de WEGA, donné sur la Fig. 10.4, avec le spectre provenant de notre modèle d'Ar I à III obtenu pour $n_e = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ et $T_e = 32 \text{ kK}$, montré sur la Fig. 10.5. De même que sur le spectre expérimental, les raies théoriques d'Ar III ont ici été multipliées par un facteur vingt pour mieux les distinguer. Les raies d'Ar I ont été multipliées par un facteur deux mille et celles de multiplet $4s \leftarrow 5p$ ont aussi été multipliées par un facteur trente. Les raies de l'Ar I sont beaucoup plus intenses dans l'expérience. Cela montre que du Xe I est présent dans le stellarator très près des parois. Dans cette région, la température est assez froide, entre 1 et 2 eV. La similitude entre les deux spectres, expérimental et théorique d'Ar II et III montre que le diagnostic optique aboutit à une température voisine de 32 kK loin de la paroi, mais pas au centre de la décharge.

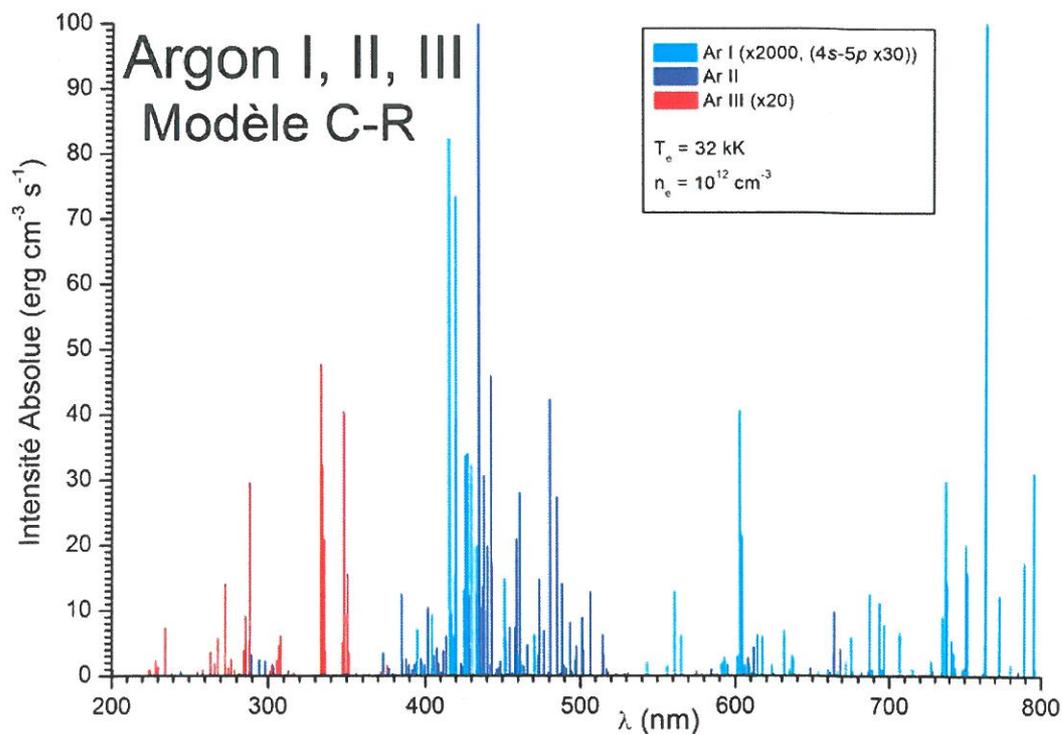


Fig. 10.5 Spectre théorique du modèle C-R d'Ar I, II et III dans la région allant de 200 nm à 800 nm.

Une étude plus détaillée des raies des principaux multiplets détectés permet d'affiner ce premier diagnostic. Pour ce faire, nous avons comparé le spectre de la décharge à nos spectres théoriques, multiplet par multiplet, au sein de chaque espèce. Sur la Fig. 10.6, nous présentons un spectre expérimental dont les raies d'Ar I ont été classées par multiplet.

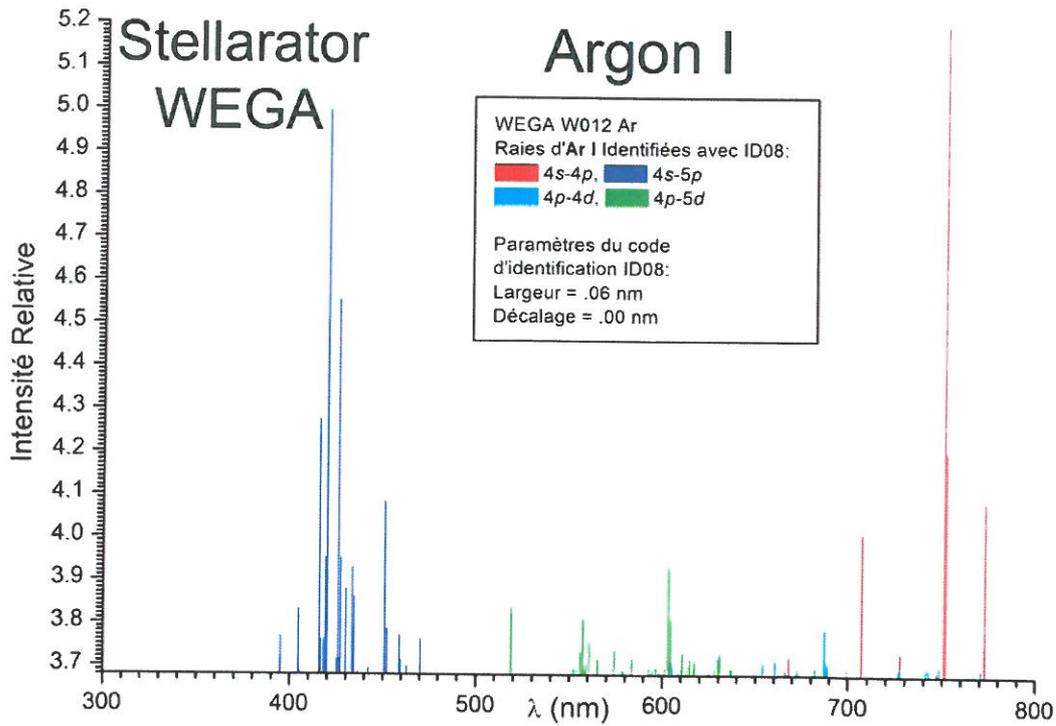


Fig. 10.6. Spectre de WEGA fonctionnant à l'Ar, raies de quatre multiplets d'Ar I identifiées.

Dans le domaine spectral observé (de 300 nm à 800 nm), les quatre multiplets principaux d'Ar I sont les $4s \leftarrow 4p, 5p$ et $4p \leftarrow 4d, 5d$. Les raies 'rouges' du multiplet $4s \leftarrow 4p$ et les raies 'bleues' du multiplet $4s \leftarrow 5p$ sont les plus intenses, en accord avec ce qui est connu par d'autres études. Les raies que nous appelons 'oranges' du multiplet $4p \leftarrow 4d$ (représentées ici en bleu clair) sont ici peu intenses par rapport aux raies 'rouges'. Cela montre que la température du plasma dans la région où se trouve le Xe I est relativement basse. La sensibilité du spectromètre dans la région allant de 700 à 800 nm est moindre et certaines raies 'rouges' n'ont pas pu être observées. Sur la Fig. 10.7 nous présentons le spectre théorique pour $n_e = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ et $T_e = 15 \text{ kK}$ provenant de notre modèle d'Ar I. La comparaison entre spectre expérimental et théorique montre que les intensités des raies sont assez similaires, ce qui confirme notre diagnostic suggérant un plasma relativement froid. Nous pensons que les raies qui se situent dans la région de grandes longueurs d'onde sont ici en partie réabsorbées dans l'expérience.

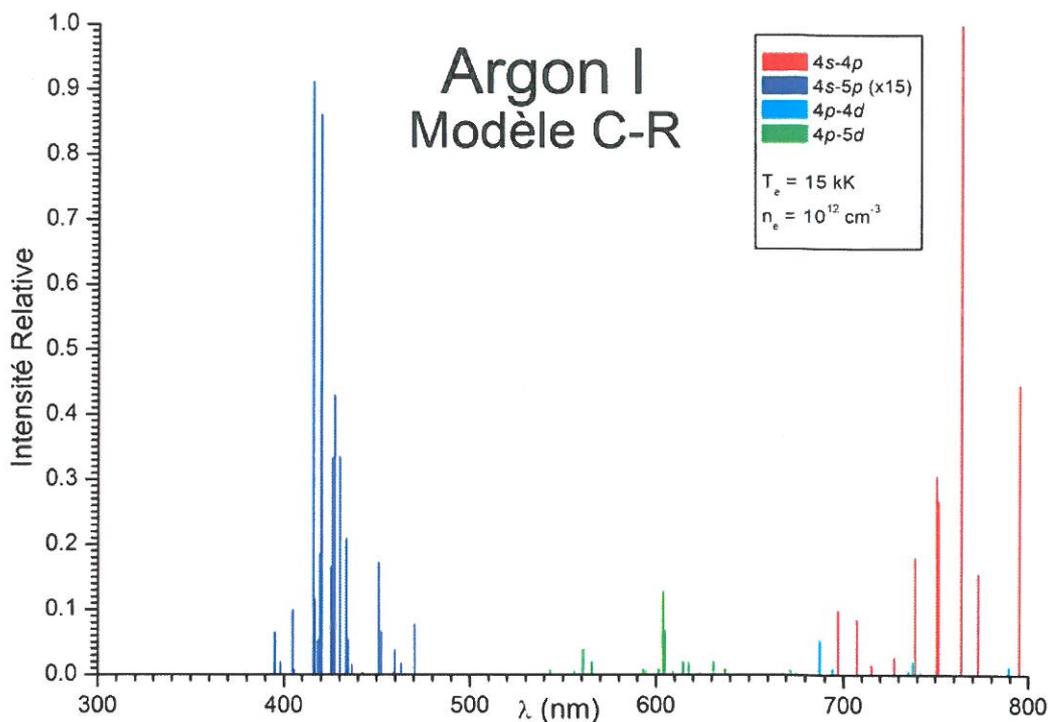


Fig. 10.7. Spectre du modèle C-R d'Ar I, multiplets sélectionnés.

Nous présentons sur la Fig. 10.8 le spectre expérimental dans lequel, seules les raies d'Ar II et III des multiplets $4s \leftarrow 4p$ et $3d \leftarrow 4p$ sont présentes; les raies sont classées par multiplet. Le multiplet dont les raies prédominent est le $4s \leftarrow 4p$, ce qui nous indique que la T_e est assez basse. Le spectre théorique du Xe II et III pour ces deux mêmes multiplets qui provient de notre modèle est représenté sur la Fig. 10.9. La forme de ces deux spectres est assez similaire, ce qui confirme notre diagnostic. Les raies du multiplet $3d \leftarrow 4p$ du Xe III sont moins intenses dans l'expérience, ce qui est peut être dû à la difficulté d'observer les raies entre 200 et 250 nm. Le choix de ces multiplets provient du fait que les raies de ces deux multiplets sont les plus intenses pour le Xe II. Pour le Xe III, le multiplet $4p \leftarrow 4d$ est classé deuxième par ordre d'intensité des raies, après le multiplet $4s \leftarrow 4p$. Cette situation est illustrée sur les Figs. 10.10 et 10.11 qui présentent le spectre de la décharge dans lequel seules les raies d'Ar II et III respectivement sont présentées.

La Fig. 10.10 montre le spectre de la décharge dans lequel les raies d'Ar II seulement ont été identifiées. Sur la Fig. 10.11 se trouve le spectre expérimental dans la région allant de 200 à 400 nm et comprenant uniquement les raies de l'Ar III, identifiées par multiplets.

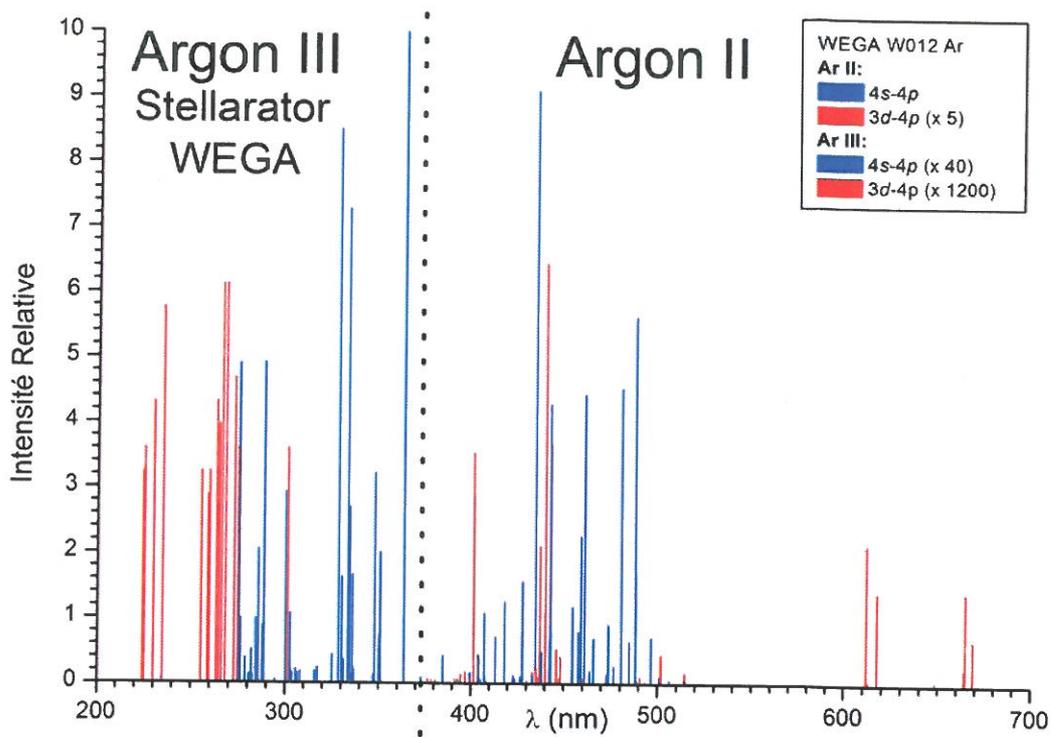


Fig. 10.8. Spectre de la décharge, raies des multiplets $4s \leftarrow 4p$ et $3d \leftarrow 4p$ d'Ar II et III identifiées.

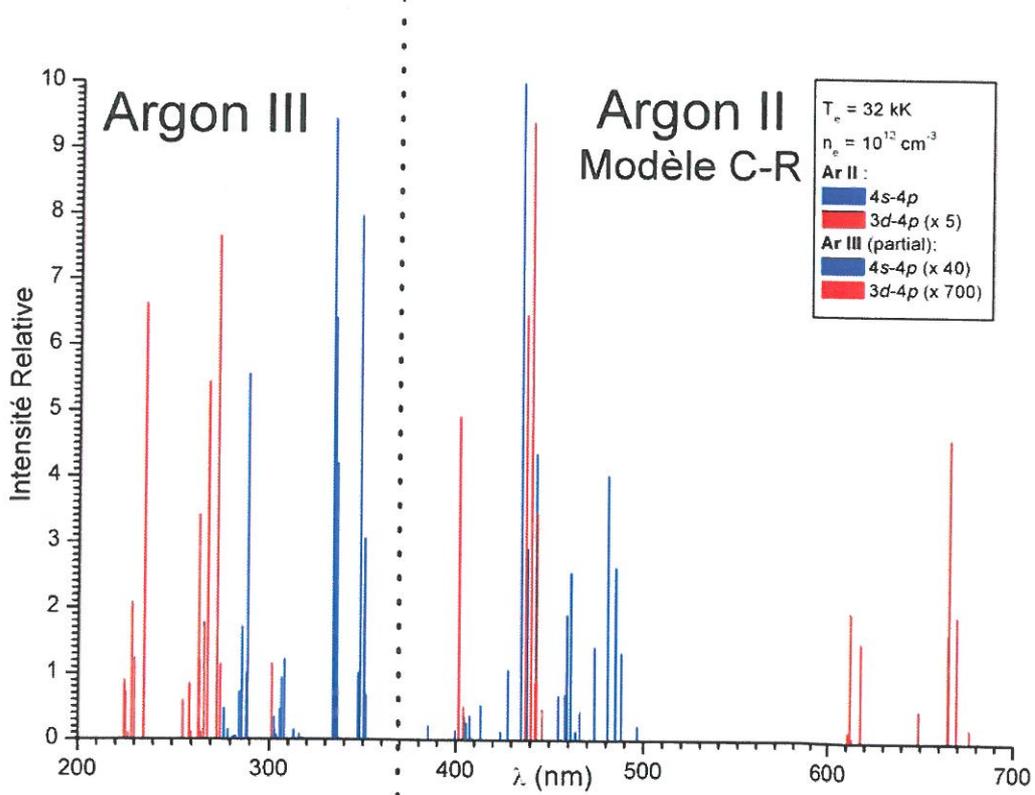


Fig. 10.9. Spectre du modèle C-R d'Ar II et III, raies des multiplets $4s \leftarrow 4p$ et $3d \leftarrow 4p$ sélectionnées.

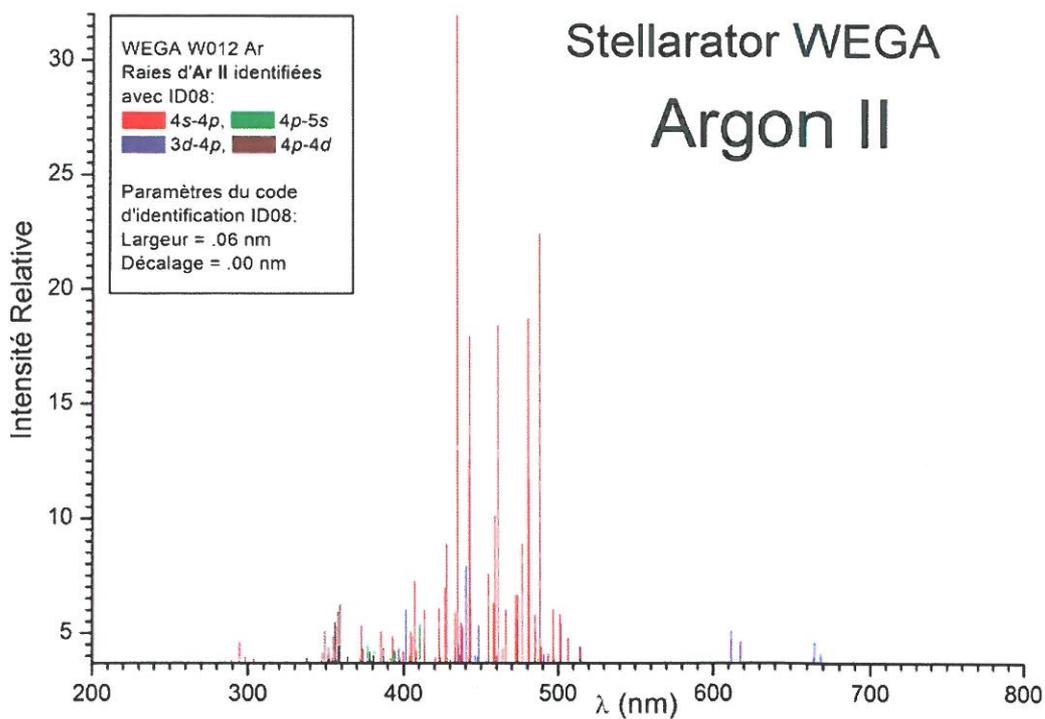


Fig. 10.10. Spectre de WEGA fonctionnant à l'Ar, raies des multiplets d'Ar II identifiés.

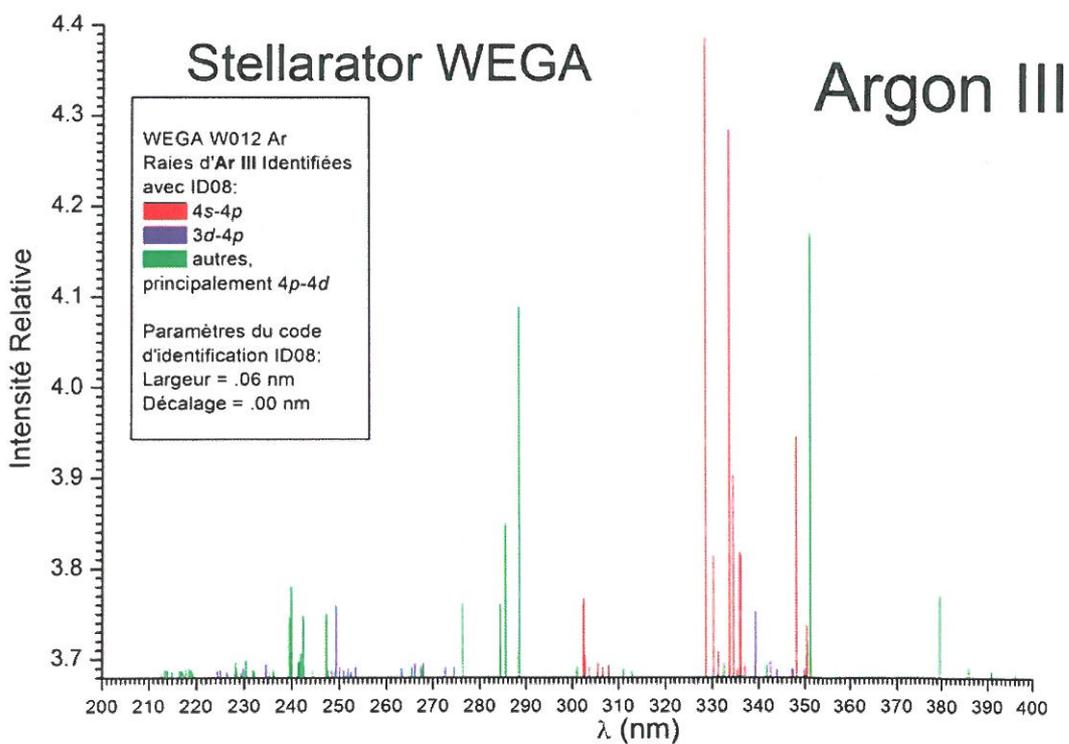


Fig. 10.11. Spectre de WEGA fonctionnant à l'Ar dans la région allant de 200 nm à 400 nm, multiplets d'Ar III identifiées.

Dans le spectre d'Ar III montré sur la Fig. 10.11 nous avons identifié les raies des trois multiplets $4s \leftarrow 4p$, $4p \leftarrow 3d$, $4p \leftarrow 4d$. Le fait que les raies du multiplet $4p \leftarrow 4d$ soient ici assez intenses montre que les niveaux placés relativement haut dans le diagramme de Grotrian de l'Ar III sont peuplés préférentiellement, ce qui indique une température assez haute. Nous pensons que cette partie du spectre provient d'une région assez centrale du plasma.

En conclusion, l'étude du spectre 'W012' a montré que dans le stellarator WEGA:

- i) Le plasma très près des parois est relativement froid, de l'ordre de 1 à 2 eV. Par conséquent, il est principalement composé d'Ar I. Ceci est clairement illustré par l'intensité des raies de l'argon neutre.
- ii) Par comparaison du deuxième et du troisième spectre d'argon théorique avec les spectres expérimentaux correspondant on arrive à la conclusion que la température est nettement plus chaude dans les régions situées plus loin de la paroi, de l'ordre de 3 à 4 eV.
- iii) La présence de raies d'Ar IV montre que dans les régions plus près du centre, la température est encore plus élevée.

II. Dans le cadre de notre collaboration, nous avons été invités récemment à Greifswald pour participer à une nouvelle campagne de mesures concernant des décharges d'argon et de xénon. Ont prit part à cette campagne déroulée du 15 au 19 décembre 2008, P. Tsekeris (de l'Université de Ioannina), M. Otte et des membres de 'WEGA Team' (de l'IPPG), K. Katsonis et Ch. Berenguer.

De nombreux spectres ont été enregistrés à l'aide d'un spectromètre de type ESA3000 dans la région allant de 320 nm à 800 nm. Différents angles de la fibre optique ont été essayés pour l'acquisition des spectres. Nous présentons dans la suite un spectre d'argon obtenu lors de cette campagne de mesures. Dans ce spectre aussi, les raies d'Ar I à III ont été identifiées à l'aide de notre code ID08. Nous comparons le spectre récent avec celui provenant de la décharge 'W012' présenté précédemment. Les deux spectres dont les raies ont été identifiées sont représentés dans la région allant de 320 à 400 nm. Dans cette région se trouve une grande partie des raies d'Ar III (multiplet $4s \leftarrow 4p$ notamment) ainsi que des raies de plusieurs multiplets d'Ar II. Le spectre de la décharge 'W012' est représenté sur la Fig. 10.12. et celui de la nouvelle décharge '28810' (du 17.12.08) est représenté sur la Fig. 10.13. La comparaison de ces deux spectres et notamment du pourcentage de raies d'Ar II et III montre que le spectre obtenu plus récemment correspond à un plasma nettement plus chaud que celui présent dans la décharge 'W012'. Ceci est dû essentiellement au fait que nous avons cherché à diagnostiquer une autre région du spectre que l'on pensait plus chaude.

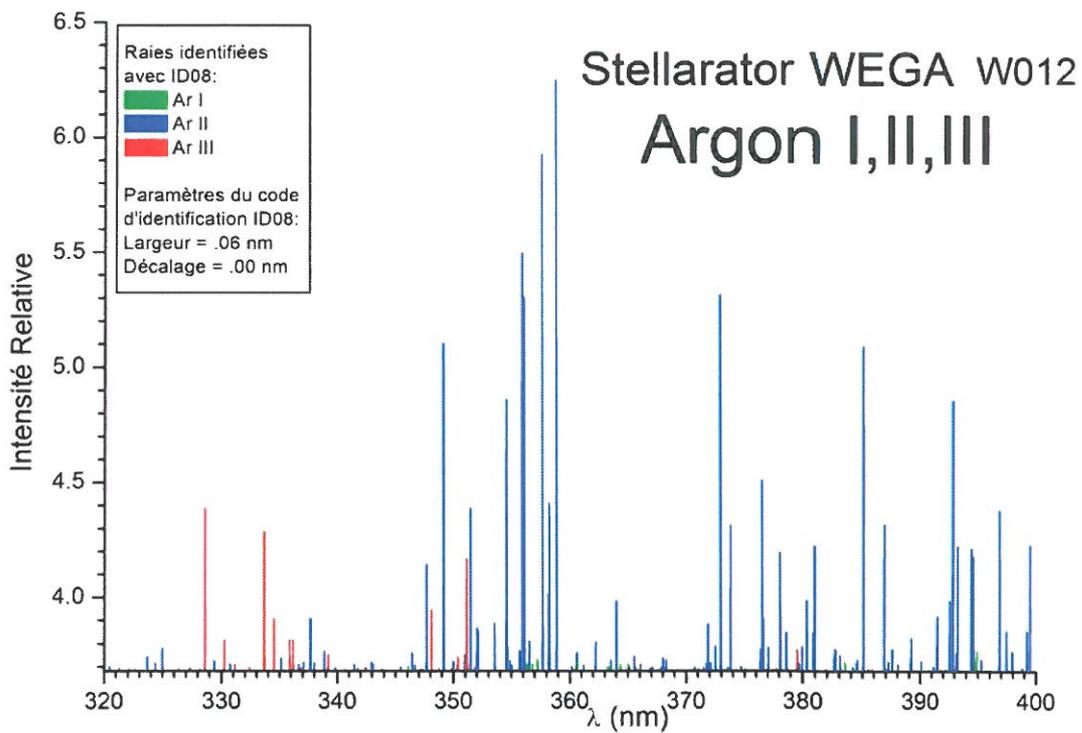


Fig. 10.12. Spectre de la décharge 'W012' de WEGA fonctionnant à l'Ar dans la région allant de 320 nm à 400 nm, raies d'Ar I à III identifiées.

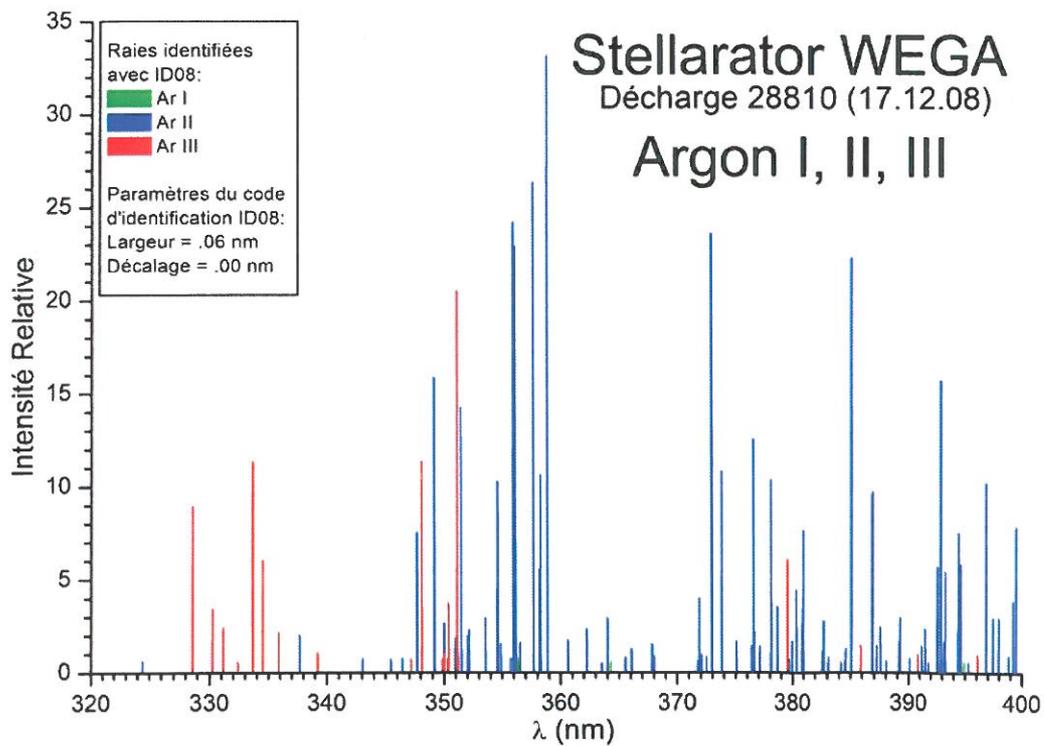


Fig. 10.13. Spectre de la décharge '28810' de WEGA fonctionnant à l'Ar dans la région allant de 320 nm à 400 nm, raies d'Ar I à III identifiées.

10.2. Fonctionnement au xénon

Lors de la campagne de mesures effectuée à l'IPPG du 15 au 19 décembre 2008, le diagnostic par spectroscopie d'émission a aussi été étendu aux décharges du xénon comme cela avait été programmé dans le passé (KAT07b). Nous avons mesuré des spectres du plasma dans différentes régions allant de 330 nm à 800 nm. Comme un début de l'étude que nous envisageons à l'avenir, nous commentons ici le spectre de la décharge '28845' du 17.12.08. Nous avons utilisé notre code ID08 pour identifier dans ce spectre les raies des espèces du Xe I à Xe IV.

Le spectre expérimental dans lequel les raies des quatre espèces Xe I à IV ont été identifiées se trouve sur la Fig. 10.14. Les intensités des raies du Xe I ont été multipliées sur cette figure par un facteur dix, celles du Xe III par un facteur huit et celles du Xe IV par un facteur cent de manière à les distinguer plus clairement. Nous remarquons que les raies du Xe II représentées en **bleu** sont prédominantes. Ceci montre que la température est de l'ordre de 2 à 3 eV, en accord avec notre diagnostic concernant le plasma d'Ar. La comparaison de ce spectre avec celui montré sur la Fig. 10.4, qui représente le spectre d'Ar I à IV de la décharge 'W012', indique que le pourcentage de l'Ar III (Ar IV) était alors plus petit que celui obtenu ici pour le Xe III (Xe IV). Ceci s'explique par le faible potentiel d'ionisation du Xe (de l'ordre de 12 eV) qui en fait un gaz facilement ionisable, celui de l'Ar étant de l'ordre de 16 eV. En ce qui concerne le Xe IV, seules deux raies ont été clairement identifiées. Les autres raies du Xe IV n'étaient pas clairement visibles sur le spectre car les raies les plus intenses du Xe IV se situent entre 200 et 300 nm, région que nous n'avons pas pu observer dans de bonnes conditions.

Nous présentons aussi sur la Fig. 10.15 le spectre théorique du Xe I à III provenant de notre modèle pour $n_e = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ et $T_e = 30 \text{ kK}$. Les intensités des raies du Xe I ont été ici multipliées par un facteur mille et celles du multiplet $6s \leftarrow 7p$ (situées dans la région allant de 400 à 450 nm) ont été aussi multipliées par trente. Les raies du Xe III ont été multipliées par un facteur quatre. La similitude entre la forme générale des deux spectres pour le Xe III confirme notre diagnostic optique dans la région un peu éloignée de la paroi. Les spectres théoriques du Xe I et II sont assez différents des expérimentaux, ce qui montre que ces deux espèces se trouvent dans une région plus froide du dispositif. La présence de Xe II en plus du Xe I dans une région froide du plasma provient du fort potentiel d'ionisation du Xe.

Nous présentons aussi une comparaison des spectres espèce par espèce pour le Xe II et III. Pour le Xe I, une grande partie du spectre se trouve autour de 1000 nm et n'est pas visible ici.

Sur la Fig. 10.16, nous présentons le spectre de la décharge dans lequel se trouvent uniquement les raies du Xe II. Le spectre de notre modèle correspondant pour $n_e = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ et $T_e = 15 \text{ kK}$ est représenté sur la Fig. 10.17. L'analogie entre la forme de ces deux spectres confirme notre hypothèse de présence du Xe II très près de la paroi du stellarator. L'analogie montre aussi que dans cette région la n_e doit être de l'ordre de 10^{12} cm^{-3} et la T_e de 15 kK comme c'était le cas avec l'Ar I.

WEGA Stellarator
Shot 28845, 17.12.08
Xenon

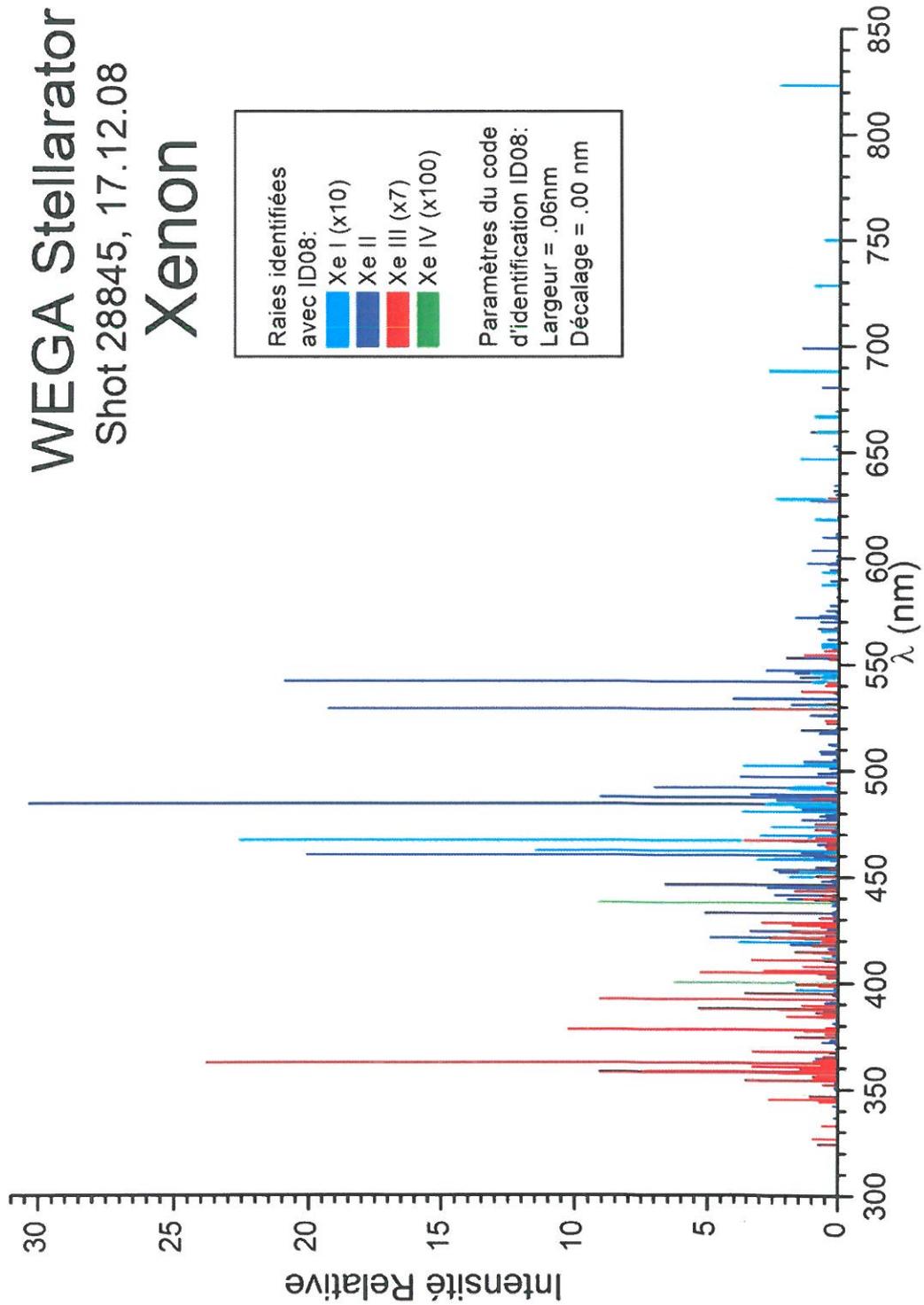


Fig. 10.14. Vue d'ensemble du spectre enregistré dans WEGA fonctionnant au Xe pur, raies de Xe I à IV identifiées.

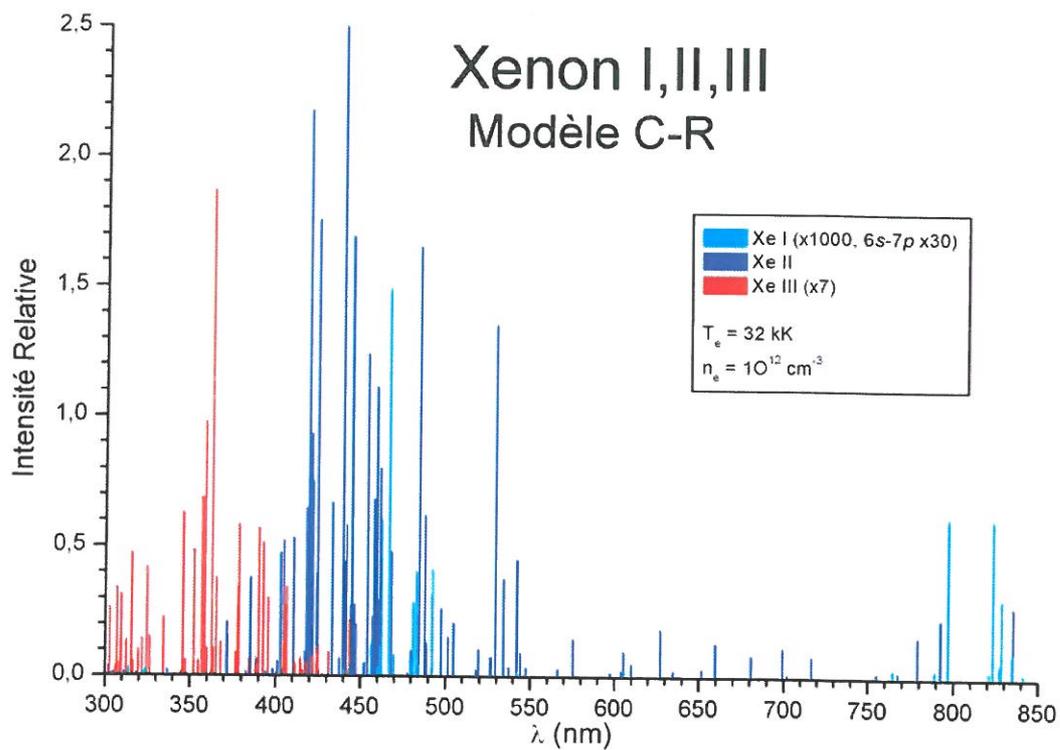


Fig. 10.15 Spectre théorique du modèle C-R du Xe I, II et III dans la région de 350 nm à 850 nm.

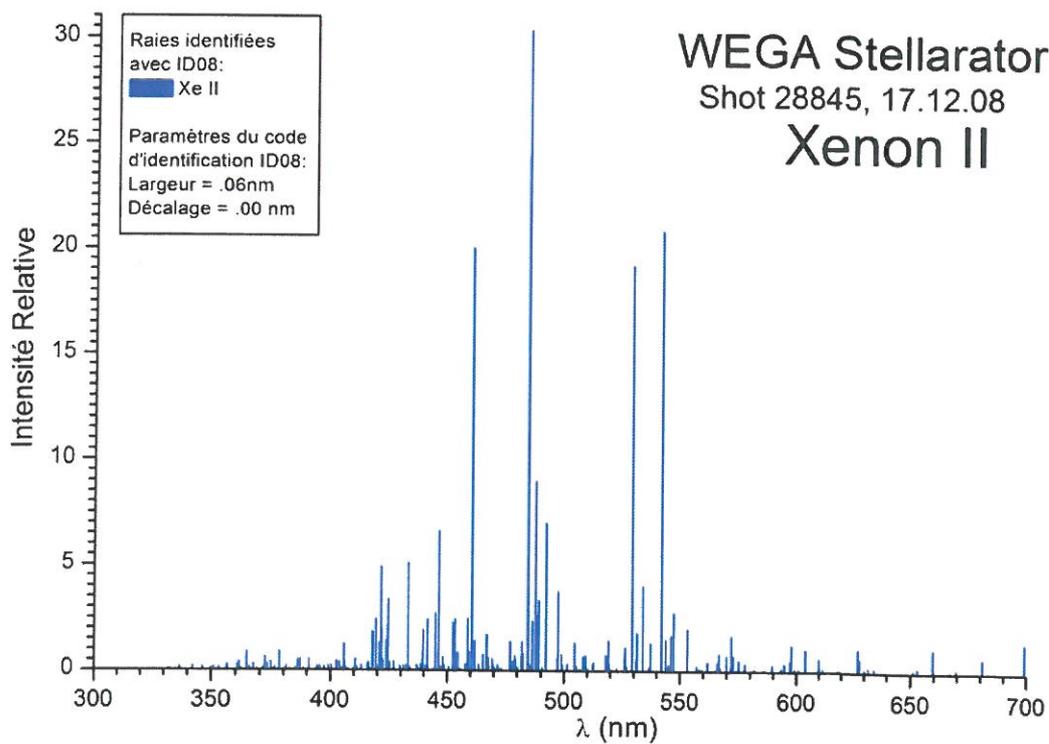


Fig. 10.16 Spectre de la décharge de Xe enregistré dans WEGA, raies d'Ar II identifiées.

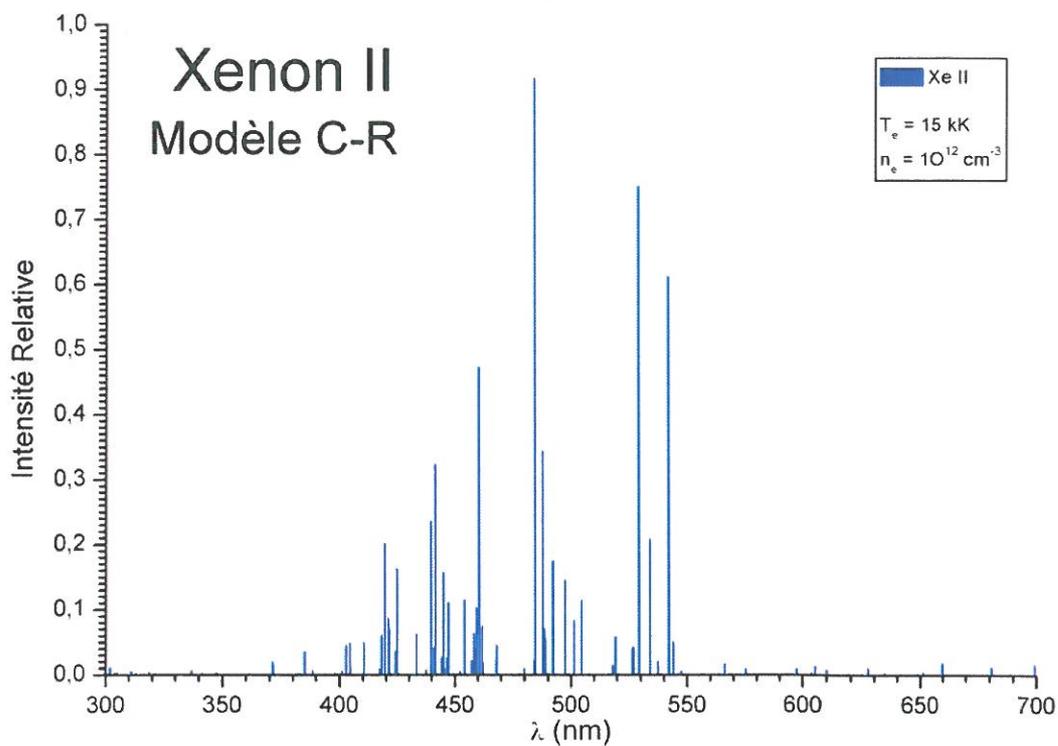


Fig. 10.17 Spectre théorique du modèle C-R, raies du Xe II sélectionnées.

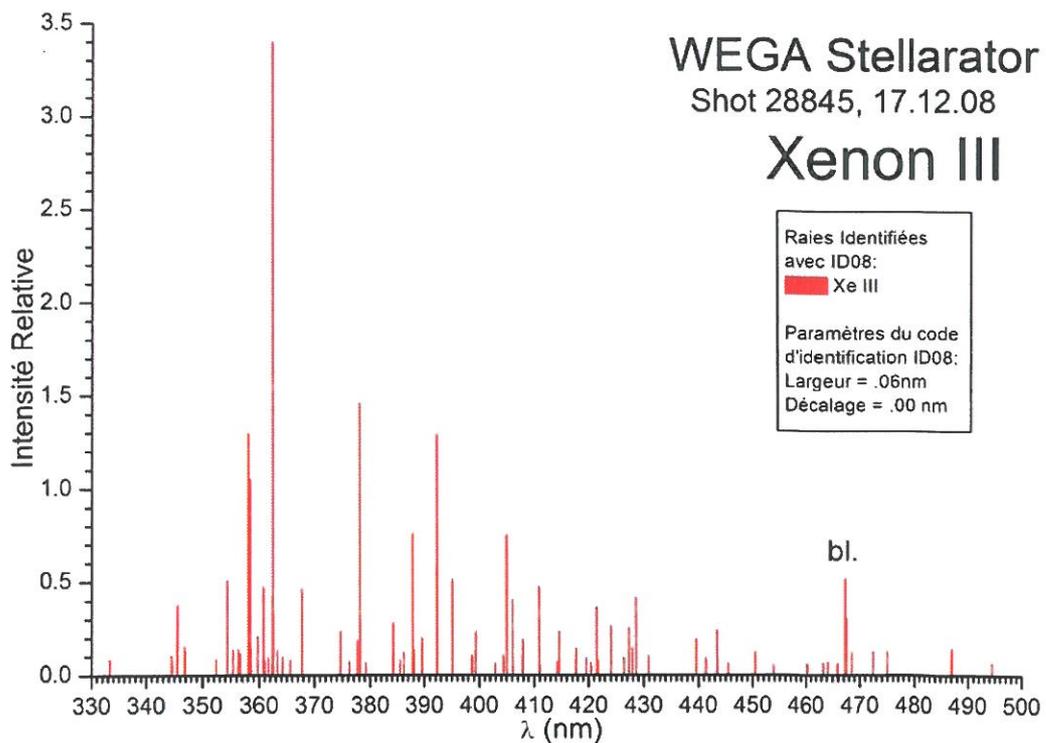


Fig. 10.18 Spectre de la décharge de Xe enregistré dans WEGA, raies d'Ar III identifiées.

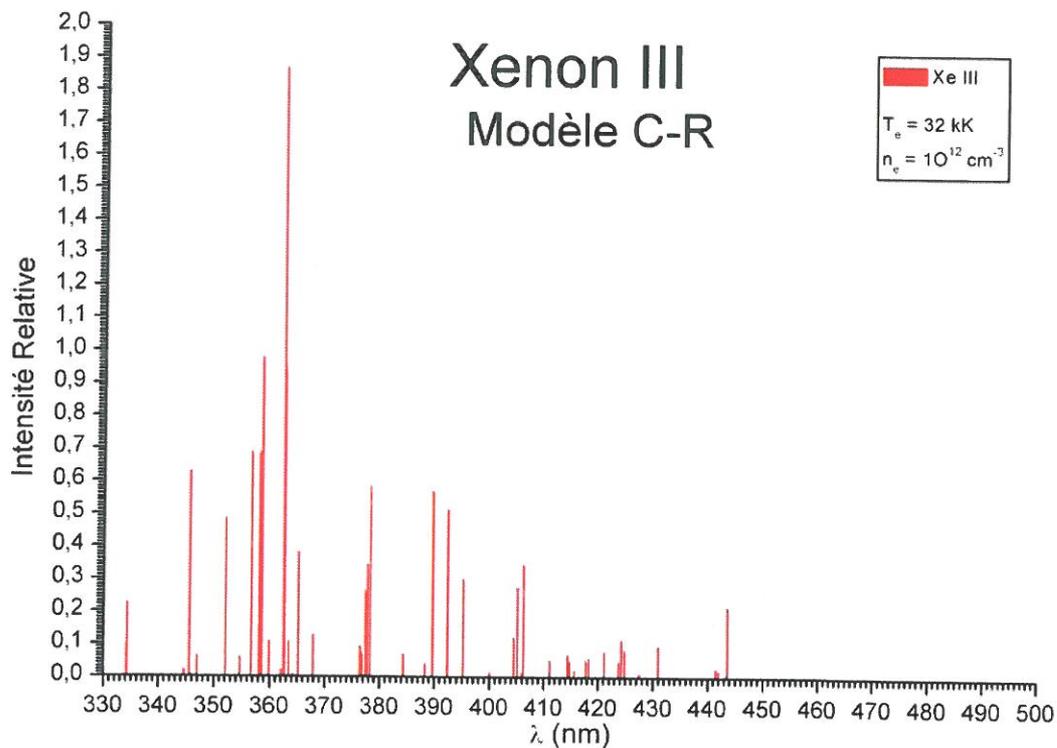


Fig. 10.19 Spectre théorique du modèle C-R, raies du Xe III sélectionnées.

Nous présentons sur la Fig. 10.18 le spectre de la décharge dans lequel seules les raies du Xe III sont montrées. Le spectre du Xe III correspondant qui provient de notre modèle pour $n_e = 10^{12} \text{cm}^{-3}$ et $T_e = 32 \text{ kK}$ est montré sur la Fig. 10.19. La similitude de ces deux spectres confirme notre diagnostic du plasma dans la région située plus loin de la paroi.

Il est prévu d'étudier prochainement les décharges de mélanges d'argon et de xénon. Cette étude nous permettra de comparer nos résultats déjà obtenus avec l'Ar et le Xe alimentant des décharges séparées. Des mesures précises de ces mélanges dans la région allant de 200 à 300 nm nous permettrait d'identifier plus de raies des spectres d'Ar (Xe) IV et affiner le diagnostic. Pour le moment, dans la région spectrale allant de 200 nm à 300 nm le spectromètre n'est pas assez sensible. Pour obtenir un spectre exploitable pour le cas de l'Ar (Xe) V et éventuellement de l'Ar (Xe) VI on doit changer tout le système d'acquisition spectrale, ce qui est en étude en collaboration avec le Kernforschungsanlage de Jülich.

11. CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

Cette thèse a permis d'étendre la modélisation du type collisionnel-radiatif aux plasmas d'argon et de xénon I à V et de développer ainsi le diagnostic optique des plasmas d'argon et de xénon. Nos modèles C-R d'argon et de xénon ont pu être validés pour les spectres visibles de Xe et d'Ar I à III et pour le Xe II à Xe V dans la région VUV. Ceci a permis de développer une étude spectroscopique avec des longueurs d'onde précises des spectres provenant des espèces d'Ar et de Xe, ce qui est fondamental pour comprendre l'évolution du plasma et donc pour mieux apprécier les résultats des phénomènes complexes (turbulence, inhomogénéités locales, etc..) intervenant dans les dispositifs expérimentaux. En ce qui concerne les diagnostics optiques appliqués à de nombreux plasmas, nous pouvons évaluer à l'aide de modèles C-R les populations des niveaux excités qui sont observés dans ces plasmas. Ceci est nécessaire pour le diagnostic optique de plusieurs dispositifs. Par ailleurs, nous avons aussi pu effectuer un diagnostic basé directement sur la comparaison des spectres que nous avons mesurés. Nous rappelons que la précision du diagnostic optique est toujours directement liée à la connaissance des données atomiques utilisées.

En parallèle à l'effort théorique, nous avons pu effectuer plusieurs études expérimentales du spectre d'émission de différents dispositifs (lampes de Xe et d'Ar, réacteur à plasma DIVA fonctionnant avec de l'Ar et stellarator WEGA fonctionnant à l'Ar pur ou contenant un mélange d'Ar et de Xe). J'ai développé un code (ID08) pour identifier aisément les raies présentes dans les spectres expérimentaux. Ce code a été notamment utilisé pour faire des études spectroscopiques détaillées pour l'argon, le xénon, le niobium et leurs ions, présents dans les spectres de plasmas enregistrés dans différents dispositifs et différentes conditions: le stellarator WEGA, le réacteur à plasma DIVA, une lampe à cathode de Nb fonctionnant à l'Université de Berlin et une cathode creuse contenant de l'Ar disponible à l'Université de Ioannina.

Les travaux effectués ont été présentés et discutés dans de nombreuses conférences internationales, lors desquelles j'ai pu profiter des connaissances et de l'évaluation critique des spécialistes de physique atomique et de spectroscopie. Ainsi, j'ai été invitée à présenter mes résultats expérimentaux et leur traitement théorique aux réunions du Projet de Recherche Coordonné (CRP) de l'AIEA sur les données atomiques pour la fusion.

Ayant eu l'occasion de travailler sur deux gaz rares, nous avons pu comparer les résultats obtenus par nos modèles C-R d'Ar et de Xe et observer les similitudes entre ces espèces. Nous avons mesuré et étudié des spectres dans différentes expériences qui donnent des résultats dans différentes régions spectrales, nous permettant ainsi de valider nos modèles dans le visible (Ar et Xe I à III) mais aussi dans l'ultraviolet lointain (Xe II à V). Pour valider nos modèles C-R pour l'Ar et le Xe, et pour élargir leur domaine d'application vers des plasmas à forte densité d'énergie, des données concernant la structure, les probabilités de transition et les sections efficaces de nombreux processus concernant l'Ar, le Xe et leurs ions (I à V) ont été calculées et évaluées. Ces données sont nécessaires pour la constitution de nos modèles et contribuent à une meilleure connaissance des différents processus

collisionnels et radiatifs rencontrés dans les plasmas des gaz rares. Pour les introduire correctement dans les équations statistiques, j'ai développé un code (INTEG08) capable d'intégrer toutes les sections efficaces sur des fonctions de distribution variées pour des gammes de température choisies et adapté à nos applications. Ce code utilise la paramétrisation (code PARAM08) que j'ai développée pour traiter toutes les sections efficaces et tous les taux des processus étudiés. Le code PARAM08 donne une forme directement exploitable pour introduire les données dans les codes C-R et pour comparer les valeurs provenant de différents calculs ou mesures. L'écriture d'un sous-programme (POLY08) a été nécessaire pour tester le comportement des polynômes utilisés dans la paramétrisation de chaque processus, entre et au-delà des limites de l'intégration et de la paramétrisation.

Ce travail montre une fois encore l'importance des modèles C-R en physique des plasmas, notamment pour leur diagnostic optique et leur modélisation. De plus, il a été constaté ici que le fait de considérer plusieurs transitions atomiques appartenant à des multiplets et à des espèces différentes permet d'affiner considérablement le diagnostic optique.

Pour développer ce travail, nous envisageons:

- i) L'introduction des coefficients d'échappement pour étudier des régions où les plasmas sont optiquement épais au moins pour certaines transitions (de préférence résonnantes).
- ii) L'inclusion de processus collisionnels entre atomes et ions. Ces processus deviennent importants lorsque la densité et la température du plasma augmentent. Pour les plasmas des décharges et les plasmas de fusion qui peuvent contenir une grande quantité d'impuretés (parmi elles C, Fe, Nb et C, W, O respectivement), nous pourrions aussi ajouter des processus atomiques et moléculaires impliquant d'autres éléments.
- iii) L'extension du modèle C-R de Xe aux espèces plus ionisées de manière à diagnostiquer des régions encore plus chaudes, notamment le centre des dispositifs de fusion et notamment le tokamak ITER et le stellarator WENDELSTEIN actuellement en développement.
- iv) L'extension du modèle C-R d'Ar à des ions plus ionisés dont nous avons déjà calculé et évalué un certain nombre de données.
- v) Nous allons aussi faire des doubles diagnostics dans des dispositifs contenant des mélanges d'Ar et de Xe I à V à la base des résultats donnés par notre modèle d'Ar et de Xe I à V.
- vi) Inclure nos modèles C-R à des codes globaux contenant une étude de la cinétique et du transport des atomes et des ions dans le plasma.

Nous avons programmé de nouvelles expériences concernant l'étude des spectres de Xe et d'Ar dans les conditions suivantes:

- Acquisition à Greifswald, en collaboration avec Mathias Otte et l'équipe WEGA, de spectres du stellarator WEGA fonctionnant avec un mélange Ar-Xe et aussi des spectres du stellarator WEDELSTEIN quand il sera en fonctionnement.

- Etude des spectres de décharges DBD et des spectres de lampes OSRAM à effectuer à l'Université de Ioannina en collaboration avec le Prof. Périclis Tsekeris et le Dr. Sophie Kroeger de l'Université de Berlin.

Ces expériences permettront de nouvelles comparaisons et évaluations qui aboutiront à des données validées qui sont indispensables pour le diagnostic et la modélisation de plusieurs plasmas industriels.

- ABD88** J. Abdallah Jr., R.E.H. Clark, R.D. Cowan, *CATS: The Cowan Atomic Structure Code*, Report LA-11436-M (1988).
- AIP57** American Institut of Physics Handbook, D.E. Gray Edts., McGraw-Hill Handbooks, (1957).
- ART66** L. Artsimovitch, *Physique Elementaire des Plasmas*, Edt. Mir, Moscou (1970).
- BAR99** K. Bartschat, V. Zeman, *Electron-impact Excitation from the (3p⁵4s) Metastable States of Argon*, Phys. Rev. A **59**, R2552 (1999).
- BAT49** D.R. Bates, A. Damgaard, *The Calculation of the Absolute Strengths of Spectral Lines*, Phil. Trans. Roy. Soc. A **242**, 101-122 (1949).
- BAT62** D.R. Bates, A. Dalargo, 'Atomic and Modlecular Processes' Edts. D.R. Bates, Academic Press, N.Y. ; D.R. Bates, A.E. Kingston, R.W.P. McWhirter, Proc. Roy. Soc. **A267**, 297 (1962).
- BER06** Ch. Berenguer, *Application des Modèles Collisionnels Radiatifs aux Plasmas d'Argon et de Xenon Faiblement Ionisés*, Rapport de Stage Master 2, Laboratoire LPGP, Université Paris Sud, juin 2006, Orsay (France).
- BER08a** Ch. Berenguer, K. Katsonis, M. Cornille, M. Ganciu, C. Boisse-Laporte, *Diagnosis of Xe Plasmas Using a Collisional-Radiative Model*, SPPT23, 16-19 juin 2008, Prague (République Tchèque).
- BER08b** Ch. Berenguer, K. Katsonis, S. Danakas, S. Cohen, P. Tsekeris, M. Cornille, *Study of the First Three Ar I, II, III Spectra Using a C-R Model*, ICAMDATA 06, 28-31 octobre 2008, Pékin (Chine).
- BER09a** Ch. Berenguer, K. Katsonis, R.E.H. Clark, E. Biémont, H.-P. Garnir, *Structure and Transition Probabilities of Xe V*, en préparation.
- BER09b** Ch. Berenguer, K. Katsonis, R.E.H. Clark, E. Biémont, H.-P. Garnir, *VUV Spectra and Transition Probabilities of the Xe II to Xe V Homonuclear Series*, en préparation.
- BER09c** Ch. Berenguer, K. Katsonis, R.E.H. Clark, Jun Yan, Bin Duan, M. Cornille, *Structure and Transition Probabilities of Xe III and Xe IV*, en préparation.
- BIE05a** E. Biémont, P. Quinet, C.J. Zeippen, *Transition Probabilities in Xe V*, Phys. Scripta **71**, 163-169 (2005).
- BIE05b** E. Biémont, V. Buchard, H.-P. Garnir, P.-H. Lefèbvre, P. Quinet, *Radiative Lifetime and Oscillator Strength Determinations in Xe VI*, Eur. Phys. J. D **33**, 181-191 (2005).
- BIE07** E. Biémont, M. Clar, V. Fivet, H.-P. Garnir, P. Palmeri, P. Quinet, D. Rostohar, *Lifetime and Transition Probability Determination in Xenon Ions, The Cases of Xe VII and VIII*, Eur. Phys. J. D **44**, 23-33 (2007).
- BOF96** J.B. Boffard, G.A. Piech, M.F. Gehrke, M.E. Lagus, L.W. Anderson, C.C. Lin, *Electron Impact Excitation out of the Metastable Levels of Argon into the 3p⁵4p J=3 Level*, J. Phys. B **29**, L795 (1996).
- BOF99** J.B. Boffard, A.G. Piech, M.F. Gehrke, M.E. Lagus, L.W. Etersson, C.C. Lin, *Measurement of Electron-impact Excitation Cross Sections out of Metastable Levels of Argon and Comparison with Ground-State Excitation*, Phys. Rev. A **59**, 2749 (1999).

- BOF04** J.B. Boffard, C.C. Lin, C.A. DeJoseph Jr., *Application of Excitation Cross Sections to Optical Plasma Diagnostics*, J. Phys. D **37**, R143 (2004).
- BOG98** A. Bogaerts, R. Gijbels, J. Vlcek, *Collisional – Radiative Model for an Argon Glow Discharge*, J. Appl. Phys. **84**, 121-136 (1998); A. Bogaerts, R. Gijbels, J. Vlcek, *Modeling of Glow Discharge Optical Emission Spectrometry: Calculation of the Argon Atomic Optical Emission Spectrum*, Spectrochimica B **53**, 1517-1526 (1998).
- BUR58** A. Burgess, Mon. Not. Roy. Astr. Soc. **118**, 477 (1958).
- CEL08** M. Celik, M.M. Sanchez, *Experimental and Computational Studies of Electric Thruster Plasma Radiation Emission*, <http://ssl.MIT.edu>, rapport SERC # 4-07 (2008).
- CHU02** H.-K. Chung, K.B. Fournier, M.J. Edwards, H.A. Scott, R. Cattolica, T. Ditmire, R.W. Lee, *Spectroscopic Characterization of Post-Cluster Argon Plasmas During the Blast Wave Expansion*, AIP Conference Proceedings **635**, 52-57 (2002).
- CLA88** R.E.H. Clark, J. Abdallah Jr., G. Czanak, J.B. Mann, R.D. Cowan, *ACE: Atomic Collisions with Electrons*, Report LA-11436-M, Vol. II (1988).
- CLA06** R.E.H. Clark, *Summary Report of First IAEA Research Coordination Meeting on Atomic Data for Heavy Element Impurities in Fusion Reactors*, Vienne, Autriche, novembre 2005, IAEA, Rept. INDC (NDS)-0487 (2006).
- CLA08** R.E.H. Clark, *Summary Report of Second IAEA Research Coordination Meeting on Atomic Data for Heavy Element Impurities in Fusion Reactors*, Vienne, Autriche, septembre 2007, IAEA, Rept. INDC (NDS)-0521 (2008).
- COW81** R.D. Cowan, *The Theory of Atomic Structure and Spectra*, Univ. of California Pres, Berkeley (1981).
- DAS02** A. Dasgupta, M. Blaha, J.L. Giuliani, *Electron-impact Excitation from the Ground and the Metastable levels of Ar I*, Phys. Rev. A **61**, 012703 (1999); *Erratum*, Phys. Rev. A **65**, 039905 (2002).
- DIM01** K. Dimitriou, *Etude des Collisions d'Ions et d'Electrons avec Atomes et Molécules par la Méthode des Trajectoires Classiques*, thèse, Université Paris-Sud (2001).
- DJE01** S. Djenize, S. Bukvič, *Transition Probabilities of Several Transitions in the Ar III and Ar IV Spectra*, A&A **365**, 252-257 (2001).
- DRA66** H.-W. Drawin, *Collision and Transport Cross Sections*, Rapport EUR-CEA-FC **383**, Fontenay-Aux-Roses, édition révisée 1967, France (1966/67).
- DRA70** H.-W. Drawin, F. Emard, *Instantaneous Population Densities of Excited Levels of Hydrogen Atoms, Hydrogen-like Ions, and Helium Atoms in Optically Thin and Thick non-L.T.E. Plasmas*, rapport EUR-CEA-FC-**534**, Fontenay-Aux-Roses, France (1970).
- EIS74** W. Eissner, M. Jones, H. Nussbaumer, Compt. Phys. Commun. **8**, 270 (1974).
- FUJ79** T.J. Fujimoto, Phys. Sot. Japan **47**, 265 (1979); T.J. Fujimoto, Phys. Sot. Japan **47**, 273 (1979).
- GA-20** K. Katsonis, Jun Yan, Ch. Berenguer, *Collaboration of the GAPHYOR Atomic Data Center with the Institut of Applied Physics and Computational Mathematics (IAPCM) of Beijing*, Rapport LPGP-GA-**20**, 20 mars 2007, Pékin (Chine).

- GA-21** K. Katsonis, Ch. Berenguer, *Excitation of the Xe I 6s Metastables to the 6p and 7p Configurations*, rapport LPGP-GA-21, Orsay, France (2008).
- GA-22** K. Katsonis, Ch. Berenguer, M. Cornille, *Ar I Transition Probabilities and Excitation Cross Sections Involving the 4s Metastable Levels and the 4/5p Configurations*, rapport LPGP-GA-22, Orsay, France (2008).
- GA-23** K. Katsonis, Ch. Berenguer, *Electron Collision Excitation of the Lower Ar I Levels*, rapport LPGP-GA-23, Orsay, France (2008).
- GA-24** K. Katsonis, Ch. Berenguer, *Energy Levels of Xe I to V*, rapport LPGP-GA-24, Orsay, France (2008).
- GA-25** K. Katsonis, Ch. Berenguer, *Energy Levels of Ar I to V*, rapport LPGP-GA-25, Orsay, France (2008).
- GRA81** J.P. Grandin, X. Husson, *Even-parity Rydberg and Autoionising States in Xenon*, J. Phys. B **14**, 433-440 (1981).
- GRY59** M. Gryziński, *Classical Theory of Electronic and Ionic Inelastic Collisions*, Phys. Rev. **115**, 374 (1959).
- HOL47** Holstein, *Imprisonment of Resonance Radiation in Gases. I*, Phys. Rev. **72**, 1212-1233 (1947).
- HOL51** Holstein, *Imprisonment of Resonance Radiation in Gases. II*, Phys. Rev. **83**, 1159-1168 (1951).
- HOR05** K. Horvath, *Characterisation and Optimisation of WEGA Plasmas*, PhD Thesis, Greifswald University, (2005).
- HUL82** R.A. Hulse, *Numerical Studies of Impurities in Fusion Plasma*, Nucl. Tech. Fusion **3**, 259 (1982).
- HUM33** C.V. Humphreys, W.F. Meggers, J. Research Natl. Bur. Standards **10**, 139 (1933).
- HUM52** C.V. Humphreys, J. Kostkowski, J. Research Natl. Bur. Standards **49**, 73 (1952).
- IMB06** J-C. Imbert, *Etude Spatio-Temporelle d'un Procédé de Pulvérisation Cathodique Magnétron à Fort Degré d'Ionisation de la Vapeur Pulvérisée*, thèse, Université Paris-Sud (2006).
- JEF68** J.T. Jefferies, *Spectral Line Formation*, Blaisdell Pub. Co, Mass. (1968).
- JUN05** R.O. Jung, J.B. Boffard, L.W. Anderson, C.C. Lin, *Electron-Impact Excitation Cross-Sections from the Xenon J=2 Metastable Level*, Phys. Rev. A **72**, 022723 (2005).
- JUN07** R.O. Jung, J.B. Boffard, L.W. Anderson, C.C. Lin, *Excitation into 3p⁵5p Levels from the Metastable Levels of Ar*, Phys. Rev. A **75**, 052707 (2007).
- KAR06** G.F. Karabadzak, Y.-H. Chiu, R.A. Dressler, *Passive Optical Diagnostic of Xe-Propelled Hall Thruster. II. Collisional-Radiative Model*, J. Appl. Phys. **99**, 113305 (2006).
- KAT76** K. Katsonis, *Etude Statistique et Cinétique des Plasmas d'Argon en Dehors de l'Equilibre Thermodynamique Local*, thèse de Doctorat d'Etat, Rapport EUR-CEA-FC-820, Fontenay-aux-Roses, France (1976).

- KAT03** K. Katsonis, S. Pellerin, K. Dzierzega, *C-R Type Modeling and Application in Plasma Diagnostics*, JHTMP 7, 559-568 (2003).
- KAT04a** K. Katsonis, A. Siskos, K. Dzierzega, S. Pellerin, M. Tanguy, *C-R Modeling of Ar Plasmas: Low Temperature Validation*, dans ESA SP-555, A.Wilson Edtr., 4thISPC, p. 129.1, 2-9 juin 2004, Sardaigne (Italie).
- KAT04b** K. Katsonis, C. Boisse-Laporte, J. Bonnet, S. Letout, A. Siskos, *C-R Modeling and Spectroscopic Diagnostics of SPT Plasmas*, 4th ISPC, 2-9 juin 2004, Sardaigne (Italie).
- KAT06a** K. Katsonis, D. Zhang, Ch. Berenguer, R.E.H. Clark, M. Cornille, WEGA Team, *A Collisional – Radiative Model for Ar I to VI Spectra Diagnostics*, conférence EGAS 38, 7-11 juin 2006, Ischia (Italie).
- KAT06b** K. Katsonis, M. Cornille, D. Humbert, R.E.H. Clark, J. Abdallah Jr., Ch. Berenguer, M. Ganciu, G. Maynard, A. Ndiaye, *Evaluation of the Xe Transition Probabilities*, conférence ICAMDATA 05, 16-19 octobre 2006, Meudon (France).
- KAT07a** K. Katsonis, R.E.H. Clark, M. Cornille, Ch. Berenguer, D. Humbert, A. Ndiaye, G. Maynard, *Atomic Data for Fusion Reactor Impurities*, conférence ECAMP IX, 7-11 mai 2007, Crète (Grèce).
- KAT07b** K. Katsonis, D. Zhang, R. König, WEGA Team, Ch. Berenguer, R.E.H. Clark, M. Cornille, *Application of Collisional-Radiative Models to Spectroscopic Diagnostics of WEGA*, conference ECAMP IX, 7-11 mai 2007, Crète (Grèce).
- KAT07c** K. Katsonis, Ch. Berenguer, R.E.H. Clark, M. Cornille, M. Ganciu, *Collisional-Radiative Models for Diagnosis of Xe Plasmas*, conference ECAMP IX, 7-11 mai 2007, Crète (Grèce).
- KAT07d** K. Katsonis, E. Biémont, H.-P. Garnir, M. Cornille, Ch. Berenguer, R.E.H. Clark, *Lowly Ionized Xe Spectra in the UV Region*, conférence ECAMP IX, 7-11 mai 2007, Crète (Grèce).
- KAT07e** K. Katsonis, Jun Yan, R.E.H. Clark, Bin Duan, Hong Zhang, Ch. Berenguer, *Evaluation of Xenon I to IX Main Multiplets Transition Probabilities*, conférence ICPEAC XXV, 25-31 juillet 2007, Freiburg (Allemagne).
- KAT07f** K. Katsonis, J. Bonnet, D. Packan, Ch. Berenguer, R.E.H. Clark, M. Cornille, G. Maynard, *A Xenon Collisional-Radiative Model for Plasma Thruster Optical Diagnostics and Modeling*, conference IEPC07, 17-20 septembre 2007, Florence (Italie).
- KAT07g** K. Katsonis, R.E.H. Clark, M. Cornille, Jun Yan, Ch. Berenguer, A. Ndiaye, *Application of Rare Gases Collisional-Radiative Models to Fusion Plasmas Optical Diagnostics and Modeling*, RCM Meeting, 26-28 septembre 2007, IAEA, Vienne (Autriche).
- KAT07h** K. Katsonis, R.E.H. Clark, M. Cornille, Jun Yan, Ch. Berenguer, A. Ndiaye, D. Humbert, *Atomic Data for Rare Gases Collisional-Radiative Models for Optical Diagnostics and Modeling of Fusion Plasmas*, DCN Meeting, 3-5 octobre 2007, IAEA, Vienne (Autriche).
- KAT08a** K. Katsonis, H.-P. Garnir, E. Biémont, Jun Yan, Ch. Berenguer, R.E.H. Clark, *Xe II to V Spectra in the Far UV Region*, SPPT23, 16-19 juin 2008, Prague (République Tchèque).

- KAT08b** K. Katsonis, Ch. Berenguer, R. Srivastava, L. Sharma, R.E.H. Clark, M. Cornille, A.D. Stauffer, *Ar I Transition Probabilities and Excitation Cross Sections Involving the 4s Metastable Levels and the 4/5p Configurations*, conférence EGAS40, 2-5 juillet 2008, Graz (Autriche).
- KAT08c** K. Katsonis, Ch. Berenguer, R. Srivastava, L. Sharma, R.E.H. Clark, A.D. Stauffer, *Excitation of the Xe I 6s Metastables to the 6p and 7p Configurations*, conférence EGAS40, 2-5 juillet 2008, Graz (Autriche).
- KAT08d** K. Katsonis, Ch. Berenguer, R.E.H. Clark, M. Cornille, Jun Yan, *Transition Probabilities in the Third Spectrum of Rare Gases Ar III and Xe III*, conference ICAMDATA 06, 28-31 octobre 2008, Pékin (Chine).
- KAT08e** K. Katsonis, Ch. Berenguer, M. Cornille, Jun Yan, *Xe Ions Data for Optical Plasma Diagnostics*, conference ICAMDATA 06, 28-31 octobre 2008, Pékin (Chine).
- KAT08f** K. Katsonis, Ch. Berenguer, R. Srivastava, L. Sharma, R.K. Gangwar, A.D. Stauffer, R.E.H. Clark, *Electron Collision Excitation of the Lower Ar I Levels*, conference ICAMDATA 06, 28-31 octobre 2008, Pékin (Chine).
- LIEN1** <http://www.eirene.de/>
- LIEN2** <http://aphysics2.lanl.gov/tempweb/>
- LIEN3** <http://www.am.qub.ac.uk/>
- LIEN4** <http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/>
- MAL00** C.M. Maloney, J.L. Peacher, K. Bartschat, D.H. Madison, *Excitation of Ar $3p^5 4s - 3p^5 4p$ Transitions by Electron Impact*, Phys. Rev. A **61**, 022701 (2000).
- MIT93** A.A. Mityureva, V.V. Smirnov, *Cross-Section Measurements for Stepwise Excitation of Inert-Gas Atoms from Metastable States by Electron Impact*, Opt. Spektrosk. **74**, 6 (1993).
- MIT94** A.A. Mityureva, V.V. Smirnov, *Excitation of Heavy Rare Gases to Metastable States by Electron Impact*, J. Phys. B **27**, 1869-1880 (1994).
- OTT03** M. Otte *et al.*, *Overview of Recent Results from WEGA Stellerator* pp. 1.211 in 31 EPS Conference on Plasma Phys. and Controlled Fusion, St Petersburg, 7-11 July 2003.
- PIE98** G.A. Piech, J.B. Boffard, M.F. Gehrke, L.W. Anderson, C.C. Lin, *Measurement of Cross Sections for Electron Excitation out of Metastable Levels of Argon*, Phys. Rev. Lett. **81**, 309 (1998).
- RAL08** Yu. Ralchenko, A.E. Kramida, J. Reader, and NIST ASD Team (2008), *NIST Atomic Spectra Database (version 3.1.5)*, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD (Etats Unis).
- SAL04** E.B. Saloman, *Energy Levels and Observed Spectral Lines of Xenon, Xe I through Xe LIV*, J. Phys. Chem. Ref. Data **33**, 765-921 (2004).
- SAS96** S. Sasaki, S. Takamura, S. Watanabe, S. Masuzaki, T. Kato, K. Kadota, *Helium I Line Intensity Ratios in a Plasma for the Diagnostics of Fusion Edge Plasmas*, Rev. Sci. Instrum. **67**, 10 (1996).
- SAT03** F Sattin, K Katsonis, *Electron Impact Ionization Close to the Threshold: Classical Calculations*, J. Phys. B **36**, L63-L68 (2003).

- SHA07** L. Sharma, R. Srivastava, A.D. Stauffer, *Excitation of $3p^5 5p$ Levels of Argon from the $3p^5 4s$ Metastable States*, Phys. Rev. A **76**, 024701 (2007).
- SIS05** A. Siskos, *Constantes Atomiques et Modèles Collisionnels-Radiatifs pour la Propulsion Ionique*, thèse, Université Paris-Sud, Orsay, France (2005).
- SOB72** I.I. Sobelman, *Introduction to the Theory of Atomic Spectra*, Pergamon Press, Oxford, UK (1972).
- SRI06** R. Srivastava, A.D. Stauffer, L. Sharma, *Excitation of the Metastable States of the Noble Gases*, Phys. Rev. A **74**, 012715 (2006).
- SRI08** R. Srivastava, L. Sharma, Ch. Berenguer, K. Katsonis, R.E.H. Clark, A.D. Stauffer, *Collisional Excitation of the First Two Ar I and Xe I Metastable Levels*, conference MPS08, 30 juin - 2 juillet 2008, Paris (France).
- THE57** M. Thekaekara, G.H. Dieke, *Emission Lines from Preionized Levels in Krypton and Xenon*, Phys. Rev. **109**, 2029 (1958).
- ZHA06** D. Zhang, M. Otte, L. Giannone, *Bolometer Results in the Long-Microwave-Heated WEGA Stellarator*, dans 'PLASMA 2005', M.J. Sadowski *et al.* Edts., AIP Conf. Proc. **812**, 187, NY 2006, Opole (Pologne).