



REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE



UNIVERSITE ABOU-BEKR BELKAID - TLEMCCEN

THÈSE

Présentée à :

FACULTE DES SCIENCES – DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

Pour l'obtention du diplôme de :

DOCTORAT LMD

Spécialité: *Physique des Gaz et des Plasmas*

Par :

Mlle BELABBAS Meryem

Sur le thème

Données collisionnelles pour le modèle PACR (population-alignment collisional-radiative) utilisé dans la spectroscopie des plasmas chauds anisotropes

Soutenue publiquement le 04 Juin 2022 à Tlemcen devant le jury composé de :

Mme BEDRANE Zeyneb	Professeur	Université de Tlemcen	Présidente
Mr INAL Mokhtar Kemal	Professeur	Université de Tlemcen	Directeur de thèse
Mme BETTADJ Latifa	MCA	Université de Tlemcen	Examinatrice
Mme RACHEDI Souad Wassila	MCA	Université de Tlemcen	Examinatrice
Mr SAHLAOUI Mohammed	Professeur	ESSA - Tlemcen	Examineur

*Laboratoire de Physique Théorique
BP 119, 13000 Tlemcen - Algérie*

Remerciements

Ces trois années ont été pour moi pleines de richesses scientifiques et humaines grâce notamment au Pr. Mokhtar Kemal INAL qui a été pour moi un directeur de thèse absolument parfait. Il a été présent pour me soutenir et m'aider.

J'adresse également mes plus vifs remerciements à Pr. BEDRANE Zeyneb, Professeur à l'Université de Tlemcen, pour m'avoir fait l'honneur de présider le Jury de ma thèse et pour l'intérêt qu'elle a porté à ce travail.

Je remercie Dr. BETTADJ Latifa, Maître de conférence A de Tlemcen, de m'avoir fait l'honneur et le plaisir d'examiner mon travail.

A Dr. RACHEDI Souad Wassila, Maître de conférence A à l'Université de Tlemcen qui a bien voulu faire partie du jury, qu'elle veuille bien accepter ici l'expression de ma sincère reconnaissance.

Mes plus sincères remerciements vont également à Pr. SAHLAOUI Mohammed Professeur à l'Ecole Supérieure des Sciences Appliquées (ESSA) de Tlemcen qui a bien voulu faire partie du jury et examiner mon manuscrit.

Je tiens à exprimer aussi mon respect et ma profonde gratitude à Pr. Mustapha BENMOUNA, Professeur émérite à l'Université de Tlemcen, pour son aide précieuse dans l'élaboration de l'article et les réponses apportées aux rapports des référées.

A ma mère, A mon père

Belabbas Meryem

Résumé

Une expression des composantes multipolaires de sections efficaces d'excitation d'ions par impact d'électrons directs a été établie pour la première fois dans le cadre de l'approche de l'onde distordue relativiste, en prenant en compte la cohérence entre les sous-niveaux magnétiques. Ces sections efficaces sont requises dans l'interprétation des raies émises à partir des plasmas chauds non-thermiques dont les électrons libres sont caractérisés par des distributions de vitesses ayant une symétrie cylindrique. Afin d'évaluer numériquement ces données collisionnelles, nous avons apporté des modifications au programme d'excitation entre sous-niveaux magnétiques de FAC (Flexible Atomic Code). Des calculs détaillés ont été effectués pour les transitions dans l'ion bérylliumoïde O^{4+} à partir des niveaux fondamentaux $2s^2\ ^1S_0$ et métastables $2s2p\ ^3P_{0,1,2}$. Une série de résultats pour les transitions à partir des niveaux $2s2p\ ^3P_{1,2}$ vers $2s3p\ ^3P_{1,2}$ et $2s3d\ ^3D_{2,3}$, qui présentent un grand intérêt pour les plasmas de l'atmosphère solaire et de tokamak, est présentée dans cette thèse afin d'illustrer l'application du programme modifié proposé ici. Une analyse approfondie des résultats numériques et une comparaison préliminaire avec les données disponibles dans la littérature ont fourni une cohérence systématique du programme modifié, ouvrant la voie au calcul d'une grande quantité de données de sections efficaces multipolaires avec un gain de temps considérable.

Mots clés: composantes multipolaires de sections efficaces ; ion bérylliumoïde O^{4+} ; onde distordue ; plasmas chauds anisotropes; distribution d'électrons axialement symétrique.

Abstract

An expression for the multipole components of cross sections for excitation of ions by impact with directive electrons has been derived for the first time within the framework of the relativistic distorted Wave approach, taking into account the coherence between the magnetic sublevels. These cross sections are needed in the interpretation of lines emitted from non-thermal hot plasmas whose free electrons are characterized by velocity distributions having cylindrical symmetry. In order to compute this collisional data, we introduced modifications in the magnetic-sublevel excitation program of the flexible atomic code (FAC). Detailed calculations were carried out for transitions in the beryllium-like ion O^{4+} from the ground $2s^2\ ^1S_0$ and metastable $2s2p\ ^3P_{0,1,2}$ levels. Various results for transitions from $2s2p\ ^3P_{1,2}$ to $2s3p\ ^3P_{1,2}$ and $2s3d\ ^3D_{2,3}$ levels, which have a great interest in the solar atmosphere and tokamak plasmas, are presented in this thesis to illustrate the application of the modified program proposed here. An indepth analysis of the numerical results and a preliminary comparison with the data available in the literature allowed a systematic consistency of the modified program, paving the way for the calculations of a large amount of multipole excitation cross-section data with a considerable saving of time.

Key words: multipole components of excitation cross sections; beryllium-like ion O^{4+} ; distorted-wave; anisotropic hot plasmas; cylindrical symmetric electron distribution.

Table des matières

Table des matières	i
Liste des figures	iii
Liste des tableaux	v
1 Introduction	1
2 Généralités sur les plasmas chauds	7
2.1 Introduction	8
2.2 Plasmas Astrophysiques et Plasmas de Laboratoire	8
2.3 Processus atomiques dans les plasmas chauds	9
2.4 Modèles d'équilibre	11
2.5 L'approximation Distorted Wave (DW) pour les collisions atomiques inélastiques	13
3 Spectroscopie de polarisation d'un plasma (PPS)	23
3.1 Introduction	24
3.2 Spectroscopie de polarisation d'un plasma (PPS)	24
3.3 Classification des phénomènes de PPS	25
3.4 Observations expérimentales	27
3.5 Modèle PACR (population-alignment collisional-radiative)	31
4 Composantes multipolaires des forces de collision électron-ion	41
4.1 Introduction	42
4.2 Composantes multipolaires de sections efficaces d'excitation d'ions par un faisceau d'électrons	43
4.3 Cas particulier d'électrons incidents isotropes	49
4.4 Expression factorisée des composantes multipolaires de sections efficaces d'excitation	50
4.5 Relation entre $\langle \sigma_q^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) \rangle$ pour une distribution arbitraire et $\sigma_q^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f)_{z\text{-beam}}$	59
4.6 Références	62
5 Application : Béryllium-like Oxygène O V	65
5.1 Introduction	66

5.2	Extension du programme d'excitation de FAC	66
5.3	Résultats numériques	69
5.4	Discussions	88
5.5	Comparaison avec les résultats de Iwamae <i>et al.</i>	91
6	Conclusion et perspectives	95

Liste des figures

5.1	Composantes multipolaires des sections efficaces $\sigma_q^{kk'}$ où $k = 0, 2$; $k' = 0, 2$ et $q = 0, 1$ et 2 en fonction de l'énergie de l'électron incident ε_i pour la transition $2s2p\ ^3P_1$ vers $2s3p\ ^3P_1$ (i.e., $2 \rightarrow 14$). Pour le panel (d), les courbes en trait plein, en pointillé et trait discontinu correspondent à σ_0^{22} , σ_1^{22} et σ_2^{22} , respectivement.	82
5.2	Composantes multipolaires des sections efficaces $\sigma_q^{kk'}$ où $k = 0, 2$; $k' = 0, 2$ et $q = 0, 1$ et 2 en fonction de l'énergie de l'électron incident ε_i pour la transition $2s2p\ ^3P_1$ vers $2s3p\ ^3P_2$ (i.e., $2 \rightarrow 15$). Pour le panel (d), les courbes en trait plein, en pointillé et trait discontinu correspondent à σ_0^{22} , σ_1^{22} et σ_2^{22} , respectivement.	82
5.3	Composantes multipolaires des sections efficaces $\sigma_q^{kk'}$ où $k = 0, 2$; $k' = 0, 2$ et $q = 0, 1$ et 2 en fonction de l'énergie de l'électron incident ε_i pour la transition $2s2p\ ^3P_1$ vers $2s3d\ ^3D_2$ (i.e., $2 \rightarrow 17$). Pour le panel (d), les courbes en trait plein, en pointillé et trait discontinu correspondent à σ_0^{22} , σ_1^{22} et σ_2^{22} , respectivement.	83
5.4	Composantes multipolaires des sections efficaces $\sigma_q^{kk'}$ où $k = 0, 2$; $k' = 0, 2$ et $q = 0, 1$ et 2 en fonction de l'énergie de l'électron incident ε_i pour la transition $2s2p\ ^3P_2$ vers $2s3p\ ^3P_1$ (i.e., $3 \rightarrow 14$). Pour le panel (d), les courbes en trait plein, en pointillé et trait discontinu correspondent à σ_0^{22} , σ_1^{22} et σ_2^{22} , respectivement.	83
5.5	Composantes multipolaires des sections efficaces $\sigma_q^{kk'}$ où $k = 0, 2$; $k' = 0, 2$ et $q = 0, 1$ et 2 en fonction de l'énergie de l'électron incident ε_i pour la transition $2s2p\ ^3P_2$ vers $2s3p\ ^3P_2$ (i.e., $3 \rightarrow 15$). Pour le panel (d), les courbes en trait plein, en pointillé et trait discontinu correspondent à σ_0^{22} , σ_1^{22} et σ_2^{22} , respectivement.	84
5.6	Composantes multipolaires des sections efficaces $\sigma_q^{kk'}$ où $k = 0, 2$; $k' = 0, 2$ et $q = 0, 1$ et 2 en fonction de l'énergie de l'électron incident ε_i pour la transition $2s2p\ ^3P_2$ vers $2s3d\ ^3D_3$ (i.e., $3 \rightarrow 18$). Pour le panel (d), les courbes en trait plein, en pointillé et trait discontinu correspondent à σ_0^{22} , σ_1^{22} et σ_2^{22} , respectivement.	84
5.7	Composantes multipolaires des sections efficaces $\sigma_q^{kk'}$ où $k = 0, 2$; $k' = 4$ et $q = 0, 1$ et 2 en fonction de l'énergie de l'électron incident ε_i pour la transition $2s2p\ ^3P_1$ vers $2s3p\ ^3P_2$ (i.e., $2 \rightarrow 15$). Pour le panel (b), les courbes en trait plein, en pointillé et trait discontinu correspondent à σ_0^{24} , σ_1^{24} et σ_2^{24} , respectivement.	85

5.8	Composantes multipolaires des sections efficaces $\sigma_q^{kk'}$ où $k = 0, 2$; $k' = 4$ et $q = 0, 1$ et 2 en fonction de l'énergie de l'électron incident ε_i pour la transition $2s2p\ ^3P_1$ vers $2s3d\ ^3D_2$ (i.e., $2 \rightarrow 17$). Pour le panel (b), les courbes en trait plein, en pointillé et trait discontinu correspondent à σ_0^{24} , σ_1^{24} et σ_2^{24} , respectivement.	85
5.9	Composantes multipolaires des sections efficaces $\sigma_q^{kk'}$ où $k = 0, 2$; $k' = 4$ et $q = 0, 1$ et 2 en fonction de l'énergie de l'électron incident ε_i pour la transition $2s2p\ ^3P_2$ vers $2s3d\ ^3D_3$ (i.e., $3 \rightarrow 18$). Pour le panel (b), les courbes en trait plein, en pointillé et trait discontinu correspondent à σ_0^{24} , σ_1^{24} et σ_2^{24} , respectivement.	85
5.10	Composantes multipolaires des sections efficaces $\sigma_q^{kk'}$ où $k = 4$; $k' = 0, 2$ et $q = 0, 1$ et 2 en fonction de l'énergie de l'électron incident ε_i pour la transition $2s2p\ ^3P_2$ vers $2s3p\ ^3P_1$ (i.e., $3 \rightarrow 14$). Pour le panel (b), les courbes en trait plein, en pointillé et trait discontinu correspondent à σ_0^{42} , σ_1^{42} et σ_2^{42} , respectivement.	86
5.11	Composantes multipolaires des sections efficaces $\sigma_q^{kk'}$ où $k = 4$; $k' = 0, 2$ et $q = 0, 1$ et 2 en fonction de l'énergie de l'électron incident ε_i pour la transition $2s2p\ ^3P_2$ vers $2s3p\ ^3P_2$ (i.e., $3 \rightarrow 15$). Pour le panel (b), les courbes en trait plein, en pointillé et trait discontinu correspondent à σ_0^{42} , σ_1^{42} et σ_2^{42} , respectivement.	86
5.12	Composantes multipolaires des sections efficaces $\sigma_q^{kk'}$ où $k = 4$; $k' = 0, 2$ et $q = 0, 1$ et 2 en fonction de l'énergie de l'électron incident ε_i pour la transition $2s2p\ ^3P_2$ vers $2s3d\ ^3D_3$ (i.e., $3 \rightarrow 18$). Pour le panel (b), les courbes en trait plein, en pointillé et trait discontinu correspondent à σ_0^{42} , σ_1^{42} et σ_2^{42} , respectivement.	86
5.13	Composantes multipolaires des sections efficaces $\sigma_q^{kk'}$ où $k = 4$; $k' = 4$ et $q = 0, 1, 2, 3$ et 4 en fonction de l'énergie de l'électron incident ε_i pour la transition $2s2p\ ^3P_2$ vers $2s3p\ ^3P_2$ (i.e., $3 \rightarrow 15$, panel (a)) et vers $2s3d\ ^3D_3$ (i.e., $3 \rightarrow 18$, panel (b)). Courbes en trait plein, en pointillé, en trait discontinu, en point-discontinu et double-points-discontinu correspondent à σ_0^{44} , σ_1^{44} , σ_2^{44} , σ_3^{44} et σ_4^{44} , respectivement.	87
5.14	Composantes multipolaires des sections efficaces $\sigma_q^{kk'}$ où $k = 0, 2$ et 4; $k' = 6$ et $q = 0, 1, 2, 3$ et 4 en fonction de l'énergie de l'électron incident ε_i pour la transition $2s2p\ ^3P_2$ vers $2s3d\ ^3D_3$ (i.e., $3 \rightarrow 18$). Pour les panels (b) et (c), les courbes en trait plein, en pointillé, en trait discontinu, en point-discontinu et double-points-discontinu correspondent à $\sigma_0^{kk'}$, $\sigma_1^{kk'}$, $\sigma_2^{kk'}$, $\sigma_3^{kk'}$ et $\sigma_4^{kk'}$ où $k = 2, 4$; $k' = 6$, respectivement.	87
5.15	Comparaison des composantes multipolaires des sections efficaces (a) Q_0^{20} , (b) Q_0^{02} et (c) Q_0^{22} pour l'excitation $2s2p\ ^3P_2 \rightarrow 2s3p\ ^3P_2$ dans O^4+ entre nos présents résultats (lignes pointillées) et ceux de Réf. [13] (traits pleins). Les Q sont en unités de 10^{-20} cm ² et ε_i en unité d'eV.	92

Liste des tableaux

5.1	Légende courte pour l'exemple de tableau	72
5.2	Composantes multipolaires des sections efficaces σ_0^{00} (10^{-20} cm ²) pour les transitions $2s2p^3P_J$ où $J = 0, 1$ et 2 vers $2s3p^3P_{J'}$ où $J' = 0, 1$ et 2 et vers $2s3d^3D_{J'}$ où $J' = 1, 2$ à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV).	72
5.3	Composantes multipolaires des sections efficaces σ_0^{02} (10^{-20} cm ²) pour les transitions $2s2p^3P_0$ vers $2s3p^3P_{J'}$ où $J' = 1$ et 2 (i.e., $1 \rightarrow 14$ et $1 \rightarrow 15$) et vers $2s3d^3D_{J'}$ où $J' = 1, 2$ et 3 (i.e., $1 \rightarrow 16, 1 \rightarrow 17$ et $1 \rightarrow 18$) à des énergies incidentes proches du seuil d'excitation ϵ_i (65, 70 et 80 eV).	73
5.4	Composantes multipolaires des sections efficaces σ_0^{02} (10^{-20} cm ²) pour les transitions $2s2p^3P_J$ où $J = 1, 2$ vers $2s3p^3P_{J'}$ où $J' = 1, 2$ et vers $2s3d^3D_{J'}$ où $J' = 1, 2$ à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV).	73
5.5	Composantes multipolaires des sections efficaces σ_0^{04} (10^{-20} cm ²) pour les transitions $2s2p^3P_J$ où $J = 0, 1$ et 2 vers $2s3p^3P_2$ et vers $2s3d^3D_2$ à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV).	73
5.6	Composantes multipolaires des sections efficaces σ_0^{20} (10^{-20} cm ²) pour les transitions $2s2p^3P_J$ où $J = 1, 2$ vers $2s3p^3P_{J'}$ où $J' = 0, 1$ et 2 et vers $2s3d^3D_{J'}$ où $J' = 1$ et 2 à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV).	73
5.7	Composantes multipolaires des sections efficaces σ_0^{40} (10^{-20} cm ²) pour les transitions $2s2p^3P_2$ vers $2s3p^3P_{J'}$ où $J' = 0, 1$ et 2 et vers $2s3d^3D_{J'}$ où $J' = 1, 2$ à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV).	74
5.8	Composantes multipolaires des sections efficaces σ_q^{22} (10^{-20} cm ²) et ses différents K -termes σ_q^{22K} (10^{-20} cm ²) où $q = 0, 1$ et 2 pour la transition $2s2p^3P_1$ vers $2s3p^3P_1$ (i.e., $2 \rightarrow 14$) à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV).	74
5.9	Composantes multipolaires des sections efficaces σ_q^{22} (10^{-20} cm ²) et ses différents K -termes σ_q^{22K} (10^{-20} cm ²) où $q = 0, 1$ et 2 pour la transition $2s2p^3P_1$ vers $2s3p^3P_2$ (i.e., $2 \rightarrow 15$) à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV).	75
5.10	Composantes multipolaires des sections efficaces σ_q^{22} (10^{-20} cm ²) et ses différents K -termes σ_q^{22K} (10^{-20} cm ²) où $q = 0, 1$ et 2 pour la transition $2s2p^3P_1$ vers $2s3d^3D_2$ (i.e., $2 \rightarrow 17$) à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV).	75

- 5.11 Composantes multipolaires des sections efficaces σ_q^{24} (10^{-20} cm²) et ses différents K -termes σ_q^{24K} (10^{-20} cm²) où $q = 0, 1$ et 2 pour la transition $2s2p^3P_1$ vers $2s3p^3P_2$ (i.e., $2 \rightarrow 15$) à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV). . . 76
- 5.12 Composantes multipolaires des sections efficaces σ_q^{24} (10^{-20} cm²) et ses différents K -termes σ_q^{24K} (10^{-20} cm²) où $q = 0, 1$ et 2 pour la transition $2s2p^3P_1$ vers $2s3d^3D_2$ (i.e., $2 \rightarrow 17$) à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV). 76
- 5.13 Composantes multipolaires des sections efficaces σ_q^{22} (10^{-20} cm²) et ses différents K -termes σ_q^{22K} (10^{-20} cm²) où $q = 0, 1$ et 2 pour la transition $2s2p^3P_2$ vers $2s3p^3P_1$ (i.e., $3 \rightarrow 14$) à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV). . . 77
- 5.14 Composantes multipolaires des sections efficaces σ_q^{22} (10^{-20} cm²) et ses différents K -termes σ_q^{22K} (10^{-20} cm²) où $q = 0, 1$ et 2 pour la transition $2s2p^3P_2$ vers $2s3p^3P_2$ (i.e., $3 \rightarrow 15$) à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV). . . 77
- 5.15 Composantes multipolaires des sections efficaces σ_q^{42} (10^{-20} cm²) et ses différents K -termes σ_q^{42K} (10^{-20} cm²) où $q = 0, 1$ et 2 pour la transition $2s2p^3P_2$ vers $2s3p^3P_1$ (i.e., $3 \rightarrow 14$) à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV). . . 78
- 5.16 Composantes multipolaires des sections efficaces σ_q^{42} (10^{-20} cm²) et ses différents K -termes σ_q^{42K} (10^{-20} cm²) où $q = 0, 1$ et 2 pour la transition $2s2p^3P_2$ vers $2s3p^3P_2$ (i.e., $3 \rightarrow 15$) à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV). . . 78
- 5.17 Composantes multipolaires des sections efficaces σ_q^{22} (10^{-20} cm²) et ses différents K -termes σ_q^{22K} (10^{-20} cm²) où $q = 0, 1$ et 2 pour la transition $2s2p^3P_2$ vers $2s3d^3D_2$ (i.e., $3 \rightarrow 17$) à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV). 79
- 5.18 Composantes multipolaires des sections efficaces σ_q^{24} (10^{-20} cm²) et ses différents K -termes σ_q^{24K} (10^{-20} cm²) où $q = 0, 1$ et 2 pour la transition $2s2p^3P_2$ vers $2s3p^3P_2$ (i.e., $3 \rightarrow 15$) à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV). . . 79
- 5.19 Composantes multipolaires des sections efficaces σ_q^{24} (10^{-20} cm²) et ses différents K -termes σ_q^{24K} (10^{-20} cm²) où $q = 0, 1$ et 2 pour la transition $2s2p^3P_2$ vers $2s3d^3D_2$ (i.e., $3 \rightarrow 17$) à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV). 80
- 5.20 Composantes multipolaires des sections efficaces σ_q^{42} (10^{-20} cm²) et ses différents K -termes σ_q^{42K} (10^{-20} cm²) où $q = 0, 1$ et 2 pour la transition $2s2p^3P_2$ vers $2s3d^3D_2$ (i.e., $3 \rightarrow 17$) à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV). 80
- 5.21 Composantes multipolaires des sections efficaces σ_q^{44} (10^{-20} cm²) et ses différents K -termes σ_q^{44K} (10^{-20} cm²) où $q = 0, 1, 2, 3$ et 4 pour la transition $2s2p^3P_2$ vers $2s3p^3P_2$ (i.e., $3 \rightarrow 15$) à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV). 81
- 5.22 Composantes multipolaires des sections efficaces σ_q^{44} (10^{-20} cm²) et ses différents K -termes σ_q^{44K} (10^{-20} cm²) où $q = 0, 1, 2, 3$ et 4 pour la transition $2s2p^3P_2$ vers $2s3d^3D_2$ (i.e., $3 \rightarrow 17$) à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV). 81

Chapitre 1

Introduction

La spectroscopie de polarisation d'un plasma (PPS) est une technique puissante de diagnostic des plasmas chauds anisotropes, elle a été développée au cours de ces dernières décennies. De nouvelles approches théoriques ont été élaborées et de nouvelles données expérimentales ont été obtenues. Ces dernières ont été effectuées pour pouvoir réaliser des études théoriques concernant les phénomènes de polarisation [1,2]. Les bases théoriques de PPS et les applications de ses principes sont décrites dans les livres [3-6].

Dans ce qui suit, nous donnons un bref aperçu de l'histoire du développement de PPS qui est résumé par Fujimoto [6,7].

Le terme spectroscopie de polarisation d'un plasma (PPS) a été introduit pour la première fois par Kazantsev *et al.* [8]. L'atmosphère solaire est une cible importante du PPS, les atomes de la proéminence solaire sont illuminés par la lumière du disque solaire et la photoexcitation est anisotrope. L'alignement ainsi produit est perturbé par le champ magnétique qui y est présent. A partir de la direction et de l'ampleur de la polarisation observée d'une raie d'émission d'hélium, par exemple, la direction et la force du champ magnétique ont été déduites [9,10].

Les éruptions solaires, dans lesquelles une excitation anisotrope des ions par des électrons à mouvement directionnel produiraient un alignement, faisaient également l'objet d'une observation PPS [11]. En laboratoire, les étincelles sous vide et les foyers de plasma étaient également à l'origine des observations de PPS. La polarisation a été trouvée sur des raies semblables à l'hélium dans le domaine des rayons X [12]. La difficulté liée à la géométrie d'observation, l'interprétation est parfois compliquée et les efforts pour améliorer l'instrumentation se poursuivent [13]. Le z-pinch et le soi-disant X-pinch font l'objet d'une enquête approfondie [13,14].

La première observation de PPS sur un plasma produit par laser a été faite par Kieffer *et al.* [15,16] sur des raies de l'ion aluminium héliumoïde Al^{11+} . La polarisation de ces raies a été interprétée comme étant due à une distribution de vitesses anisotrope des électrons dans un plasma chaud. Une autre observation a été réalisée par Yoneda *et al.* [12,17] sur des raies d'émission de l'ion fluor héliumoïde.

Les plasmas confinés magnétiquement, y compris les plasmas de tokamak, ont été également la cible des observations PPS. La MSE (effet Stark de mouvement) est maintenant une technique standard pour déterminer la direction du champ magnétique local, et donc déterminer la distribution de courant dans le plasma [18,19]. L'effet Zeeman est également utilisé pour le diagnostic d'un plasma [20]. L'observation résolue de la polarisation du profil de Zeeman de la raie Balmer a été jugée très utile [21].

Fujimoto *et al.* [23] ont d'abord signalé l'observation de la polarisation sur des raies d'émission d'ions carbone et oxygène provenant d'un plasma de tokamak. Ils ont utilisé une plaque de calcite incorporée dans le spectromètre en tant qu'élément de résolution de polarisation. Les distributions anisotropes de la vitesse des électrons ont été suggérées comme étant à l'origine des polarisations observées.

Alors, en utilisant la spectroscopie de polarisation de plasma (PPS), on peut étudier les caractéristiques d'anisotropie des plasmas non thermiques astrophysiques et de laboratoire [24]. La polarisation et la distribution angulaire du rayonnement linéaire émis par des ions chargés dans de tels plasmas fournit un outil de diagnostic important afin de déduire la distribution de vitesses anisotrope des électrons libres. Pour l'interprétation de raies d'émission à partir de plasmas, il faut connaître les sections efficaces pour la création, la destruction et le transfert d'alignement entre différents niveaux de structure fine d'ions excités par un faisceau monoénergétique d'électrons. Ces sections efficaces multipolaires, notées $\sigma_q^{kk'}$ avec $0 \leq k \leq 2J_i$, $0 \leq k' \leq 2J_f$, et $-\min(k, k') \leq q \leq +\min(k, k')$, où J_i et J_f sont les moments cinétiques totaux des niveaux initial et final de la transition, sont nécessaires dans le calcul des coefficients de taux multipolaires moyennés sur une distribution d'électrons avec une symétrie cylindrique arbitraire.

Dans cette thèse intitulée "Données collisionnelles pour le modèle PACR (population-alignment collisional-radiative) utilisé dans la spectroscopie des plasmas chauds anisotropes", nous dérivons une expression inédite des composantes multipolaires de sections efficaces d'excitation d'ions par impact d'électrons en fonction des éléments de matrice de transition dans l'approximation distorted-wave relativiste (RDW) basée sur la méthode de factorisation. Puis, nous avons procédé aux calculs numériques de ces sections efficaces en introduisant des modifications appropriées dans le programme RDW du code atomique flexible (FAC) [25] pour toutes les valeurs possibles de q .

Le travail développé dans cette thèse a été réparti selon le plan suivant : le chapitre 2 présente des généralités sur les plasmas chauds (plasmas astrophysiques et de laboratoire). Dans une première étape, nous donnons une définition générale des plasmas chauds, après nous rappelons les différents processus atomiques élémentaires intervenant dans ce type de plasmas parmi lesquels nous exposons excitation collisionnelle, la photoionisation et la recombinaison radiative, l'autoionisation et la recombinaison diélectronique et enfin l'ionisation par impact d'électrons. Ensuite, nous décrivons brièvement les modèles d'équilibre pour traiter et calculer les populations des états excités

des ions fortement chargés. Puis nous implémentons le calcul des sections efficaces d'excitation par des électrons directifs dans le cadre de la méthode d'approximation Distorted Wave (DW) utilisée par le code FAC.

Dans le chapitre 3, nous présentons une définition de la spectroscopie de polarisation de plasmas (PPS) et nous citons les trois classes de PPS. Après avoir exposé des exemples expérimentaux de PPS, nous décrivons de manière détaillée le modèle théorique population-alignement collisionnel-radiative (PACR) qui est applicable dans notre étude.

Le chapitre 4 est consacré à la théorie développée au cours de notre travail de thèse pour calculer les composantes multipolaires de sections efficaces en utilisant la méthode de factorisation implémentée dans le code FAC.

Nous rapportons dans le chapitre 5 nos résultats numériques et nous les discutons de manière approfondie. Nous présentons d'abord notre application concernant les calculs de l'ion O^{4+} (ion oxygène de la série isoélectronique du béryllium) et nous décrivons le package de FAC qui est nécessaire pour cette application. Par la suite, nous montrons les composantes multipolaires de sections efficaces pour différentes transitions et nous comparons nos résultats avec ceux de la littérature scientifique. Finalement, les conclusions et les perspectives de notre travail sont présentés dans le dernier chapitre.

Références

- [1] T. Kawachi, “*Plasma spectroscopy of highly charged ions by the method of collisional-radiative model*”, Thèse de doctorat, Université Kyoto (1995).
- [2] S. A. Kazantsev and A. G. Petrashen in *Proceedings of the 3rd US-Japan Workshop on Plasma Polarization Spectroscopy*, edited by T. Fujimoto and P. Beiersdorfer, UCRL-ID-146907 (2001) p. 30.
- [3] K. Blum, *Density Matrix Theory and Applications* (Plenum, New York, 1981).
- [4] S. A. Kazantsev and J.-C. Héroux, *Polarization Spectroscopy of Ionized Gases*, Kluwer Academic Publishers (Dordrecht, London, Boston, 1995).
- [5] S. A. Kazantsev, A. G. Petrashen, and N. M. Firstova, *Impact Spectropolarimetric Sensing* (Kluwer Academic/Plenum, New York, 1999).
- [6] T. Fujimoto, *Plasma Polarization Spectroscopy*, edited by T. Fujimoto and A. Iwamae, Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics (Springer, Berlin, 2008).
- [7] T. Fujimoto, in *Proceedings of the 3rd US-Japan Workshop on Plasma Polarization Spectroscopy*, edited by T. Fujimoto and P. Beiersdorfer, UCRL-ID-146907 (2001) p. 21.
- [8] S. A. Kazantsev, L. Ya. Margolin, N. Ya. Polynovskaya, L. N. Pyatnitskii, A. G. Rys, and S. A. Edelman, *Opt. Spectrosc.* **55**, 326 (1983).
- [9] S. Sahal-Bréchet, V. Bommier, and J. L. Leroy, *Astron. Astrophys.* **59**, 223 (1977).
- [10] V. Bommier, J. L. Leroy, and S. Sahal-Bréchet, *Astron. Astrophys.* **100**, 231 (1981).
- [11] J. C. Héroux and G. Chambe, *J. Quant. Spectrosc. Radiative Transfer* **44**, 193 (1990).
- [12] F. Walden, H.-J. Kunze, A. Petoyan, A. Urnov, and J. Dubau, *Phys. Rev. E* **59**, 3562 (1999).
- [13] E. O. Baronova, M. M. Stepanenko, L. Jakubowski, and H. Tsunemi, *J. Plasma and Fusion Res.* **78**, 731 (2002) (in Japanese).
- [14] L. Jakubowski, M. J. Sadowski, and E. O. Baronova, NIFS-PROC-57 (2004) p. 21.
- [15] J. C. Kieffer, J. P. Matte, H. Pépin, M. Chaker, Y. Beaudoin, T. W. Johnston, C. Y. Chien, S. Coe, G. Mourou, and J. Dubau, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 480 (1992).

- [16] J. C. Kieffer, J. P. Matte, M. Chaker, Y. Beaudoin, C. Y. Chien, S. Coe, G. Mourou, J. Dubau, and M. K. Inal, *Phys. Rev. E* **48**, 4648 (1993).
- [17] H. Yoneda, N. Hasegawa, S. Kawana, and K. Ueda, *Phys. Rev. E* **56**, 988 (1997).
- [18] K. Kawakami and T. Fujimoto, UCRL-ID-146907 (2001) p. 18.
- [19] F. M. Levinton, R. J. Fonck, G. M. Gammel, R. Kaita, H. W. Kugel, E. T. Powell, and D. W. Roberts, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 2060 (1989).
- [20] D. J. Den Hartog *et al.*, UCRL-ID-146907 (2001) p. 205.
- [21] M. Goto and S. Morita, *Phys. Rev. E* **65**, 026401 (2002).
- [22] A. Iwamae, M. Hayakawa, M. Atake, and T. Fujimoto, *Phys. Plasmas* **12**, 042501 (2005).
- [23] T. Fujimoto, H. Sahara, T. Kawachi, T. Kallstenius, M. Goto, H. Kawase, T. Furukubo, T. Maekawa, and Y. Terumichi, *Phys. Rev. E* **54**, R2240 (1996).
- [24] T. Fujimoto and S. A. Kazantsev, *Plasma Phys. Control. Fusion* **39**, 1267 (1997).
- [25] M. F. Gu, *Can. J. Phys.* **86**, 675 (2008).

Chapitre 2

Généralités sur les plasmas chauds

Sommaire

2.1	Introduction	8
2.2	Plasmas Astrophysiques et Plasmas de Laboratoire	8
2.2.1	Plasmas Astrophysiques	8
2.2.2	Plasmas de Laboratoire	8
2.3	Processus atomiques dans les plasmas chauds	9
2.3.1	Transition radiative – photo-excitation	9
2.3.2	Excitation par impact d'électrons	9
2.3.3	Photoionisation et recombinaison radiative	9
2.3.4	Autoionisation et recombinaison diélectronique	10
2.3.5	Ionisation par impact d'électrons	10
2.4	Modèles d'équilibre	11
2.4.1	Modèle d'équilibre thermodynamique local (ETL)	11
2.4.2	Modèle coronal	12
2.4.3	Modèle collisionnel-radiatif	13
2.5	L'approximation Distorted Wave (DW) pour les collisions atomiques inélastiques	13
2.5.1	Force de collision factorisée	13
2.5.2	Solution de l'équation de Dirac pour le continu	15
2.5.3	Évaluation des intégrales radiales	16
2.5.4	Approximation quasi-relativiste	17
2.5.5	Sommation d'ondes partielles	18

2.1 Introduction

L'étude précise des processus atomiques a une importance dans la modélisation des plasmas chauds et l'interprétation des radiations émises par ces plasmas [1-3]. Parmi ces processus, on trouve l'excitation par impact d'électrons, l'ionisation par impact d'électrons, la recombinaison radiative et la photoionisation. Dans ce qui suit, nous allons donner un bref aperçu sur ces processus.

Pour effectuer ces études et déduire les propriétés de tels plasmas, il existe trois modèles approximatifs qui sont dépendants de la température et de la densité du plasma : le modèle d'équilibre thermodynamique local (ETL) valable aux hautes densités, le modèle coronal (CM) qui s'applique dans la limite des basses densités et le modèle collisionnel-radiatif (CR) aux densités intermédiaires.

Dans ce chapitre, nous donnons une définition des plasmas chauds (plasmas astrophysiques et plasmas de laboratoire), après nous présentons les différents processus atomiques qui interviennent dans les plasmas chauds, par la suite nous expliquons brièvement les modèles d'équilibre dans ce type de plasmas (ETL, CM et CR). Après nous implémentons le calcul des sections efficaces d'excitation par des électrons directs dans le cadre de la méthode d'approximation de l'onde distordue (DW) utilisée par le code FAC.

2.2 Plasmas Astrophysiques et Plasmas de Laboratoire

2.2.1 Plasmas Astrophysiques

Les plasmas astrophysiques représentent 99% de la matière observée dans l'univers : les planètes, la matière des étoiles, des nébuleuses et du milieu interstellaire qui comprend des galaxies observables, le vent solaire et les aurores boréales. Les objets astrophysiques correspondent à plusieurs régimes de température d'électrons T_e et de densité n_e , par exemple la température au centre du soleil (le cœur) est à peu près 15×10^6 K, celle à la surface du soleil avoisine 15000 K et la température de la couronne solaire s'élève à (1 – 2) millions K [4,5].

2.2.2 Plasmas de Laboratoire

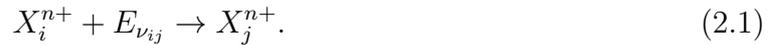
La création des conditions simulant celles des sources astrophysiques, nous ramène à étudier les processus physiques mis en jeu et à mesurer les grandeurs physiques de base

qui nous aide dans la modélisation et la simulation numérique des plasmas chauds. Les sources des plasmas chauds de laboratoire concernent la fusion thermonucléaire contrôlée pour laquelle il existe deux types de dispositif. L'un de ces dispositifs est le réacteur à plasma à confinement magnétique, appelé tokamak, et l'autre est le dispositif de fusion à confinement inertiel (ICF) (tels que les plasmas produits par laser de haute puissance) [5].

2.3 Processus atomiques dans les plasmas chauds

2.3.1 Transition radiative – photo-excitation

Un ion X de charge positive ($n+$) peut être excité radiativement d'un état initial i à un autre état j par absorption d'un photon incident d'énergie $E_{\nu_{ij}} = h\nu_{ij}$:

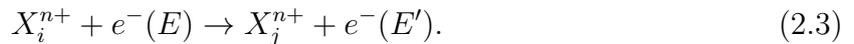


L'état fondamental a une durée de vie infinie mais les états excités ont une durée de vie finie. L'émission d'un photon montre la décroissance radiative spontanée qui peut avoir lieu avec l'émission de plusieurs photons jusqu'à atteindre l'état fondamental



2.3.2 Excitation par impact d'électrons

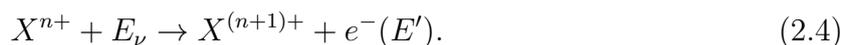
Lors d'une collision entre un ion positif (X^{n+}) et un électron d'énergie E ($e^-(E)$), l'ion cible peut être excité d'un état initial i vers un état final j selon :



L'ion excité X_j^{n+} dans l'état j se désexcite par la suite par émission d'un photon ν vers un niveau inférieur.

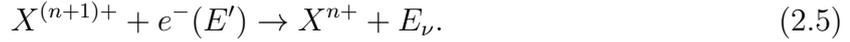
2.3.3 Photoionisation et recombinaison radiative

La photoionisation est aussi appelée l'ionisation radiative. Soit un ion cible X^{n+} où un électron lié à cet ion a une énergie de liaison E exposé à un flux incident de photons d'énergie $E_\nu = h\nu$. Si E_ν est supérieur à l'énergie de liaison E , l'électron lié peut être éjecté en laissant un ion positif de charge plus élevée $X^{(n+1)+}$, ce processus étant appelé la photoionisation :



L'électron libre $e^-(E')$ souvent appelé photoélectron possède une énergie cinétique E' égale à la différence entre l'énergie des photons incidents E_ν et l'énergie de liaison E (qui représente le potentiel d'ionisation).

La recombinaison radiative (RR) représente le processus inverse de la photoionisation, c'est à dire ce processus consiste en la capture d'un électron libre d'énergie E' ($e^-(E')$) par un ion $X^{(n+1)+}$ suivie de l'émission d'un photon d'énergie $E_\nu = h\nu$:

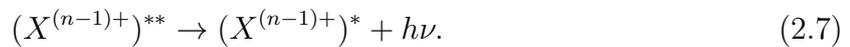


2.3.4 Autoionisation et recombinaison diélectronique

La recombinaison diélectronique est un processus de recombinaison électron-ion qui s'effectue en deux étapes. La première étape de ce processus est la capture diélectronique (aussi appelée capture non-radiative) correspondant au processus inverse de l'autoionisation. Un électron libre entre en collision avec un ion X^{n+} avec une énergie cinétique juste en dessous du seuil d'excitation d'une transition de résonance et forme un état doublement excité $(X^{(n-1)+})^{**}$, situé au-dessus de la première limite d'ionisation de l'ion $X^{(n-1)+}$:



Une fois cet état doublement excité formé, il existe deux voies de relaxation : soit l'autoionisation soit le déclin radiatif spontané vers un état simplement excité (un état situé au-dessous de la première limite d'ionisation de l'ion $X^{(n-1)+}$). C'est cette deuxième voie, appelée stabilisation radiative, qui constitue la seconde étape de la recombinaison diélectronique (DR) :

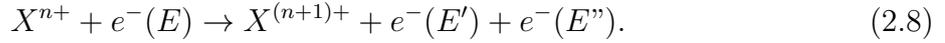


Notons que la recombinaison diélectronique n'est efficace que pour les ions fortement chargés. Notons aussi que si la voie d'autoionisation débouche sur un niveau de l'ion X^{n+} autre que le niveau initial, cela donne naissance à une excitation ou désexcitation collisionnelle résonnante.

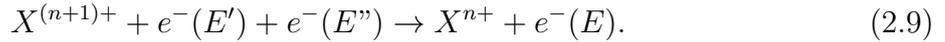
2.3.5 Ionisation par impact d'électrons

L'ionisation par impact d'électrons (EII) peut se produire par collision d'un électron libre e^- d'énergie cinétique E avec un ion X^{n+} , produisant un autre ion avec une charge

plus élevée $X^{(n+1)+}$ et l'extraction d'un électron lié d'énergie cinétique E'' , l'électron diffusé ayant l'énergie E' :



L'ionisation par impact électronique (EII) est un processus à trois corps et l'inverse de ce processus est la recombinaison simultanée de deux électrons libres et d'un ion, appelé recombinaison à trois corps :



2.4 Modèles d'équilibre

2.4.1 Modèle d'équilibre thermodynamique local (ETL)

L'équilibre thermodynamique complet n'est jamais atteint dans les plasmas de laboratoire. Cependant, il existe à l'intérieur des étoiles comme le soleil. Le rayonnement s'échappe généralement facilement des plasmas, conduisant ainsi à des champs de rayonnement à l'intérieur du plasma en dessous de la densité d'énergie de Planck radiante [6]. Néanmoins, à des densités de plasmas élevées, les collisions seront tellement fréquentes qu'elles maintiendront des densités de population à l'état stationnaire selon la relation de Boltzmann et la distribution des états d'ionisation donnée par l'équation de Saha [6,7]. La détermination des populations des niveaux atomiques d'un ion est effectuée par l'application de l'équation de Boltzmann :

$$\frac{N_i}{N_f} = \frac{g_i}{g_f} \exp\left(-\frac{E_i - E_f}{kT_e}\right). \quad (2.10)$$

où N_i est la population du niveau i , N_f est la population du niveau f et (g_i, g_f) sont les poids statistiques des niveaux i et f respectivement, k est la constante de Boltzmann, E_i et E_j sont les énergies des niveaux et T_e est la température électronique.

Ces conditions représentent un concept puissant appelé équilibre thermodynamique local (LTE). Les plasmas en LTE sont parfois synonymes de collision dominée car lorsque la densité électronique devient très élevée, les taux d'excitation collisionnelle des niveaux atomiques sont régis par le principe du bilan détaillé et le phénomène d'émission spontanée est presque absent [8].

Nous soulignons que pour une température donnée lorsque la densité augmente, le modèle collisionnel-radiatif converge vers le régime LTE et lorsque la densité diminue, il converge vers le régime coronal [9].

2.4.2 Modèle coronal

Le régime coronal a été appliqué à l'origine à la couronne solaire qui représente un plasma chaud de basse densité. L'hypothèse de base est qu'à des densités d'électrons très faibles, les processus collisionnels sont devenus très faibles par rapport aux processus radiatifs donc en conséquence, le dépeuplement des niveaux excités se fait uniquement par désexcitation radiative spontanée (les collisions sont dominées par les processus radiatifs) et leur peuplement est assuré par collisions d'électrons soit directement soit via les cascades radiatives. En régime permanent, la densité de population de tous les niveaux excités est très faible par rapport à celle de l'état fondamental, peut-être à l'exception des niveaux métastables. Dans ce régime, on suppose donc que tous les ions d'un état d'ionisation sont dans le niveau fondamental et que la population des niveaux supérieurs se fait uniquement par collisions d'électrons à partir de l'état fondamental.

Contrairement à ETL, la densité d'électrons et les taux d'excitation doivent être connus, et la dépendance en température se fait maintenant via le coefficient de taux d'excitation. Cette définition originale stricte de l'équilibre d'excitation coronale est habituellement assouplie sous deux aspects. Tout d'abord, les transitions radiatives en cascade à partir des niveaux supérieurs après excitation de l'état fondamental sont considérées et incluses dans des coefficients de taux effectifs d'excitation [6]. Selon Fujimoto [10], la contribution en cascade est d'environ 20% et elle est presque indépendante du nombre quantique principal.

La constante de temps pour atteindre l'état stationnaire par rapport à l'état fondamental est naturellement la durée de vie radiative du niveau supérieur. Etant donné que le régime coronal ne peut jamais être satisfait pour des niveaux très élevés, McWhirter [11] a défini un régime de validité pour la population coronale d'ions de type hydrogèneoïde en considérant que pour le niveau avec le nombre quantique principal $n = 6$, le taux de décroissance radiative soit plus grand que la somme de toutes les transitions collisionnelles hors de ce niveau [6].

On considère un modèle simple incluant l'excitation collisionnelle $i \rightarrow f$, la désexcitation radiative du niveau supérieur f vers le niveau inférieur i et aussi la désexcitation radiative du niveau supérieur f vers d'autres niveaux m . L'équation d'équilibre s'écrit comme :

$$N_i N_e C_{if} = N_f A_f \tag{2.11}$$

où $A_f = \sum_{m < f} A_{fm}$, A_f représente la somme des probabilités de transition radiative

à partir du niveau f .

2.4.3 Modèle collisionnel-radiatif

Le modèle intermédiaire entre le modèle d'équilibre thermodynamique local et le modèle coronal est le modèle collisionnel-radiatif (CR). Il est utilisé dans les plasmas moyennement denses, tels que les plasmas de la région de transition solaire et ceux qui sont produits aux laboratoires par irradiation laser [2]. Le peuplement et le dépeuplement des niveaux excités des ions sont assurés par des transitions à la fois collisionnelles et radiatives. On suppose que les transitions collisionnelles et radiatives interviennent entre des niveaux d'un ion beaucoup plus rapidement que l'ionisation et la recombinaison entre des ions, ce qui revient en pratique à séparer les calculs des populations des niveaux et d'équilibre d'ionisation. On détermine les populations des niveaux atomiques à partir de la résolution de système d'équations couplées :

$$-N_i \left[\sum_{f < i} (A_{if} + N_e C_{if}^d) + \sum_{f > i} N_e C_{if}^e \right] + \sum_{f < i} N_f N_e C_{fi}^e + \sum_{f > i} (A_{fi} + N_e C_{fi}^d) = 0 \quad (2.12)$$

où N_e est la densité des électrons libres du plasma, C_{if}^e est le coefficient de taux de l'excitation ($i \rightarrow f$) (sachant que $E_f > E_i$) et C_{if}^d est le coefficient de taux de désexcitation ($i \rightarrow f$) (sachant que $E_i > E_f$).

2.5 L'approximation Distorted Wave (DW) pour les collisions atomiques inélastiques

Dans cette section, nous allons rappeler la méthode DW utilisée par le code FAC pour calculer les sections efficaces d'excitation par impact d'électrons (EIE) [12].

2.5.1 Force de collision factorisée

On considère le processus EIE d'un ion de l'état initial $\beta_i J_i$ vers l'état final $\beta_f J_f$, où J_i et J_f sont les moments angulaires totaux, β_i et β_f représentent des ensembles de nombres quantiques additionnels nécessaires pour spécifier ces états. La section efficace EIE $\sigma(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f)$ de $\beta_i J_i$ vers $\beta_f J_f$ peut être exprimée en termes de force de collision $\Omega(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f)$ (en unités atomiques, que nous utiliserons tout au long de cette section)

$$\sigma(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) = \frac{\pi}{k_0^2 g_0} \Omega(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f), \quad (2.13)$$

où g_0 est le poids statistique de l'état initial ($g_0 = 2J_i + 1$), et k_0 est le nombre d'onde de l'électron incident, qui est lié à l'énergie ε_0 par la relation relativiste

$$k_0^2 = 2\varepsilon_0 \left(1 + \frac{\alpha^2}{2} \varepsilon_0 \right), \quad (2.14)$$

où α est la constante de structure fine. La fonction d'onde du continuum est normalisée pour que la grande composante ait une amplitude asymptotique de $\sqrt{k/\varepsilon}$, qui se réduit à $\sqrt{2/k}$ dans la limite non-relativiste, ou de manière équivalente,

$$\int_0^\infty [P_{\varepsilon(r)} P_{\varepsilon'}(r) + Q_{\varepsilon(r)} Q_{\varepsilon'}(r)] dr = \pi \delta(\varepsilon - \varepsilon'), \quad (2.15)$$

où ε et k sont l'énergie et le nombre d'onde de l'orbitale, P_ε et Q_ε sont les grande et petite composantes de la fonction d'onde du continuum. La force de collision peut être écrite comme

$$\Omega(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) = 2 \sum_{\kappa_0 \kappa_1} \sum_{J_T} [J_T] \langle \beta_i J_i \kappa_0, J_T M_T | \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}} | \beta_f J_f \kappa_1, J_T M_T \rangle|^2, \quad (2.16)$$

où κ_0 et κ_1 sont les nombres quantiques angulaires relativistes des électrons incident et diffusé, respectivement, J_T est le moment angulaire total lorsque l'état cible est couplé à l'orbitale continue, M_T est la projection du moment angulaire total, et $[J_T] = 2J_T + 1$. Selon Bar-Shalom *et al.* [13], cette expression peut être simplifiée pour donner

$$\begin{aligned} \Omega(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) &= 2 \sum_k \sum_{\substack{\alpha_0 \alpha_1 \\ \beta_0 \beta_1}} Q^k(\alpha_0 \alpha_1; \beta_0 \beta_1) \\ &\langle \beta_i J_i || Z^k(\alpha_0, \alpha_1) || \beta_f J_f \rangle \langle \beta_i J_i || Z^k(\beta_0, \beta_1) || \beta_f J_f \rangle, \end{aligned} \quad (2.17)$$

où

$$Q^k(\alpha_0 \alpha_1; \beta_0 \beta_1) = \sum_{\kappa_0 \kappa_1} [k]^{-1} P^k(\kappa_0 \kappa_1; \alpha_0 \alpha_1) P^k(\kappa_0 \kappa_1; \beta_0 \beta_1), \quad (2.18)$$

et

$$P^k(\kappa_0 \kappa_1; \alpha_0 \alpha_1) = X^k(\alpha_0 \kappa_0; \alpha_1 \kappa_1) + \sum_t (-1)^{k+t} [k] j_{\alpha_0} j_1 t j_0 j_{\alpha_1} k X^t(\alpha_0 \kappa_0; \kappa_1 \alpha_1), \quad (2.19)$$

où X^k et l'opérateur $Z^k(\alpha, \beta)$ sont définis dans la Réf. [14].

L'importance de l'Eq. (2.17) est que les intégrales angulaires et radiales sont complètement factorisées. Les intégrales radiales $Q^k(\alpha_0 \alpha_1; \beta_0 \beta_1)$ avec le même ensemble d'orbitales liées α_0 , α_1 , β_0 et β_1 peuvent apparaître dans de nombreuses transitions. Ces intégrales dépendent aussi de l'énergie des électrons incident et diffusé, ou pour une énergie donnée des électrons diffusés, elles dépendent de l'énergie ΔE du seuil d'excitation. Cependant, comme Bar-Shalom *et al.* [13] ont noté, la dépendance à ΔE est assez faible. Pour les intégrales radiales associées aux transitions interdites,

$Q^k \propto \Delta E$, alors que pour les intégrales radiales associés aux transitions dipolaires permises, $Q^k \propto \ln \Delta E$ valable approximativement sur une large gamme d'énergies de transition. Par conséquent, pour une énergie donnée des électrons diffusés, Q^k peut être calculé pour quelques valeurs de ΔE , et l'intégrale à l'énergie de transition réelle peut être interpolée à partir de ces quelques valeurs.

Généralement une grille à trois points couvrant toute la gamme d'énergie de transition pour un réseau donné d'excitations donne des résultats suffisamment précis. La dépendance de Q^k en ε_1 , l'énergie de l'électron diffusé, bien que pas aussi simple que celui en ΔE , est toujours assez lisse, et a un comportement asymptotique connu aux grandes énergies selon le type de transition. Dans ce cas, l'interpolation sur ε_1 est utilisée en incluant quelques autres points. Le calcul de $\langle \beta_i J_i || Z^k || \beta_f J_f \rangle$ est le même que celui impliqué dans les taux de transition radiative [14].

2.5.2 Solution de l'équation de Dirac pour le continu

Dans FAC, les orbitales du continu sont obtenues en résolvant les équations de Dirac avec le même potentiel central que celui des orbitales liées. Après avoir transformé les équations de Dirac en équations du second ordre de type Schrödinger, et en adoptant la même grille radiale que dans la solution des orbitales liées [13], la grande composante transformée, $F(r)$, de l'orbitale libre satisfait à l'équation

$$\frac{d^2}{dr^2} F(r) + \left\{ 2[\varepsilon - U(r)] - \frac{\kappa(\kappa + 1)}{r^2} \right\} F(r) = 0, \quad (2.20)$$

où ε est l'énergie de l'électron libre, et la condition aux limites à l'infini est remplacée par l'exigence que la grande composante $P(r)$ a l'amplitude asymptotique de $\sqrt{k/\varepsilon}$.

En résolvant l'équation (2.20), la grille radiale est divisée en deux Régions. Dans la région intérieure, où la fonction d'onde n'est pas oscillatoire, ou la période d'oscillation est suffisamment grande pour contenir un nombre suffisant de grilles intervalles (par exemple, plus de 16), nous utilisons la méthode Numerov standard pour intégrer l'équation vers l'extérieur. Au-delà d'un certain point $r = r_c$, qui dépend de l'énergie et du moment cinétique du continu recherché, l'oscillation périodique de la fonction d'onde devient trop petite pour que l'intégration directe soit précise. À ce stade, nous passons à une méthode phase-amplitude, dans laquelle $F(r)$ s'écrit sous la forme

$$F(r) = A \frac{1}{\eta^{1/2}(r)} \sin \phi(r), \quad (2.21)$$

où la constante A est choisie pour assurer la normalisation appropriée. $\phi(r)$ et $\eta(r)$

satisfont

$$\begin{aligned}\phi(r) &= \int_0^r \eta(s) ds \\ \eta^2(r) &= \eta^{1/2} \frac{d^2}{dr^2} \eta^{-1/2} + \omega^2(r),\end{aligned}\tag{2.22}$$

où

$$\omega^2(r) = 2 [\varepsilon - U(r)] - \frac{\kappa(\kappa + 1)}{r^2}.\tag{2.23}$$

Pour $r > r_c$, Eq. (2.22) peut être facilement résolu par itération à partir de l'approximation WKB du premier ordre $\eta(r) = \omega(r)$. En fait, dans la plupart des cas, l'approximation du premier ordre elle-même est suffisamment précise. Les solutions internes et externes sont mises en correspondance à r_c en imposant la continuité de $F(r)$ et de sa dérivée première.

2.5.3 Évaluation des intégrales radiales

L'évaluation des intégrales de Slater se réduit au calcul de ce type d'intégrales

$$I = \int_0^\infty P_a(r) f(r) P_b(r) dr,\tag{2.24}$$

où $P_a(r)$ et $P_b(r)$ peuvent être des composantes grande ou petite des orbitales soit liée ou libre, et $f(r)$ est une fonction lisse de r . Si les deux fonctions d'onde proviennent d'orbitales liées, l'intégration numérique directe est utilisée.

Si l'une d'elles provient d'une orbitale continue, on divise le domaine d'intégration en deux régions. Dans la première région, $r < r_c$, l'intégration procède comme dans le cas lié. Dans la région $r > r_c$, l'intégrale est du genre

$$I_1 = \int g(r) \sin \phi(r) dr,\tag{2.25}$$

ou

$$I_2 = \int g(r) \cos \phi(r) dr,\tag{2.26}$$

où $g(r)$ est une fonction lisse de r . Puisque la phase ϕ est aussi une fonction lisse de r , nous évaluons I_1 comme

$$I_1 = \int \tilde{g}(\phi) \sin \phi d\phi,\tag{2.27}$$

où

$$\tilde{g}(\phi) = g(r) \frac{dr}{d\phi},\tag{2.28}$$

qui est une fonction lisse de ϕ . En utilisant ces valeurs à chaque point de grille, il est représenté par une fonction d'interpolation de type spline cubique. Donc au sein de

chaque intervalle de grille, c'est un polynôme du troisième ordre de ϕ . I_1 est évalué en intégrant $\int \phi^n \sin \phi d\phi$ analytiquement, où $n = 0, 1, 2$ ou 3 . L'évaluation de I_2 est similaire, remplaçant $\sin \phi$ par $\cos \phi$.

Si les deux fonctions d'onde proviennent du continuum, la plage d'intégration est divisée en trois régions. Dans la première région, $r < \min(r_{c1}, r_{c2})$, l'intégration se déroule comme dans le cas borné. Dans la deuxième région, $\min(r_{c1}, r_{c2}) < r < \max(r_{c1}, r_{c2})$, l'intégration se déroule comme dans le cas lié-libre. Dans la dernière région, $r > \max(r_{c1}, r_{c2})$, les deux fonctions d'onde sont sous la forme phase-amplitude, les intégrales sont du type

$$I = \int g(r) \sin \phi_1(r) \sin \phi_2(r) dr, \quad (2.29)$$

ou de type similaire dans lequel l'une ou les deux fonctions sinus sont remplacées par les fonctions cosinus. De telles intégrales sont transformées en la somme de deux termes

$$\begin{aligned} I^+ &= \int g^+(r) \cos \phi^+(r) dr \\ I^- &= \int g^-(r) \cos \phi^-(r) dr, \end{aligned} \quad (2.30)$$

ou des variantes dans lesquelles la fonction cosinus est remplacée par la fonction sinus. Dans l'équation ci-dessus, $\phi^+ = \phi_1 + \phi_2$ et $\phi^- = \phi_1 - \phi_2$, respectivement. Ces intégrales sont évaluées de la même manière que les intégrales lié-libre, sauf lorsque les énergies des deux orbitales continues sont très proches de sorte que ϕ^- est très petit, auquel cas, les intégrales contenant ϕ^- sont calculées directement dans la variable radiale r .

2.5.4 Approximation quasi-relativiste

Dans la plupart des cas, il n'est pas nécessaire de résoudre l'équation radiale de l'électron libre dans l'approche totalement relativiste. L'approximation quasi-relativiste, dans laquelle les deux fonctions d'onde avec le même l mais différents j sont traités de la même manière, et les petites composantes sont négligées, donne souvent des forces de collision finales très proches des résultats entièrement relativistes pour une charge nucléaire plus grande que 74 et une énergie de collision supérieure à approximativement 30 keV. Même pour une charge aussi élevée que $Z = 92$, les différences sont très souvent comprises entre 15 et 20% [14].

Dans le code FAC, Gu [12] incorpore également une option pour appliquer cette approximation quasi-relativiste. En fait, l'approximation ne peut être invoquée que pour $l > l_{qr}$, où l_{qr} est une valeur appropriée, car on s'attendrait à ce que l'approximation s'améliore pour l plus élevé. Puisque l'approximation quasi-relativiste est très

bonne pour tous les éléments ayant Z faible à moyen et qu'elle procure une économie considérable de temps de calcul, l_{qr} est choisi à 0 par défaut, c'est-à-dire toutes les ondes partielles sont traitées en approximation quasi-relativiste. Pour les éléments de Z élevé, il faut augmenter l_{qr} ou désactiver complètement l'option de l'approximation quasi-relativiste.

2.5.5 Sommation d'ondes partielles

L'intégrale radiale Q^k , donnée par Eq. (2.18), est exprimée comme une somme d'ondes partielles. La somme est évaluée comme suit

$$\begin{aligned} Q^k &= \sum_{l_0} \sum_{l_1} \tilde{Q}^k(l_0, l_1) \\ \tilde{Q}^k(l_0, l_1) &= \sum_{j_0, j_1} [k]^{-1} P^k(\kappa_0 \kappa_1; \alpha_0 \alpha_1) P^k(\kappa_0 \kappa_1; \beta_0 \beta_1), \end{aligned} \quad (2.31)$$

où la sommation sur κ_0 et κ_1 est explicitement écrite comme la somme sur le moment cinétique orbital l_0 et l_1 et sur le moment cinétique total j_0 et j_1 . Notons que $\tilde{Q}^k(l_0, l_1)$ n'est pas calculé pour chaque valeur possible de l_0 et de l_1 . Une grille appropriée est choisie pour l_0 de 0 à l_{max} . Pour chaque l_0 dans cette grille, $\tilde{Q}^k(l_0) = \sum_{l_1} \tilde{Q}^k(l_0, l_1)$ est calculé, où les valeurs de l_1 sont limitées par les relations triangulaires. $\tilde{Q}^k(l_0)$ est une fonction lisse de l_0 surtout quand l_0 est relativement grand. Par conséquent, pour tout l_0 manquant dans la grille, sa valeur peut être obtenue par interpolation. La grille de l_0 utilisée dans le code peut être spécifiée dans l'entrée. Cependant, la grille par défaut est généralement suffisante, et contient toutes les valeurs de $l_0 = 0$ à 5, après que l'intervalle entre les points successifs est doublé chaque deux points, c'est-à-dire qu'il est presque logarithmique.

La valeur de l_{max} nécessaire pour la précision souhaitée varie considérablement selon le type de transition et l'énergie de collision. De nombreux programmes choisissent une valeur arbitraire pour l_{max} , et la convergence n'est pas garantie pour toutes les transitions à toutes les énergies. Dans le programme présent, l_{max} n'est pas corrigé. En chaque point de la grille l_0 , une estimation des contributions des ondes partielles supérieures est faite selon la méthode décrite ci-dessous. L'incertitude relative dans le résultat de la force de collision est également estimée si la somme tronquée à laquelle on ajoute la contribution estimée des ondes partielles supérieures est considérée comme étant le résultat final. Une fois que l'incertitude relative devient inférieure à une précision prescrite (généralement 5%), la sommation est tronquée à ce stade.

Pour les transitions strictement interdites, qui sont caractérisées par des forces de

collision non nulles uniquement en raison de l'interaction d'échange, les contributions des ondes partielles supérieures ne sont pas du tout importantes, et de ce fait aucune difficulté particulière ne se pose en ce qui concerne la convergence des ondes partielles. Pour les transitions permises (y compris tous les types multipolaires), le code FAC utilise l'approximation de Coulomb-Bethe pour estimer les contributions significatives des ondes partielles élevées et calculer les incertitudes de ces estimations. Dans cette méthode, le terme d'échange en P^k est négligé, et le terme direct est approximé par

$$P_{CB}^k(\kappa_0\kappa_1; \alpha_0\alpha_1) = M_k(\alpha_0\alpha_1)R_k(\kappa_0\kappa_1), \quad (2.32)$$

où

$$\begin{aligned} M_k(\alpha_0\alpha_1) &= \langle \alpha_0 || C^k || \alpha_1 \rangle \int (P_{\alpha_0}P_{\alpha_1} + Q_{\alpha_0}Q_{\alpha_1})r^k dr \\ R_k(\kappa_0\kappa_1) &= \int (P_{\kappa_0}P_{\kappa_1} + Q_{\kappa_0}Q_{\kappa_1})\frac{1}{r^{k+1}} dr. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Notez que M_k ne dépend que des orbitales cibles, et R_k ne dépend que du continuum. La quantité $\tilde{Q}^k(l_0, l_1)$ correspondant à l'approximation de Coulomb-Bethe s'écrit sous la forme

$$\tilde{Q}_{CB}^k(l_0, l_1) = M_k(\alpha_0\alpha_1)M_k(\beta_0\beta_1) \sum_{j_0 j_1} [k]^{-1} R_k^2(\kappa_0\kappa_1), \quad (2.34)$$

et

$$\tilde{Q}_{CB}^k(l_0) = \sum_{l_1} \tilde{Q}_{CB}^k(l_0, l_1). \quad (2.35)$$

Le rapport

$$\gamma(l_0) = \frac{\tilde{Q}_{CB}^k(l_0 + 1)}{\tilde{Q}_{CB}^k(l_0)} \quad (2.36)$$

ne dépend que des orbitales du continu et se rapproche d'une constante, $\gamma_\infty = \varepsilon_1/\varepsilon_0$, aux grandes valeurs de l_0 .

Pour $k \geq 2$, la convergence vers cette valeur asymptotique est relativement rapide. Par conséquent, nous pouvons approximer la somme sur l_0 par

$$\sum_{l_0 > l_{max}} \tilde{Q}_{CB}^k(l_0) = \tilde{Q}_{CB}^k(l_{max}) \frac{\gamma_\infty}{1 - \gamma_\infty}. \quad (2.37)$$

La différence entre γ_∞ et la valeur de $\tilde{Q}^k(l_0+1)/\tilde{Q}^k(l_0)$ calculée avec les fonctions d'onde réelles peut être utilisé pour calculer l'incertitude introduite dans cette approximation. Supposons que la différence est δ , l'incertitude absolue est donnée par

$$\Delta = \tilde{Q}_{CB}^k(l_{max}) \frac{\delta}{(1 - \gamma_\infty)^2}. \quad (2.38)$$

Cette valeur est comparée à la précision souhaitée pour déterminer si la sommation devrait être tronquée ou non.

Cependant, pour $k = 0$ et 1 , γ_∞ n'est pas atteint avant $l_0 \gg \varepsilon_1/(\varepsilon_0 - \varepsilon_1)$, ce qui conduit à une valeur qui peut être trop grande si l'énergie de transition est très faible ou l'énergie de collision très élevée. Pour de tels cas, FAC fait appel aux relations de récurrence non-relativistes bien connues, qui relient $\tilde{Q}_{CB}^k(l_0, l_1)$ avec différents l_0 afin de calculer le rapport $\gamma(l_0)$ jusqu'à ce qu'il converge vers γ_∞ [16]. Ces rapports sont ensuite utilisés pour estimer les contributions des ondes partielles élevées et les incertitudes de ces estimations.

Références

- [1] N. B. Edl, Phys. Scr. T **85** (1984).
- [2] E. Träbert, P. H. Heckmann, R. Hutton, and I. Martinson, J. Opt. Soc. Am. B **5**, 2173 (1988).
- [3] D. G. Elis, I. Martinson, and E. Träbert, Comm. At. Mol. Phys. **22**, 241 (1989).
- [4] P. Alexander, *Plasma Physics An Introduction to Laboratory, Space, and Fusion Plasmas*. Second Edition. Germany : Kiel University (2017).
- [5] A. K. Pradhan and S. Nahar, *Electron ion collisions In Atomic Astrophysics and Spectroscopy*. Cambridge : Cambridge University (2011).
- [6] H. J. Kunze, *Introduction to Plasma Spectroscopy* (Springer, Berlin 2009).
- [7] D. Salzmänn, *Atomic Physics in Hot Plasmas* (Oxford University Press, New York 1998).
- [8] A. K. Ferouani, “Effets d’électrons suprathermiques directs sur le diagnostic en température de plasmas chauds basé sur le rapport d’intensité des raies d’émission d’ions héliumoides”, Thèse de doctorat, Université Tlemcen (2013).
- [9] M. Belkhiri, “Plasma out of thermodynamical equilibrium : influence of the plasma environment on atomic structure and collisional cross sections”, Thèse de doctorat, Université PARIS-SUD XI (2015).
- [10] T. Fujimoto, *Plasma Spectroscopy* (Clarendon Press Oxford 2004).
- [11] R. W. P. McWhirter, in *Spectral Intensities*, edited by R. H. Huddleston and S. L. Leonard, *Plasma Diagnostic Techniques* (Academic Press, New York, 1965).
- [12] M. F. Gu, *The Flexible Atomic Code : II. Electron Impact Excitation*, Center for Space Research, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, MA 02139 (2008).
- [13] A. Bar-Shalom, M. Klapisch, and J. Oreg, Phys. Rev. A **38**, 1773 (1988).
- [14] H. L. Zhang, D. H. Sampson, and A. K. Mohanty, Phys. Rev. A **40**, 616 (1989).
- [15] M. F. Gu, Can. J. Phys. **86**, 675 (2008).
- [16] A. Burgess and V. B. Sheorey, J. Phys. B **7**, 2403 (1974).

Chapitre 3

Spectroscopie de polarisation d'un plasma (PPS)

Sommaire

3.1	Introduction	24
3.2	Spectroscopie de polarisation d'un plasma (PPS)	24
3.2.1	Spectroscopie d'un plasma	24
3.2.2	Spectroscopie de polarisation d'un plasma (PPS)	25
3.3	Classification des phénomènes de PPS	25
3.4	Observations expérimentales	27
3.4.1	Plasmas de tokamak	27
3.4.2	Plasmas produits par laser	29
3.4.3	Laser à rayons X	30
3.5	Modèle PACR (population-alignment collisional-radiative)	31
3.5.1	Matrice densité	31
3.5.2	Transitions collisionnelle et radiative	33
3.5.3	Système d'équations cinétiques de taux	35
3.5.4	Intensité et polarisation	36

3.1 Introduction

Le phénomène de polarisation du rayonnement émis d'un plasma est lié à l'anisotropie spatiale, plus précisément à l'anisotropie directionnelle au sein du plasma. En tant qu'exemple typique d'anisotropie, il y a l'excitation d'atomes ou d'ions par un faisceau directif d'électrons monoénergétiques, qui joue un rôle important dans la spectroscopie d'intensité du plasma (PPS). L'utilisation des caractéristiques de polarisation du rayonnement afin d'interpréter les processus physiques dans un plasma, permet de déduire des informations précieuses sur les conditions dont ces atomes ou ions ont été excités dans le plasma. La détermination de la fonction de distribution des électrons anisotropes, non thermiques, est un exemple immédiat. Dans les expériences sur la spectroscopie d'intensité du rayonnement émergeant d'un plasma (PPS), dans de nombreux cas, la polarisation d'une seule raie d'émission était mesurée et elle était interprétée selon l'hypothèse de l'équilibre coronal avec un modèle de fonction de distribution de vitesses des électrons (EVDF) anisotrope. Cependant, l'intensité et la polarisation de plusieurs raies d'émission d'atomes ou d'ions dans un plasma devraient donner des informations plus complètes sur les propriétés du plasma. Une formulation pour une telle interprétation est la généralisation du modèle collisionnel-radiatif (CR), c'est un modèle conventionnel de collision associé au rayonnement ce qui représente l'outil de la spectroscopie d'intensité du plasma. Ce modèle s'appelle "population-alignment collisional-radiative" (PACR) [1].

Dans ce chapitre, nous présentons une définition de la spectroscopie de polarisation d'un plasma (PPS), et nous donnerons la classification qui existe dans ce domaine. Puis, nous citons quelques expériences de PPS, et nous terminons par rappeler en détail le modèle PACR.

3.2 Spectroscopie de polarisation d'un plasma (PPS)

3.2.1 Spectroscopie d'un plasma

La spectroscopie des plasmas est une discipline de la physique des plasmas. Les propriétés physiques d'un plasma sont fortement influencées par le rayonnement tant émis qu'absorbé, ce dernier est plus ou moins contrôlé par le transfert d'énergie radiative. Les processus atomiques collisionnels et radiatifs intervenant dans

les plasmas chauds sont bien connus et représentent un domaine important pour la description expérimentale des plasmas à partir de la spectroscopie. Cette dernière est une étude des rayonnements émis par les plasmas avec l'observation des spectres de radiations et l'interprétation de ses caractéristiques en fonction des paramètres du plasma (température, densité et abondance relative des ions) [2-4].

3.2.2 Spectroscopie de polarisation d'un plasma (PPS)

Une extension de l'application de la spectroscopie des plasmas est d'intégrer les caractéristiques de polarisation du rayonnement émis, ce qui permet de mesurer et d'obtenir des informations précieuses sur la manière dont les ions présents dans le plasma ont été excités. Donc, la spectroscopie de polarisation d'un plasma (PPS) fait l'objet d'étude de la relation des caractéristiques et de la nature de la polarisation des rayonnements émis par le plasma et ses propriétés physiques [1-5].

Pour atteindre l'objectif de la PPS, il faut que les techniques expérimentales soient développées car ils sont utiles pour l'observation de la polarisation de rayonnement et il est nécessaire aussi de développer un modèle cinétique de population des niveaux atomiques pour connecter les caractéristiques de polarisation observées et l'anisotropie de l'environnement plasma [6].

Finalement, on peut considérer que les collisions atomiques, le champ électrique (ou magnétique) et le rayonnement polarisé sont des ingrédients importants dans le cadre de la spectroscopie de polarisation d'un plasma (PPS) [1].

3.3 Classification des phénomènes de PPS

Le rayonnement émergent d'un plasma peut être polarisé par l'anisotropie du plasma. Cette anisotropie peut être due à une excitation par des collisions anisotropes ou à un champ externe, électrique ou magnétique. Selon Fujimoto [1], les phénomènes de polarisation peuvent être classés en trois catégories :

- 1 Lorsqu'un atome est plongé dans un champ électrique ou un champ magnétique, il est soumis à l'effet Stark ou à l'effet Zeeman. Un niveau d'énergie de l'atome est décomposé en plusieurs sous-niveaux selon la valeur du nombre quantique J de moment angulaire caractérisant ce niveau et chacune des composantes Stark ou Zeeman d'une raie spectrale est polarisée. Lorsque toutes

les composantes sont mélangées ensemble, la raie globale devient non polarisée. Ces phénomènes sont connus depuis longtemps et la formulation de ces effets est bien établie. Néanmoins, de nouvelles techniques sont en cours de développement pour le diagnostic des plasmas sur la base de ces principes classiques.

Lorsque les champs électriques et magnétiques sont présents simultanément avec des intensités arbitraires et des directions relatives, le problème est plutôt complexe et une prédiction du profil de raie observé suivant une direction donnée n'est pas évidente. Lorsqu'un champ électromagnétique dépendant du temps est appliqué, en particulier lorsque la fréquence est au voisinage de celle associée à la séparation d'énergie des sous-niveaux Zeeman ou Stark (phénomène de résonance), un nouveau phénomène de polarisation peut apparaître. Mais, cet aspect n'est pas encore bien exploré. Si le champ appliqué est statique et extrêmement puissant, son effet peut ne pas être considéré comme une petite perturbation, ainsi la raie spectrale peut présenter une nouvelle caractéristique, notamment une apparence de polarisation globale.

- 2** Dans le cas d'une absence de champ externe, les atomes sont soumis à une excitation anisotrope à travers :
- des collisions avec des électrons directifs, – la photo-excitation par un faisceau laser, – la réabsorption du rayonnement (diffusion par résonance) dans une géométrie anisotrope.

Pour la première anisotropie (collisions directionnelles avec des électrons), la caractéristique est la distribution de vitesses des électrons libres du milieu plasma, qui excitent les atomes. On désignera dans ce qui suit par EVDF la fonction de distribution de vitesses des électrons. L'objectif de PPS est de diagnostiquer le plasma en déduisant la forme d'EVDF du plasma.

- 3** Il s'agit de la combinaison des classes 1 et 2. Une excitation anisotrope en présence d'un champ électrique ou un champ magnétique. Cette classe est très difficile à traiter, mais du point de vue pratique de diagnostic de plasma, cette classe devrait être investiguée et le formalisme correspondant devrait être développé. Si le champ électrique est extrêmement fort, le problème d'EVDF et celui de l'excitation anisotrope des atomes ne peuvent pas être séparés, ils doivent être traités de manière cohérente dans un cadre unique.

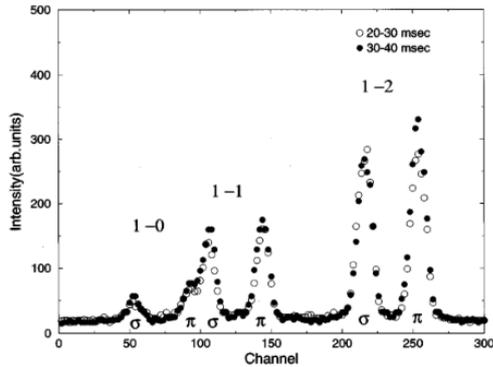
3.4 Observations expérimentales

3.4.1 Plasmas de tokamak

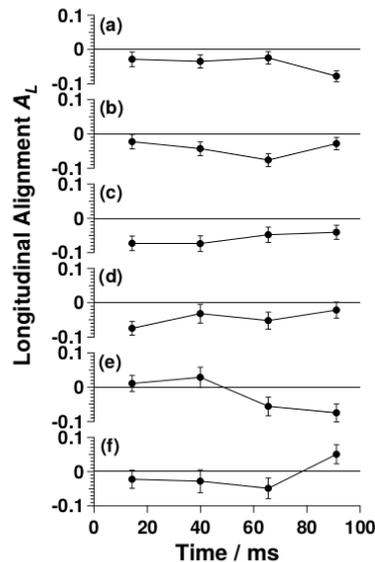
Une application de spectroscopie de polarisation d'un plasma (PPS) avait été réalisée sur le WT-3 tokamak (un dispositif de forme toroïdale de confinement magnétique d'un plasma chaud) à l'Université de Kyoto, Japon. Les rayons de cette machine WT-3 sont 0.65 m (rayon majeur) et 0.21 m (rayon mineur), et le champ magnétique toroïdal de la machine est 1.5 T. Un plasma a été généré par chauffage ohmique (effet Joule), et le courant toroïdal avait été maintenu par conduction d'une onde à la fréquence hybride inférieure. La densité électronique était typiquement de $3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ au cœur du plasma, et la température des électrons était entre 100 et 300 eV. Dans cette expérience, à partir des intensités et degrés de polarisation de plusieurs raies spectrales observées, il a été possible de déduire la population et l'alignement des niveaux excités [5,7-9]. La région centrale du plasma a été observée avec un spectromètre visible-UV. Une plaque de calcite a été placée juste derrière la fente d'entrée. L'axe optique de la lumière π a été déplacé parallèlement à celui de la lumière σ d'environ 1 mm dans le sens de la dispersion. Fujimoto *et al.* [5] ont pris l'axe de quantification dans la direction toroïdale. Les images de la fente par ces rayons lumineux ont été focalisées sur la surface du détecteur à différents endroits distants de 1 mm. La figure 3.1 est un exemple des résultats expérimentaux. Elle montre deux spectres de raies de l'ion oxygène O^{4+} de la série isoélectronique du béryllium (i.e., ion à quatre électrons). Les raies observées correspondent aux transitions entre niveaux triplets $3p^3P_{0,1,2} \rightarrow 3s^3S_1$ ayant les longueurs d'onde 278.985, 278.699 et 278.101 nm, respectivement. Parmi ces trois raies, on trouve celle associée à la transition $3p^3P_0 \rightarrow 3s^3S_1$ qui a la plus faible intensité et elle n'est jamais polarisée quelque soit les conditions du plasma, du fait que son niveau supérieur n'est pas aligné (puisque'il n'y a qu'un seul sous-niveau magnétique $M_J = 0$). Cette raie avait été utilisée à des fins de calibration des sensibilités relatives du système de détection. En effet, pour cette raie l'intensité relative des composantes π et σ est égale dans la direction d'observation.

Pour la raie la plus intense $3p^3P_2 \rightarrow 3s^3S_1$, Fujimoto *et al.* [5] ont remarqué que le rapport de l'intensité apparente de la composante π à celle de la composante σ croît dans le mode de chauffage LHCD (lower-hybrid current drive) comparativement à

celui du mode de chauffage par effet Joule. Cela signifie que l'ensemble des ions O^4 excités au niveau supérieur est polarisé dans ces conditions de plasma ; plus précisément, ces ions sont alignés. Puisque le plasma produit dans cette expérience de tokamak est dans la phase ionisante [11] et que l'effet d'opacité est négligeable (ce qui signifie que tout photon émis s'échappe du plasma sans être absorbé) compte tenu de la densité électronique relativement basse, qui ne dépasse pas 10^{13} cm^{-3} [6], l'origine de cet alignement devrait provenir de l'excitation collisionnelle spatialement anisotrope par des électrons ayant une distribution de vitesses anisotrope. La figure 3.2 montre l'alignement longitudinal $A_L = (I_\pi - I_\sigma)/(I_\pi + 2I_\sigma)$ de la raie d'émission $3p^3P_2 \rightarrow 3s^3S_1$ observé à certains instants à partir de différentes positions dans le plasma de tokamak (c'est à dire différentes distances du centre du plasma).



(a) Spectre de raies de l'ion béryllium-like oxygène O^{4+} enregistré dans une expérience du tokamak WT-3 [8]. Les raies observées correspondent aux transitions entre niveaux triplets : $3p^3P_{0,1,2} \rightarrow 3s^3S_1$.



(b) Alignement longitudinal de la raie d'émission $3p^3P_2 \rightarrow 3s^3S_1$ observé à certains instants à partir de différentes positions dans le plasma du tokamak WT-3 [8].

Un exemple de distribution anisotrope est une distribution Maxwellienne avec différentes températures dans différentes directions [12,14,15]. Un autre exemple, quelque fois utilisé par les théoriciens, est l'existence d'une composante de faisceau ou d'une "queue" superposée à des électrons majoritaires ayant une distribution Maxwellienne isotrope [13]. Une "forme" spécifique de la distribution de vitesses des électrons donne lieu à un ensemble spécifique de population et d'alignement dans divers niveaux excités d'ions, conduisant à un ensemble d'intensité et de

polarisation de raies d'émission à partir de ces niveaux.

3.4.2 Plasmas produits par laser

Kieffer *et al.* [14,15] ont irradié une cible en aluminium suivant la direction normale à la cible avec une impulsion laser de $1.05 \mu\text{m}$ de longueur d'onde, 1 ps de durée et $8 \times 10^{14} \text{ W.cm}^2$ d'intensité à la surface cible, précédée d'une pré-impulsion avec un rapport d'intensité de 10^{-3} . Un pré-plasma de basse température (de l'ordre de 100 eV) ayant une longueur d'échelle d'environ $1 \mu\text{m}$ a été chauffé par l'impulsion principale et porté à une température de plusieurs centaines d'eV. Des électrons de hautes énergies (deux à trois fois l'énergie thermique) diffuse à partir du plasma chaud peu dense, dont la densité est inférieure à la densité critique de coupure pour la radiation laser, vers le plasma beaucoup plus dense, entraînant une anisotropie de la distribution de vitesses des électrons. En utilisant un spectromètre à cristal ADP et un film photographique, ils ont observé les raies d'émission des ions aluminium de la séquence isoélectronique de l'hélium, c'est à dire les ions Al^{11+} . Le cristal de Bragg réfléchissait les rayons X, et la composante polarisée préférentiellement réfléchiée était la lumière s : le champ électrique oscillant perpendiculairement au plan d'incidence qui comprend les rayons incidents et réfléchis.

Cela correspond à la composante π , où l'axe de quantification est pris dans la direction suivant la normale à la cible. En faisant tourner le spectromètre de 90° autour de son axe optique, Kieffer *et al.* ont enregistré l'intensité de la composante polarisée σ . La raie d'intercombinaison y , associée à la transition $2^3P_1 \rightarrow 1^1S_0$, était pratiquement non polarisée en raison principalement du couplage du moment angulaire orbital avec le moment magnétique nucléaire. Ce couplage d'interaction hyperfine, qui est dû au fait que l'élément Al est naturellement monoisotopique de spin nucléaire $I = \frac{5}{2}$, a un effet fortement dépolarisant. Cependant, la raie de résonance w , associée à la transition $2^1P_1 \rightarrow 1^1S_0$, s'est avéré être polarisée avec le degré de polarisation relativement significatif $P = -0.25 \pm 0.07$.

Il est à noter que les caractéristiques de polarisation de la raie de résonance w par suite de l'excitation par collision d'électrons unidirectionnels de l'ion Al^{11+} devraient être comprises entre l'hélium neutre He (au seuil d'excitation $P \sim 100\%$) et de l'ion de fer héliumoïde Fe^{24+} ($P = 58.4\%$) [16]. Le seuil d'excitation de l'ion Al^{11+} est de 1.6 keV, de sorte que les électrons directs avec des énergies de

quelques keV produiraient une polarisation positive. Par conséquent, la polarisation négative observée est cohérente avec la prédiction de la distribution de vitesses en forme d'oblate.

3.4.3 Laser à rayons X

Une lumière laser à double impulsion de $1.05 \mu\text{m}$ en longueur d'onde irradie une plaque cible de germanium de 3 cm . Ces impulsions avaient des largeurs de 0.1 ns séparées de 0.4 ns . L'énergie totale était d'environ 170 J et l'intensité de la deuxième impulsion à la surface de la cible était de $2.9 \times 10^{13} \text{ W cm}^2$. La sortie du faisceau laser à rayons X émis par les ions de germanium Ge^{22+} de type néonoïde a été dispersée avec un spectromètre à haute résolution de 0.6 nm/mm et la raie laser de 19.6 nm correspondant à la transition $2p^5 3p^1 S_0 \rightarrow 2p^5 3s^3 P_1$ a été séparée.

Le spectre a été enregistré avec un film photographique. Juste devant le film, un polariseur réfléchissant a été placé; il consistait en deux miroirs multicouches Mo/Si placés parallèlement l'un à l'autre. L'angle d'incidence était 38° par rapport à la normale à la surface. La réflectivité de la lumière a été mesurée comme étant 25% à 19.6 nm et l'efficacité de réflexion relative pour les deux composants polarisés était estimé être supérieur à 100 . Ce polariseur pourrait être tourné autour du faisceau de lumière incident. La partie centrale de l'image de la raie spectrale a été analysée par le polariseur, et la partie de la raie passant par le polariseur a été enregistrée dans le but de surveiller la reproductibilité de l'intensité de sortie laser.

Ce plasma a été produit avec une impulsion assez longue, de sorte que les anisotropies de la distribution des vitesses des électrons était peu susceptible de se développer. Au contraire, l'alignement observé a été attribué au piégeage anisotrope du rayonnement de la raie de résonance de $2p^5 3s^3 P_1 \rightarrow 2p^6^1 S_0$ ayant la longueur d'onde de 0.98 nm ; le plasma avait un mouvement de ruissellement dans la direction normale à la surface, ou dans la direction de l'axe de quantification, résultant en un gradient de vitesse de 10^7 cm s^{-1} par $100 \mu\text{m}$. Ce gradient réduit, en effet, l'épaisseur optique du plasma dans cette direction par rapport aux directions perpendiculaires, créant ainsi un piégeage spatialement anisotrope des radiations [17].

3.5 Modèle PACR (population-alignment collisional-radiative)

3.5.1 Matrice densité

On considère une assemblée d'ions dépourvus de structure hyperfine (i.e., dont le noyau a un spin nul) et on pose les hypothèses suivantes [1,5] :

- 1- Il existe une symétrie axiale autour de l'axe z (qu'on prend comme axe de quantification).
- 2- Il n'y a pas de cohérence entre les sous-niveaux Zeeman appartenant à différents niveaux. Il y a aussi absence de cohérence entre les sous-niveaux Zeeman au sein d'un même niveau. On spécifie l'état de l'ion par les nombres quantiques (i) moment angulaire électronique J , (ii) sa projection M sur l'axe z , et (iii) un ensemble de nombres quantiques additionnels désigné par β , qui sont nécessaires pour définir complètement l'état ionique.
- 3- Les champs électrique et magnétique sont absents.

Ces hypothèses impliquent que le système atomique est décrit par une superposition incohérente des différents niveaux βJ et sa matrice densité se réduit à une sommation des matrices densités de chaque niveau βJ [18,19].

$$\rho(\beta J) = \sum_{MM'} \rho_{M,M'}(\beta J) |\beta JM\rangle \langle \beta JM'| \quad (3.1)$$

où les éléments non diagonaux $\rho_{M,M'}(\beta J)$ (i.e., éléments $\langle \beta JM | \rho | \beta JM' \rangle$ avec $M \neq M'$) décrivent la cohérence et les éléments diagonaux ($M = M'$) représentent la population du sous-niveau magnétique M . Au lieu de travailler avec $|\beta JM\rangle \langle \beta JM'|$, il est plus avantageux d'introduire l'ensemble des opérateurs tensoriels irréductibles $T_q^k(\beta J)$ définis par

$$T_q^k(\beta J) = \sum_{MM'} (-1)^{J-M} \sqrt{2k+1} \begin{pmatrix} J & J & k \\ M & -M' & -q \end{pmatrix} |\beta JM\rangle \langle \beta JM'| \quad (3.2)$$

avec $\begin{pmatrix} J & J & k \\ M & -M' & -q \end{pmatrix}$ se référant à un symbole $3j$. Notons que les valeurs possibles du nombre quantique k sont $k = 0, 1, \dots, 2J$. Comme indiqué dans l'hypothèse 1, nous considérons uniquement les situations de symétrie axiale pour lesquelles $\rho_{M,M'}(\beta J) = 0$ pour $M \neq M'$. Il en résulte que nous avons à traiter seulement le cas où $q = 0$ compte tenu des propriétés du symbole $3j$ qui s'annule

lorsque $M - M' - q \neq 0$. On peut développer Eq. (3.1) en termes d'opérateurs T_q^k définis par Eq. (3.2), on obtient alors

$$\rho(\beta J) = \rho_0^0(\beta J) T_0^0(\beta J) + \rho_0^2(\beta J) T_0^2(\beta J) + \rho_0^4(\beta J) T_0^4(\beta J) + \dots \quad (3.3)$$

où les coefficients de développement $\rho_0^k(\beta J)$, appelés tenseurs statistiques ou multipôles d'état, sont liés aux populations $N_M(\beta J) \equiv \rho_{M,M}(\beta J)$ des sous-niveaux magnétiques M du niveau βJ par

$$\rho_0^k(\beta J) = \sum_M (-1)^{J-M} \sqrt{2k+1} \begin{pmatrix} J & J & k \\ M & -M & 0 \end{pmatrix} N_M(\beta J) \quad (3.4)$$

Notons que les termes de développement pour les valeurs impaires de k ne contribuent pas dans Eq. (3.3) à cause des hypothèses considérées précédemment [18], à savoir la symétrie axiale du milieu plasma. Souvent, on néglige les tenseurs statistiques de rang k supérieur ou égal à 6, et on utilise seulement les 3 premiers termes $k = 0, 2$ et 4 qui correspondent à la population ρ_0^0 , l'alignement ρ_0^2 et l'alignement additif ρ_0^4 . Donnons les expressions de ρ_0^k en fonction des populations $N_M(\beta J)$ des sous-niveaux magnétiques. Pour $k = 0$, ρ_0^0 est proportionnel à la population $N(\beta J) = \sum_M N_M(\beta J)$ selon

$$\rho_0^0(\beta J) = \frac{N(\beta J)}{\sqrt{2J+1}}, \quad (3.5)$$

ce qui revient à écrire pour $J = 0$, $\rho_0^0 = N_0$; pour $J = 1/2$, $\rho_0^0 = \sqrt{2} N_{1/2}$; pour $J = 1$, $\rho_0^0 = (N_0 + 2N_1)/\sqrt{3}$; pour $J = 3/2$, $\rho_0^0 = N_{3/2} + N_{1/2}$; pour $J = 2$, $\rho_0^0 = (N_0 + 2N_1 + 2N_2)/\sqrt{5}$. Concernant $k = 2$ ou 4 , on a les relations suivantes entre ρ_0^k et N_M : pour $J = 1$, $\rho_0^2 = (N_1 - N_0)/\sqrt{3/2}$; pour $J = 3/2$, $\rho_0^2 = N_{3/2} - N_{1/2}$; pour $J = 2$, $\rho_0^2 = (2N_2 - N_1 - N_0)/\sqrt{7/2}$ et $\rho_0^4 = (N_2 - 4N_1 + 3N_0)/\sqrt{35/2}$.

Dans le modèle collisionnel-radiatif conventionnel appliqué à un plasma isotrope [20-22], on travaille avec un système d'équations couplées de populations de chaque niveau, l'intensité d'une raie d'émission dépend seulement de la population du niveau supérieur. Pour un plasma présentant une symétrie cylindrique, il faut tenir compte de l'alignement qui est une mesure de déséquilibre de populations des sous-niveaux magnétiques M et M' avec $|M| \neq |M'|$. Cet alignement conduit à une polarisation linéaire de la raie d'émission et à une anisotropie spatiale de son intensité. Mentionnons qu'en général, les tenseurs statistiques $\rho_q^k(\beta J)$ sont connectés à la symétrie du système. Pour un système ayant la symétrie sphérique, les valeurs de ρ_q^k avec $k \neq 0$ sont nulles et donc seul ρ_0^0 existe. Pour un système ayant la symétrie axiale, tous les tenseurs statistiques ρ_q^k avec $q \neq 0$ sont nuls.

Dans le formalisme de PPS, on travaille avec l'alignement $\rho_0^k(\beta J)$ des niveaux ($k = 2, 4$), en plus de leur population $\rho_0^0(\beta J)$ (à un facteur près). Cette méthode s'appelle le modèle GPACR (generalized population-alignment collisional-radiative). Dans ce modèle, on inclut les processus suivants : création d'alignement (population vers alignement $\rho_0^0 \rightarrow \rho_0^{2,4}$), destruction d'alignement (alignement vers population $\rho_0^{2,4} \rightarrow \rho_0^0$), et transfert d'alignement (alignement vers alignement $\rho_0^{2,4} \rightarrow \rho_0^{2,4}$).

3.5.2 Transitions collisionnelle et radiative

Pour des ions en collision avec un faisceau monoénergétique d'électrons, l'évolution temporelle du tenseur statistique se rapportant à l'axe de quantification z parallèle à la direction du faisceau est régie par

$$\frac{d\rho_0^k(\beta J)_{\text{beam}}}{dt} = - \sum_{\beta' J' k'} R_0^{kk'}(\beta J \rightarrow \beta' J') \rho_0^{k'}(\beta' J') \quad (3.6)$$

où la matrice de relaxation $R_0^{kk'}$ contient des sections efficaces d'excitation ou de désexcitation collisionnelle $\sigma_0^{kk'}(\beta J \rightarrow \beta' J')$ ainsi que les taux de déclin radiatif spontané des niveaux excités. Pour les transitions collisionnelles

$$R_0^{kk'} = \mp n_e v \sigma_0^{kk'}(\beta J \rightarrow \beta' J') \quad (3.7)$$

où v et n_e sont la vitesse et la densité des électrons, respectivement, le signe moins s'applique dans le cas où ($\beta J \equiv \beta' J'$) (collisions élastiques) tandis que le signe plus s'applique pour les collisions inélastiques pour lesquelles l'expression des sections efficaces $\sigma_0^{kk'}$ est donnée dans le Chapitre 5.

Lorsque les électrons de collisions ne sont pas unidirectionnels mais caractérisés par une distribution angulaire arbitraire notée $f_v(\theta)$ de symétrie axiale, où θ est l'angle que fait le vecteur vitesse \mathbf{v} de l'électron avec l'axe z , alors la matrice de relaxation est donnée par [1,5,6]

$$\begin{aligned} R_0^{kk'} &= \sum_q (-1)^q R_{q \text{ beam}}^{kk'} \sum_K (2K+1) \begin{pmatrix} k & k' & K \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k & k' & K \\ q & -q & 0 \end{pmatrix} \\ &\times \int_0^\pi f_v(\theta) P_K(\cos \theta) \sin \theta d\theta \end{aligned} \quad (3.8)$$

où $P_K(\cos \theta)$ est le polynôme de Legendre d'ordre K . Il est utile de préciser que dans ces conditions, le calcul de la matrice de relaxation $R_0^{kk'}$ nécessite la connaissance de celle $R_{q \text{ beam}}^{kk'}$ relative aux électrons unidirectionnels pour $q \neq 0$, autrement

dit nécessite la détermination au préalable des sections efficaces de transfert de cohérence.

On considère maintenant la situation dans laquelle les électrons de collision ne sont pas monoénergétiques, mais ont une distribution de vitesse sur \mathbf{v} , désignée par $f(v, \theta)$. Il convient de développer $f(v, \theta)$ en série de polynômes de Legendre

$$f(v, \theta) = \sum_K f_K(v) P_K(\cos \theta) \quad (3.9)$$

avec

$$f_K(v) = \frac{2K+1}{2} \int_0^\pi f(v, \theta) P_K(\cos \theta) \sin \theta d\theta$$

La définition conventionnelle de la population $n(\beta J)$ du niveau βJ est égale à $\sqrt{2J+1} \rho_0^0(\beta J)$ conformément à Eq.(3.5). A partir de Eq.(3.7), on peut définir les coefficients de taux $C_0^{kk'}$ pour la transition $\beta J \rightarrow \beta' J'$ comme suit

$$\begin{aligned} C_0^{kk'}(\beta J \rightarrow \beta' J') &= \sum_q (-1)^q n_e v (\mp \sigma_q^{kk'}(\beta J \rightarrow \beta' J')) \\ &\times \sum_K (2K+1) \begin{pmatrix} k & k' & K \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k & k' & K \\ q & -q & 0 \end{pmatrix} \\ &\times \int_0^\pi f_v(\theta) P_K(\cos \theta) \sin \theta d\theta \end{aligned} \quad (3.10)$$

Les transitions radiatives spontanées sont isotropes dans le sens où la probabilité de déclin radiatif vers un niveau à partir d'un sous-niveau spécifique M_J ne dépend pas de M_J . Il en résulte que $A^{20}(\beta' J' \rightarrow \beta J) = A^{02}(\beta' J' \rightarrow \beta J) = 0$ et on a essentiellement 2 taux de transition radiative pour $\beta' J' \rightarrow \beta J$ avec ($\beta' J' \neq \beta J$)

$$A^{00}(\beta' J' \rightarrow \beta J) = A(\beta' J' \rightarrow \beta J) \quad (3.11)$$

$$A^{22}(\beta' J' \rightarrow \beta J) = (-1)^{J'+J+1} (2J'+1) \begin{Bmatrix} J' & J' & 2 \\ J & J & 1 \end{Bmatrix} A(\beta' J' \rightarrow \beta J) \quad (3.12)$$

où $A(\beta' J' \rightarrow \beta J)$ est le coefficient d'Einstein pour l'émission spontanée de niveau à niveau et $\begin{Bmatrix} J' & J' & 2 \\ J & J & 1 \end{Bmatrix}$ représente le symbole $6j$. En général, la formule tensorielle des transitions radiatives de type absorption (ou photoexcitation) ou

émission induite est comme suit [22]

$$\begin{aligned}
 {}^K A^{kk'}(\beta' J' \rightarrow \beta J) &= \int A^{kk'}(\beta' J' \rightarrow \beta J; \hat{k}_p) P_K(\cos \theta_p) d\hat{k}_p \\
 &= 3(-1)^{k'}(2J'+1)\sqrt{(2k+1)(2k'+1)} \\
 &\times \begin{Bmatrix} J' & J & 1 \\ J' & J & 1 \\ k & k' & K \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & K \\ -1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k & k' & K \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} A(\beta' J' \rightarrow \beta J) \quad (3.13)
 \end{aligned}$$

où $\hat{k}_p = (\theta_p, \phi_p)$ spécifie la direction du vecteur d'onde \mathbf{k}_p du photon absorbé ou émis, et K est toujours pair ($K = 0$ ou 2).

3.5.3 Système d'équations cinétiques de taux

On construit maintenant les équations de taux pour un ensemble d'ions contenus dans un plasma selon Eq. (3.8)

a – Pour la population $n(\beta J)$ du niveau βJ , on a l'équation de taux suivante

$$\begin{aligned}
 \frac{dn(\beta J)}{dt} &= \sum_{\beta' J' \neq \beta J} n(\beta' J') [n_e C_e^{00}(\beta' J' \rightarrow \beta J) + A^{00}(\beta' J' \rightarrow \beta J)] \\
 &+ \sum_{\beta' J' \neq \beta J} a(\beta' J') n_e C_e^{20}(\beta' J' \rightarrow \beta J) + \sum_{\beta' J' \neq \beta J} a^+(\beta' J') n_e C_e^{40}(\beta' J' \rightarrow \beta J) \\
 &- \sum_{\beta' J' \neq \beta J} n(\beta J) [n_e C_e^{00}(\beta J \rightarrow \beta' J') + A^{00}(\beta J \rightarrow \beta' J')] \quad (3.14)
 \end{aligned}$$

b – Pour l'alignement $a(\beta J) \equiv \rho_0^2(\beta J)$, on a

$$\begin{aligned}
 \frac{da(\beta J)}{dt} &= \sum_{\beta' J' \neq \beta J} n(\beta' J') n_e C_e^{02}(\beta' J' \rightarrow \beta J) \\
 &+ \sum_{\beta' J' \neq \beta J} a(\beta' J') [n_e C_e^{22}(\beta' J' \rightarrow \beta J) + A^{22}(\beta' J' \rightarrow \beta J)] \\
 &+ \sum_{\beta' J' \neq \beta J} a^+(\beta' J') n_e C_e^{42}(\beta' J' \rightarrow \beta J) \\
 &- \sum_{\beta J \neq \beta' J'} a(\beta J) [n_e C_e^{20}(\beta J \rightarrow \beta' J') + n_e C_e^{24}(\beta J \rightarrow \beta' J')] \quad (3.15)
 \end{aligned}$$

c – Pour l'alignement additif $a^+(\beta J) \equiv \rho_0^4(\beta J)$

$$\begin{aligned}
 \frac{da^+(\beta J)}{dt} &= \sum_{\beta' J' \neq \beta J} n(\beta' J') n_e C_e^{04}(\beta' J' \rightarrow \beta J) + \sum_{\beta' J' \neq \beta J} a(\beta' J') n_e C_e^{24}(\beta' J' \rightarrow \beta J) \\
 &+ \sum_{\beta' J' \neq \beta J} a^+(\beta' J') [n_e C_e^{44}(\beta' J' \rightarrow \beta J) + A^{44}(\beta' J' \rightarrow \beta J)] \\
 &+ \sum_{\beta' J' \neq \beta J} a^+(\beta J) [n_e C_e^{40}(\beta J \rightarrow \beta' J') + n_e C_e^{42}(\beta J \rightarrow \beta' J')] \quad (3.16)
 \end{aligned}$$

La première ligne du membre de droite de Eq. (3.14) représente l'équation de taux conventionnelle pour la population du niveau. La deuxième ligne désigne la production de la population à ce niveau βJ à partir du déséquilibre de la population,

ou de l'alignement, ou de l'alignement additif dans d'autres niveaux $\beta'J'$. La dernière ligne prend en compte le dépeuplement du niveau βJ vers d'autres niveaux $\beta'J'$.

La première ligne du membre de droite de Eq. (3.15) représente la production d'alignement à ce niveau βJ à partir de la population d'autres niveaux $\beta'J'$. La deuxième ligne se compose de deux contributions; la première partie correspond au transfert d'alignement venant des niveaux $\beta'J'$. La troisième ligne correspond au transfert d'alignement additif d'autres niveaux vers ce niveau. La dernière ligne représente la destruction de l'alignement.

Il est à noter que les Eqs. (3.14) à (3.16) décrivent la cinétique des ions dans l'état excité dans l'environnement du plasma ionisant, c'est-à-dire que la population et l'alignement du niveau excité sont créés à partir des atomes initialement dans l'état fondamental [5].

3.5.4 Intensité et polarisation

Supposons qu'on a un ensemble d'ions excités et qu'on observe l'émission d'une raie due à la transition $\beta J \rightarrow \beta'J'$ selon une direction donnée avec un polariseur linéaire dont l'axe de transmission est suivant la direction définie par le vecteur unitaire \mathbf{e} . L'intensité observée est donnée par

$$I(\mathbf{e}) = \frac{1}{8\pi} n(\beta J) A(\beta J \rightarrow \beta'J') h\nu \times \left[1 - (-1)^{J+J'} \frac{\sqrt{6}}{2} (1 - 3 \cos^2 \eta) (2J + 1) \begin{Bmatrix} J & J & 2 \\ 1 & 1 & J' \end{Bmatrix} \frac{a(\beta J)}{n(\beta J)} \right] dV d\Omega \quad (3.17)$$

où η est l'angle que fait \mathbf{e} avec l'axe de quantification z , dV est le volume du plasma qui est observé et $d\Omega$ l'angle solide sous-tendu par les instruments de détection.

Notons que la composante π du rayonnement est observée selon la direction du polariseur $\eta = 0$, de sorte que $1 - 3 \cos^2 \eta = -2$, et pour la composante σ $\eta = \pi/2$, de sorte que $1 - 3 \cos^2 \eta = 1$. En présence d'un alignement, l'intensité qui est proportionnelle à seulement la population est donnée par

$$\begin{aligned} I_0 &= \frac{1}{4\pi} n(\beta J) A(\beta J \rightarrow \beta'J') h\nu dV d\Omega \\ &= \frac{2}{3} (I_\pi + 2I_\sigma) \end{aligned} \quad (3.18)$$

En général, une intensité obtenue à travers un système de détection tel qu'un spectromètre a une contribution venant de l'alignement outre celui venant de la

population. Même si le système de détection a une sensibilité égale pour les deux composantes de polarisation, de telle manière qu'on obtient l'intensité $I_\pi + I_\sigma$, on ne peut pas éliminer la contribution venant de l'alignement.

Au lieu du degré de polarisation $P = (I_\pi - I_\sigma)/(I_\pi + I_\sigma)$, il convient parfois d'utiliser l'alignement longitudinal A_L qui est défini par

$$A_L = \frac{I_\pi - I_\sigma}{I_\pi + 2I_\sigma} = \frac{2P}{3 - P}, \quad (3.19)$$

et qui est directement proportionnel au rapport $a(\beta J)/n(\beta J)$,

$$A_L(\beta J \rightarrow \beta' J') = (-1)^{J+J'} \sqrt{\frac{3}{2}} (2J+1) \begin{Bmatrix} J & J & 2 \\ 1 & 1 & J' \end{Bmatrix} \frac{a(\beta J)}{n(\beta J)} \quad (3.20)$$

Toutes les caractéristiques des radiations émises par un système atomique, à savoir intensité, polarisations linéaire et circulaire, peuvent être déduites à partir des valeurs de ρ_q^k du niveau supérieur. Dans le cas où une radiation est due à un seul type de transition (par exemple, dipolaire électrique $E1$ ou quadrupolaire électrique $E2, \dots$, ou dipolaire magnétique $M1$ ou quadrupolaire magnétique $M2$) entre 2 niveaux βJ et $\beta' J'$, le degré de polarisation linéaire de la raie $\beta J \rightarrow \beta' J'$ émise suivant la direction définie par les angles (θ, ϕ) relatives au système d'axes $Oxyz$, est donné par [23]

$$P(\theta, \phi) = \pm \frac{\sum_{\substack{k=2, \dots, 2J \\ k \text{ pair}}} \begin{pmatrix} \lambda & \lambda & k \\ 1 & 1 & -2 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} k & J & J \\ J' & \lambda & \lambda \end{Bmatrix} \rho_0^k(\beta J) Y_k^2(\theta, \phi)}{\sum_{\substack{k=0, \dots, 2J \\ k \text{ pair}}} \begin{pmatrix} \lambda & \lambda & k \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} k & J & J \\ J' & \lambda & \lambda \end{Bmatrix} \rho_0^k(\beta J) Y_k^0(\theta, \phi)} \quad (3.21)$$

où λ est la multipolarité de la radiation, i.e., $\lambda = 1$ pour les transitions dipolaires ($E1, M1$) et $\lambda = 2$ pour les transitions quadrupolaires ($E2, M2$), $Y_k^2(\theta, \phi)$ désigne l'harmonique sphérique, le signe $+$ devant la fraction s'applique pour les transitions électriques alors que le signe $-$ s'applique pour les transitions magnétiques.

Références

- [1] T. Fujimoto, *Plasma Polarization Spectroscopy* edited by T. Fujimoto and A. Iwamae, Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics (Springer, Berlin, 2008).
- [2] H. Kunze, *Introduction to Plasma Spectroscopy* Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics (Springer, Germany, 2009).
- [3] H. Griem, *Plasma Spectroscopy*, McGraw-Hill, (1965).
- [4] U. Fantz, *Basic of plasma spectroscopy*, Plasma Sources Sci. Technol. **15**, S135 (2006).
- [5] T. Fujimoto and S. A. Kazantsev : Plasma Phys. Control. Fusion **39** 1267 (1997).
- [6] S. A. Kazantsev, A. G. Petrashen, and N. M. Firstova, Impact Spectropolarimetric Sensing (Kluwer Academic/Plenum, New York, 1999).
- [7] T. Fujimoto, H. Sahara, T. Kawachi, T. Kallstenius, M. Goto, H. Kawase, T. Furukubo, T. Maekawa, and Y. Terumichi, Phys. Rev. E **54**, R2240 (1996).
- [8] T. Inoue, M. Nakai, A. Tanaka, K. Kawakami, A. Iwamae, T. Fujimoto, M. Yoshikawa, and T. Tamano, Plasma Phys. Control. Fusion **43**, L9 (2001).
- [9] A. Iwamae, A. Tanaka, T. Inoue, T. Fujimoto, H. L. Zhang, D. P. Kilcrease, and G. Csanak, in *Proceedings of the Third US-Japan Plasma Polarization Spectroscopy Workshop*, edited by P. Beiersdorfer and T. Fujimoto, University of California Lawrence Livermore National Laboratory Report UCRL-ID-146907 (2001) p. 165.
- [10] H. Yoneda, N. Hasegawa, S. Kawana and K. Ueda, Phys. Rev. E **55** (1997).
- [11] T. Fujimoto, J. Phys. Soc. Jpn. **47**, 265 (1979).
- [12] T. Kawachi, K. Murai, G. Yuan, S. Ninomiya, R. Kodama, H. Daido, Y. Kato, and T. Fujimoto, Phys. Rev. Lett. **75**, 3826 (1995).
- [13] L. Pieroni and S. E. Segre, Phys. Rev. Lett. **34**, 928 (1975); B. Coppi, F. Pegoraro, R. Pozzoli, and G. Rewoldt, Nucl. Fusion **16**, 309 (1976).
- [14] J. C. Kieffer, J. P. Matte, H. Pépin, M. Chaker, Y. Beaudoin, T. Johnston, C. Y. Chien, S. Coe, G. Mourou, and J. Dubau, Phys. Rev. Lett. **68**, 480 (1992).

- [15] J. C. Kieffer, J. P. Matte, M. Chaker, Y. Beaudoin, C. Y. Chen, S. Coe, G. Mourou, J. Dubau, and M. K. Inal, *Phys. Rev. E* **48**, 4648 (1993).
- [16] Y. Itikawa, R. Srivastava, and K. Sakimoto, *Phys. Rev. A* **44**, 7195 (1991).
- [17] K. Blum, *Density Matrix Theory and Applications*, (New York : Plenum, 1981).
- [18] U. Fano, *Rev. Mod. Phys.* **29**, 1 (1957).
- [19] D. R. Bates, A. E. Kingston, and R. W. P. McWhirter, *Proc. R. Soc.* **267**, 297 (1962).
- [20] D. R. Bates and A. E. Kingston, *Planet Space Sci.* **11**, 1 (1963).
- [21] R. W. P. McWhirter and A. G. Hearn, *Proc. Phys. Soc.* **82**, 641 (1963).
- [22] G. Peach, N. Feautrier, and H. E. Saraph, *J. Phys. A : Math. Theor.* **42**, 445501 (2009).
- [23] J. Dubau, in *Proceedings of the Japan-US Workshop on Plasma Polarization Spectroscopy and The International Seminar on Plasma Polarization Spectroscopy*, edited by T. Fujimoto and P. Beiersdorfer, NIFS-PROC-37 (1998) p. 9.

Chapitre 4

Composantes multipolaires des forces de collision électron-ion

Sommaire

4.1	Introduction	42
4.2	Composantes multipolaires de sections efficaces d'excitation d'ions par un faisceau d'électrons	43
4.3	Cas particulier d'électrons incidents isotropes	49
4.4	Expression factorisée des composantes multipolaires de sections efficaces d'excitation	50
4.4.1	Cas particulier de $K = 0$	55
4.4.2	Cas particulier de $k = 0$	56
4.4.3	Distribution isotrope d'électrons	57
4.4.4	Distribution unidirectionnelle d'électrons le long de l'axe z	58
4.5	Relation entre $\langle \sigma_q^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) \rangle$ pour une distribution arbitraire et $\sigma_q^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f)_{z\text{-beam}}$	59
4.6	Références	62

4.1 Introduction

L'interprétation de raies polarisées émises par des ions dans un plasma caractérisé par une distribution de vitesses d'électrons arbitraire ayant une symétrie de révolution autour de l'axe z nécessite la connaissance des valeurs de composantes multipolaires de sections efficaces d'excitation par impact d'électrons. D'après Csanak *et al.* [1], ces composantes multipolaires sont notées $\sigma_q^{kk'}$ et correspondent aux sections efficaces de création d'alignement, destruction d'alignement et de transfert d'alignement et de cohérence, selon les valeurs des nombres quantiques k , k' et q avec $0 \leq k \leq 2J_i$, $0 \leq k' \leq 2J_f$, et $-\min(k, k') \leq q \leq +\min(k, k')$, où J_i et J_f sont les moments cinétiques totaux des niveaux initial et final de la transition.

Les sections efficaces de création d'alignement se réfèrent à $\sigma_0^{0k'}$ avec $k' = 2, 4, \dots$, ceux de destruction d'alignement à σ_0^{k0} avec $k = 2, 4, \dots$, et ceux de transfert d'alignement et de transfert de cohérence correspondent à $\sigma_{q=0}^{kk'}$ et $\sigma_{q \neq 0}^{kk'}$, respectivement, avec $k, k' = 2, 4, \dots$

Très souvent dans les rares travaux publiés [1,2], seules les sections efficaces multipolaires avec k et k' tous deux inférieurs ou égaux à 2 sont pris en compte. Parfois, celles avec k et/ou k' valant 4 et même 6 doivent être pris en considération dans la modélisation des émissions de raie de type quadrupolaire et octupolaires caractérisant des plasmas particulièrement chauds [3]. Les $\sigma_q^{kk'}$ peuvent être déduits des sections efficaces d'excitation entre sous-niveaux magnétiques pour $q = 0$, mais ce n'est pas le cas pour $q \neq 0$. Dans ce dernier cas, k et k' sont tous deux non nuls, et les calculs des sections efficaces $\sigma_{q \neq 0}^{kk'}$ sont plus élaborés car ils prennent en compte des cohérences quantiques entre les sous-niveaux magnétiques M_i et M'_i (M_f et M'_f) appartenant aux niveaux initial (final), pour lesquels $M_i - M'_i = M_f - M'_f = q$. Les sections efficaces de transfert de cohérence sont requis dans la détermination des coefficients de taux de transfert d'alignement impliqués dans le modèle généralisé de population-alignement collisionnel-radiatif (GPACR) pour les plasmas dans lesquels les électrons libres sont décrits par une distribution de vitesses arbitraire ayant une symétrie cylindrique [2,4].

Outre leur important rôle dans l'interprétation de l'émission de raies polarisées émergeant de tels plasmas à des fins de diagnostic, les données $\sigma_{q \neq 0}^{kk'}$ fournissent un test plus critique des approches de diffusion électron-ion utilisés que les sections efficaces entre les sous-niveaux magnétiques. La théorie des sections efficaces mul-

tipolaires pour la diffusion élastique et inélastique d'électrons par des ions a été perfectionnée par Csanak *et al.* [5] en utilisant l'approche du paquet d'ondes de propagation dans le traitement quantique de la collision électron-ion. Dans toute cette thèse, nous nous limitons à la diffusion inélastique électron-ion, autrement dit à l'excitation ou désexcitation d'ions par impact d'électrons entre des niveaux distincts de structure fine. Nous dérivons une expression originale pour les sections efficaces multipolaires d'excitation par un faisceau d'électrons non polarisés dirigé le long de l'axe z , dans le cadre de la méthode de factorisation de l'approximation RDW (distorted-wave relativiste).

4.2 Composantes multipolaires de sections efficaces d'excitation d'ions par un faisceau d'électrons

On cherche à établir une expression des composantes multipolaires de sections efficaces d'excitation d'ions par impact d'électrons en fonction des éléments de matrice de transition dans l'approximation distorted-wave relativiste (RDW). Le point de départ est l'amplitude de diffusion par un ion d'un électron de composante de spin m_{s_i} et de vecteur d'onde $\mathbf{k}_i \equiv (k_i, \hat{\mathbf{k}}_i)$ ($k_i = |\mathbf{k}_i|$ et $\hat{\mathbf{k}}_i = \mathbf{k}_i/k_i$) dans la direction $\hat{\mathbf{k}}_f$ avec le nombre d'onde k_f et la composante de spin m_{s_f} associée à la transition à partir de l'état $\beta_i J_i M_i$ vers l'état $\beta_f J_f M_f$ dans l'ion cible, qui est donnée par (voir équation (9.1) dans [6])

$$\begin{aligned} f_{\beta_f J_f M_f, \beta_i J_i M_i}^{m_{s_f} m_{s_i}}(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i) &= \frac{2\pi}{k_i} \sum_{\substack{l_i m_{l_i} j_i m_i \\ l_f m_{l_f} j_f m_f}} i^{l_i - l_f + 1} e^{i(\delta_{\kappa_i} + \delta_{\kappa_f})} Y_{l_i}^{m_{l_i}^*}(\hat{\mathbf{k}}_i) Y_{l_f}^{m_{l_f}}(\hat{\mathbf{k}}_f) \\ &\times C\left(l_i \frac{1}{2} m_{l_i} m_{s_i}; j_i m_i\right) C\left(l_f \frac{1}{2} m_{l_f} m_{s_f}; j_f m_f\right) T(\alpha_i, \alpha_f), \end{aligned} \quad (4.1)$$

où T est l'élément de matrice de transitions entre les états non couplés initial $\alpha_i \equiv \beta_i J_i M_i k_i l_i j_i m_i$ et final $\alpha_f \equiv \beta_f J_f M_f k_f l_f j_f m_f$ du système électron+ion. J_k est le moment cinétique total de l'état de l'ion, M_k sa projection sur l'axe z et β_k représente l'ensemble des nombres quantiques supplémentaires nécessaires pour caractériser cet état, l'indice $k = i$ étant pour l'état initial et $k = j$ pour l'état final; $(l_i, m_{l_i}, m_{s_i}, j_i, m_i)$ et $(l_f, m_{l_f}, m_{s_f}, j_f, m_f)$ se réfèrent aux moments cinétiques orbitaux, de spin et totaux des électrons libres incidents et diffusés; $Y_{l_i}^{m_{l_i}}$ et $Y_{l_f}^{m_{l_f}}$ désignent les harmoniques sphériques; δ_{κ_i} et δ_{κ_f} sont les déphasages coulombiens; $C(j_1 j_2 m_1 m_2; j m)$ désigne les coefficients de Clebsch-Gordan.

Les composantes multipolaires de sections efficaces d'excitation (cas des collisions inélastiques) sont définies par (voir équation (40) dans [5]) :

$$\begin{aligned} \sigma_q^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f; \mathbf{k}_i) &= \sum_{M_f M'_f} (-1)^{J_f - M_f} \sqrt{2k' + 1} \begin{pmatrix} J_f & J_f & k' \\ M_f & -M'_f & -q \end{pmatrix} \\ &\times \sum_{M_i M'_i} (-1)^{J_i - M_i} \sqrt{2k + 1} \begin{pmatrix} J_i & J_i & k \\ M_i & -M'_i & -q \end{pmatrix} \\ &\times \sigma(\beta_i J_i M_i M'_i \rightarrow \beta_f J_f M_f M'_f; \mathbf{k}_i), \end{aligned} \quad (4.2)$$

avec

$$\begin{aligned} \sigma(\beta_i J_i M_i M'_i \rightarrow \beta_f J_f M_f M'_f; \mathbf{k}_i) &= \frac{1}{2} \sum_{m_{s_i} m_{s_f}} \int d\hat{\mathbf{k}}_f f_{\beta_f J_f M_f, \beta_i J_i M_i}^{m_{s_f} m_{s_i}}(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i) \\ &\times f_{\beta_f J_f M'_f, \beta_i J_i M'_i}^{m_{s_f} m_{s_i}^*}(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i). \end{aligned} \quad (4.3)$$

Dans Eq. (4.2), $\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix}$ désigne un symbole $3j$ qui relié au coefficient de Clebsch-Gordan par

$$C(j_1 j_2 m_1 m_2; j m) = (-1)^{j_1 - j_2 + m} \sqrt{2j + 1} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix}$$

En écrivant Eq. (4.3), il a été supposé que les électrons incidents sont non polarisés en spin, c'est la raison pour laquelle nous avons moyenné sur m_{s_i} . En remplaçant Eq. (4.1) dans Eq. (4.3) et en appliquant la relation d'orthonormalisation satisfaite par les harmoniques sphériques en ce qui concerne l'intégration sur $\hat{\mathbf{k}}_f$ ainsi que la relation d'orthogonalité des coefficients de Clebsch-Gordan suivante

$$\sum_{m_{l_f} m_{s_f}} C\left(l_f \frac{1}{2} m_{l_f} m_{s_f}; j_f m_f\right) C\left(l_f \frac{1}{2} m_{l_f} m_{s_f}; j'_f m'_f\right) = \delta_{j_f j'_f} \delta_{m_f m'_f}, \quad (4.4)$$

on obtient

$$\begin{aligned} \sigma(\beta_i J_i M_i M'_i \rightarrow \beta_f J_f M_f M'_f; \mathbf{k}_i) &= \frac{2\pi^2}{k_i^2} \sum_{\substack{l_i m_{l_i} m_{s_i} l_f \\ j_i m_i j_f m_f}} \sum_{l'_i m'_{l_i} j'_i m'_i} j_i^{l_i - l'_i} e^{i(\delta_{\kappa_i} - \delta_{\kappa'_i})} \\ &\times Y_{l_i}^{m_i^*}(\hat{\mathbf{k}}_i) Y_{l'_i}^{m'_{l_i}}(\hat{\mathbf{k}}_i) C\left(l_i \frac{1}{2} m_{l_i} m_{s_i}; j_i m_i\right) C\left(l'_i \frac{1}{2} m'_{l_i} m_{s_i}; j'_i m'_i\right) \\ &\times T(\alpha_i, \alpha_f) T^*(\alpha'_i, \alpha'_f), \end{aligned} \quad (4.5)$$

où $\alpha'_i \equiv \beta_i J_i M'_i k_i l'_i j'_i m'_i$ tandis que α'_f diffère de α_f en ce que seul M'_f remplace M_f . Nous supposons que la distribution angulaire des électrons incidents possède une symétrie cylindrique par rapport à l'axe z , ce qui permet de moyenné sur

l'angle azimutal ϕ_i de \mathbf{k}_i ($\hat{\mathbf{k}}_i = (\theta_i, \phi_i)$), soit

$$\sigma(\beta_i J_i M_i M_i' \rightarrow \beta_f J_f M_f M_f'; k_i \theta_i) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi_i \sigma(\beta_i J_i M_i M_i' \rightarrow \beta_f J_f M_f M_f'; \mathbf{k}_i) \quad (4.6)$$

En insérant Eq. (4.5) dans Eq. (4.6), et en utilisant le théorème d'addition des harmoniques sphériques

$$\begin{aligned} Y_{l_i}^{m_i}(\hat{\mathbf{k}}_i) Y_{l_i'}^{m_i'}(\hat{\mathbf{k}}_i) &= \sum_{LM_L} (-1)^{m_i'} \sqrt{\frac{(2l_i+1)(2l_i'+1)(2L+1)}{4\pi}} \\ &\times \begin{pmatrix} l_i & l_i' & L \\ m_i & -m_i' & M_L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_i & l_i' & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} Y_L^{M_L}(\hat{\mathbf{k}}_i), \end{aligned} \quad (4.7)$$

et sachant que

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi_i Y_L^{M_L}(\hat{\mathbf{k}}_i) = \sqrt{\frac{(2L+1)}{4\pi}} P_L(\cos \theta_i) \delta_{M_L 0}, \quad (4.8)$$

on aboutit à

$$\begin{aligned} \sigma(\beta_i J_i M_i M_i' \rightarrow \beta_f J_f M_f M_f'; k_i \theta_i) &= \frac{\pi}{2k_i^2} \sum_{l_i m_i m_{s_i} l_i'} \sum_{l_f j_f m_f} \sum_{j_i m_i j_i'} i^{l_i - l_i'} e^{i(\delta_{\kappa_i} - \delta_{\kappa_i'})} \\ &\times \sum_L (-1)^{m_i} \sqrt{(2l_i+1)(2l_i'+1)(2L+1)} P_L(\cos \theta_i) \\ &\times \begin{pmatrix} l_i & l_i' & L \\ m_i & -m_i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_i & l_i' & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} C\left(l_i \frac{1}{2} m_i m_{s_i}; j_i m_i\right) \\ &\times C\left(l_i' \frac{1}{2} m_i m_{s_i}; j_i' m_i\right) T(\alpha_i, \alpha_f) T^*(\alpha_i', \alpha_f'). \end{aligned} \quad (4.9)$$

Notons que pour des raisons de conservation de la parité, $(l_i + l_i')$ doit être pair. Par conséquent, compte tenu de la présence dans Eq. (4.9) du symbole $3j \begin{pmatrix} l_i & l_i' & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ qui s'annule si $l_i + l_i' + L$ est impair, seules les valeurs paires de L contribuent à la sommation dans Eq. (4.9). On peut maintenant effectuer la sommation sur les nombres quantiques magnétiques m_{l_i} et m_{s_i} dans Eq. (4.9) en appliquant la

relation suivante

$$\begin{aligned}
& \sum_{m_i, m_{s_i}} (-1)^{m_i} \begin{pmatrix} l_i & l'_i & L \\ m_{l_i} & -m_{l_i} & 0 \end{pmatrix} C\left(l_i \frac{1}{2} m_{l_i} m_{s_i}; j_i m_i\right) C\left(l'_i \frac{1}{2} m_{l_i} m_{s_i}; j'_i m_i\right) \\
&= \sum_{m_i, m_{s_i}} (-1)^{m_i+1-l_i-l'_i-2m_i} \sqrt{(2j_i+1)(2j'_i+1)} \begin{pmatrix} l_i & l'_i & L \\ m_{l_i} & -m_{l_i} & 0 \end{pmatrix} \\
&\quad \times \begin{pmatrix} l'_i & \frac{1}{2} & j'_i \\ m_{l_i} & m_{s_i} & -m_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & l_i & j_i \\ -m_{s_i} & -m_{l_i} & m_i \end{pmatrix} \\
&= (-1)^{j_i+j'_i+L+1/2-m_i} \sqrt{(2j_i+1)(2j'_i+1)} \begin{pmatrix} j_i & j'_i & L \\ m_i & -m_i & 0 \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} l_i & l'_i & L \\ j'_i & j_i & \frac{1}{2} \end{matrix} \right\}, \quad (4.10)
\end{aligned}$$

où $\left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_4 & j_5 & j_6 \end{matrix} \right\}$ désigne un symbole $6j$. Il s'ensuit que Eq. (4.9) devient :

$$\begin{aligned}
\sigma(\beta_i J_i M_i M'_i \rightarrow \beta_f J_f M_f M'_f; k_i \theta_i) &= \frac{\pi}{2k_i^2} \sum_{l_i, l'_i, l_f} \sum_{m_i, m'_i, m_f} i^{l_i-l'_i} e^{i(\delta_{\kappa_i}-\delta_{\kappa'_i})} \\
&\quad \times \sum_L (-1)^{j_i+j'_i+L+\frac{1}{2}-m_i} [l_i, l'_i, j_i, j'_i] [L]^2 P_L(\cos \theta_i) \begin{pmatrix} l_i & l'_i & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
&\quad \times \begin{pmatrix} j_i & j'_i & L \\ m_i & -m_i & 0 \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} l_i & l'_i & L \\ j'_i & j_i & \frac{1}{2} \end{matrix} \right\} T(\alpha_i, \alpha_f) T^*(\alpha'_i, \alpha'_f). \quad (4.11)
\end{aligned}$$

où $P_L(\cos \theta_i)$ est le polynôme de Legendre d'ordre L . Pour des raisons d'allègement d'écriture, la notation $[j_1, j_2, \dots] \equiv \sqrt{(2j_1+1)(2j_2+1)\dots}$ a été adoptée. Il convient de transformer la matrice T de la représentation angulaire non couplée α_k à la représentation couplée qui est désignée par $\gamma_k = \beta_k J_k k_k l_k j_k J M$ ($k = i$ ou f) dans laquelle J_k est couplé à j_k pour former le moment cinétique total J du système total électron-ion. Cette transformation est donnée par

$$T(\alpha_i, \alpha_f) = \sum_{JM} C\left(J_i j_i M_i m_i; JM\right) C\left(J_f j_f M_f m_f; JM\right) T(\gamma_i, \gamma_f). \quad (4.12)$$

La substitution de Eq. (4.12) dans Eq. (4.11) permet d'écrire

$$\begin{aligned}
\sigma(\beta_i J_i M_i M'_i \rightarrow \beta_f J_f M_f M'_f; k_i \theta_i) &= \frac{\pi}{2k_i^2} \sum_{l_i l'_i l_f} \sum_{\substack{j_i j'_i j_f \\ m_i m'_f}} i^{l_i - l'_i} e^{i(\delta_{\kappa_i} - \delta_{\kappa'_i})} \\
&\times \sum_L (-1)^{j_i + j'_i + L + \frac{1}{2} - m_i} [l_i, l'_i, j_i, j'_i] [L]^2 P_L(\cos \theta_i) \begin{pmatrix} l_i & l'_i & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
&\times \begin{pmatrix} j_i & j'_i & L \\ m_i & -m_i & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} l_i & l'_i & L \\ j'_i & j_i & \frac{1}{2} \end{Bmatrix} \sum_{\substack{J J' \\ M M'}} C(J_i j_i M_i m_i; J M) \\
&\times C(J_i j'_i M'_i m_i; J' M') C(J_f j_f M_f m_f; J M) C(J_f j_f M'_f m'_f; J' M') \\
&\times T(\gamma_i, \gamma_f) T^*(\gamma'_i, \gamma'_f) \tag{4.13}
\end{aligned}$$

L'insertion de Eq. (4.13) dans Eq. (4.2) conduit pour les composantes multipolaires de la section efficace d'excitation à

$$\begin{aligned}
\sigma_q^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f; k_i \theta_i) &= \frac{\pi}{2k_i^2} \sum_{\substack{M_i M'_i \\ M_f M'_f}} (-1)^{J_i + J_f - M_i - M_f} [k, k'] \begin{pmatrix} J_f & J_f & k' \\ M_f & -M'_f & -q \end{pmatrix} \\
&\times \begin{pmatrix} J_i & J_i & k \\ M_i & -M'_i & -q \end{pmatrix} \sum_{l_i l'_i l_f} \sum_{\substack{j_i j'_i j_f \\ m_i m'_f}} \sum_{\substack{J J' \\ M M'}} i^{l_i - l'_i} e^{i(\delta_{\kappa_i} - \delta_{\kappa'_i})} \sum_L (-1)^{L + \frac{1}{2} - m_i} \\
&\times [l_i, l'_i, j_i, j'_i] [L]^2 P_L(\cos \theta_i) \begin{pmatrix} l_i & l'_i & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_i & j'_i & L \\ m_i & -m_i & 0 \end{pmatrix} \\
&\times \begin{Bmatrix} l_i & l'_i & L \\ j'_i & j_i & \frac{1}{2} \end{Bmatrix} (-1)^{2J_i + 2J_f - 2j_f + 2M + 2M'} [J, J']^2 \begin{pmatrix} J_f & j_f & J \\ M_f & m_f & -M \end{pmatrix} \\
&\times \begin{pmatrix} J_f & j_f & J' \\ M'_f & m_f & -M' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_i & j_i & J \\ M_i & m_i & -M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_i & j'_i & J' \\ M'_i & m_i & -M' \end{pmatrix} \\
&\times T(\gamma_i, \gamma_f) T^*(\gamma'_i, \gamma'_f). \tag{4.14}
\end{aligned}$$

Les sommations sur tous les nombres quantiques magnétiques figurant dans Eq. (4.14), à savoir $M_i, M'_i, m_i, M_f, M'_f, m_f, M$ et M' , peuvent être effectuées en utilisant successivement les deux relations suivantes

$$\begin{aligned}
&\sum_{\substack{M_f M'_f \\ m_f}} (-1)^{2J_f + j_f + M_f + M'_f - m_f} \begin{pmatrix} J_f & J_f & k' \\ M_f & -M'_f & -q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_f & j_f & J' \\ M'_f & m_f & -M' \end{pmatrix} \\
&\times \begin{pmatrix} j_f & J_f & J \\ -m_f & -M_f & M \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J' & J & k' \\ -M' & M & -q \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} J' & J & k' \\ J_f & J_f & j_f \end{Bmatrix}, \tag{4.15}
\end{aligned}$$

et

$$\sum_{\substack{M_i M'_i m_i \\ M M'}} \begin{pmatrix} J_i & j_i & J \\ M_i & m_i & -M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_i & j'_i & J' \\ -M'_i & -m_i & M' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_i & J_i & k \\ M_i & -M'_i & -q \end{pmatrix} \\ \times \begin{pmatrix} j_i & j'_i & L \\ m_i & -m_i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J' & J & k' \\ -M' & M & -q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k & L & k' \\ -q & 0 & q \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} J_i & j_i & J \\ J_i & j'_i & J' \\ k & L & k' \end{matrix} \right\}, \quad (4.16)$$

où $\left\{ \begin{matrix} J_i & j_i & J \\ J_i & j'_i & J' \\ k & L & k' \end{matrix} \right\}$ désigne un symbole $9j$. L'expression finale des composantes multipolaire de la section efficace d'excitation est alors obtenue sous la forme :

$$\sigma_q^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f; k_i \theta_i) = \frac{\pi}{2k_i^2} [k, k'] \sum_{l_i l'_i l_f} \sum_{\substack{j_i j'_i j_f \\ J J'}} i^{l_i - l'_i} e^{i(\delta_{\kappa_i} - \delta_{\kappa'_i})} \\ \times \sum_L (-1)^{j'_i - J_f - J' - j_f + L + \frac{1}{2} + q} [l_i, l'_i, j_i, j'_i] [L, J, J']^2 P_L(\cos \theta_i) \\ \times \begin{pmatrix} l_i & l'_i & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k & k' & L \\ q & -q & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_i & l'_i & L \\ j'_i & j_i & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} J' & J & k' \\ J_f & J_f & j_f \end{matrix} \right\} \\ \times \left\{ \begin{matrix} J_i & j_i & J \\ J_i & j'_i & J' \\ k & L & k' \end{matrix} \right\} T(\gamma_i, \gamma_f) T^*(\gamma'_i, \gamma'_f). \quad (4.17)$$

Pour les ions hautement chargés qui nous intéressent dans ce travail, l'unitarisation de la matrice T n'est pas nécessaire, ce qui entraîne que la relation approchée $T(\gamma_i, \gamma_f) \approx -2i R(\gamma_i, \gamma_f)$ peut être utilisée. Dans ce cas, les composantes multipolaires de la section efficace d'excitation sont données en termes d'éléments de la matrice de réactance R par

$$\sigma_q^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f; k_i \theta_i) = \frac{2\pi}{k_i^2} [k, k'] \sum_{l_i l'_i l_f} \sum_{\substack{j_i j'_i j_f \\ J J'}} i^{l_i - l'_i} e^{i(\delta_{\kappa_i} - \delta_{\kappa'_i})} \\ \times \sum_L (-1)^{j'_i - J_f - J' - j_f + L + \frac{1}{2} + q} [l_i, l'_i, j_i, j'_i] [L, J, J']^2 P_L(\cos \theta_i) \\ \times \begin{pmatrix} l_i & l'_i & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k & k' & L \\ q & -q & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_i & l'_i & L \\ j'_i & j_i & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} J' & J & k' \\ J_f & J_f & j_f \end{matrix} \right\} \\ \times \left\{ \begin{matrix} J_i & j_i & J \\ J_i & j'_i & J' \\ k & L & k' \end{matrix} \right\} R(\gamma_i, \gamma_f) R^*(\gamma'_i, \gamma'_f). \quad (4.18)$$

4.3 Cas particulier d'électrons incidents isotropes

Reprenons Eq. (4.17) et considérons le cas particulier des collisions avec des électrons isotropes. Dans ce cas, la moyenne sur l'angle polaire θ_i conduit au fait que seul le terme $L = 0$ contribue dans Eq. (4.17). Cette unique contribution de L vient de la relation $\int_0^\pi P_L(\cos \theta_i) \sin \theta_i d\theta_i = 2\delta_{L0}$. Il en résulte que les composantes multipolaires de la section efficace se réduisent à

$$\begin{aligned}
\sigma_q^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f; k_i) &= \frac{1}{2} \int_0^\pi \sigma_q^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f; k_i \theta_i) \sin \theta_i d\theta_i \\
&= \frac{1}{2} [k, k'] \sum_{l_i l'_i l_f} \sum_{j_i j'_i j_f} i^{l_i - l'_i} e^{i(\delta_{\kappa_i} - \delta_{\kappa'_i})} (-1)^{j'_i - J_f - J' - j_f + L + \frac{1}{2} + q} [l_i, l'_i, j_i, j'_i] \\
&\times [J, J']^2 \begin{pmatrix} l_i & l'_i & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k & k' & 0 \\ q & -q & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} l_i & l'_i & 0 \\ j'_i & j_i & \frac{1}{2} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} J' & J & k' \\ J_f & J_f & j_f \end{Bmatrix} \\
&\times \begin{Bmatrix} J_i & j_i & J \\ J_i & j'_i & J' \\ k & 0 & k' \end{Bmatrix} T(\gamma_i, \gamma_f) T^*(\gamma'_i, \gamma'_f). \tag{4.19}
\end{aligned}$$

Les symboles $3j$, $6j$ et $9j$ intervenant dans Eq. (4.19) sont donnés par

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} l_i & l'_i & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} &= \frac{(-1)^{l_i}}{[l_i]} \delta_{l_i l'_i} & \begin{pmatrix} k & k' & 0 \\ q & -q & 0 \end{pmatrix} &= \frac{(-1)^{k-q}}{[k]} \delta_{kk'} \\
\begin{Bmatrix} l_i & l'_i & 0 \\ j'_i & j_i & \frac{1}{2} \end{Bmatrix} &= \frac{(-1)^{l_i + j_i + 1/2}}{[l_i, j_i]} \delta_{l_i l'_i} \delta_{j_i j'_i} \\
\begin{Bmatrix} J_i & j_i & J \\ J_i & j'_i & J' \\ k & 0 & k' \end{Bmatrix} &= \frac{(-1)^{J_i + j_i - k + J'}}{[j_i, k]} \begin{Bmatrix} J' & J & k \\ J_i & J_i & j_i \end{Bmatrix} \delta_{j_i j'_i} \delta_{kk'}, \tag{4.20}
\end{aligned}$$

Le résultat final est le suivant :

$$\begin{aligned}
\sigma_q^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f; k_i) &= \delta_{kk'} \frac{\pi}{2k_i^2} \sum_{l_i l'_i l_f} \sum_{j_i j'_i} (-1)^{J_i + J_f + j_i - j_f + 2J + 1} \\
&\times [J, J']^2 \begin{Bmatrix} J' & J & k \\ J_f & J_f & j_f \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} J' & J & k \\ J_i & J_i & j_i \end{Bmatrix} T(\gamma_i, \gamma_f) T^*(\gamma'_i, \gamma'_f). \tag{4.21}
\end{aligned}$$

Le facteur de phase dans l'équation ci-dessus peut être remplacé par

$$(-1)^{J_i + J_f + j_i - j_f + 2J + 1} \rightarrow (-1)^{J_i + J_f + j_i + j_f + 2J} \tag{4.22}$$

puisque $(-1)^{-j_f+1} = (-1)^{j_f-2j_f+1} = (-1)^{j_f}$, $2j_f$ étant un nombre impair. Mentionnons que γ'_i et γ'_f diffèrent de γ_i et γ_f , respectivement, en seulement J' à la place de J . Il est aussi important de noter que

- $\sigma_q^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f; k_i)$ donné par Eq. (4.21) ne dépend pas de la valeur de q , et donc dans les conditions où les électrons incidents sont isotropes, il convient de désigner les composantes multipolaires de la section efficace d'excitation par $\sigma^k(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f; k_i)$ avec le nombre quantique k qui prend les valeurs de 0 à $2 \min(J_i, J_f)$.
- σ^k obéit à la relation de symétrie

$$k_i^2 \sigma^k(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f; k_i) = k_f^2 \sigma^k(\beta_f J_f \rightarrow \beta_i J_i; k_f) \quad (4.23)$$

compte tenu de la symétrie en indices i et f remarquée dans Eq. (4.21).

4.4 Expression factorisée des composantes multipolaires de sections efficaces d'excitation

La méthode de factorisation introduite par Bar-Shalom *et al.* [8] dans le calcul numérique de sections efficaces d'excitation présente beaucoup d'avantages car elle permet de séparer les intégrations angulaires et radiales, ce qui réduit fortement le temps de programmation et conduit à une interpolation efficace dans l'évaluation des intégrales radiales. C'est cette méthode qui a été utilisée par Gu [7] dans son programme de calcul des sections efficaces d'excitation entre sous-niveaux magnétiques. Reprenons Eq. (4.11) et développons l'élément de matrice $T(\alpha_i, \alpha_f)$ selon les équations (48) et (50) de [7]

$$\begin{aligned} T(\alpha_i, \alpha_f) = & -2i \sum_{tQ} (-1)^{Q+j_i-m_i+J_i-M_i} \begin{pmatrix} j_i & t & j_f \\ -m_i & -Q & m_f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_i & t & J_f \\ -M_i & Q & M_f \end{pmatrix} \\ & \times \sum_{j_0 j_1} \langle \beta_i J_i || Z^t(j_0 j_1) || \beta_f J_f \rangle P^t(\tilde{j}_i \tilde{j}_f; j_0 j_1), \end{aligned} \quad (4.24)$$

où t désigne le rang multipolaire de l'interaction Coulombienne électron-électron (les valeurs possibles de t sont comprises entre $|J_i - J_f|$ et $J_i + J_f$); $\tilde{j}_i \equiv l_i j_i$ et $\tilde{j}_f \equiv l_f j_f$ sont les nombres quantiques relativistes de l'électron incident et diffusé avec $\tilde{j}_i = l_i$ si $j_i = l_i - 1/2$ et $\tilde{j}_i = -l_i - 1$ si $j_i = l_i + 1/2$; $j_0 \equiv n_i l_{ib} j_{ib}$ et $j_1 \equiv n_f l_{fb} j_{fb}$ représentent les orbitales dans les fonctions d'onde initiale et finale de l'ion cible, l'indice b servant à distinguer l et j pour les électrons liés de ceux de

l'électron libre. L'élément de matrice réduit $\langle \beta_i J_i \| Z^t(j_0 j_1) \| \beta_f J_f \rangle$ dans Eq. (4.24) dépend de la structure atomique de l'ion cible, tandis que $P^t(\tilde{j}_i \tilde{j}_f; j_0 j_1)$ dépend des orbitales des électrons liés et libre. Il est donné par

$$P^t(\tilde{j}_i \tilde{j}_f; j_0 j_1) = X^t(j_0 \tilde{j}_i; j_1 \tilde{j}_f) + \sum_{\lambda} (-1)^{t+\lambda} [t]^2 \times \begin{Bmatrix} j_{ib} & j_f & \lambda \\ j_i & j_{fb} & t \end{Bmatrix} X^{\lambda}(j_0 \tilde{j}_i; \tilde{j}_f j_1) \quad (4.25)$$

où X^t et X^{λ} contiennent les intégrales radiales à deux électrons directe $R^t(j_0 \tilde{j}_i; j_1 \tilde{j}_f)$ et d'échange $R^{\lambda}(j_0 \tilde{j}_i; \tilde{j}_f j_1)$ (voir les équations (23) et (33) de [7]). Par exemple $R^t(\alpha\beta; \gamma\delta)$ est donné par

$$R^t(\alpha\beta; \gamma\delta) = \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} (P_{\alpha}(r_1)P_{\gamma}(r_1) + Q_{\alpha}(r_1)Q_{\gamma}(r_1)) \times \frac{r_{<}^t}{r_{>}^{t+1}} (P_{\beta}(r_2)P_{\delta}(r_2) + Q_{\beta}(r_2)Q_{\delta}(r_2)) dr_1 dr_2, \quad (4.26)$$

où $r_{<} = \inf(r_1, r_2)$, $r_{>} = \sup(r_1, r_2)$, P_{α} et Q_{α} sont les composantes supérieure et inférieure des fonctions radiales relativistes. Après substitution de Eq. (4.24) dans Eq. (4.11), on peut effectuer la sommation sur les nombres quantiques magnétiques m_i et m_f intervenant dans Eq. (4.11) en utilisant la relation suivante

$$\begin{aligned} & \sum_{m_i m_f} (-1)^{1/2-3m_i} \begin{pmatrix} j_i & t & j_f \\ -m_i & -Q & m_f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_i & j'_i & L \\ m_i & -m_i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j'_i & t' & j_f \\ -m_i & -Q & m_f \end{pmatrix} \\ &= \sum_{m_i m_f} (-1)^{1/2-3m_i} \begin{pmatrix} j_f & j_i & t \\ m_f & -m_i & -Q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_i & j'_i & L \\ m_i & -m_i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j'_i & j_f & t' \\ m_i & -m_f & Q \end{pmatrix} \\ &= (-1)^{j_f-j_i-j'_i+1/2+Q} \begin{pmatrix} t & t' & L \\ Q & -Q & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} t' & t & L \\ j_i & j'_i & j_f \end{Bmatrix}. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Cela conduit à

$$\begin{aligned} \sigma(\beta_i J_i M_i M'_i \rightarrow \beta_f J_f M_f M'_f; k_i \theta_i) &= \frac{2\pi}{k_i^2} \sum_{t'Q} \begin{pmatrix} J_i & t & J_f \\ -M_i & Q & M_f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_i & t' & J_f \\ -M'_i & Q & M'_f \end{pmatrix} \\ &\times \sum_{\substack{j_0 j_1 \\ j'_0 j'_1}} \langle \beta_i J_i \| Z^t(j_0 j_1) \| \beta_f J_f \rangle \langle \beta_i J_i \| Z^{t'}(j'_0 j'_1) \| \beta_f J_f \rangle \sum_{\tilde{j}_i \tilde{j}'_i \tilde{j}_f} i^{l_i-l'_i} e^{i(\delta_{\kappa_i}-\delta_{\kappa'_i})} [l_i, l'_i, j_i, j'_i] \\ &\times (-1)^{j_i+j'_i+j_f+2J_i+1/2+Q-M_i-M'_i} \sum_{L \text{ pair}} [L]^2 P_L(\cos \theta_i) \begin{pmatrix} l_i & l'_i & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t & t' & L \\ Q & -Q & 0 \end{pmatrix} \\ &\times \begin{Bmatrix} l_i & l'_i & L \\ j'_i & j_i & \frac{1}{2} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} t' & t & L \\ j_i & j'_i & j_f \end{Bmatrix} P^t(\tilde{j}_i \tilde{j}_f; j_0 j_1) P^{t'}(\tilde{j}'_i \tilde{j}'_f; j'_0 j'_1). \end{aligned} \quad (4.28)$$

Après insertion de Eq. (4.28) dans Eq. (4.2) et après quelques manipulations d'algèbre de Racah, nous obtenons

$$\begin{aligned}
\sigma_q^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f; k_i \theta_i) &= \frac{2\pi}{k_i^2} \sum_{M_i M'_i} \sum_{M_f M'_f} (-1)^{k+2J_f-M_i-M'_f} [k, k'] \begin{pmatrix} J_i & J_i & k \\ -M_i & M'_i & q \end{pmatrix} \\
&\times \begin{pmatrix} J_f & J_f & k' \\ -M_f & M'_f & -q \end{pmatrix} \sum_{t' Q} (-1)^{t'} \begin{pmatrix} J_i & t & J_f \\ -M_i & Q & M_f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_i & t' & J_f \\ M'_i & -Q & -M'_f \end{pmatrix} \\
&\times \sum_{\substack{j_0 j_1 \\ j'_0 j'_1}} \langle \beta_i J_i \| Z^t(j_0 j_1) \| \beta_f J_f \rangle \langle \beta_i J_i \| Z^{t'}(j'_0 j'_1) \| \beta_f J_f \rangle \sum_{\tilde{j}_i \tilde{j}'_i \tilde{j}_f} i^{l_i-l'_i} e^{i(\delta_{\kappa_i}-\delta_{\kappa'_i})} \\
&\times (-1)^{j_i+j'_i+j_f+1/2+Q} [l_i, l'_i, j_i, j'_i] P^t(\tilde{j}_i \tilde{j}'_i; j_0 j_1) P^{t'}(\tilde{j}'_i \tilde{j}_f; j'_0 j'_1) \sum_{L \text{ pair}} [L]^2 P_L(\cos \theta_i) \\
&\times \begin{pmatrix} l_i & l'_i & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t & t' & L \\ Q & -Q & 0 \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} l_i & l'_i & L \\ j'_i & j_i & \frac{1}{2} \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} t' & t & L \\ j_i & j'_i & j_f \end{matrix} \right\}. \quad (4.29)
\end{aligned}$$

En utilisant maintenant la relation fondamentale suivante d'un symbole $9j$ en termes de symboles $3j$

$$\begin{aligned}
&\sum_{\substack{M_i Q M'_i \\ M_f M'_f}} \begin{pmatrix} J_i & t & J_f \\ -M_i & Q & M_f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_i & t' & J_f \\ M'_i & -Q & -M'_f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_i & J_i & k \\ -M_i & M'_i & q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t & t' & L \\ Q & -Q & 0 \end{pmatrix} \\
&\times \begin{pmatrix} J_f & J_f & k' \\ M_f & -M'_f & -q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k & L & k' \\ q & 0 & -q \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} J_i & t & J_f \\ J_i & t' & J_f \\ k & L & k' \end{matrix} \right\}, \quad (4.30)
\end{aligned}$$

nous trouvons

$$\begin{aligned}
\sigma_q^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f; k_i \theta_i) &= \frac{2\pi}{k_i^2} (-1)^{k-q} [k, k'] \sum_{t'} (-1)^{t'} \\
&\times \sum_{\substack{j_0 j_1 \\ j'_0 j'_1}} \langle \beta_i J_i \| Z^t(j_0 j_1) \| \beta_f J_f \rangle \langle \beta_i J_i \| Z^{t'}(j'_0 j'_1) \| \beta_f J_f \rangle \sum_{\tilde{j}_i \tilde{j}'_i \tilde{j}_f} i^{l_i-l'_i} e^{i(\delta_{\kappa_i}-\delta_{\kappa'_i})} \\
&\times (-1)^{j_i+j'_i+j_f+1/2} [l_i, l'_i, j_i, j'_i] P^t(\tilde{j}_i \tilde{j}'_i; j_0 j_1) P^{t'}(\tilde{j}'_i \tilde{j}_f; j'_0 j'_1) \\
&\times \sum_{L \text{ pair}} [L]^2 P_L(\cos \theta_i) \begin{pmatrix} l_i & l'_i & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k & L & k' \\ q & 0 & -q \end{pmatrix} \\
&\times \left\{ \begin{matrix} l_i & l'_i & L \\ j'_i & j_i & \frac{1}{2} \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} t' & t & L \\ j_i & j'_i & j_f \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} J_i & t & J_f \\ J_i & t' & J_f \\ k & L & k' \end{matrix} \right\}. \quad (4.31)
\end{aligned}$$

On suppose que les électrons de collision sont monoénergétiques et caractérisés par la distribution angulaire $f(\theta_i)$, qui est normalisée selon :

$$\frac{1}{4\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} f(\theta_i) \sin \theta_i d\theta_i d\phi_i = 1 \quad \text{soit} \quad \frac{1}{2} \int_0^\pi f(\theta_i) \sin \theta_i d\theta_i = 1. \quad (4.32)$$

On développe $f(\theta_i)$ en série de polynômes de Legendre

$$f(\theta_i) = \sum_{K=0}^{\infty} f_K P_K(\cos \theta_i), \quad (4.33)$$

avec les coefficients de développement f_K déterminés par

$$f_K = \frac{2K+1}{2} \int_0^\pi f(\theta_i) P_K(\cos \theta_i) \sin \theta_i d\theta_i = \frac{2K+1}{2} \int_{-1}^{+1} f(\theta_i) P_K(\cos \theta_i) d(\cos \theta_i). \quad (4.34)$$

On moyenne $\sigma_q^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f; k_i \theta_i)$ sur la distribution $f(\theta_i)$

$$\langle \sigma_q^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) \rangle = \frac{1}{2} \int_0^\pi \sigma_q^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f; \theta_i) f(\theta_i) \sin \theta_i d\theta_i, \quad (4.35)$$

où, par souci de simplicité, k_i a été omis sachant qu'il est fixé. En insérant les Eqs. (4.31) et (4.33) dans Eq. (4.35), et en utilisant la relation d'orthogonalité des polynômes de Legendre suivante

$$\int_0^\pi P_K(\cos \theta_i) P_L(\cos \theta_i) \sin \theta_i d\theta_i = \frac{2}{2K+1} \delta_{KL}, \quad (4.36)$$

on obtient

$$\begin{aligned} \langle \sigma_q^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) \rangle &= \frac{2\pi}{k_i^2} (-1)^{k-q} [k, k'] \sum_{tt'} (-1)^{t'} \\ &\times \sum_{\substack{j_0 j_1 \\ j'_0 j'_1}} \langle \beta_i J_i \| Z^t(j_0 j_1) \| \beta_f J_f \rangle \langle \beta_i J_i \| Z^{t'}(j'_0 j'_1) \| \beta_f J_f \rangle \sum_{\tilde{j}_i \tilde{j}'_i} i^{l_i - l'_i} e^{i(\delta_{\kappa_i} - \delta_{\kappa'_i})} \\ &\times (-1)^{j_i + j'_i + j_f + 1/2} [l_i, l'_i, j_i, j'_i] P^t(\tilde{j}_i \tilde{j}'_i; j_0 j_1) P^{t'}(\tilde{j}'_i \tilde{j}_i; j'_0 j'_1) \\ &\times \sum_{K \text{ pair}} f_K \begin{pmatrix} l_i & l'_i & K \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k & K & k' \\ q & 0 & -q \end{pmatrix} \\ &\times \left\{ \begin{matrix} l_i & l'_i & K \\ j'_i & j_i & \frac{1}{2} \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} t' & t & K \\ j_i & j'_i & j_f \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} J_i & t & J_f \\ J_i & t' & J_f \\ k & K & k' \end{matrix} \right\}. \end{aligned} \quad (4.37)$$

On peut écrire $\langle \sigma_q^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) \rangle$ sous la forme d'expansion

$$\langle \sigma_q^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) \rangle = \sum_{K \text{ pair}} f_K \sigma_q^{kk'K}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) \quad (4.38)$$

avec

$$\begin{aligned}
\sigma_q^{kk'K}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) &= \frac{2\pi}{k_i^2} (-1)^{k-q} [k, k'] \begin{pmatrix} k & K & k' \\ q & 0 & -q \end{pmatrix} \sum_{tt'} (-1)^{t'} \\
&\times \sum_{\substack{j_0 j_1 \\ j'_0 j'_1}} \langle \beta_i J_i \| Z^t(j_0 j_1) \| \beta_f J_f \rangle \langle \beta_i J_i \| Z^{t'}(j'_0 j'_1) \| \beta_f J_f \rangle \sum_{\tilde{j}_i \tilde{j}'_i \tilde{j}_f} i^{l_i - l'_i} e^{i(\delta_{\kappa_i} - \delta_{\kappa'_i})} \\
&\times (-1)^{j_i + j'_i + j_f + 1/2} [l_i, l'_i, j_i, j'_i] P^t(\tilde{j}_i \tilde{j}'_i; j_0 j_1) P^{t'}(\tilde{j}'_i \tilde{j}_i; j'_0 j'_1) \\
&\times \begin{pmatrix} l_i & l'_i & K \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_i & l'_i & K \\ j'_i & j_i & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t' & t & K \\ j_i & j'_i & j_f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_i & t & J_f \\ J_i & t' & J_f \\ k & K & k' \end{pmatrix}. \quad (4.39)
\end{aligned}$$

Rappelons que le nombre des composantes multipolaires de sections efficaces $\sigma_q^{kk'K}$ est limité par les conditions $0 \leq k \leq 2J_i$, $0 \leq k' \leq 2J_f$, $|k - k'| \leq K \leq k + k'$ et $-\min(k, k') \leq q \leq +\min(k, k')$. On remarque à partir de Eq. (4.39) que la dépendance de $\sigma_q^{kk'K}$ en q réside dans le facteur $(-1)^{k-q} \begin{pmatrix} k & K & k' \\ q & 0 & -q \end{pmatrix}$. De ce fait, il y a connection entre $\sigma_q^{kk'K}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f)$ pour une valeur non nulle de q et $\sigma_{q=0}^{kk'K}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f)$ selon la relation

$$\sigma_q^{kk'K}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) = (-1)^q \frac{\begin{pmatrix} k & K & k' \\ q & 0 & -q \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} k & K & k' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}} \sigma_{q=0}^{kk'K}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f). \quad (4.40)$$

A partir de l'équation précédente, il est clair que pour $K = 0$ la dépendance en q de $\sigma_q^{kk'K}$ disparaît puisque

$$(-1)^q \begin{pmatrix} k & 0 & k' \\ q & 0 & -q \end{pmatrix} = \delta_{kk'} \begin{pmatrix} k & 0 & k \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.41)$$

Pour $k = k' = 2$, il est facile de trouver pour $K = 2$

$$\sigma_q^{222} = \left(1 - \frac{q^2}{2}\right) \sigma_0^{222} \quad i.e., \quad \sigma_2^{222} = -2\sigma_1^{222} = -\sigma_0^{222}, \quad (4.42)$$

et pour $K = 4$

$$\sigma_2^{224} = -\frac{1}{4} \sigma_1^{224} = \frac{1}{6} \sigma_0^{224}. \quad (4.43)$$

Il est utile de préciser les valeurs des symboles $3j$ impliqués dans l'obtention des Eqs. (4.42) et (4.43)

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} &= -\frac{2}{\sqrt{70}} & \begin{pmatrix} 2 & 2 & 2 \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} &= \frac{1}{\sqrt{70}} & \begin{pmatrix} 2 & 2 & 2 \\ 2 & -2 & 0 \end{pmatrix} &= \frac{2}{\sqrt{70}} \\ \begin{pmatrix} 2 & 2 & 4 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} &= \frac{2}{\sqrt{70}} & \begin{pmatrix} 2 & 2 & 4 \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} &= \frac{4}{3\sqrt{70}} & \begin{pmatrix} 2 & 2 & 4 \\ 2 & -2 & 0 \end{pmatrix} &= \frac{1}{3\sqrt{70}} \end{aligned} \quad (4.44)$$

Souvent, il est préférable de raisonner en termes de forces de collision (qui sont des quantités sans dimension) au lieu des sections efficaces d'excitation. La relation entre les composantes multipolaires de sections efficaces $\sigma_q^{kk'}$ (en unité de a_0^2) et les composantes multipolaires de forces de collision $\Omega_q^{kk'}$ est

$$\sigma_q^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) = \frac{\pi}{k_i^2} \Omega_q^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f), \quad (4.45)$$

où k_i^2 est reliée à l'énergie cinétique ϵ_i de l'électron incident (en Ry) par

$$k_i^2 = \epsilon_i \left(1 + \frac{\alpha^2}{4} \epsilon_i \right), \quad (4.46)$$

α étant la constante de structure fine ($\alpha = 1/137.036$). Similairement à Eq. (4.38), on peut écrire

$$\langle \Omega_q^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) \rangle = \sum_{K \text{ pair}} f_K \Omega_q^{kk'K}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) \quad (4.47)$$

4.4.1 Cas particulier de $K = 0$

Ce cas correspond à la composante isotrope des collisions car pour des électrons incidents isotropes, d'après la section 5.3 seul le terme $K = 0$ contribue à Eq. (4.38).

Dans ce cas, Eq. (4.39) se réduit à

$$\begin{aligned} \sigma_q^{kk'K=0}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) &= \frac{2\pi}{k_i^2} \delta_{kk'} \sum_t \frac{(-1)^{J_i+J_f+k+t}}{2t+1} \left\{ \begin{matrix} J_i & J_f & t \\ J_f & J_i & k \end{matrix} \right\} \\ &\times \sum_{\substack{j_0 j_1 \\ j'_0 j'_1}} \langle \beta_i J_i \| Z^t(j_0 j_1) \| \beta_f J_f \rangle \langle \beta_i J_i \| Z^t(j'_0 j'_1) \| \beta_f J_f \rangle \sum_{\tilde{j}_i \tilde{j}_f} P^t(\tilde{j}_i \tilde{j}_f; j_0 j_1) P^t(\tilde{j}_i \tilde{j}_f; j'_0 j'_1) \\ &= \frac{2\pi}{k_i^2} \delta_{kk'} \sum_t (-1)^{J_i+J_f+k+t} \left\{ \begin{matrix} J_i & J_f & t \\ J_f & J_i & k \end{matrix} \right\} \sigma_t(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) \end{aligned} \quad (4.48)$$

Dans l'équation ci-dessus, $\sigma_t(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f)$ est la composante t de la section efficace conventionnelle $\sigma(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f)$, soit

$$\begin{aligned} \sigma(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) &= \sum_t \sigma_t(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f). \\ &= \frac{2\pi}{k_i^2} \frac{1}{(2J_i + 1)(2t + 1)} \sum_{j_0 j_1} \left| \sum_{\tilde{j}_i \tilde{j}_f} \langle \beta_i J_i \| Z^t(j_0 j_1) \| \beta_f J_f \rangle P^t(\tilde{j}_i \tilde{j}_f; j_0 j_1) \right|^2 \end{aligned} \quad (4.49)$$

En obtenant Eq. (4.48), on a utilisé les simplifications suivantes :

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} l_i & l'_i & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} &= \frac{(-1)^{l_i}}{\sqrt{2l_i + 1}} \delta_{l_i l'_i}, & \begin{pmatrix} k & 0 & k' \\ q & 0 & -q \end{pmatrix} &= \frac{(-1)^{k-q}}{\sqrt{2k + 1}} \delta_{kk'}, \\ \begin{Bmatrix} l_i & l_i & 0 \\ j'_i & j_i & \frac{1}{2} \end{Bmatrix} &= \frac{(-1)^{j_i + l_i + 1/2}}{\sqrt{(2j_i + 1)(2l_i + 1)}} \delta_{j_i j'_i}, & \begin{Bmatrix} t' & t & 0 \\ j_i & j_i & j_f \end{Bmatrix} &= \frac{(-1)^{j_i + j_f + t}}{\sqrt{(2j_i + 1)(2t + 1)}} \delta_{tt'}, \\ \begin{Bmatrix} J_i & t & J_f \\ J_i & t & J_f \\ k & 0 & k \end{Bmatrix} &= \frac{(-1)^{J_i + J_f + k + t}}{\sqrt{(2t + 1)(2k + 1)}} \begin{Bmatrix} J_i & J_f & t \\ J_f & J_i & k \end{Bmatrix}. \end{aligned}$$

Il convient de désigner simplement $\sigma_q^{kk'K=0}(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f)$ par $\sigma^k(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f)$ compte tenu de $k = k'$ et de son indépendance par rapport à q . Par voie de conséquence, on peut réécrire Eq. (4.38) sous la forme

$$\langle \sigma_q^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) \rangle = \sigma^k(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) \delta_{kk'} + \sum_{K \text{ pair} \geq 2}^{k+k'} f_K \sigma_q^{kk'K}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) \quad (4.50)$$

sachant que $f_0 = \frac{1}{2} \int_0^\pi f(\theta_i) \sin(\theta_i) d\theta_i = 1$.

4.4.2 Cas particulier de $k = 0$

Pour un niveau initial ayant soit $J_i = 0$ ou qui n'est pas aligné (i.e. ses différents sous-niveaux magnétiques M_i sont également peuplés), seule la valeur zéro de k intervient dans les équations de taux du modèle Population-Alignment Collisional-Radiative. Dans ce cas, les simplifications suivantes au niveau de Eq. (4.39) s'ap-

pliquent :

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} 0 & K & k' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} &= \frac{(-1)^{k'}}{[k']} \delta_{k'K} \\ \left\{ \begin{matrix} J_i & t & J_f \\ J_i & t' & J_f \\ 0 & K & k' \end{matrix} \right\} &= \frac{(-1)^{t'+k'+J_i+J_f}}{[J_i, k']} \left\{ \begin{matrix} J_f & J_f & k' \\ t' & t & J_i \end{matrix} \right\} \delta_{k'K}, \end{aligned} \quad (4.51)$$

ce qui donne comme expression

$$\begin{aligned} \langle \sigma_0^{0k'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) \rangle &= f_{k'} \frac{2\pi}{k_i^2} \frac{1}{[J_i, k']} (-1)^{J_i+J_f} \sum_{tt'} \sum_{\substack{j_0 j_1 \\ j'_0 j'_1}} \langle \beta_i J_i \| Z^t(j_0 j_1) \| \beta_f J_f \rangle \\ &\times \langle \beta_i J_i \| Z^{t'}(j'_0 j'_1) \| \beta_f J_f \rangle \sum_{\tilde{j}_i \tilde{j}'_i \tilde{j}_f} i^{l_i - l'_i} e^{i(\delta_{\kappa_i} - \delta_{\kappa'_i})} (-1)^{j_i + j'_i + j_f + 1/2} \\ &\times [l_i, l'_i, j_i, j'_i]^{1/2} P^t(\tilde{j}_i \tilde{j}_f; j_0 j_1) P^{t'}(\tilde{j}'_i \tilde{j}'_f; j'_0 j'_1) \begin{pmatrix} l_i & l'_i & k' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &\times \begin{pmatrix} l_i & l'_i & k' \\ j'_i & j_i & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t' & t & k' \\ j_i & j'_i & j_f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_f & J_f & k' \\ t' & t & J_i \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.52)$$

4.4.3 Distribution isotrope d'électrons

Pour une distribution isotrope d'électrons, $f(\theta_i) = 1$, et on a

$$f_K = \frac{2K+1}{2} \int_0^\pi P_K(\cos \theta_i) \sin \theta_i \theta_i = \delta_{K0}.$$

Ceci permet d'écrire en accord avec la section (5.3) et en tenant compte de Eq. (4.48)

$$\begin{aligned} \langle \sigma_q^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) \rangle_{\text{iso}} &= \sigma_q^{kk'K=0}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) = \delta_{kk'} \sigma^k(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) \\ &= \frac{2\pi}{k_i^2} \delta_{kk'} \sum_t (-1)^{J_i+J_f+k+t} \begin{pmatrix} J_i & J_f & t \\ J_f & J_i & k \end{pmatrix} \sigma_t(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) \end{aligned} \quad (4.53)$$

Dans le cas particulier où $k = 0$, on a

$$\begin{pmatrix} J_i & J_f & t \\ J_f & J_i & 0 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{J_i+J_f+t}}{\sqrt{(2J_i+1)(2J_f+1)}},$$

ce qui conduit à une relation directe entre $\sigma^0(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f)$ et la section efficace conventionnelle $\sigma(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f)$, qui s'écrit

$$\sigma^0(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) = \sqrt{\frac{2J_i+1}{2J_f+1}} \sigma(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f)$$

4.4.4 Distribution unidirectionnelle d'électrons le long de l'axe z

Pour un faisceau unidirectionnel d'électrons le long de l'axe z , la fonction de distribution angulaire est $f(\theta_i) = 2\delta(\cos\theta_i - 1)$, et les coefficients de développement de $f(\theta_i)$ sur les polynômes de Legendre sont simplement

$$f_K = \frac{2K+1}{2} \int_{-1}^{+1} 2\delta(\cos\theta_i - 1) P_K(\cos\theta_i) d(\cos\theta_i) = (2K+1)P_K(1) = 2K+1,$$

ce qui conduit à

$$\sigma_q^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f)_{z\text{-beam}} = \sum_{K \text{ pair}} (2K+1) \sigma_q^{kk'K}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f), \quad (4.54)$$

où l'on rappelle que $\sigma_q^{kk'K}$ est donné par Eq.(4.39). A toutes fins utiles, on donne ci-dessous les expressions suivantes de $\sigma_q^{kk'}_{z\text{-beam}}$ en termes de $\sigma_0^{kk'K}$ pour quelques valeurs de k, k', q :

$$\begin{aligned} \sigma_{0 \ z\text{-beam}}^{00} &= \sigma_0^{000}, \\ \sigma_{0 \ z\text{-beam}}^{02} &= 5 \sigma_0^{022}, \\ \sigma_{0 \ z\text{-beam}}^{20} &= 5 \sigma_0^{202}, \\ \sigma_{0 \ z\text{-beam}}^{04} &= 9 \sigma_0^{044}, \\ \sigma_{0 \ z\text{-beam}}^{40} &= 9 \sigma_0^{404}, \\ \sigma_{0 \ z\text{-beam}}^{22} &= \sigma_0^{220} + 5 \sigma_0^{222} + 9 \sigma_0^{224}, \\ \sigma_{1 \ z\text{-beam}}^{22} &= \sigma_1^{220} + 5 \sigma_1^{222} + 9 \sigma_1^{224} \approx \sigma_0^{220} + \frac{5}{2} \sigma_0^{222} - 6 \sigma_0^{224}, \\ \sigma_{2 \ z\text{-beam}}^{22} &= \sigma_2^{220} + 5 \sigma_2^{222} + 9 \sigma_2^{224} \approx \sigma_0^{220} - 5 \sigma_0^{222} + \frac{3}{2} \sigma_0^{224}, \\ \sigma_{0 \ z\text{-beam}}^{24} &= 5 \sigma_0^{242} + 9 \sigma_0^{244} + 13 \sigma_0^{246} \approx 5 \sigma_0^{242} + 9 \sigma_0^{244}, \\ \sigma_{1 \ z\text{-beam}}^{24} &= 5 \sigma_1^{242} + 9 \sigma_1^{244} + 13 \sigma_1^{246} \approx 5 \sqrt{\frac{5}{6}} \sigma_0^{242} + \frac{9}{2} \sqrt{\frac{3}{10}} \sigma_0^{244}, \\ \sigma_{2 \ z\text{-beam}}^{24} &= 5 \sigma_2^{242} + 9 \sigma_2^{244} + 13 \sigma_2^{246} \approx \frac{5}{2} \sqrt{\frac{5}{3}} \sigma_0^{242} - \frac{27}{2} \sqrt{\frac{3}{5}} \sigma_0^{244}, \\ \sigma_{0 \ z\text{-beam}}^{42} &= 5 \sigma_0^{422} + 9 \sigma_0^{424} + 13 \sigma_0^{426} \approx 5 \sigma_0^{422} + 9 \sigma_0^{424}, \\ \sigma_{1 \ z\text{-beam}}^{42} &= 5 \sigma_1^{422} + 9 \sigma_1^{424} + 13 \sigma_1^{426} \approx 5 \sqrt{\frac{5}{6}} \sigma_0^{422} + \frac{9}{2} \sqrt{\frac{3}{10}} \sigma_0^{424}, \\ \sigma_{2 \ z\text{-beam}}^{42} &= 5 \sigma_2^{422} + 9 \sigma_2^{424} + 13 \sigma_2^{426} \approx \frac{5}{2} \sqrt{\frac{3}{5}} \sigma_0^{422} - \frac{27}{2} \sqrt{\frac{3}{5}} \sigma_0^{424}, \\ \sigma_{0 \ z\text{-beam}}^{44} &= \sigma_0^{440} + 5 \sigma_0^{442} + 9 \sigma_0^{444} + 13 \sigma_0^{446} + 17 \sigma_0^{448} \approx \sigma_0^{440} + 5 \sigma_0^{442} + 9 \sigma_0^{444} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_{1\ z\text{-beam}}^{44} &= \sigma_1^{440} + 5\sigma_1^{442} + 9\sigma_1^{444} + 13\sigma_1^{446} + 17\sigma_1^{448} \approx \sigma_0^{440} + \frac{17}{4}\sigma_0^{442}, \\
\sigma_{2\ z\text{-beam}}^{44} &= \sigma_2^{440} + 5\sigma_2^{442} + 9\sigma_2^{444} + 13\sigma_2^{446} + 17\sigma_2^{448} \approx \sigma_0^{440} + 2\sigma_0^{442}, \\
\sigma_{3\ z\text{-beam}}^{44} &= \sigma_3^{440} + 5\sigma_3^{442} + 9\sigma_3^{444} + 13\sigma_3^{446} + 17\sigma_3^{448} \approx \sigma_0^{440} - \frac{7}{4}\sigma_0^{442}, \\
\sigma_{4\ z\text{-beam}}^{44} &= \sigma_4^{440} + 5\sigma_4^{442} + 9\sigma_4^{444} + 13\sigma_4^{446} + 17\sigma_4^{448} \approx \sigma_0^{440} - 7\sigma_0^{442}. \quad (4.55)
\end{aligned}$$

où on a utilisé le fait que σ_q^{kk0} ne dépend pas de la valeur de q , et en plus de Eqs. (4.42) et (4.43), les relations suivantes :

$$\begin{aligned}
\sigma_1^{422} &= \sqrt{\frac{5}{6}}\sigma_0^{422} & \sigma_2^{422} &= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{5}{3}}\sigma_0^{422} & \sigma_1^{424} &= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{10}}\sigma_0^{424} & \sigma_2^{424} &= -\frac{3}{2}\sqrt{\frac{3}{5}}\sigma_0^{424} \\
\sigma_1^{242} &= \sqrt{\frac{5}{6}}\sigma_0^{242} & \sigma_2^{242} &= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{5}{3}}\sigma_0^{242} & \sigma_1^{244} &= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{10}}\sigma_0^{244} & \sigma_2^{244} &= -\frac{3}{2}\sqrt{\frac{3}{5}}\sigma_0^{244} \\
\sigma_q^{440} &= \sigma_0^{440} \text{ pour } q = 1 - 4 \\
\sigma_1^{442} &= \frac{17}{20}\sigma_0^{442} & \sigma_2^{442} &= \frac{2}{5}\sigma_0^{442} & \sigma_3^{442} &= -\frac{7}{20}\sigma_0^{442} & \sigma_4^{442} &= -\frac{7}{5}\sigma_0^{442}. \quad (4.56)
\end{aligned}$$

Les valeurs des symboles $3j$ impliqués dans l'obtention des relations précédentes sont :

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} 2 & 2 & 4 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} &= \sqrt{\frac{2}{35}} & \begin{pmatrix} 2 & 2 & 4 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} &= -\frac{1}{\sqrt{21}} & \begin{pmatrix} 2 & 2 & 4 \\ 2 & 0 & -2 \end{pmatrix} &= \frac{1}{\sqrt{42}} \\
\begin{pmatrix} 2 & 4 & 4 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} &= -\frac{2}{3}\sqrt{\frac{5}{77}} & \begin{pmatrix} 2 & 4 & 4 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} &= \frac{1}{\sqrt{462}} & \begin{pmatrix} 2 & 4 & 4 \\ 2 & 0 & -2 \end{pmatrix} &= \sqrt{\frac{3}{77}} \\
\begin{pmatrix} 4 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} &= \sqrt{\frac{2}{35}} & \begin{pmatrix} 4 & 2 & 2 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} &= -\frac{1}{\sqrt{21}} & \begin{pmatrix} 4 & 2 & 2 \\ 2 & 0 & -2 \end{pmatrix} &= \frac{1}{\sqrt{42}} \\
\begin{pmatrix} 4 & 2 & 4 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} &= \frac{17}{6\sqrt{385}} & \begin{pmatrix} 4 & 2 & 4 \\ 2 & 0 & -2 \end{pmatrix} &= -\frac{4}{3\sqrt{385}} & \begin{pmatrix} 4 & 2 & 4 \\ 3 & 0 & -3 \end{pmatrix} &= -\frac{1}{6}\sqrt{\frac{7}{55}} \\
\begin{pmatrix} 4 & 2 & 4 \\ 4 & 0 & -4 \end{pmatrix} &= \frac{2}{3}\sqrt{\frac{7}{55}}
\end{aligned}$$

4.5 Relation entre $\langle \sigma_q^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) \rangle$ pour une distribution arbitraire et $\sigma_q^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f)_{z\text{-beam}}$

Les composantes multipolaires de la section efficace d'excitation $\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f$, moyennées sur une distribution angulaire arbitraire ayant une symétrie de révolu-

tion autour de l'axe z , s'expriment comme

$$\begin{aligned} \langle \sigma_q^{kk'} (\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) \rangle_{\text{arb}} &= \sum_{K \text{ pair}} f_K \sigma_q^{kk'K} (\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) \\ &= \sum_{K \text{ pair}} f_K (-1)^{-q} \begin{pmatrix} k & K & k' \\ q & 0 & -q \end{pmatrix} \mathcal{A}(k k' K), \end{aligned} \quad (4.57)$$

où, compte-tenu de Eq. (Eq :39)

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(k k' K) &= 2(-1)^k \sqrt{(2k+1)(2k'+1)} \sum_{tt'} (-1)^{t'} \\ &\times \sum_{\substack{j_0 j_1 \\ j'_0 j'_1}} \langle \beta_i J_i \| Z^t(j_0 j_1) \| \beta_f J_f \rangle \langle \beta_i J_i \| Z^{t'}(j'_0 j'_1) \| \beta_f J_f \rangle \sum_{\tilde{j}_i \tilde{j}'_i \tilde{j}_f} i^{l_i - l'_i} e^{i(\delta_{\kappa_i} - \delta_{\kappa'_i})} \\ &\times (-1)^{j_i + j'_i + j_f + 1/2} \sqrt{(2l_i+1)(2l'_i+1)(2j_i+1)(2j'_i+1)} \\ &\times P^t(\tilde{j}_i \tilde{j}'_i; j_0 j_1) P^{t'}(\tilde{j}'_i \tilde{j}_i; j'_0 j'_1) \begin{pmatrix} l_i & l'_i & K \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} l_i & l'_i & K \\ j'_i & j_i & \frac{1}{2} \end{Bmatrix} \\ &\times \begin{Bmatrix} t' & t & K \\ j_i & j'_i & j_f \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} J_i & t & J_f \\ J_i & t' & J_f \\ k & K & k' \end{Bmatrix}. \end{aligned} \quad (4.58)$$

Dans le cas d'un faisceau unidirectionnel d'électrons suivant l'axe z , on a

$$\begin{aligned} \sigma_{q'}^{kk'} (\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f)_{z\text{-beam}} &= \sum_{K' \text{ pair}} (2K'+1) \sigma_{q'}^{kk'K'} (\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) \\ &= \sum_{K' \text{ pair}} (2K'+1) (-1)^{-q'} \begin{pmatrix} k & K' & k' \\ q' & 0 & -q' \end{pmatrix} \mathcal{A}(k k' K'). \end{aligned} \quad (4.59)$$

On peut écrire

$$\begin{aligned} \sum_{q'} (-1)^{q'} \begin{pmatrix} k & K & k' \\ q' & 0 & -q' \end{pmatrix} \sigma_{q'}^{kk'} (\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f)_{z\text{-beam}} &= \sum_{q'} (-1)^{q'} \begin{pmatrix} k & K & k' \\ q' & 0 & -q' \end{pmatrix} \\ &\times \sum_{K' \text{ pair}} (2K'+1) (-1)^{-q'} \begin{pmatrix} k & K' & k' \\ q' & 0 & -q' \end{pmatrix} \mathcal{A}(k k' K'). \end{aligned} \quad (4.60)$$

En appliquant la relation que satisfait les symboles $3j$

$$\sum_{q'} \begin{pmatrix} k' & k & K \\ -q' & q' & 0' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k' & k & K' \\ -q' & q' & 0 \end{pmatrix} = \frac{\delta_{KK'}}{2K+1},$$

Eq. (4.60) devient

$$\sum_{q'} (-1)^{q'} \begin{pmatrix} k & K & k' \\ q' & 0 & -q' \end{pmatrix} \sigma_{q'}^{kk'} (\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f)_{z\text{-beam}} = \mathcal{A}(k k' K). \quad (4.61)$$

Par conséquent

$$\begin{aligned} \langle \sigma_q^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) \rangle_{\text{arb}} &= \sum_{q'=-\min(k,k')}^{+\min(k,k')} (-1)^{q'-q} \sigma_{q'}^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f)_{z\text{-beam}} \\ &\times \sum_{K=|k-k'|}^{k+k'} f_K \begin{pmatrix} k & K & k' \\ q & 0 & -q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k & K & k' \\ q' & 0 & -q' \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.62)$$

On retrouve la formule (4.42) de l'article d'Omont [9]. Dans les applications aux plasmas de symétrie cylindrique, on a besoin de connaître la seule composante $q = 0$ de $\langle \sigma_q^{kk'} \rangle_{\text{arb}}$. En prenant $q = 0$ dans Eq. (4.62) et en y remplaçant les 1ères lignes de Eqs. (4.57) et (4.59), on peut écrire

$$\begin{aligned} \sigma_0^{kk'K}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) &= \sum_{K'q} (-1)^q (2K' + 1) \sigma_q^{kk'K'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) \\ &\times \begin{pmatrix} k & K & k' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k & K & k' \\ q & 0 & -q \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.63)$$

Cette dernière équation est compatible avec la relation (4.40). En effet, en insérant Eq. (4.40) dans Eq. (4.63), on a

$$\begin{aligned} \sigma_0^{kk'K}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) &= \sum_{K'q} (-1)^q (2K' + 1) (-1)^q \frac{\begin{pmatrix} k & K' & k' \\ q & 0 & -q \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} k & K' & k' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}} \\ &\times \sigma_{q=0}^{kk'K'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) \begin{pmatrix} k & K & k' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k & K & k' \\ q & 0 & -q \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (4.64)$$

ce qui est juste sachant que

$$\sum_q \begin{pmatrix} k & K' & k' \\ q & 0 & -q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k & K & k' \\ q & 0 & -q \end{pmatrix} = \frac{\delta_{KK'}}{2K + 1}. \quad (4.65)$$

4.6 Références

- [1] G. Csanak, D. P. Kilcrease, D. V. Fursa, and I. Bray, *Phys. Rev. A* **78**, 062716 (2008).
- [2] T. Fujimoto, *Plasma Polarization Spectroscopy* edited by T. Fujimoto and A. Iwamae, Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics (Springer, Berlin, 2008) Chap. 4.
- [3] J. Dubau, in *Proceedings of the Japan-US Workshop on Plasma Polarization Spectroscopy and The International Seminar on Plasma Polarization Spectroscopy*, edited by T. Fujimoto and P. Beiersdorfer, NIFS-PROC-37 (1998) p. 9.
- [4] G. Csanak, C. J. Fontes, P. Hakel, and D. P. Kilcrease, *J. Phys. B* **44**, 215701 (2011).
- [5] G. Csanak, C. J. Fontes, M. K. Inal, and D. P. Kilcrease, *J. Phys. B* **45**, 105202 (2012).
- [6] D. H. Sampson, H. L. Zhang, and C. J. Fontes, *Phys. Rep.* **477**, 111 (2009).
- [7] M. F. Gu, *Can. J. Phys.* **86**, 675 (2008).
- [8] A. Bar-Shalom, M. Klapisch, and J. Oreg, *Phys. Rev. A* **38**, 1773 (1988).
- [9] A. Omont, *Prog. Quantum Electron.* **5**, 69 (1977).
- [10] M. K. Inal and J. Dubau, *J. Phys. B* **20**, 4221 (1987).
- [11] H. L. Zhang, D. H. Sampson, and R. E. H. Clark, *Phys. Rev. A* **41**, 198 (1990).
- [12] P. Beiersdorfer *et al*, *Phys. Rev. A* **53**, 3974 (1996).
- [13] M. S. Bentotoche, M. K. Inal, and M. Benmouna, *X-Ray Spectrom.* **49**, 65 (2020).
- [14] L. Belluzzi, E. Landi Degl’Innocenti, and J. Trujillo Bueno, *Astron. Astrophys.* **551**, 84 (2013).
- [15] M. Derouich, A. Alruhaili, and Badruddin, *New Astron.* **71**, 52 (2019).
- [16] K. G. Widing, J. G. Doyle, P. L. Dufton, and A. E. Kingston, *Astrophys. J.* **257**, 913 (1982).

- [17] F. P. Keenan, P. L. Dufton, L. K. Harra, E. S. Conlon, K. A. Berrington, A. E. Kingston, and K. G. Widing, *Astrophys. J.* **382**, 349 (1991).
- [18] P. R. Young *et al.*, *Publ. Astron. Soc. Japan* **59**, S857 (2007).
- [19] L. K. Huang, S. Lippmann, B. C. Stratton, H. W. Moos, and M. Finkenthal, *Phys. Rev. A* **37**, 3927 (1988).
- [20] K. Ikeda, Y. Nagayama, T. Itoh, E. Kawamori, Y. Okamoto, T. Tamano, N. Yamaguchi, K. Yatsu, and M. Yoshikawa, *Rev. Sci. Instrum.* **70**, 332 (1999).
- [21] G. Csanak, C. J. Fontes, M. K. Inal, and D. P. Kilcrease, *J. Phys. B* **46**, 085202 (2013).
- [22] A. Messiah, *Mécanique Quantique* (Dunod, Paris, 1972), Vol. 2.
- [23] F. P. Keenan, K. A. Berrington, P. G. Burke, A. E. Kingston, and P. L. Dufton, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **207**, 459 (1984).

Chapitre 5

Application : Béryllium-like

Oxygène O V

Sommaire

5.1	Introduction	66
5.2	Extension du programme d'excitation de FAC	66
5.3	Résultats numériques	69
5.4	Discussions	88
5.5	Comparaison avec les résultats de Iwamae <i>et al.</i>	91

5.1 Introduction

Dans cette thèse, nous calculons les composantes multipolaires des sections efficaces d'excitation de l'ion O^{4+} (oxygène bérylliumoïde). C'est une application du programme modifié de FAC. Cet ion est présent dans l'atmosphère solaire [1,2] et dans les plasmas de fusion thermonucléaire par confinement magnétique [3,4].

Dans ce chapitre, nous exposons quelques résultats sélectionnés pour diverses excitations de l'ion O^{4+} , qui ont une grande importance dans les applications de PPS (spectroscopie de polarisation d'un plasma). Donc, tout d'abord, nous présentons l'extension de FAC (Flexible Atomique Code) pour calculer les composantes multipolaires de sections efficaces puis nous donnons quelques résultats numériques pour différentes transitions. Par la suite, nous discutons les valeurs obtenues et nous terminons ce chapitre par une comparaison de nos résultats avec d'autres travaux.

5.2 Extension du programme d'excitation de FAC

La section efficace pour la transition du sous-niveau magnétique $\beta_i J_i M_i$ vers $\beta_f J_f M_f$ induite par des électrons incidents le long de l'axe de quantification z peut être écrite sous la forme factorisée suivante (voir Eq. (51) de Réf. [5])

$$\begin{aligned}
 \sigma(\beta_i J_i M_i \rightarrow \beta_f J_f M_f) &= \frac{2\pi}{k_i^2} \sum_{tt'} \begin{pmatrix} J_i & t & J_f \\ -M_i & Q & M_f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_i & t' & J_f \\ -M_i & Q & M_f \end{pmatrix} \\
 &\times \sum_{\substack{j_0 j_1 \\ j'_0 j'_1}} \langle \beta J_i \| Z^t(j_0 j_1) \| \beta_f J_f \rangle \langle \beta_i J_i \| Z^{t'}(j'_0 j'_1) \| \beta_f J_f \rangle \sum_{\tilde{j}_i \tilde{j}'_i \tilde{j}_f} i^{l_i - l'_i} e^{i(\delta_{\tilde{j}_i} - \delta_{\tilde{j}'_i})} [l_i, l'_i, j_i, j'_i] \\
 &\times P^t(\tilde{j}_i \tilde{j}_f; j_0 j_1) P^{t'}(\tilde{j}'_i \tilde{j}'_f; j'_0 j'_1) \sum_{m_i m_f} \begin{pmatrix} j_i & \frac{1}{2} & l_i \\ -m_i & m_i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j'_i & \frac{1}{2} & l'_i \\ -m_i & m_i & 0 \end{pmatrix} \\
 &\times \begin{pmatrix} j_i & t & j_f \\ -m_i & -Q & m_f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j'_i & t' & j_f \\ -m_i & -Q & m_f \end{pmatrix}. \tag{5.1}
 \end{aligned}$$

Le programme d'excitation RDW de FAC est conçu pour calculer cette section efficace, mais ne permet pas de déterminer les composantes multipolaires des sections efficaces. L'un des objectifs du présent travail a consisté à étendre ce programme RDW de FAC (version 1.1.5) afin de pouvoir calculer $\sigma_q^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f)$ pour toute combinaison de k ($= 0, \dots, 2J_i$), k' ($= 0, \dots, 2J_f$) et q ($=$

$-\min(k, k'), \dots, +\min(k, k')$). En examinant attentivement Eqs. (4.39) et (5.1), on constate que cette extension peut être réalisée en faisant quelques transformations appropriées : (i) remplacer la somme sur m_i et m_f des deux dernières lignes de Eq. (5.1), i.e.

$$\sum_{m_i m_f} \begin{pmatrix} j_i & \frac{1}{2} & l_i \\ -m_i & m_i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j'_i & \frac{1}{2} & l'_i \\ -m_i & m_i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_i & t & j_f \\ -m_i & -Q & m_f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j'_i & t' & j_f \\ -m_i & -Q & m_f \end{pmatrix}$$

par l'expression algébrique suivante

$$\begin{aligned} & (-1)^{k-q+t'+j_i+j'_i+j_f+1/2} [k, k'] [K]^2 \begin{pmatrix} l_i & l'_i & K \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k & K & k' \\ q & 0 & -q \end{pmatrix} \\ & \times \begin{Bmatrix} l_i & l'_i & K \\ j'_i & j_i & \frac{1}{2} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} t' & t & K \\ j_i & j'_i & j_f \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} J_i & t & J_f \\ J_i & t' & J_f \\ k & K & k' \end{Bmatrix}, \end{aligned}$$

(ii) supprimer les deux symboles $3j$ dans la première ligne de Eq. (5.1). Dans la première transformation, les quatre variables entières k, k', q et K sont introduites avec leurs plages de valeurs permises, et les subroutines de fonction 'W6j' et 'W9j' sont utilisées pour obtenir les symboles de Wigner $6j$ et $9j$ requis. Cette adaptation permet de calculer ${}^K \sigma_q^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f)$, et après avoir effectué la sommation sur K dans Eq. (4.38) on obtient les composantes multipolaires de sections efficaces $\sigma_q^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f)$.

Nous avons effectué des calculs préliminaires pour $q = 0$ en vue de vérifier si le programme modifié fournit des résultats cohérents. Tout d'abord, nous avons calculé $\sigma_0^{00}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f)$ pour diverses transitions dans l'ion O^{4+} et nous avons déduit la section efficace standard $\sigma(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f)$ à partir de la relation déjà vue et qui est rappelée ci-dessous

$$\sigma_0^{00}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) = \frac{[J_i]}{[J_f]} \sigma(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f).$$

Nous avons comparé les résultats avec ceux obtenus en utilisant FAC original (i.e., package non adapté) et trouvé un accord total. Un autre test plus élaboré a été fait en calculant $\sigma_0^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f)$, permettant à k et k' de prendre toutes les

valeurs qui sont possibles. Nous avons déduit $\sigma(\beta_i J_i M_i \rightarrow \beta_f J_f M_f)$ à l'aide de

$$\begin{aligned} \sigma(\beta_i J_i M_i \rightarrow \beta_f J_f M_f) &= (-1)^{J_i - M_i + J_f - M_f} \sum_{kk'} [k, k'] \\ &\times \begin{pmatrix} J_i & J_i & k \\ M_i & -M_i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_f & J_f & k' \\ M_f & -M_f & 0 \end{pmatrix} \sigma_0^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f), \end{aligned} \quad (5.2)$$

qui découle de Eq. (4.2). Les résultats ont été comparés à ceux obtenus directement à partir du package original de FAC, et à nouveau nous avons trouvé un accord complet. Ces tests préliminaires indiquent que les modifications que nous avons introduites ici dans FAC mènent à des résultats cohérents.

Avant d'aller plus loin dans les calculs de $\sigma_q^{kk'}$ pour $q \neq 0$, décrivons les principales étapes des méthodes de calcul utilisées dans le programme RDW. Les fonctions d'onde de l'ion cible sont déterminées dans l'approximation de mélange de configuration, avec les coefficients de mélange obtenus en diagonalisant l'Hamiltonien de Dirac–Coulomb exprimé dans les états de base constitués de fonctions d'état de configuration (CSF). Le mélange concerne des CSF de moment cinétique total et parité donnés, qui découlent souvent d'un seul n -complexe correspondant à toutes les configurations avec le même ensemble de nombres quantiques principaux. Chaque CSF est construite dans le schéma de couplage jj à partir des fonctions radiales mono-électroniques obtenues auto systématiquement comme solutions de l'équation de Dirac avec un potentiel central de type Dirac–Fock–Slater modifié. Ce dernier est déterminé à l'aide d'une configuration moyenne fictive avec des nombres d'occupation fractionnels pour représenter toutes les configurations incluses dans les calculs d'excitation. Afin d'évaluer les éléments de la matrice de diffusion radiale impliqués dans $P^l(\tilde{j}_i \tilde{j}_f; j_0 j_1)$, les orbitales d'électrons libres sont obtenues en résolvant l'équation de Dirac avec le même potentiel central que pour les orbitales liées, ce qui signifie que toutes les orbitales sont orthogonales. Pour les transitions permises par dipôle électrique et par multipôle d'ordre supérieur (hors les transitions faibles avec changement de multiplicité de spin qui ne se produisent que par échange d'électrons), les contributions des ondes partielles pour les grands moments cinétiques de l'électron libre sont prises en compte dans l'approximation de Coulomb-Bethe. De plus amples détails sur les techniques numériques mises en œuvre dans FAC peuvent être consultés dans Réf. [5].

Il est utile de souligner que seuls les $\sigma_q^{kk'}$ avec $q \geq 0$ nécessitent d'être donnés puisque $\sigma_{-q}^{kk'} = \sigma_q^{kk'}$ pour les valeurs paires de k et k' (voir Eq. (4.24)). On peut

montrer que $\sigma_q^{kk'}$ peut être développé comme la somme de termes

$$\sigma_q^{kk'}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) = \sigma^k(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f) \delta_{kk'} + \sum_{K \geq K_0} \sigma_q^{kk'K}(\beta_i J_i \rightarrow \beta_f J_f), \quad (5.3)$$

Notons que la sommation dans Eq. (5.3) porte sur les mêmes valeurs de K que dans Eq. (4.38).

5.3 Résultats numériques

Afin d'illustrer la présente extension du programme d'excitation RDW de FAC, nous avons effectué des calculs détaillés de $\sigma_q^{kk'}$ pour diverses transitions dans l'ion Be-like O^{4+} , qui seraient intéressants dans l'étude approfondie de l'atmosphère solaire [2,6,7] et des plasmas de fusion magnétique [3,4]. Dans ces calculs, les 46 niveaux de structure fine issus des configurations $2s^2$, $2s2p$, $2p^2$, $2s3s$, $2s3p$, $2s3d$, $2p3s$, $2p3p$ et $2p3d$ dans l'ion O^{4+} ont été considérés (voir tableau 1). Les transitions collisionnelles prises en compte sont celles à partir du niveau fondamental $2s^2 1S_0$ et des trois niveaux métastables $2s2p^3 P_{0,1,2}$. Pour le domaine de densités d'électrons considéré ici, il n'est pas utile de prendre en compte les transitions à partir d'autres niveaux étant donné que ces derniers ont des durées de vie radiatives suffisamment courtes.

Dans cette thèse, nous collectons les résultats de $\sigma_q^{kk'}$ pour différentes combinaisons de k et k' et les excitations correspondantes. Dans les tableaux ci-dessous, nous nous sommes limités à trois valeurs (65, 70 et 80 eV) de l'énergie ε_i de l'électron incident, qui sont légèrement au-dessus du seuil d'excitation pour les transitions $2s2p^3 P_{0,1,2} \rightarrow 2s3p^3 P_{0,1,2}$ et $2s2p^3 P_{0,1,2} \rightarrow 2s3d^3 D_{1,2,3}$. Les résultats du tableau (6.2 à 6.7) donnent les sections efficaces de population σ_0^{00} , les sections efficaces de création d'alignement (σ_0^{02} , σ_0^{04} et σ_0^{06}) et les sections efficaces de destruction d'alignement (σ_0^{20} , σ_0^{40}) pour des transitions impliquant un niveau initial ou final ayant un moment cinétique nul, i.e., $J = 0$. Il s'agit de transitions à partir de $2s2p^3 P_0$ (niveau numéro 1) vers les niveaux $2s3p^3 P_0$ (N° 13), $2s3p^3 P_1$ (N° 14), $2s3p^3 P_2$ (N° 15), $2s3d^3 D_1$ (N° 16) et $2s3d^3 D_2$ (N° 17). Puis des transitions à partir de $2s2p^3 P_1$ (N° 2) et $2s2p^3 P_2$ (N° 3) vers le niveau $2s3p^3 P_0$ (N° 13). De plus, nous présentons aussi nos résultats pour de nombreuses autres transitions, telles que de $2s2p^3 P_1$ (N° 2) et $2s2p^3 P_2$ (N° 3) vers $2s3p^3 P_1$ (N° 14), $2s3p^3 P_2$ (N° 15), $2s3d^3 D_1$ (N° 16) et $2s3d^3 D_2$ (N° 17).

On note que les composantes multipolaires de sections efficaces pour $k = 0$ ou $k' = 0$ peuvent être aisément déduites des sections efficaces entre sous-niveaux magnétiques. A titre d'exemple, dans le cas de l'excitation à partir de $2s2p^3P_0$, nous avons pour les sections efficaces de création d'alignement (voir Eq. (4.2) de chapitre 4)

$$\begin{aligned} \sigma_0^{0k'}(2s2p^3P_0 \rightarrow \beta_f J_f) &= \sqrt{2k'+1} \sum_{M_f} (-1)^{J_f-M_f} \begin{pmatrix} J_f & J_f & k' \\ M_f & -M_f & 0 \end{pmatrix} \\ &\times \sigma(2s2p^3P_0 \rightarrow \beta_f J_f M_f). \end{aligned} \quad (5.4)$$

Concernant maintenant l'excitation vers le niveau $2s3p^3P_0$, nous avons pour les sections efficaces de destruction d'alignement

$$\begin{aligned} \sigma_0^{k0}(\beta_i J_i \rightarrow 2s3p^3P_0) &= \sqrt{2k+1} \sum_{M_i} (-1)^{J_i-M_i} \begin{pmatrix} J_i & J_i & k \\ M_i & -M_i & 0 \end{pmatrix} \\ &\times \sigma(\beta_i J_i M_i \rightarrow 2s3p^3P_0). \end{aligned} \quad (5.5)$$

L'un des objectifs principaux ici est de calculer les sections efficaces de transfert de cohérence $\sigma_{q \neq 0}^{kk'}$, qui ne sont pas accessibles à partir des sections efficaces entre sous-niveaux magnétiques et qui n'ont jamais été calculées auparavant. Dans le but d'avoir plus d'informations sur les résultats numériques de $\sigma_{q \neq 0}^{kk'}$, nous nous tournons vers Eq. (4.38) en examinant les contributions relatives des différents termes K intervenant dans l'expansion de la section efficace multipolaire $\sigma_q^{kk'}$. De ce fait, dans les tableaux 6.8 à 6.22, nous fournissons les résultats pour les composantes $\sigma_q^{kk'}$ ainsi que ses expansions $\sigma_q^{kk'K}$ pour les transitions de $2s2p^3P_1$ (N° 2) et $2s2p^3P_2$ (N° 3) vers $2s3p^3P_1$ (N° 14), $2s3p^3P_2$ (N° 15) et $2s3d^3D_1$ (N° 16) et $2s3d^3D_2$ (N° 17). Ces résultats sont donnés pour trois valeurs de l'énergie de l'électron de collision.

Dans ces tableaux, nous présentons les quatre possibles combinaisons de couple $(k, k') = (2, 2), (2, 4), (4, 2), (4, 4)$ selon les transitions. Pour les tableaux correspondant à $(k, k') = (2, 2), (2, 4), (4, 2)$, il n'y a que trois valeurs permises de K . Dans les deux derniers tableaux 6.21 et 6.22 correspondant à $(k, k') = (4, 4)$, il y a en principe cinq valeurs autorisées de K , qui sont 0, 2, 4, 6 et 8. Mais, les calculs ont montré que la contribution de $K = 8$ est vraiment insignifiante. De plus on peut remarquer que pour la transition $3 \rightarrow 15$ seule la contribution de $K = 0$ est importante, puisque celles de $K = 2$ et 4 sont au moins deux ordres de grandeur

plus petites. Concernant la transition $3 \rightarrow 17$, les contributions de $K = 2, 4$ et 6 peuvent ne pas être négligeables. Notons que les troisièmes termes contributeurs $\sigma_0^{246}(2s2p^3P_{1,2} \text{ vers } 2s3p^3P_2)$, $\sigma_0^{426}(2s2p^3P_2 \text{ vers } 2s3p^3P_{1,2})$ sont également extrêmement petits.

Il est important de mentionner qu'on peut se contenter de montrer les résultats pour $\sigma_0^{kk'K}$ seulement, sachant que ceux correspondant à $\sigma_{q \neq 0}^{kk'K}$ peuvent être facilement déduits de $\sigma_0^{kk'K}$ en appliquant Eq. (4.40) du chapitre 4.

En plus de tous ces tableaux, nous présentons plusieurs figures montrant la dépendance des composantes multipolaires de sections efficaces en énergie ε_i des électrons incidents dans un large domaine allant juste au dessus du seuil d'excitation jusqu'à 1500 eV pour les six transitions suivantes : $2s2p^3P_{1,2} \text{ vers } 2s3p^3P_{1,2}$ et $2s3d^3D_{2,3}$.

TABLE 5.1: Les 46 premiers niveaux de structure fine de l'ion O^{4+} désignés en couplage LSJ. π désigne la parité du niveau, 0 pour pair et 1 pour impair.

N°	Energie (eV)	π		N°	Energie (eV)	π	
0	0.00000000E+00	0	$2s^2\ ^1S_0$	23	8.32060343E+01	1	$2p3s\ ^1P_1$
1	1.01958458E+01	1	$2s2p\ ^3P_0$	24	8.33863900E+01	0	$2p3p\ ^1P_1$
2	1.02121664E+01	1	$2s2p\ ^3P_1$	25	8.40208672E+01	0	$2p3p\ ^3D_1$
3	1.02491742E+01	1	$2s2p\ ^3P_2$	26	8.40616015E+01	0	$2p3p\ ^3D_2$
4	2.07412463E+01	1	$2s2p\ ^1P_1$	27	8.40881830E+01	0	$2p3p\ ^3D_3$
5	2.66694333E+01	0	$2p^2\ ^3P_0$	28	8.50259651E+01	0	$2p3p\ ^3S_1$
6	2.67027886E+01	0	$2p^2\ ^3P_1$	29	8.57009338E+01	0	$2p3p\ ^3P_0$
7	2.67304605E+01	0	$2p^2\ ^3P_2$	30	8.57333127E+01	0	$2p3p\ ^3P_1$
8	2.96530529E+01	0	$2p^2\ ^1D_2$	31	8.57475973E+01	0	$2p3p\ ^3P_2$
9	3.72322263E+01	0	$2p^2\ ^1S_0$	32	8.61323265E+01	1	$2p3d\ ^1D_2$
10	6.76700610E+01	0	$2s3s\ ^3S_1$	33	8.62224302E+01	1	$2p3d\ ^3F_2$
11	6.96252639E+01	0	$2s3s\ ^1S_0$	34	8.62600814E+01	1	$2p3d\ ^3F_4$
12	7.20633094E+01	1	$2s3p\ ^1P_1$	35	8.62681550E+01	1	$2p3d\ ^3F_3$
13	7.22167139E+01	1	$2s3p\ ^3P_0$	36	8.71868107E+01	0	$2p3d\ ^1D_2$
14	7.22206481E+01	1	$2s3p\ ^3P_1$	37	8.74187555E+01	1	$2p3d\ ^3D_1$
15	7.22294570E+01	1	$2s3p\ ^3P_2$	38	8.74534844E+01	1	$2p3d\ ^3D_3$
16	7.45769720E+01	0	$2s3d\ ^3D_1$	39	8.74627902E+01	1	$2p3d\ ^3D_2$
17	7.45785110E+01	0	$2s3d\ ^3D_2$	40	8.80535540E+01	1	$2p3d\ ^3P_2$
18	7.45806612E+01	0	$2s3d\ ^3D_3$	41	8.80670911E+01	1	$2p3d\ ^3P_1$
19	7.64765459E+01	0	$2s3d\ ^1D_2$	42	8.80957034E+01	1	$2p3d\ ^3P_0$
20	8.09989119E+01	1	$2p3s\ ^3P_0$	43	8.97357041E+01	1	$2p3d\ ^1F_3$
21	8.10184557E+01	1	$2p3s\ ^3P_1$	44	9.01032523E+01	0	$2p3p\ ^1S_0$
22	8.10598717E+01	1	$2p3s\ ^3P_2$	45	9.01063701E+01	1	$2p3d\ ^1P_1$

TABLE 5.2: Composantes multipolaires des sections efficaces σ_0^{00} (10^{-20} cm²) pour les transitions $2s2p\ ^3P_J$ où $J = 0, 1$ et 2 vers $2s3p\ ^3P_{J'}$ où $J' = 0, 1$ et 2 et vers $2s3d\ ^3D_{J'}$ où $J' = 1, 2$ à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV).

ϵ_i	1 → 13	1 → 14	1 → 15	1 → 16	1 → 17	1 → 18	2 → 13	3 → 13
65	2.49[+2]	1.63[+1]	2.16[+1]	2.94[+2]	2.77[+1]	2.05[+1]	1.61[+1]	2.17[+1]
70	2.35[+2]	1.40[+1]	1.98[+1]	2.90[+2]	2.32[+1]	1.81[+1]	1.38[+1]	1.98[+1]
80	2.22[+2]	1.21[+1]	1.82[+1]	2.86[+2]	1.97[+1]	1.61[+1]	1.19[+1]	1.83[+1]
ϵ_i	2 → 14	2 → 15	2 → 16	2 → 17	3 → 14	3 → 15	3 → 16	3 → 17
65	2.68[+2]	3.71[+1]	1.55[+2]	3.14[+2]	3.68[+1]	2.87[+2]	3.80[+1]	1.20[+2]
70	2.52[+2]	3.34[+1]	1.49[+2]	3.08[+2]	3.32[+1]	2.68[+2]	3.45[+1]	1.13[+2]
80	2.37[+2]	3.04[+1]	1.44[+2]	3.02[+2]	3.02[+1]	2.51[+2]	3.14[+1]	1.07[+2]

TABLE 5.3: Composantes multipolaires des sections efficaces σ_0^{02} (10^{-20} cm²) pour les transitions $2s2p^3P_0$ vers $2s3p^3P_{J'}$ où $J' = 1$ et 2 (i.e., $1 \rightarrow 14$ et $1 \rightarrow 15$) et vers $2s3d^3D_{J'}$ où $J' = 1, 2$ et 3 (i.e., $1 \rightarrow 16, 1 \rightarrow 17$ et $1 \rightarrow 18$) à des énergies incidentes proches du seuil d'excitation ϵ_i (65, 70 et 80 eV).

ϵ_i	$1 \rightarrow 14$	$1 \rightarrow 15$	$1 \rightarrow 16$	$1 \rightarrow 17$	$1 \rightarrow 18$
65	6.98[+0]	-8.90[+0]	-1.28[+2]	-8.73[+0]	-1.19[+1]
70	5.98[+0]	-8.26[+0]	-1.31[+2]	-7.38[+0]	-1.02[+1]
80	5.15[+0]	-7.67[+0]	-1.34[+2]	-6.28[+0]	-8.72[+1]

 TABLE 5.4: Composantes multipolaires des sections efficaces σ_0^{02} (10^{-20} cm²) pour les transitions $2s2p^3P_J$ où $J = 1, 2$ vers $2s3p^3P_{J'}$ où $J' = 1, 2$ et vers $2s3d^3D_{J'}$ où $J' = 1, 2$ à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV).

ϵ_i	$2 \rightarrow 14$	$2 \rightarrow 15$	$2 \rightarrow 16$	$2 \rightarrow 17$	$3 \rightarrow 14$	$3 \rightarrow 15$	$3 \rightarrow 16$	$3 \rightarrow 17$
65	5.59[+0]	-1.14[+1]	3.50[+1]	-7.45[1]	1.14[+1]	-1.62[+1]	-1.30[+1]	1.47[1]
70	5.39[+0]	-1.01[+1]	3.54[+1]	-7.67[1]	1.02[+1]	-1.47[+1]	-1.09[+1]	1.67[1]
80	5.06[+0]	-8.94[+0]	3.55[+1]	-7.83[1]	9.18[+0]	-1.32[+1]	-9.21[+0]	1.82[1]

 TABLE 5.5: Composantes multipolaires des sections efficaces σ_0^{04} (10^{-20} cm²) pour les transitions $2s2p^3P_J$ où $J = 0, 1$ et 2 vers $2s3p^3P_2$ et vers $2s3d^3D_2$ à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV).

ϵ_i	$1 \rightarrow 15$	$1 \rightarrow 17$	$2 \rightarrow 15$	$2 \rightarrow 17$	$3 \rightarrow 15$	$3 \rightarrow 17$
65	-5.62[-1]	-1.44[+0]	4.87[-1]	-1.24[+1]	-1.25[-1]	-2.76[+0]
70	-3.71[-1]	-1.20[+0]	3.21[-1]	-1.23[+1]	-8.35[-2]	-2.67[+0]
80	-2.69[-1]	-1.01[+0]	2.33[-1]	-1.24[+1]	-5.98[-2]	-2.58[+0]

 TABLE 5.6: Composantes multipolaires des sections efficaces σ_0^{20} (10^{-20} cm²) pour les transitions $2s2p^3P_J$ où $J = 1, 2$ vers $2s3p^3P_{J'}$ où $J' = 0, 1$ et 2 et vers $2s3d^3D_{J'}$ où $J' = 1$ et 2 à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV).

ϵ_i	$2 \rightarrow 13$	$2 \rightarrow 14$	$2 \rightarrow 15$	$2 \rightarrow 16$	$2 \rightarrow 17$
65	4.30[+0]	1.56[+0]	5.14[+0]	3.62[+0]	-6.73[+0]
70	3.69[+0]	1.95[+0]	4.92[+0]	7.49[+0]	-8.13[+0]
80	3.19[+0]	2.18[+0]	4.69[+0]	1.06[+1]	-9.11[+1]
ϵ_i	$3 \rightarrow 13$	$3 \rightarrow 14$	$3 \rightarrow 15$	$3 \rightarrow 16$	$3 \rightarrow 17$
65	-4.58[+0]	-3.89[+0]	-1.95[-1]	-7.83[-1]	5.49[+0]
70	-4.57[+0]	-3.78[+0]	1.73[-1]	-1.43[+0]	7.84[+0]
80	-4.50[+0]	-3.66[+0]	5.03[-1]	-1.90[+0]	9.74[+0]

TABLE 5.7: Composantes multipolaires des sections efficaces σ_0^{40} (10^{-20} cm²) pour les transitions $2s2p^3P_2$ vers $2s3p^3P_{J'}$ où $J' = 0, 1$ et 2 et vers $2s3d^3D_{J'}$ où $J' = 1, 2$ à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV).

ϵ_i	3 → 13	3 → 14	3 → 15	3 → 16	3 → 17
65	-5.61[+1]	4.83[-1]	-1.25[-1]	3.06[-1]	-3.96[-1]
70	-3.73[+1]	2.85[-1]	-8.35[-2]	3.27[-1]	-4.23[-1]
80	-2.70[+1]	2.33[-1]	-5.99[-2]	3.65[-1]	-4.72[-1]

TABLE 5.8: Composantes multipolaires des sections efficaces σ_q^{22} (10^{-20} cm²) et ses différents K -termes σ_q^{22K} (10^{-20} cm²) où $q = 0, 1$ et 2 pour la transition $2s2p^3P_1$ vers $2s3p^3P_1$ (i.e., $2 \rightarrow 14$) à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV).

q	ϵ_i	σ_q^{220}	σ_q^{222}	σ_q^{224}	σ_q^{22}
0	65	2.42[+2]	-6.24[-1]	3.11[-1]	2.42[+2]
	70	2.28[+2]	-1.16[+0]	3.09[-1]	2.27[+2]
	80	2.16[+2]	-1.52[+0]	2.87[-1]	2.15[+2]
1	65	2.42[+2]	-3.12[-1]	-2.07[-1]	2.41[+2]
	70	1.47[+2]	-5.82[-1]	-2.06[-1]	2.27[+2]
	80	1.47[+2]	-7.58[-1]	-1.91[-1]	2.15[+2]
2	65	2.42[+2]	6.24[-1]	5.18[-2]	2.43[+2]
	70	2.28[+2]	1.16[+0]	5.15[-2]	2.29[+2]
	80	2.16[+2]	1.52[+0]	4.79[-2]	2.17[+2]

TABLE 5.9: Composantes multipolaires des sections efficaces σ_q^{22} (10^{-20} cm²) et ses différents K -termes σ_q^{22K} (10^{-20} cm²) où $q = 0, 1$ et 2 pour la transition $2s2p^3P_1$ vers $2s3p^3P_2$ (i.e., $2 \rightarrow 15$) à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV).

q	ϵ_i	σ_q^{220}	σ_q^{222}	σ_q^{224}	σ_q^{22}
0	65	-3.97[+0]	1.00[+0]	-7.40[-1]	-3.71[+0]
	70	-4.38[+0]	1.32[+0]	-6.50[-1]	-3.71[+0]
	80	-4.70[+0]	1.53[+0]	-5.66[-1]	-3.74[+0]
1	65	-3.97[+0]	5.01[-1]	4.94[-1]	-2.97[+0]
	70	-4.38[+0]	6.69[-1]	4.34[-1]	-3.28[+0]
	80	-4.70[+0]	7.67[-1]	3.78[-1]	-3.56[+0]
2	65	-3.97[+0]	-1.00[+0]	-1.23[-1]	-5.09[+0]
	70	-4.38[+0]	-1.31[+0]	-1.08[-1]	-5.80[+0]
	80	-4.70[+0]	-1.53[+0]	-9.43[-2]	-6.32[+0]

 TABLE 5.10: Composantes multipolaires des sections efficaces σ_q^{22} (10^{-20} cm²) et ses différents K -termes σ_q^{22K} (10^{-20} cm²) où $q = 0, 1$ et 2 pour la transition $2s2p^3P_1$ vers $2s3d^3D_2$ (i.e., $2 \rightarrow 17$) à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV).

q	ϵ_i	σ_q^{220}	σ_q^{222}	σ_q^{224}	σ_q^{22}
0	65	1.60[+2]	-2.48[+0]	-4.28[+0]	1.53[+2]
	70	1.60[+2]	-4.93[+0]	-4.25[+0]	1.51[+2]
	80	1.59[+2]	-6.71[+0]	-4.24[+0]	1.48[+2]
1	65	1.60[+2]	-1.42[+0]	2.86[+0]	1.61[+2]
	70	1.60[+2]	-2.47[+0]	2.83[+0]	1.60[+2]
	80	1.47[+2]	-3.36[+0]	2.83[+0]	1.58[+2]
2	65	1.60[+2]	2.85[+0]	-7.14[-1]	1.62[+2]
	70	1.60[+2]	4.94[+0]	-7.08[-1]	1.65[+2]
	80	1.59[+2]	6.72[+0]	-7.07[-1]	1.65[+2]

TABLE 5.11: Composantes multipolaires des sections efficaces σ_q^{24} (10^{-20} cm²) et ses différents K -termes σ_q^{24K} (10^{-20} cm²) où $q = 0, 1$ et 2 pour la transition $2s2p^3P_1$ vers $2s3p^3P_2$ (i.e., $2 \rightarrow 15$) à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV).

q	ϵ_i	σ_q^{242}	σ_q^{244}	σ_q^{246}	σ_q^{24}
0	65	2.40[+0]	4.92[-1]	5.21[-7]	2.89[+0]
	70	2.27[+0]	3.25[-1]	5.91[-7]	2.60[+0]
	80	2.13[+0]	2.36[-1]	6.25[-7]	2.37[+0]
1	65	2.19[+0]	1.35[-1]	-3.81[-7]	2.32[+0]
	70	2.07[+0]	8.90[-2]	-4.32[-7]	2.16[+0]
	80	1.95[+0]	6.45[-2]	-4.56[-7]	2.01[+0]
2	65	1.55[+0]	-5.72[-1]	1.34[-7]	9.80[-1]
	70	1.46[+0]	-3.78[-1]	1.53[-7]	1.08[+0]
	80	1.38[+0]	-2.74[-1]	1.65[-7]	1.11[+0]

 TABLE 5.12: Composantes multipolaires des sections efficaces σ_q^{24} (10^{-20} cm²) et ses différents K -termes σ_q^{24K} (10^{-20} cm²) où $q = 0, 1$ et 2 pour la transition $2s2p^3P_1$ vers $2s3d^3D_2$ (i.e., $2 \rightarrow 17$) à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV).

q	ϵ_i	σ_q^{242}	σ_q^{244}	σ_q^{246}	σ_q^{24}
0	65	-1.23[+2]	-1.78[+0]	-1.03[+0]	-1.26[+2]
	70	-1.27[+2]	-6.41[-1]	-9.54[-1]	-1.29[+2]
	80	-1.30[+2]	3.26[-1]	-9.06[-1]	-1.30[+2]
1	65	-1.12[+2]	-4.89[-1]	7.53[-1]	-1.13[+2]
	70	-1.16[+2]	-1.76[-1]	6.95[-1]	-1.16[+2]
	80	-1.19[+2]	8.91[-2]	6.62[-1]	-1.17[+2]
2	65	-7.96[+1]	2.07[+0]	-2.66[-1]	-7.78[+1]
	70	-8.91[+1]	7.45[-1]	-2.46[-1]	-8.86[+1]
	80	-8.39[+1]	-3.78[-1]	-2.34[-1]	-8.45[+1]

TABLE 5.13: Composantes multipolaires des sections efficaces σ_q^{22} (10^{-20} cm²) et ses différents K -termes σ_q^{22K} (10^{-20} cm²) où $q = 0, 1$ et 2 pour la transition $2s2p^3P_2$ vers $2s3p^3P_1$ (i.e., $3 \rightarrow 14$) à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV).

q	ϵ_i	σ_q^{220}	σ_q^{222}	σ_q^{224}	σ_q^{22}
0	65	-4.17[+0]	9.99[-1]	-7.36[-1]	-3.91[+0]
	70	-4.56[+0]	1.27[+0]	-6.49[-1]	-3.94[+0]
	80	-4.86[+0]	1.44[+0]	-5.63[-1]	-3.98[+0]
1	65	-4.17[+0]	4.99[-1]	4.91[-1]	-3.18[+0]
	70	-4.56[+0]	6.34[-1]	4.33[-1]	-3.49[+0]
	80	-4.86[+0]	7.20[-1]	3.75[-1]	-3.77[+0]
2	65	-4.17[+0]	-9.99[-1]	-1.23[-1]	-5.29[+0]
	70	-4.56[+0]	-1.27[+0]	-1.08[-1]	-5.94[+0]
	80	-4.86[+0]	-1.44[+0]	-9.38[-2]	-6.09[+0]

 TABLE 5.14: Composantes multipolaires des sections efficaces σ_q^{22} (10^{-20} cm²) et ses différents K -termes σ_q^{22K} (10^{-20} cm²) où $q = 0, 1$ et 2 pour la transition $2s2p^3P_2$ vers $2s3p^3P_2$ (i.e., $3 \rightarrow 15$) à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV).

q	ϵ_i	σ_q^{220}	σ_q^{222}	σ_q^{224}	σ_q^{22}
0	65	2.45[+2]	4.44[-1]	1.19[+0]	2.47[+2]
	70	2.31[+2]	3.88[-1]	1.03[+0]	2.23[+2]
	80	2.18[+2]	3.58[-1]	8.93[-1]	2.19[+2]
1	65	2.45[+2]	2.22[-1]	-7.92[-1]	2.43[+2]
	70	2.31[+2]	1.94[-1]	-6.87[-1]	2.81[+2]
	80	2.18[+2]	1.79[-1]	-5.95[-1]	2.18[+2]
2	65	2.45[+2]	-4.44[-1]	1.98[-1]	2.45[+2]
	70	2.31[+2]	-3.88[-1]	1.72[-1]	2.31[+2]
	80	2.18[+2]	-3.58[-1]	1.49[-1]	2.18[+2]

TABLE 5.15: Composantes multipolaires des sections efficaces σ_q^{42} (10^{-20} cm²) et ses différents K -termes σ_q^{42K} (10^{-20} cm²) où $q = 0, 1$ et 2 pour la transition $2s2p^3P_2$ vers $2s3p^3P_1$ (i.e., $3 \rightarrow 14$) à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV).

q	ϵ_i	σ_q^{422}	σ_q^{424}	σ_q^{426}	σ_q^{42}
0	65	2.69[+0]	4.87[-1]	2.05[-7]	3.18[+0]
	70	2.59[+0]	2.88[-1]	2.23[-7]	2.88[+0]
	80	2.47[+0]	2.36[-1]	2.42[-7]	2.73[+0]
1	65	2.45[+0]	1.33[-1]	-1.49[-7]	2.59[+0]
	70	2.37[+0]	7.88[-2]	-1.63[-7]	2.45[+0]
	80	2.26[+0]	6.46[-2]	-1.77[-7]	2.32[+0]
2	65	1.74[+0]	-5.66[-1]	5.28[-8]	1.16[+0]
	70	1.67[+0]	-3.34[-1]	5.75[-8]	1.34[+0]
	80	1.60[+0]	-2.74[-1]	6.26[-8]	1.32[+0]

TABLE 5.16: Composantes multipolaires des sections efficaces σ_q^{42} (10^{-20} cm²) et ses différents K -termes σ_q^{42K} (10^{-20} cm²) où $q = 0, 1$ et 2 pour la transition $2s2p^3P_2$ vers $2s3p^3P_2$ (i.e., $3 \rightarrow 15$) à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV).

q	ϵ_i	σ_q^{422}	σ_q^{424}	σ_q^{426}	σ_q^{42}
0	65	-2.65[+0]	-1.07[-1]	5.24[-6]	-2.76[+0]
	70	-3.07[+0]	-7.12[-2]	4.66[-6]	-3.14[+0]
	80	-3.31[+0]	-5.10[-2]	4.13[-6]	-3.36[+0]
1	65	-2.42[+0]	-2.92[-2]	-3.83[-6]	-2.45[+0]
	70	-2.80[+0]	-1.95[-2]	-3.40[-6]	-2.82[+0]
	80	-3.02[+0]	-1.40[-2]	-3.02[-6]	-3.04[+0]
2	65	-1.71[+0]	1.24[-1]	1.35[-6]	-1.59[+0]
	70	-1.98[+0]	8.27[-2]	1.20[-6]	-1.90[+0]
	80	-2.14[+0]	5.93[-2]	1.07[-6]	-2.08[+0]

TABLE 5.17: Composantes multipolaires des sections efficaces σ_q^{22} (10^{-20} cm²) et ses différents K -termes σ_q^{22K} (10^{-20} cm²) où $q = 0, 1$ et 2 pour la transition $2s2p^3P_2$ vers $2s3d^3D_2$ (i.e., $3 \rightarrow 17$) à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV).

q	ϵ_i	σ_q^{220}	σ_q^{222}	σ_q^{224}	σ_q^{22}
0	65	4.46[+1]	1.00[+1]	-6.72[+0]	1.00[+1]
	70	4.26[+1]	1.16[+1]	-6.50[+0]	1.16[+1]
	80	4.09[+1]	1.29[+1]	-6.35[+0]	1.29[+1]
1	65	4.46[+0]	5.00[+0]	4.48[+0]	5.41[+1]
	70	4.26[+0]	5.82[+0]	4.33[+0]	5.28[+1]
	80	4.09[+0]	6.47[+0]	4.23[+0]	5.16[+1]
2	65	4.46[+0]	-1.00[+1]	-1.12[+0]	3.35[+1]
	70	4.26[+0]	-1.16[+1]	-1.08[+0]	2.99[+1]
	80	4.09[+0]	-1.29[+1]	-1.05[+0]	2.69[+1]

 TABLE 5.18: Composantes multipolaires des sections efficaces σ_q^{24} (10^{-20} cm²) et ses différents K -termes σ_q^{24K} (10^{-20} cm²) où $q = 0, 1$ et 2 pour la transition $2s2p^3P_2$ vers $2s3p^3P_2$ (i.e., $3 \rightarrow 15$) à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV).

q	ϵ_i	σ_q^{242}	σ_q^{244}	σ_q^{246}	σ_q^{24}
0	65	-2.21[+0]	-1.07[-1]	4.75[-6]	-2.31[+0]
	70	-2.59[+0]	-7.12[-2]	4.10[-6]	-2.67[+0]
	80	-2.80[+0]	-5.10[-2]	3.55[-6]	-2.85[+0]
1	65	-2.02[+0]	-2.92[-2]	-3.47[-6]	-2.04[+0]
	70	-2.37[+0]	-1.95[-2]	-2.99[-6]	-2.39[+0]
	80	-2.56[+0]	-1.40[-2]	-2.59[-6]	-2.57[+0]
2	65	-1.43[+0]	1.24[-1]	1.23[-6]	-1.30[+0]
	70	-1.67[+0]	8.27[-2]	1.06[-6]	-1.59[+0]
	80	-1.80[+0]	5.93[-2]	9.15[-7]	-1.75[+0]

TABLE 5.19: Composantes multipolaires des sections efficaces σ_q^{24} (10^{-20} cm²) et ses différents K -termes σ_q^{24K} (10^{-20} cm²) où $q = 0, 1$ et 2 pour la transition $2s2p^3P_2$ vers $2s3d^3D_2$ (i.e., $3 \rightarrow 17$) à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV).

q	ϵ_i	σ_q^{242}	σ_q^{244}	σ_q^{246}	σ_q^{24}
0	65	1.44[+1]	6.85[+0]	3.40[+0]	2.47[+1]
	70	1.41[+1]	5.70[+0]	2.92[+0]	2.27[+1]
	80	1.38[+1]	4.76[+0]	2.54[+0]	2.11[+1]
1	65	1.32[+1]	1.88[+0]	-2.49[+0]	1.25[+1]
	70	1.29[+1]	1.56[+0]	-2.13[+0]	1.23[+1]
	80	1.26[+1]	1.30[+0]	-1.86[+0]	1.21[+1]
2	65	9.31[+0]	-7.95[+0]	8.79[-1]	2.24[+0]
	70	9.11[+0]	-6.62[+0]	7.54[-1]	3.25[+0]
	80	8.93[+0]	-5.53[+0]	6.57[-1]	4.06[+0]

 TABLE 5.20: Composantes multipolaires des sections efficaces σ_q^{42} (10^{-20} cm²) et ses différents K -termes σ_q^{42K} (10^{-20} cm²) où $q = 0, 1$ et 2 pour la transition $2s2p^3P_2$ vers $2s3d^3D_2$ (i.e., $3 \rightarrow 17$) à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV).

q	ϵ_i	σ_q^{422}	σ_q^{424}	σ_q^{426}	σ_q^{42}
0	65	-2.82[+0]	-5.36[-1]	-1.37[+0]	-4.72[+0]
	70	-9.12[-1]	-4.16[-1]	-1.09[+0]	-2.42[+0]
	80	6.62[-1]	-3.32[-1]	-8.69[-1]	-5.39[-1]
1	65	-2.57[+0]	-1.47[-1]	1.00[+0]	-1.72[+0]
	70	-8.33[-1]	-1.14[-1]	8.01[-1]	-1.46[-1]
	80	6.05[-1]	-9.10[-2]	6.35[-1]	1.15[+0]
2	65	-1.82[+0]	6.23[-1]	-3.54[-1]	-1.55[+0]
	70	-5.89[-1]	4.83[-1]	-2.83[-1]	-3.88[-1]
	80	4.27[-1]	3.86[-1]	-2.24[-1]	5.89[-1]

TABLE 5.21: Composantes multipolaires des sections efficaces σ_q^{44} (10^{-20} cm²) et ses différents K -termes σ_q^{44K} (10^{-20} cm²) où $q = 0, 1, 2, 3$ et 4 pour la transition $2s2p^3P_2$ vers $2s3p^3P_2$ (i.e., $3 \rightarrow 15$) à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV).

q	ϵ_i	σ_q^{440}	σ_q^{442}	σ_q^{444}	σ_q^{446}	σ_q^{44}
0	65	2.40[+2]	-2.72[+0]	-2.58[-1]	-6.20[-6]	2.37[+2]
	70	2.27[+2]	-1.63[+0]	-1.72[-1]	-5.59[-6]	2.25[+2]
	80	2.15[+2]	-8.68[-1]	-1.23[-1]	-5.02[-6]	2.14[+2]
1	65	2.40[+2]	-2.31[+0]	-1.28[-1]	3.10[-7]	2.38[+2]
	70	2.27[+2]	-1.39[+0]	-8.61[-2]	2.80[-7]	2.26[+2]
	80	2.15[+2]	-7.37[-1]	-6.17[-2]	2.51[-7]	2.15[+2]
2	65	2.40[+2]	-1.09[+0]	1.58[-1]	6.82[-6]	2.39[+2]
	70	2.27[+2]	-6.54[-1]	1.05[-1]	6.15[-6]	2.26[+2]
	80	2.15[+2]	-3.47[-1]	7.54[-2]	5.52[-6]	2.15[+2]
3	65	2.40[+2]	9.50[-1]	3.01[-1]	-5.27[-6]	2.41[+2]
	70	2.27[+2]	5.72[-1]	2.01[-1]	-4.75[-6]	2.28[+2]
	80	2.15[+2]	3.03[-1]	1.44[-1]	-4.27[-6]	2.16[+2]
4	65	2.40[+2]	3.80[+0]	-2.00[-1]	1.24[-6]	2.44[+2]
	70	2.27[+2]	2.29[+0]	-1.34[-1]	1.12[-6]	2.29[+2]
	80	2.15[+2]	1.21[+0]	-9.59[-2]	1.00[-6]	2.16[+2]

TABLE 5.22: Composantes multipolaires des sections efficaces σ_q^{44} (10^{-20} cm²) et ses différents K -termes σ_q^{44K} (10^{-20} cm²) où $q = 0, 1, 2, 3$ et 4 pour la transition $2s2p^3P_2$ vers $2s3d^3D_2$ (i.e., $3 \rightarrow 17$) à des énergies incidentes ϵ_i proches du seuil d'excitation (65, 70 et 80 eV).

q	ϵ_i	σ_q^{440}	σ_q^{442}	σ_q^{444}	σ_q^{446}	σ_q^{44}
0	65	-4.65[+1]	2.20[+1]	-2.41[+0]	-2.04[+0]	-2.90[+1]
	70	-4.66[+1]	2.27[+1]	-1.31[+0]	-1.63[+0]	-2.68[+1]
	80	-4.66[+1]	2.32[+1]	-4.03[-1]	-1.30[+0]	-2.50[+1]
1	65	-4.65[+1]	1.87[+1]	-1.20[+0]	1.02[-1]	-2.89[+1]
	70	-4.66[+1]	1.93[+1]	-6.56[-1]	8.17[-2]	-2.79[+1]
	80	-4.66[+1]	1.98[+1]	-2.01[-1]	6.48[-2]	-2.69[+1]
2	65	-4.65[+1]	8.78[+0]	1.47[+0]	2.25[+0]	-3.40[+1]
	70	-4.66[+1]	9.08[+0]	8.02[-1]	1.80[+0]	-3.49[+1]
	80	-4.66[+1]	9.30[+0]	2.46[-1]	1.43[+0]	-3.56[+1]
3	65	-4.65[+1]	-7.68[+0]	2.81[+0]	-1.74[+0]	-5.31[+1]
	70	-4.66[+1]	-7.94[+0]	1.53[+0]	-1.39[+0]	-5.44[+1]
	80	-4.66[+1]	-8.14[+0]	4.70[-1]	-1.10[+0]	-5.53[+1]
4	65	-4.65[+1]	-3.07[+1]	-1.88[+0]	4.09[-1]	-7.87[+1]
	70	-4.66[+1]	-3.18[+1]	-1.02[+0]	3.27[-1]	-7.91[+1]
	80	-4.66[+1]	-3.25[+1]	-3.13[-1]	2.59[-1]	-7.92[+1]

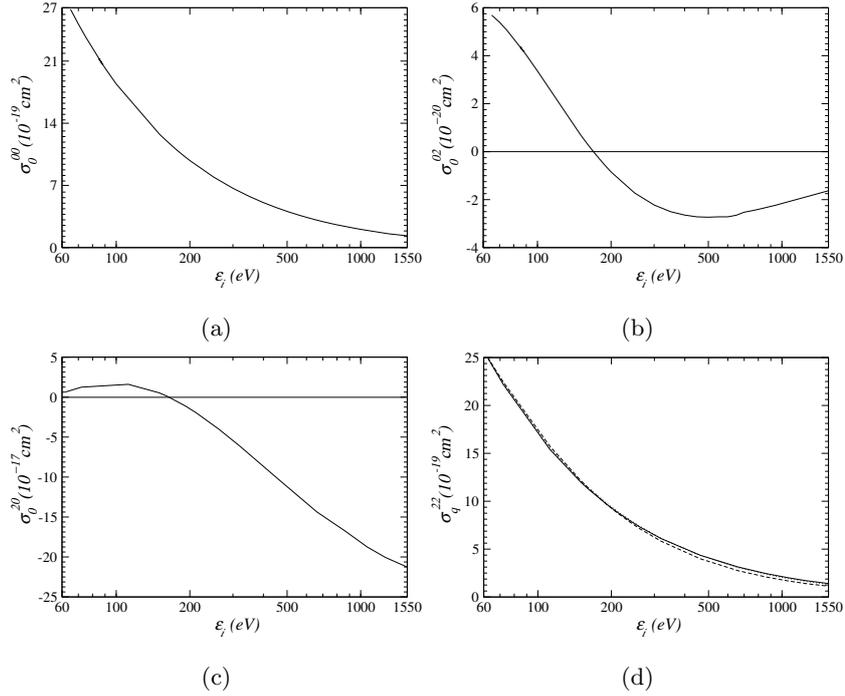


FIGURE 5.1: Composantes multipolaires des sections efficaces $\sigma_q^{kk'}$ où $k = 0, 2$; $k' = 0, 2$ et $q = 0, 1$ et 2 en fonction de l'énergie de l'électron incident ε_i pour la transition $2s2p\ ^3P_1$ vers $2s3p\ ^3P_1$ (i.e., $2 \rightarrow 14$). Pour le panel (d), les courbes en trait plein, en pointillé et trait discontinu correspondent à σ_0^{22} , σ_1^{22} et σ_2^{22} , respectivement.

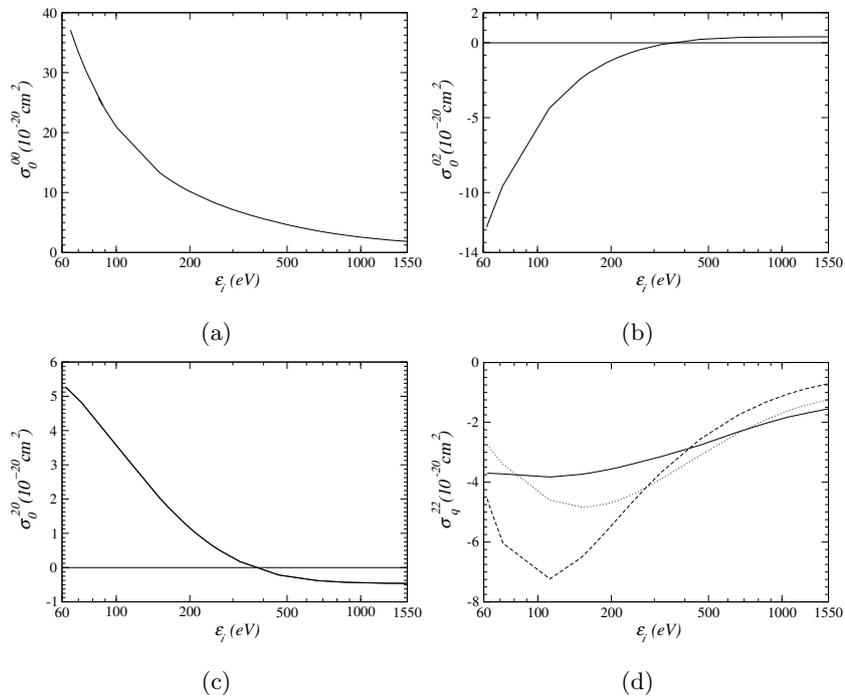


FIGURE 5.2: Composantes multipolaires des sections efficaces $\sigma_q^{kk'}$ où $k = 0, 2$; $k' = 0, 2$ et $q = 0, 1$ et 2 en fonction de l'énergie de l'électron incident ε_i pour la transition $2s2p\ ^3P_1$ vers $2s3p\ ^3P_2$ (i.e., $2 \rightarrow 15$). Pour le panel (d), les courbes en trait plein, en pointillé et trait discontinu correspondent à σ_0^{22} , σ_1^{22} et σ_2^{22} , respectivement.

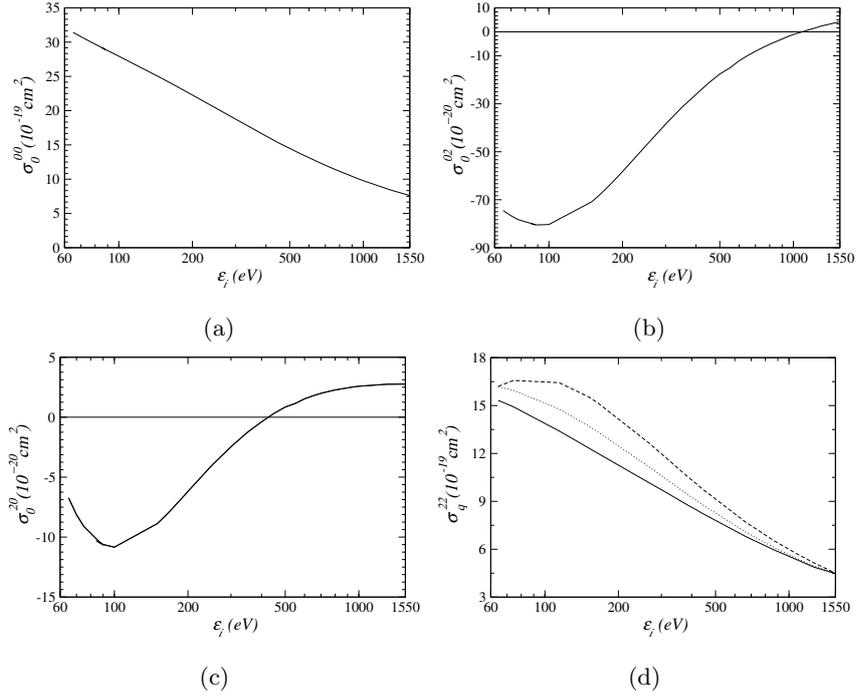


FIGURE 5.3: Composantes multipolaires des sections efficaces $\sigma_q^{kk'}$ où $k = 0, 2$; $k' = 0, 2$ et $q = 0, 1$ et 2 en fonction de l'énergie de l'électron incident ε_i pour la transition $2s2p \ ^3P_1$ vers $2s3d \ ^3D_2$ (i.e., $2 \rightarrow 17$). Pour le panel (d), les courbes en trait plein, en pointillé et trait discontinu correspondent à σ_0^{22} , σ_1^{22} et σ_2^{22} , respectivement.

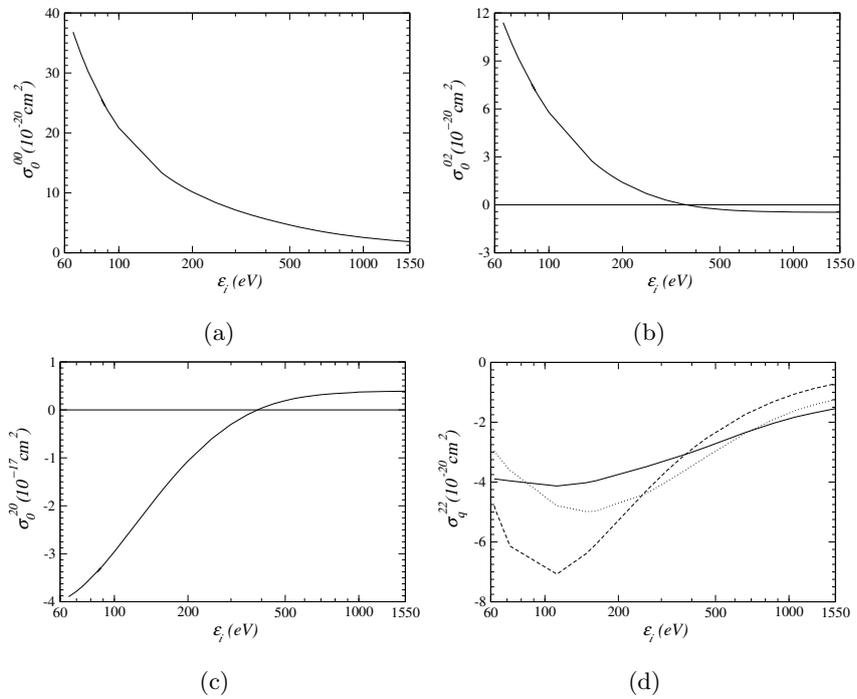


FIGURE 5.4: Composantes multipolaires des sections efficaces $\sigma_q^{kk'}$ où $k = 0, 2$; $k' = 0, 2$ et $q = 0, 1$ et 2 en fonction de l'énergie de l'électron incident ε_i pour la transition $2s2p \ ^3P_2$ vers $2s3p \ ^3P_1$ (i.e., $3 \rightarrow 14$). Pour le panel (d), les courbes en trait plein, en pointillé et trait discontinu correspondent à σ_0^{22} , σ_1^{22} et σ_2^{22} , respectivement.

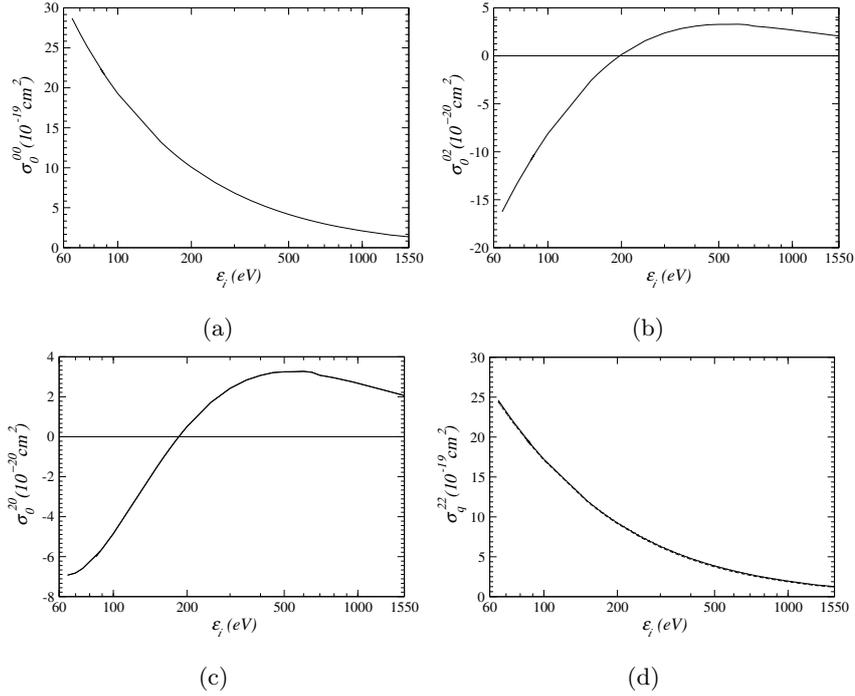


FIGURE 5.5: Composantes multipolaires des sections efficaces $\sigma_q^{kk'}$ où $k = 0, 2$; $k' = 0, 2$ et $q = 0, 1$ et 2 en fonction de l'énergie de l'électron incident ε_i pour la transition $2s2p\ ^3P_2$ vers $2s3p\ ^3P_2$ (i.e., $3 \rightarrow 15$). Pour le panel (d), les courbes en trait plein, en pointillé et trait discontinu correspondent à σ_0^{22} , σ_1^{22} et σ_2^{22} , respectivement.

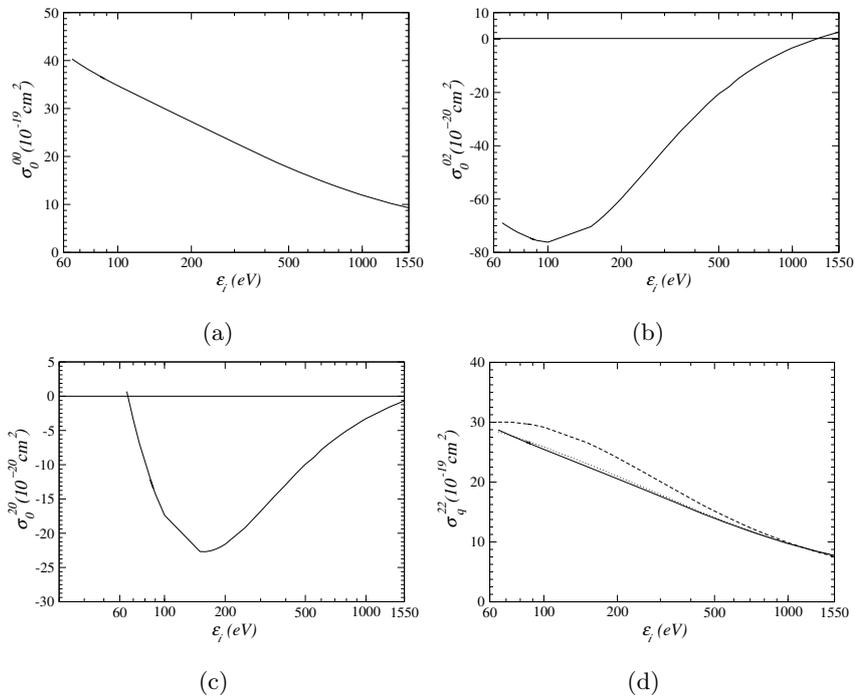


FIGURE 5.6: Composantes multipolaires des sections efficaces $\sigma_q^{kk'}$ où $k = 0, 2$; $k' = 0, 2$ et $q = 0, 1$ et 2 en fonction de l'énergie de l'électron incident ε_i pour la transition $2s2p\ ^3P_2$ vers $2s3d\ ^3D_3$ (i.e., $3 \rightarrow 18$). Pour le panel (d), les courbes en trait plein, en pointillé et trait discontinu correspondent à σ_0^{22} , σ_1^{22} et σ_2^{22} , respectivement.

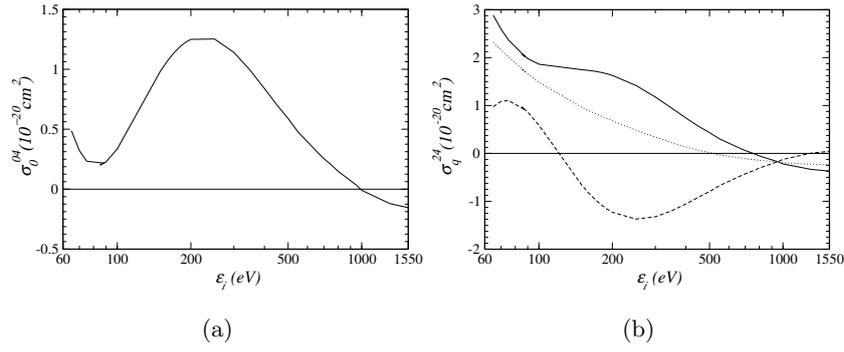


FIGURE 5.7: Composantes multipolaires des sections efficaces $\sigma_q^{kk'}$ où $k = 0, 2$; $k' = 4$ et $q = 0, 1$ et 2 en fonction de l'énergie de l'électron incident ϵ_i pour la transition $2s2p \ ^3P_1$ vers $2s3p \ ^3P_2$ (i.e., $2 \rightarrow 15$). Pour le panel (b), les courbes en trait plein, en pointillé et trait discontinu correspondent à σ_0^{24} , σ_1^{24} et σ_2^{24} , respectivement.

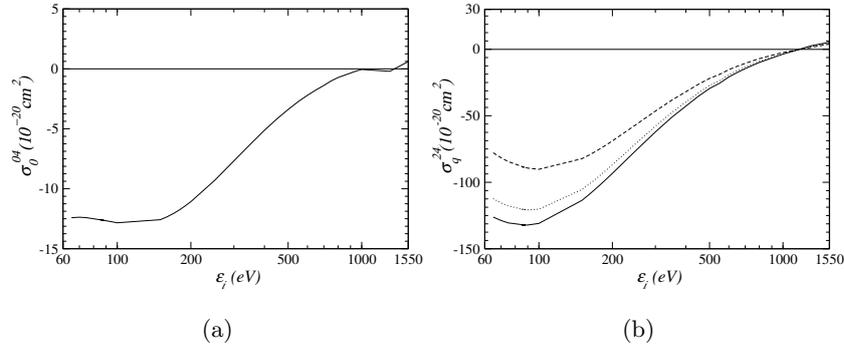


FIGURE 5.8: Composantes multipolaires des sections efficaces $\sigma_q^{kk'}$ où $k = 0, 2$; $k' = 4$ et $q = 0, 1$ et 2 en fonction de l'énergie de l'électron incident ϵ_i pour la transition $2s2p \ ^3P_1$ vers $2s3d \ ^3D_2$ (i.e., $2 \rightarrow 17$). Pour le panel (b), les courbes en trait plein, en pointillé et trait discontinu correspondent à σ_0^{24} , σ_1^{24} et σ_2^{24} , respectivement.

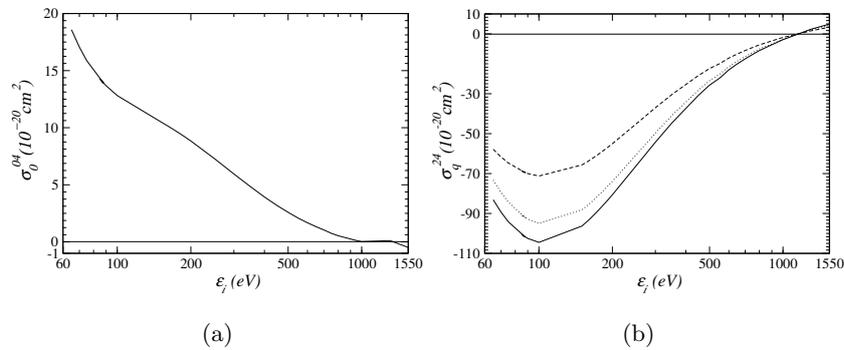


FIGURE 5.9: Composantes multipolaires des sections efficaces $\sigma_q^{kk'}$ où $k = 0, 2$; $k' = 4$ et $q = 0, 1$ et 2 en fonction de l'énergie de l'électron incident ϵ_i pour la transition $2s2p \ ^3P_2$ vers $2s3D \ ^3D_3$ (i.e., $3 \rightarrow 18$). Pour le panel (b), les courbes en trait plein, en pointillé et trait discontinu correspondent à σ_0^{24} , σ_1^{24} et σ_2^{24} , respectivement.

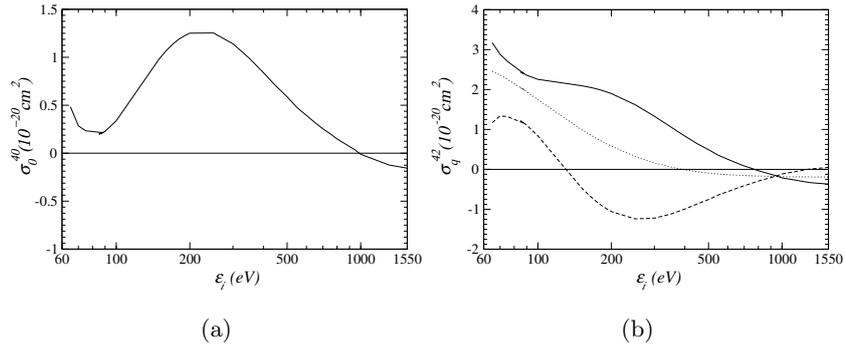


FIGURE 5.10: Composantes multipolaires des sections efficaces $\sigma_q^{kk'}$ où $k = 4$; $k' = 0, 2$ et $q = 0, 1$ et 2 en fonction de l'énergie de l'électron incident ε_i pour la transition $2s2p\ ^3P_2$ vers $2s3p\ ^3P_1$ (i.e., $3 \rightarrow 14$). Pour le panel (b), les courbes en trait plein, en pointillé et trait discontinu correspondent à σ_0^{42} , σ_1^{42} et σ_2^{42} , respectivement.

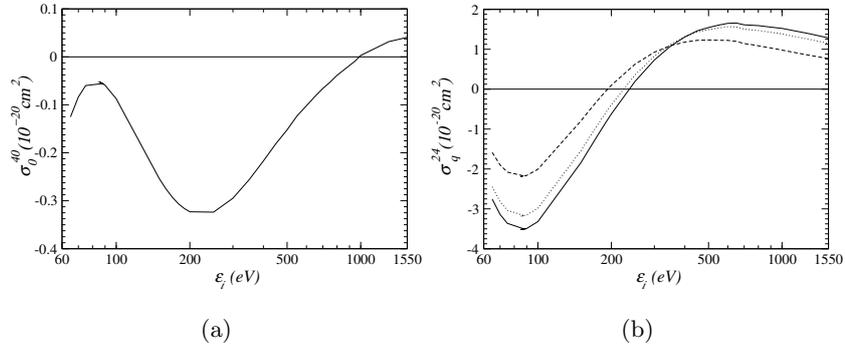


FIGURE 5.11: Composantes multipolaires des sections efficaces $\sigma_q^{kk'}$ où $k = 4$; $k' = 0, 2$ et $q = 0, 1$ et 2 en fonction de l'énergie de l'électron incident ε_i pour la transition $2s2p\ ^3P_2$ vers $2s3p\ ^3P_2$ (i.e., $3 \rightarrow 15$). Pour le panel (b), les courbes en trait plein, en pointillé et trait discontinu correspondent à σ_0^{42} , σ_1^{42} et σ_2^{42} , respectivement.

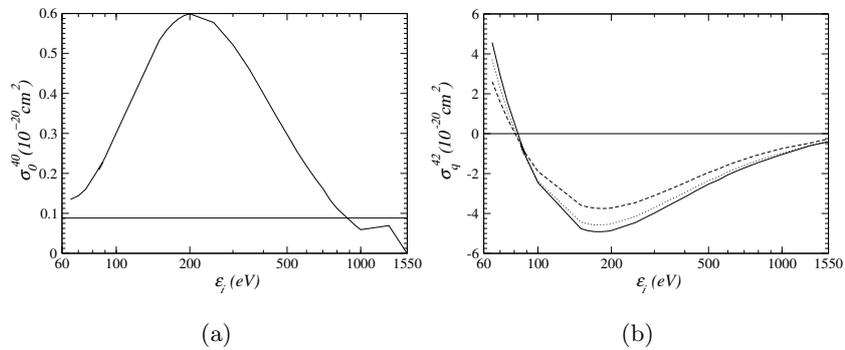


FIGURE 5.12: Composantes multipolaires des sections efficaces $\sigma_q^{kk'}$ où $k = 4$; $k' = 0, 2$ et $q = 0, 1$ et 2 en fonction de l'énergie de l'électron incident ε_i pour la transition $2s2p\ ^3P_2$ vers $2s3d\ ^3D_3$ (i.e., $3 \rightarrow 18$). Pour le panel (b), les courbes en trait plein, en pointillé et trait discontinu correspondent à σ_0^{42} , σ_1^{42} et σ_2^{42} , respectivement.

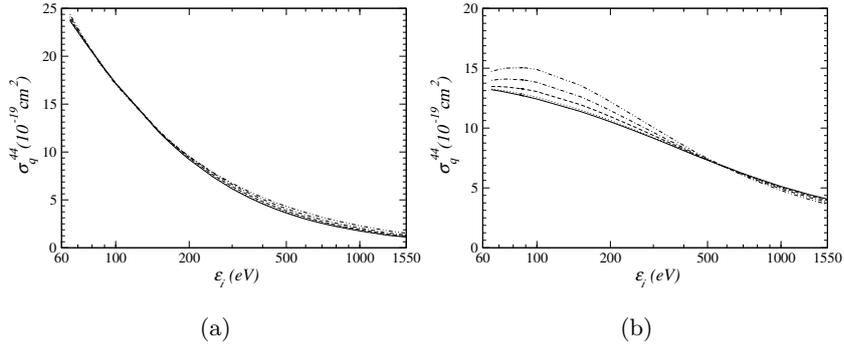


FIGURE 5.13: Composantes multipolaires des sections efficaces $\sigma_q^{kk'}$ où $k = 4$; $k' = 4$ et $q = 0, 1, 2, 3$ et 4 en fonction de l'énergie de l'électron incident ε_i pour la transition $2s2p^3P_2$ vers $2s3p^3P_2$ (i.e., $3 \rightarrow 15$, panel (a)) et vers $2s3d^3D_3$ (i.e., $3 \rightarrow 18$, panel (b)). Courbes en trait plein, en pointillé, en trait discontinu, en point-discontinu et double-points-discontinu correspondent à σ_0^{44} , σ_1^{44} , σ_2^{44} , σ_3^{44} et σ_4^{44} , respectivement.

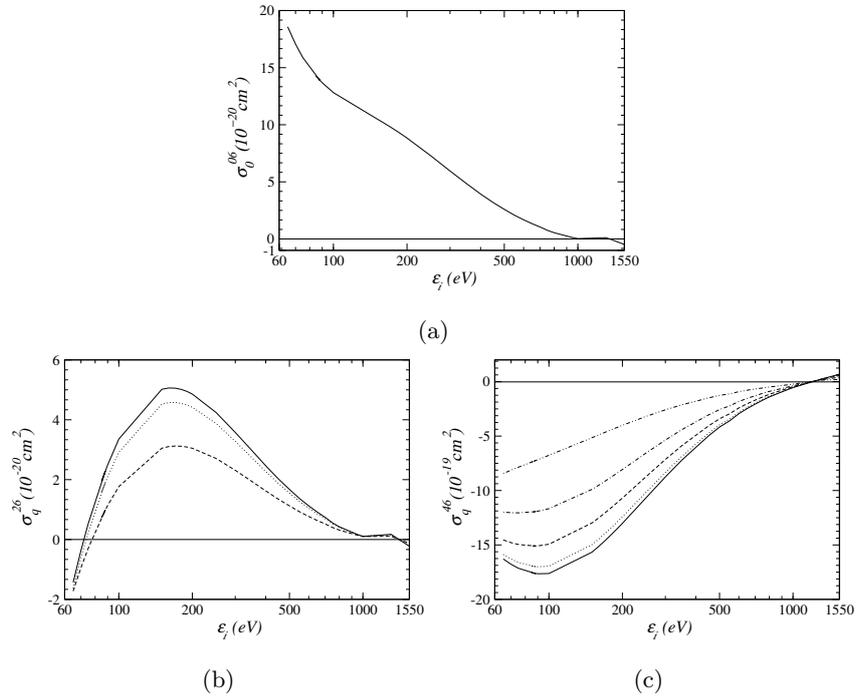


FIGURE 5.14: Composantes multipolaires des sections efficaces $\sigma_q^{kk'}$ où $k = 0, 2$ et 4 ; $k' = 6$ et $q = 0, 1, 2, 3$ et 4 en fonction de l'énergie de l'électron incident ε_i pour la transition $2s2p^3P_2$ vers $2s3d^3D_3$ (i.e., $3 \rightarrow 18$). Pour les panels (b) et (c), les courbes en trait plein, en pointillé, en trait discontinu, en point-discontinu et double-points-discontinu correspondent à $\sigma_0^{kk'}$, $\sigma_1^{kk'}$, $\sigma_2^{kk'}$, $\sigma_3^{kk'}$ et $\sigma_4^{kk'}$ où $k = 2, 4$; $k' = 6$, respectivement.

5.4 Discussions

Examinons minutieusement les résultats numériques présentés dans la section précédente. Les tableaux et les figures montrent que dans le cas des transitions $\Delta J = 0$ (sans changement du moment cinétique J), σ_q^{22} reste pratiquement inchangé pour $q = 0, 1, 2$. Pour les autres transitions correspondent à $\Delta J \neq 0$, il y a une certaine sensibilité à q plus ou moins significative selon la transition considérée.

En regardant de plus près les valeurs de σ_0^{22K} ($K = 0, 2, 4$) dans les tableaux ci-dessus, on constate que pour les transitions $\Delta J = 0$, pratiquement seulement σ^2 , le terme isotrope ($K = 0$), contribue à σ_0^{22} , les termes $K = 2$ et $K = 4$ étant négligeables. Ceci explique pourquoi $\sigma_{q=1,2}^{22} \simeq \sigma_0^{22}$ pour les deux excitations $2s2p^3P_1 \rightarrow 2s3p^3P_1$ et $2s2p^3P_2 \rightarrow 2s3p^3P_2$, sachant que σ^2 est indépendant de q comme mentionné dans la section 5. La particularité de ces excitations, par rapport aux autres considérées ici, réside dans l'implication de la partie monopôle ($t = 0$) de l'interaction électron-électron de Coulomb. Plus précisément d'après nos calculs, la composante monopolaire $\sigma_{t=0}$ pour les deux excitations représente plus de 85% de la section efficace conventionnelle $\sigma = \sum_t \sigma_t$ (cf. Eq. 4.49). C'est vraisemblablement la raison pour laquelle la contribution du terme ($K = 0$) σ^2 à σ_0^{22} est écrasante.

Les valeurs de $\sigma_{q=1,\dots,4}^{44}$ sont pratiquement égales à σ_0^{44} pour la transition $2s2p^3P_2 \rightarrow 2s3p^3P_2$ (voir tableau 5.21 et figure 5.13, panel(a)), ce qui est compatible aux remarques faites ci-dessus sur σ_q^{22} . La très faible dépendance en q peut être comprise en notant que σ^4 , i.e., le terme $K = 0$ qui est indépendant de q , est la contribution essentielle à σ_0^{44} . À ce stade, il est intéressant de noter qu'en conséquence de la quasi-égalité de σ_q^{kk} avec différents $|q|$ (pour $2s2p^3P_1 \rightarrow 2s3p^3P_1$ ($k = 2$) et $2s2p^3P_2 \rightarrow 2s3p^3P_2$ ($k = 2$ et 4)), le coefficient de taux multipolaire d'excitation \tilde{C}_0^{kk} , pour une distribution de vitesses des électrons $f(v, \theta)$ à symétrie cylindrique autour de l'axe z , peut être directement déduit de la seule composante $q = 0$ de $C_q^{kk} = v\sigma_q^{kk}$ pour un faisceau monoénergétique d'électrons le long de l'axe z . Précisons que pour la distribution de vitesses $f(v, \theta)$, v représente le module de la vitesse d'électron et θ l'angle entre le vecteur vitesse et l'axe z . A partir de l'Eq. (41) de la Réf. [8], en utilisant le fait que $C_q^{kk} \simeq v\sigma^k$, on obtient après quelques manipulations simples

$$\tilde{C}_0^{kk} \simeq 2\pi \int_{v_{th}}^{\infty} C_0^{kk} f_0(v) v^2 dv, \quad (5.6)$$

où v_{th} est la vitesse correspondant au seuil d'excitation et $f_0(v)$ est la partie isotrope de la distribution d'électrons, donnée par

$$f_0(v) = \int_0^\pi f(v, \theta) \sin \theta d\theta. \quad (5.7)$$

En poussant plus loin l'analyse des résultats numériques représentés dans les figures ci-dessus, on peut voir que pour les deux transitions $\Delta J = 0$, σ_0^{02} change de signe à une certaine énergie ε_{i0} . De plus, en valeur absolue $|\sigma_0^{02}|$ est deux ordres de grandeur inférieur à σ_0^{22} . Nos calculs donnent $\varepsilon_{i0} \approx 169.5$ eV pour $2s2p^3P_1 \rightarrow 2s3p^3P_1$ (voir figure 5.1, panel(b)) et $\varepsilon_{i0} \approx 197$ eV pour $2s2p^3P_2 \rightarrow 2s3p^3P_2$ (voir figure 5.5, panel (b)). En dehors d'une gamme d'énergie très étroite centrée sur ε_{i0} , où σ_0^{02} change de signe, à une densité de faisceau d'électrons n_e , le flux de création d'alignement $n_e|C_0^{02}|\rho_0^0$ et le flux de transfert d'alignement $n_eC_0^{22}|\rho_0^2|$ pourraient être comparables.

La raison de la comparabilité des deux flux est que pour les niveaux métastables initiaux $2s2p^3P_{1,2}$, le tenseur statistique $|\rho_0^2|$ est bien inférieur à ρ_0^0 , ce qui pourrait compenser le fait que $C_0^{22} \gg |C_0^{02}|$. Étant donné que les flux ci-dessus entrent dans le modèle GPACR, il est nécessaire de résoudre les équations de taux de ce modèle pour calculer avec précision les tenseurs statistiques ρ_0^k et en particulier ceux des niveaux initiaux ρ_0^2 des excitations. Cependant, de tels calculs sont assez élaborés et dépassent le cadre du présent travail. Sans résoudre les équations du taux GPACR, on peut s'assurer que, pour des niveaux métastables de moment cinétique $J \geq 1$, $|\rho_0^k|/\rho_0^0 \ll 1$ ($k = 2, 4, \dots, 2J$). Ceci est particulièrement vrai si n_e est suffisamment grand pour que les populations des niveaux métastables deviennent comparables à celle du niveau fondamental. Un exemple peut être inspiré d'un article récent [9] où les populations $N_{1/2}$ et $N_{3/2}$ des sous-niveaux $M = 1/2$ et $M = 3/2$ du niveau métastable $2s^22p^2P_{3/2}$ de l'ion argon Ar^{13+} boroïde avaient été calculées. À partir de ces calculs, il a été trouvé que le rapport $\rho_0^2/\rho_0^0 = (N_{1/2} - N_{3/2})/(N_{1/2} + N_{3/2})$ est soit positif soit négatif, mais, en valeur absolue, dans la plupart des conditions, il est inférieur à 10^{-3} et ne dépasse jamais 0.045.

Sans la connaissance des signes de $\rho_0^2(2s2p^3P_{1,2})$, on ne peut pas dire si le flux de transfert d'alignement s'ajoute ou se soustrait au flux de création d'alignement, c'est-à-dire si les multipôles d'état ρ_0^2 de $2s3p^3P_{1,2}$ sont augmentés ou réduits par le transfert d'alignement. À ce stade, nous pouvons seulement dire qu'à des énergies proches de 169.5 eV pour $2s2p^3P_1 \rightarrow 2s3p^3P_1$ (voir figure 5.1, panel(c)) et 197 eV pour $2s2p^3P_2 \rightarrow 2s3p^3P_2$ (voir figure 5.5, panel(b)), C_0^{02} change de

signe, ce qui signifie que seul le flux de transfert d'alignement contribue à ρ_0^2 pour chaque niveau final.

Maintenant, l'inspection des valeurs de σ_0^{02} , σ_0^{22} et σ_0^{42} pour la transition $2s2p^3P_2 \rightarrow 2s3p^3P_1$ (voir tableaux 5.4, 5.13 et 5.15, figure 5.4 et 5.1) indique que l'alignement du niveau final est principalement déterminé par le flux $n_e C_0^{02} \rho_0^0(2s2p^3P_2)$ qui domine à la fois les flux $n_e |C_0^{22} \rho_0^2(2s2p^3P_2)|$ et $n_e C_0^{42} |\rho_0^4(2s2p^3P_2)|$. En comparant σ_0^{02} pour $2s2p^3P_1 \rightarrow 2s3p^3P_1$ et $2s2p^3P_2 \rightarrow 2s3p^3P_1$, et en rappelant à partir des références [10,11] que la population de $2s2p^3P_1$ est plus petite que celle de $2s2p^3P_2$ (c'est-à-dire $\rho_0^0(2s2p^3P_1) < \rho_0^0(2s2p^3P_2)$), on observe des tendances différentes selon l'énergie ε_i des électrons de collision. Pour $\varepsilon_i = 63, 100$ et 150 eV, le flux de création d'alignement vers $2s3p^3P_1$ (qui est positif) est remarqué beaucoup plus important à partir de $2s2p^3P_2$ qu'à partir de $2s2p^3P_1$. Quant à l'énergie supérieure $\varepsilon_i = 220$ eV, les flux de création d'alignement de $2s2p^3P_1$ et $2s2p^3P_2$ vers $2s3p^3P_1$ sont de signes opposés et ont tendance à s'annuler mutuellement. Cependant, la création d'alignement est moins efficace à partir de $2s2p^3P_1$ qu'à partir de $2s2p^3P_2$, et par conséquent ρ_0^2 de $2s3p^3P_1$ dû aux flux combinés demeure positif. A la plus haute énergie considérée, $\varepsilon_i = 320$ eV, la somme des flux de création d'alignement à partir de $2s2p^3P_1$ et $2s2p^3P_2$ devient négative si le rapport de population $\rho_0^0(2s2p^3P_1)/\rho_0^0(2s2p^3P_2)$ dépasse 0.08.

Pour la transition $2s2p^3P_1 \rightarrow 2s3p^3P_2$, les valeurs de σ_0^{02} et σ_0^{22} (voir tableau 5.4 et 5.9, figure 5.2, panels (b) et (d)) montrent que la contribution au multipôle d'état ρ_0^2 du niveau final est principalement due au flux de création d'alignement $n_e C_0^{02} \rho_0^0(2s2p^3P_1)$. D'autre part, les valeurs de σ_0^{04} et σ_0^{24} révèlent que la principale contribution à ρ_0^4 de $2s3p^3P_2$ est également due au flux de création d'alignement $n_e C_0^{04} \rho_0^0(2s2p^3P_1)$.

Concernant maintenant la transition $2s2p^3P_2 \rightarrow 2s3p^3P_2$, on constate d'abord que ρ_0^2 de $2s3p^3P_2$ dû au transfert d'alignement est majoritairement déterminé plutôt par $n_e C_0^{22} \rho_0^2(2s2p^3P_2)$ que par $n_e C_0^{42} \rho_0^4(2s2p^3P_2)$. Une observation similaire peut être faite pour ρ_0^4 qui est déterminé par $n_e C_0^{44} \rho_0^4(2s2p^3P_2)$ plutôt que par $n_e C_0^{24} \rho_0^2(2s2p^3P_2)$. Les flux de transfert d'alignement vers $2s3p^3P_2$ peuvent ne pas être négligeables par rapport aux flux de création d'alignement $n_e C_0^{02} \rho_0^0(2s2p^3P_2)$ et $n_e C_0^{04} \rho_0^0(2s2p^3P_2)$ en gouvernant $\rho_0^2(2s3p^3P_2)$ et $\rho_0^4(2s3p^3P_2)$, même avec $|\rho_0^2|/\rho_0^0 \ll 1$ et $|\rho_0^4|/\rho_0^0 \ll 1$ pour le niveau métastable $2s2p^3P_2$.

Pour chacune des deux transitions optiquement permises $2s2p^3P_1 \rightarrow 2s3d^3D_2$ et

$2s2p^3P_2 \rightarrow 2s3d^3D_3$, nos résultats numériques montrent que $|\sigma_0^{02}|$ étant inférieur à σ_0^{22} par un facteur n'excédant pas 4, le flux $n_e C_0^{02} \rho_0^0$ devrait contribuer à ρ_0^2 du niveau final beaucoup plus que $n_e C_0^{22} \rho_0^2$. De même, $n_e C_0^{04} \rho_0^0$ devrait dominer sur $n_e C_0^{24} \rho_0^2$ et sur $n_e C_0^{44} \rho_0^4$ (dans le cas de l'excitation à partir de $2s2p^3P_2$) dans ρ_0^4 du niveau final. D'autre part, pour les deux transitions, le niveau final a un ρ_0^4 beaucoup plus petit comparé à ρ_0^2 car σ_0^{04} est inférieur à σ_0^{02} par un facteur allant de 4 à 7.

Tournons à présent notre attention vers la population des niveaux finaux en examinant de près les valeurs de σ_0^{00} et σ_0^{20} (pour les six excitations) ainsi que σ_0^{40} (pour les trois excitations à partir de $2s2p^3P_2$). Nous remarquons que le flux $n_e |C_0^{k0} \rho_0^k|$ ($k = 2, 4$) de l'alignement du niveau métastable initial à la population du niveau final est négligeable par rapport au flux de transfert de population $n_e C_0^{00} \rho_0^0$. Ceci vient du fait que C_0^{00} est nettement plus grand que $|C_0^{k0}|$ et, comme mentionné précédemment, $\rho_0^0 \gg |\rho_0^k|$ ($k = 2, 4$).

Toutes les données de $\sigma_q^{kk'}$ présentées dans cette thèse doivent dans le futur être confrontées à celles calculées à partir de codes informatiques indépendants afin de pouvoir valider notre extension actuelle du programme RDW de FAC. A notre connaissance, les seuls calculs publiés jusqu'à présent de $\sigma_{q \neq 0}^{kk'}$ (ou $\Omega_{q \neq 0}^{kk'}$) ont porté sur l'excitation d'atomes neutres par impact d'électrons [12], en utilisant la méthode close-coupling convergente. Malheureusement, nous ne pouvons pas exploiter ces calculs pour tester la validité des modifications apportées au programme RDW de FAC, car ce programme n'est applicable qu'aux atomes ionisés, avec une précision d'autant plus grande que le degré d'ionisation croît.

5.5 Comparaison avec les résultats de Iwamae *et al.*

Comme déjà mentionné, afin de valider la présente extension du programme RDW de FAC, il faudrait confronter nos résultats de $\sigma_q^{kk'}$ à toutes les données calculées au moyen de codes informatiques venant de sources différentes. Au meilleur de notre connaissance, le seul calcul publié jusqu'à présent de $\sigma_{q \neq 0}^{kk'}$ se rapporte à l'excitation collisionnelle d'atomes neutres [12]. Le programme RDW que nous avons modifié ne convient pas pour les cibles d'atomes neutres et il s'applique seulement aux atomes hautement ionisés. Donc, il n'est pas approprié d'utiliser les calculs de la référence [12] pour tester la validité du programme RDW modifié.

Néanmoins, il existe une possibilité de vérifier cette validité dans le cas de $\sigma_{q=0}^{kk'}$ en se servant du travail de Iwamae *et al.* [13]. Ces auteurs ont utilisé le programme RDW non-unitarisé de Zhang *et al.* [13], sans appliquer la méthode de factorisation comme c'est le cas dans FAC, pour calculer les sections efficaces d'excitation entre sous-niveaux magnétiques à partir desquelles ils ont déduit les sections efficaces multipolaires notées Q_0^{20} , Q_0^{02} et Q_0^{22} .

Dans Réf.[13], les courbes donnant Q_0^{20} , Q_0^{02} et Q_0^{22} en fonction de l'énergie ε_i ont été reportées pour l'excitation $2s2p^3P_2 \rightarrow 2s3p^3P_2$ dans O^{4+} . Notons qu'une relation directe existe entre leurs composantes multipolaires de sections efficaces et les nôtres, à savoir, $Q_0^{20} \equiv \sigma_0^{02}/\sqrt{5}$, $Q_0^{02} \equiv \sqrt{5} \sigma_0^{20}$ et $Q_0^{22} \equiv \sigma_0^{22}$. Dans la figure 5.15, nous reproduisons les courbes de Réf. [13] avec celles basées sur nos calculs, en gardant délibérément le large domaine d'énergie de l'électron incident ε_i adopté dans Réf. [13] pour une comparaison plus fiable. Un bon accord peut être observé à la fois qualitativement puisque les deux séries de courbes montrent des tendances similaires, et quantitativement puisque les valeurs numériques sont assez proches, les différences entre elles ne dépassant pas 12%.

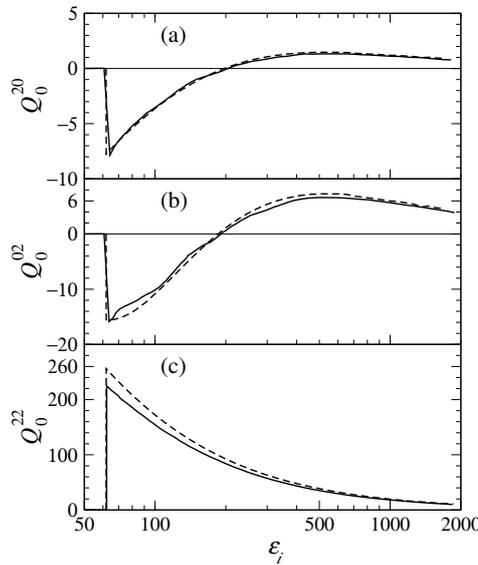


FIGURE 5.15: Comparaison des composantes multipolaires des sections efficaces (a) Q_0^{20} , (b) Q_0^{02} et (c) Q_0^{22} pour l'excitation $2s2p^3P_2 \rightarrow 2s3p^3P_2$ dans O^{4+} entre nos présents résultats (lignes pointillées) et ceux de Réf. [13] (traits pleins). Les Q sont en unités de 10^{-20} cm^2 et ε_i en unité d'eV.

Référence

- [1] K. G. Widing, J. G. Doyle, P. L. Dufton, and A. E. Kingston, *Astrophys. J.* **257**, 913 (1982).
- [2] D. R. Graham, L. Fletcher, and N. Labrosse, *Astron. Astrophys.* **584**, A6 (2015).
- [3] L. K. Huang, S. Lippmann, B. C. Stratton, H. W. Moos, and M. Finkenthal, *Phys. Rev. A* **37**, 3927 (1988).
- [4] K. Ikeda, Y. Nagayama, T. Itoh, E. Kawamori, Y. Okamoto, T. Tamano, N. Yamaguchi, K. Yatsu, and M. Yoshikawa, *Rev. Sci. Instrum.* **70**, 332 (1999).
- [5] M. F. Gu, *Can. J. Phys.* **86**, 675 (2008).
- [6] J. G. Doyle, P. L. Dufton, F. P. Keenan, and A. E. Kingston, *Sol. Phys.* **89**, 243 (1983).
- [7] G. A. Doschek, U. Feldman, J. M. Laming, H. P. Warren, U. Schühle, and K. Wilhelm, *Astrophys. J.* **507**, 991 (1998).
- [8] G. Csanak, C. J. Fontes, P. Hakel, and D. P. Kilcrease, *J. Phys. B* **44**, 215701 (2011).
- [9] S. W. Rachedi, M. K. Inal, and M. Benmouna, *J. Phys. B* **53**, 185701 (2020).
- [10] F. P. Keenan, K. A. Berrington, P. G. Burke, A. E. Kingston, and P. L. Dufton, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **207**, 459 (1984).
- [11] T. Fujimoto and M. Nakai, in *Proceedings of the International Seminar on Atomic Processes in Plasmas*, edited by T. Kato and I. Murakami, NIFS-PROC-44 (2000) p. 77.
- [12] G. Csanak, D. P. Kilcrease, D. V. Fursa, and I. Bray, *Phys. Rev. A* **78**, 062716 (2008).
- [13] A. Iwamae, A. Tanaka, T. Inoue, T. Fujimoto, H. L. Zhang, D. P. Kilcrease, and G. Csanak, in *Proceedings of the Third US-Japan Plasma Polarization Spectroscopy Workshop*, edited by P. Beiersdorfer and T. Fujimoto, University of California Lawrence Livermore National Laboratory Report UCRL-ID-146907 (2001) p. 165.
- [14] T. Fujimoto, *Plasma Polarization Spectroscopy* edited by T. Fujimoto and A. Iwamae, Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics (Springer, Berlin, 2008), Chap. 4.

- [15] J. Dubau, in *Proceedings of the Japan-US Workshop on Plasma Polarization Spectroscopy and The International Seminar on Plasma Polarization Spectroscopy*, edited by T. Fujimoto and P. Beiersdorfer, NIFS-PROC-37 (1998) p. 9.
- [16] M. S. Bentotoche, M. K. Inal, and M. Benmouna, *X-Ray Spectrom.* **49**, 65 (2020).
- [17] L. Belluzzi, E. Landi Degl’Innocenti, and J. Trujillo Bueno, *Astron. Astrophys.* **551**, 84 (2013).
- [18] M. Derouich, A. Alruhaili, and Badruddin, *New Astron.* **71**, 52 (2019).
- [19] A. Bar-Shalom, M. Klapisch, and J. Oreg, *Phys. Rev. A* **38**, 1773 (1988).
- [20] F. P. Keenan, P. L. Dufton, L. K. Harra, E. S. Conlon, K. A. Berrington, A. E. Kingston, and K. G. Widing, *Astrophys. J.* **382**, 349 (1991).
- [21] P. R. Young *et al.*, *Publ. Astron. Soc. Japan* **59**, S857 (2007).
- [22] T. Fujimoto, H. Sahara, T. Kawachi, T. Kallstenius, M. Goto, H. Kawase, T. Furukubo, T. Maekawa, and Y. Terumichi, *Phys. Rev. E* **54**, R2240 (1996).

Chapitre 6

Conclusion et perspectives

Une expression de la section efficace multipolaire $\sigma_q^{kk'}$ pour l'excitation d'ions positifs par un faisceau d'électrons est établie sous la forme factorisée de l'approche RDW (distorted-wave relativiste). Le programme du package FAC, qui à l'origine a été conçu pour le calcul des sections efficaces d'excitation entre les sous-niveaux magnétiques individuels, a été étendu par nos soins afin de permettre le calcul de $\sigma_q^{kk'}$ pour toutes les combinaisons possibles de k , k' et q , y compris $q \neq 0$. Ces données sont nécessaires dans la construction du modèle cinétique GPACR (Generalized population-alignment collisional-radiative) dédié à l'analyse de l'émission de raies polarisées par des plasmas dont les électrons libres ont une distribution de vitesses avec une symétrie cylindrique arbitraire. Une attention particulière a été portée sur les sections efficaces de transfert de cohérence $\sigma_{q \neq 0}^{kk'}$ qui ne peuvent pas être obtenues à partir des sections efficaces entre sous-niveaux magnétiques. Elles sont requises pour déterminer les coefficients de taux de transfert d'alignement intervenant dans le modèle GPACR appliqué aux plasmas anisotropes sus-indiqués. Pour illustrer cette extension du programme RDW de FAC, des résultats numériques détaillés ont été donnés en termes de composantes multipolaires des sections efficaces $\sigma_q^{kk'}$ pour des transitions sélectionnées dans l'ion oxygène O^{4+} (ion à 4 électrons) à partir des niveaux métastables $2s2p^3P_{1,2}$ vers les niveaux $2s3p^3P_{1,2}$ et $2s3d^3D_{2,3}$. Telles excitations sont pertinentes pour l'atmosphère solaire et les plasmas de fusion magnétique, dans lesquels des faisceaux d'électrons caractérisés par des distributions de vitesses anisotropes se forment sous certaines conditions. Nos calculs révèlent que σ_q^{22} pour $2s2p^3P_1 \rightarrow 2s3p^3P_1$ et $2s2p^3P_2 \rightarrow 2s3p^3P_2$ ainsi que σ_q^{44} pour cette dernière transition sont insensibles à q du fait que ces sections efficaces sont essentiellement déterminées par le terme isotrope $K = 0$, les termes

$K = 2$ et $K = 4$ étant très négligeables. Pour les autres transitions considérées ici, certaines possèdent une certaine sensibilité à q plus ou moins significative, ce qui signifie que les contributions des termes $K \neq 0$ doivent être prises en compte. Nos calculs indiquent également que pour les deux transitions $\Delta J = 0$ considérées, le transfert d'alignement pourrait concurrencer la création d'alignement même si les niveaux métastables initiaux ont un faible degré d'alignement. Une telle concurrence, qui dépend de l'énergie des électrons, pourrait conduire à une augmentation ou à une réduction du multipôle d'état ρ_0^k des niveaux finaux ($k = 2$ pour $2s3p^3P_1$; $k = 2, 4$ pour $2s3p^3P_2$). Pour les transitions optiquement permises $2s2p^3P_1 \rightarrow 2s3d^3D_2$ et $2s2p^3P_2 \rightarrow 2s3d^3D_3$, l'alignement des niveaux finaux se caractérise essentiellement par le paramètre ρ_0^2 (ρ_0^4 et ρ_0^6 étant extrêmement petits devant ρ_0^2) et il est régi par les flux de création d'alignement, ceux de transfert d'alignement étant négligeables. D'autre part, les valeurs de σ_0^{00} et σ_0^{k0} ($k = 2, 4$) montrent que la population des niveaux finaux à partir de l'alignement des niveaux initiaux est insignifiante par rapport au transfert de population.

Dans le but de vérifier la cohérence des modifications introduites ici dans le programme d'excitation RDW de FAC, nous avons comparé nos résultats de σ_0^{02} , σ_0^{20} et σ_0^{22} avec ceux rapportés dans Ref. [1] pour la transition $2s2p^3P_2 \rightarrow 2s3p^3P_2$ et nous avons constaté un accord satisfaisant. Nous espérons que, dans un proche avenir, d'autres calculs théoriques de $\sigma_q^{kk'}$ incluant $q \neq 0$ seront disponibles pour nous permettre d'effectuer une comparaison plus poussée avec nos résultats. Il est important de souligner le fait que la présente version modifiée du programme RDW ouvre la voie à des calculs massifs de données de sections efficaces multipolaires pour différents ions cibles servant dans les applications spectroscopiques des plasmas chauds anisotropes. Ces calculs numériques sont faciles à mener grâce au gain de temps considérable dû à la méthode de factorisation-interpolation de Bar-Shalom *et al.* [2] implémenté dans FAC.

Dans cette thèse, pour des raisons de limitation d'espace nous n'avons présenté qu'une sélection de résultats pour des transitions optiquement permises et des transitions interdites sans changement de spin. Il serait intéressant de considérer dans un futur travail les sections efficaces $\sigma_q^{kk'}$ pour les transitions avec changement de spin qui se produisent par échange de l'électron incident avec un électron de l'ion cible. De telles sections efficaces sont susceptibles d'être beaucoup plus sensibles aux différentes approximations et techniques utilisées. Une confrontation

des résultats obtenus par différentes approches fournirait un test plus critique pour les types d'approximations introduites.

Il a été signalé dans Ref. [1] que leurs calculs théoriques ont donné lieu à un désaccord important avec les mesures expérimentales effectuées sur le plasma produit dans le tokamak WT-3. Les auteurs ont invoqué certaines des raisons possibles de l'insuffisance de leur modèle théorique pour décrire correctement les données expérimentales. Nous sommes d'accord avec le fait que la non prise en compte des contributions de l'excitation résonnante aux coefficients de taux et l'omission des coefficients de taux associés aux collisions élastiques électron-ion dans la résolution des équations de taux de PACR peuvent générer des inexactitudes dans les calculs. Mais, de notre point de vue, l'effet de la création d'alignement à partir d'autres niveaux triplets (que ceux métastables $2s2p^3P_{0,1,2}$, par exemple, $2p^2^3P_{0,1,2}$) devrait être faible, et par conséquent cet effet n'est pas en mesure d'améliorer l'accord avec les résultats expérimentaux. Nous pensons que le dépeuplement collisionnel de tous les niveaux triplets autres que $2s2p^3P_{0,1,2}$ devrait être assez insignifiant pour les densités d'électrons dans le tokamak WT-3 (moins de 10^{13} cm^{-3}), en raison de leurs durées de vie radiatives très courtes (environ 10^{-9} s). Outre ces arguments, il pourrait y en avoir d'autres à invoquer pour améliorer l'accord avec les expériences. Par exemple, il faudrait prendre en compte les sections efficaces de transfert de cohérence $\sigma_{q=1,2}^{22}$ pour déterminer les coefficients de taux de transfert d'alignement C_0^{22} , et également incorporer les coefficients de taux multipolaires avec k et/ou $k' = 4$ dans le modèle GPACR. Les données calculées dans le cadre de cette thèse peuvent être appliquées pour résoudre le système d'équations de taux GPACR afin d'évaluer précisément la population ρ_0^0 et les alignements ρ_0^k ($k = 2, 4, \dots$) des niveaux supérieurs des raies observées. Ces données sont nécessaires dans l'interprétation de l'intensité et polarisation des raies émises par des plasmas avec une distribution de vitesses des électrons présentant une symétrie cylindrique. Une telle application pourrait apporter un nouvel éclairage sur l'origine de la grande différence constatée entre le modèle théorique et les expériences [1] et fera l'objet d'un futur travail.

Nous avons aussi l'intention dans une future étude de calculer les multipôles d'état de niveaux de l'ion O^{4+} en fonction de la densité des électrons en résolvant les équations de taux du modèle GPACR. De tels multipôles d'état permettent d'obtenir la distribution angulaire de l'intensité ainsi que la polarisation des raies émises

à partir des niveaux supérieurs $2s3p^3P_{1,2}$ et $2s3d^3D_{2,3}$ en fonction de l'énergie et la densité des électrons du faisceau incident. Ensuite, nous devrions pouvoir mieux comprendre la compétition entre les flux de création d'alignement et ceux de transfert d'alignement pour différentes excitations menant au même niveau final. Cela permettrait également de faire la lumière sur les sources d'alignements positifs et négatifs, et les possibles effets d'annulation entre les différents flux.

Référence

- [1] A. Iwamae, A. Tanaka, T. Inoue, T. Fujimoto, H. L. Zhang, D. P. Kilcrease, and G. Csanak, in Proceedings of the Third US-Japan Plasma Polarization Spectroscopy Workshop, edited by P. Beiersdorfer and T. Fujimoto, University of California Lawrence Livermore National Laboratory Report UCRL-ID-146907 (2001) p. 165.
- [2] A. Bar-Shalom, M. Klapisch, and J. Oreg, Phys. Rev. A **38**, 1773 (1988).

PUBLICATIONS

Computations of the multipole cross sections for directional excitation of ions by electron impact

M. Belabbas , M. K. Inal ,* and M. Benmouna

Department of Physics, Faculty of Sciences, University of Tlemcen, B.P. 119, 13000 Tlemcen, Algeria

 (Received 27 June 2021; accepted 6 October 2021; published 27 October 2021)

A general relativistic distorted-wave expression of the multipole cross sections for anisotropic excitation of ions by impact with an electron beam is derived by taking into account the coherence between magnetic sublevels. These multipole cross sections are required in the analysis of the intensity and polarization of lines emitted from plasmas with cylindrically symmetric electron velocity distributions. To calculate such cross sections for highly charged target ions, we need to adapt the distorted-wave excitation program of the FLEXIBLE ATOMIC CODE by making some modifications. Detailed computations are performed for transitions in the Be-like ion O^{4+} from the ground $2s^2$ and metastable triplet $2s2p$ levels. A selected series of results for transitions from $2s2p\ ^3P_{1,2}$ to $2s3p\ ^3P_{1,2}$ and $2s3d\ ^3D_{2,3}$ levels, which may be of interest for the solar atmosphere and tokamak plasmas, are given to illustrate the application of the modified program suggested here. In-depth analysis of the numerical results and preliminary comparison with available data in the literature provide a systematic consistency of the modified program, paving the way for computations of a large amount of multipole cross sections's data with a considerable saving of time.

DOI: [10.1103/PhysRevA.104.042818](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.104.042818)

I. INTRODUCTION

The atomic data available in the literature on anisotropic excitation of positive ions by electron impact are mostly concerned with cross sections (or equivalently collision strengths) for transitions between magnetic sublevels induced by an electron beam (see, e.g., Refs. [1–4]). These data are needed in the analysis of intensity and polarization of line emission from plasmas involving unidirectional electron–ion collisions such as the electron beam ion trap (EBIT) [5]. They are, however, not sufficient for plasmas characterized by an arbitrary electron velocity distribution with cylindrical symmetry about a given z axis. In this case, multipole cross sections for transitions between fine-structure levels caused by directional electrons along the z axis are requested for the interpretation of polarized line emission [6]. According to Csanak *et al.* [7], these multipole cross sections, which we denote as $\sigma_Q^{KK'}$, correspond to alignment-creation, -destruction, -transfer, and coherence-transfer cross sections depending upon the values of the quantum numbers K , K' , and Q , with $0 \leq K \leq 2J_i$, $0 \leq K' \leq 2J_f$ and $-\min(K, K') \leq Q \leq +\min(K, K')$, J_i , and J_f being the total angular momenta of the initial and final transition levels. The alignment-creation cross sections refer to $\sigma_0^{0K'}$ with $K' = 2, 4, \dots$, the alignment-destruction ones to σ_0^{K0} with $K = 2, 4, \dots$, and those of the alignment transfer and coherence transfer correspond to $\sigma_{Q=0}^{KK'}$ and $\sigma_{Q \neq 0}^{KK'}$, respectively, with $K, K' = 2, 4, \dots$.

Often [7,8], only the multipole cross sections with both K and K' less than or equal to 2 are taken into account. Sometimes, those with K and/or K' equal to 4 and even 6 need to be considered in modeling the line emission of quadrupole and octupole types characterizing particularly hot plasmas [9].

The $\sigma_Q^{KK'}$ can be deduced from the excitation cross sections between magnetic sublevels for $Q = 0$, but not for $Q \neq 0$. In the second case, both K and K' are nonzero, and the calculations of the cross sections are more elaborate because they include quantum coherences between the magnetic sublevels M_i and M'_i (M_f and M'_f) within the initial (final) levels, for which $M_i - M'_i = M_f - M'_f = Q$. The coherence-transfer cross sections are needed to obtain the alignment-transfer-rate coefficients involved in the generalized population-alignment collisional-radiative (GPACR) model for plasmas with an arbitrary, cylindrically symmetric, electron velocity distribution [8,10]. In addition to their role in the interpretation of polarized line emission from such plasmas for diagnostic purposes, the $\sigma_{Q \neq 0}^{KK'}$ data provide a more critical test for the electron–ion scattering approximations than the cross sections between magnetic sublevels.

In a recent paper [11], the case of multipole cross sections σ^K for impact excitation of ions by isotropic electrons was considered. These cross sections are characterized by a unique quantum number K [with $0 \leq K \leq 2 \min(J_i, J_f)$]; they enter in modeling polarized line emissions from astrophysical plasmas having an isotropic electron velocity distribution and are exposed to an anisotropic radiation [12,13]. A typical example is given by stellar atmospheres anisotropically irradiated by the photospheric radiation field. In Ref. [11], calculations of σ^K cross sections were reported for isotropic excitation of Si-like Fe^{12+} ions within a nonunitarized, relativistic distorted-wave (RDW) approach, using the FLEXIBLE ATOMIC CODE (FAC) package [14]. To perform these calculations, some amendments were introduced in the part of the FAC package concerned with the conventional excitation cross sections between fine-structure levels.

In the present paper, we derive an RDW expression for the multipole cross sections $\sigma_Q^{KK'}$ for collisional excitation by an electron beam, using the factorization formulation of

*mokhtar.inal@univ-tlemcen.dz

Bar-Shalom *et al.* [15]. The RDW program of FAC, dedicated to the excitation cross sections between magnetic sublevels, is extended to allow the calculation of $\sigma_Q^{KK'}$. We illustrate this extension by computing the multipole cross sections for excitations of Be-like O^{4+} ions from the ground $2s^2\ ^1S_0$ and metastable $2s2p\ ^3P_{0,1,2}$ levels. The results are given for a sample of six selected transitions relevant to the analysis of intensity and polarization of the UV $2s3p\ ^3P_{0,1,2} \rightarrow 2s3s\ ^3S_1$ and EUV $2s3d\ ^3D_{2,3} \rightarrow 2s2p\ ^3P_2$ lines. These lines are observed in the solar corona and transition region [16–19], as well as in magnetically confined fusion plasmas [20–22], where anisotropically accelerated electrons may be generated.

In Sec. II A, we derive the RDW formula for the multipole cross sections in the factorized form after summing over all magnetic quantum numbers relative to the colliding electron and target ion. In Sec. II B, we show how the RDW magnetic-sublevel excitation program of FAC has been modified to compute $\sigma_Q^{KK'}$ for all possible values of Q . In Sec. III, illustrative numerical results are displayed in terms of the multipole collision strengths for transitions from $2s2p\ ^3P_{1,2}$ to $2s3p\ ^3P_{1,2}$ and $2s3d\ ^3D_{2,3}$ levels in Be-like ion O^{4+} . Detailed discussions of these results are provided in Sec. IV, and a tentative comparison for $Q = 0$ is made with the calculations of Iwamae *et al.* [23]. Section V gives a summary of the results and some prospects for the future.

II. THEORY

A. Factorized expression for the multipole cross sections

The theory of multipole cross sections for elastic and inelastic scattering of electrons by ions was put forward by Csanak *et al.* [24] using the wave-packet propagation approach for the quantum-mechanical treatment of the electron–ion collision. Here, we limit ourselves to the electron–ion inelastic scattering, i.e., only to the electron-impact excitation or de-excitation of ions between different fine-structure levels. We derive an expression for the multipole cross sections for excitation by an unpolarized electron beam directed along a z axis, within the factorization method of the RDW approach. Initially, the electron state is defined by the wave vector $\mathbf{k}_i \equiv (k_i, \hat{\mathbf{k}}_i)$ ($k_i = |\mathbf{k}_i|$ and $\hat{\mathbf{k}}_i = \mathbf{k}_i/k_i$) and the spin z -projection m_{s_i} , while the target ion state is characterized by the set of quantum numbers $\alpha_i J_i M_i$, where J_i is the total electronic angular momentum, M_i its z projection, and α_i stands for the remaining relevant quantum numbers. The same notations are adopted for the final electron and target-ion states replacing the subscript i by f .

In the relativistic approach, the amplitude of electron scattering in the direction $\hat{\mathbf{k}}_f$ with change-of-spin component to m_{s_f} , associated with the transition $\alpha_i J_i M_i \rightarrow \alpha_f J_f M_f$ in the target ion, can be deduced from Eq. (9.1) of Ref. [25] for $\hat{\mathbf{k}}_i$ along the z axis as

$$f_{\alpha_f J_f M_f, \alpha_i J_i M_i}^{m_{s_f} m_{s_i}}(\hat{\mathbf{k}}_f) = \frac{\pi^{1/2}}{k_i} \sum_{l_i j_i} \sum_{l_f m_{l_f}} [l_i, J_i, j_f] i^{l_i - l_f + 1} e^{i(\delta_{\kappa_i} + \delta_{\kappa_f})} Y_{l_f}^{m_{l_f}}(\hat{\mathbf{k}}_f) \begin{pmatrix} l_i & \frac{1}{2} & j_i \\ 0 & m_{s_i} & -m_{s_i} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_f & \frac{1}{2} & j_f \\ m_{l_f} & m_{s_f} & -m_f \end{pmatrix} T(\beta_i, \beta_f). \quad (1)$$

Here l_i and j_i (l_f and j_f) are the orbital and total angular momenta of the incident (scattered) electron, m_{l_f} and m_f are the z projections of l_f and j_f , δ_{κ} 's are the relativistic Coulomb phase shifts, Y_l^m are the spherical harmonics, $\begin{pmatrix} l & \frac{1}{2} & j \\ m_l & m_s & -m \end{pmatrix}$ denotes a Wigner $3j$ symbol, and $T(\beta_i, \beta_f)$ represents the transition T -matrix elements between the initial $\beta_i \equiv \alpha_i J_i M_i k_i l_i j_i m_{s_i}$ and final $\beta_f \equiv \alpha_f J_f M_f k_f l_f j_f m_{s_f}$ uncou-

pled states of the electron–ion system. For convenience, the condensed notation $[j_1, j_2, \dots] \equiv [(2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \dots]^{1/2}$ is adopted throughout this section. Note that, among the magnetic quantum numbers of the incident electron, only m_{s_i} appears in Eq. (1) because $\hat{\mathbf{k}}_i$ lies along the z axis, hence $m_i = m_{s_i}$.

The multipole cross section $\sigma_{QQ'}^{KK'}$ for level-to-level excitation $\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f$ is defined as [24]

$$\sigma_{QQ'}^{KK'}(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f) = \sum_{M_i M_i'} \sum_{M_f M_f'} (-1)^{J_i - M_i + J_f - M_f} [K, K'] \begin{pmatrix} J_i & J_i & K \\ M_i & -M_i' & -Q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_f & J_f & K' \\ M_f & -M_f' & -Q' \end{pmatrix} \sigma(\alpha_i J_i M_i M_i' \rightarrow \alpha_f J_f M_f M_f'), \quad (2)$$

with

$$\sigma(\alpha_i J_i M_i M_i' \rightarrow \alpha_f J_f M_f M_f') = \frac{1}{2} \sum_{m_{s_i} m_{s_f}} \int d\hat{\mathbf{k}}_f f_{\alpha_f J_f M_f, \alpha_i J_i M_i}^{m_{s_f} m_{s_i}}(\hat{\mathbf{k}}_f) f_{\alpha_f J_f M_f, \alpha_i J_i M_i'}^{m_{s_f} m_{s_i}'}(\hat{\mathbf{k}}_f). \quad (3)$$

Here we averaged over the initial and summed over the final spin projections, then integrated over all final scattering directions $\hat{\mathbf{k}}_f$, recalling that K and K' are restricted by the con-

ditions given in Sec. I. We will see from Eq. (12) below that $\sigma(\alpha_i J_i M_i M_i' \rightarrow \alpha_f J_f M_f M_f')$ vanishes if $M_i - M_f \neq M_i' - M_f'$ because of the properties of the $3j$ symbols. In order for the $3j$

symbols in Eq. (2) to be nonzero, one must have $Q = M_i - M'_i$ and $Q' = M_f - M'_f$, meaning that $\sigma_{QQ'}^{KK'}(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f) = 0$ if $Q \neq Q'$, i.e.,

$$\sigma_{QQ'}^{KK'}(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f) = \delta_{QQ'} \sigma_Q^{KK'}(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f), \quad (4)$$

with $-\min(K, K') \leq Q \leq +\min(K, K')$. This conservation of Q has already been shown in Ref. [26] based on the invariance of the Hamiltonian of the electron-ion system under rotation about the z axis. In the case where $K = K' = 0$, Eqs. (2) and (3) lead to a direct relationship between σ_0^{00} and the standard cross section σ

$$\begin{aligned} \sigma_0^{00}(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f) &= \frac{1}{[J_i, J_f]} \sum_{M_i M_f} \sigma(\alpha_i J_i M_i \rightarrow \alpha_f J_f M_f) \\ &= \frac{[J_i]}{[J_f]} \sigma(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f). \end{aligned} \quad (5)$$

To proceed further, we substitute Eq. (1) into Eq. (3), use the orthonormality of spherical harmonics in the integration over $\hat{\mathbf{k}}_f$ together with the two following properties of $3j$ symbols [27]

$$\begin{aligned} \sum_{m_l m_s} \begin{pmatrix} l_f & \frac{1}{2} & j_f \\ m_l & m_s & -m_f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_f & \frac{1}{2} & j'_f \\ m_l & m_s & -m'_f \end{pmatrix} \\ = \frac{1}{[j_f]^2} \delta_{j_f j'_f} \delta_{m_f m'_f}, \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} l_i & \frac{1}{2} & j_i \\ 0 & m_{s_i} & -m_{s_i} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l'_i & j'_i & \frac{1}{2} \\ 0 & m_{s_i} & -m_{s_i} \end{pmatrix} \\ = \sum_L (-1)^{j_i + j'_i - \frac{1}{2} + m_{s_i}} [L]^2 \begin{Bmatrix} l_i & l'_i & L \\ j'_i & j_i & \frac{1}{2} \end{Bmatrix} \\ \times \begin{pmatrix} j'_i & j_i & L \\ m_{s_i} & -m_{s_i} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_i & l'_i & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (7)$$

to get

$$\begin{aligned} \sigma(\alpha_i J_i M_i M'_i \rightarrow \alpha_f J_f M_f M'_f) \\ = \frac{\pi}{2k_i^2} \sum_{l_i j_i m_{s_i} l'_i j'_i} [l_i, l'_i, j_i, j'_i] i^{l_i - l'_i} e^{i(\delta_{\kappa_i} - \delta_{\kappa'_i})} \\ \times \sum_L (-1)^{j_i + j'_i - \frac{1}{2} + m_{s_i}} [L]^2 \begin{Bmatrix} l_i & l'_i & L \\ j'_i & j_i & \frac{1}{2} \end{Bmatrix} \\ \times \begin{pmatrix} j'_i & j_i & L \\ m_{s_i} & -m_{s_i} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_i & l'_i & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \times T(\beta_i, \beta_f) T^*(\beta'_i, \beta'_f), \end{aligned} \quad (8)$$

where $\beta'_i \equiv \alpha_i J_i M_i k_i l'_i j'_i m_{s_i}$, $\beta'_f \equiv \alpha_f J_f M'_f k_f l'_f j'_f m_{s_f}$, and the standard notation for Wigner $6j$ symbol has been used. For parity reasons, $l_i + l'_i$ must be even, which means that only even values of L contribute to the L summation.

For target ions of low atomic number, say below 30, only the Coulomb part of the electron-electron interaction is to be taken into account, the generalized Breit interaction being negligible. Moreover, for the density and temperature

conditions encountered in magnetically confined plasmas and stellar coronae, it is reasonable to assume that ions behave like isolated particles and the effects of plasma screening can be disregarded. With these considerations in mind, one can write the T -matrix element $T(\beta_i, \beta_f)$ as

$$T(\beta_i, \beta_f) = -2i \langle \Psi_i | \sum_{\substack{p, q \\ q > p}}^{N+1} \frac{1}{r_{pq}} | \Psi_f \rangle, \quad (9)$$

where Ψ_i and Ψ_f are the initial and final antisymmetric wave functions for the total system (i.e., target ion with N bound electrons plus a free electron), respectively; r_{pq} is the distance between the pair of (p, q) electrons.

In the factorization-interpolation method of Bar-Shalom *et al.* [15] implemented in FAC, the approximate relation $T \simeq -2iR$ is used, where R is the reactance matrix. Disregarding the unitarity of T is fully justified in the case of highly charged ions such as O^{4+} , where the R -matrix elements are small. According to Eqs. (48) and (50) of Ref. [14], $T(\beta_i, \beta_f)$ can be expanded as follows:

$$\begin{aligned} T(\beta_i, \beta_f) &= -2i \sum_{\lambda \mu} (-1)^{\mu + j_i - m_{s_i} + J_i - M_i} \\ &\times \begin{pmatrix} j_i & \lambda & j_f \\ -m_{s_i} & -\mu & m_f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_i & \lambda & J_f \\ -M_i & \mu & M_f \end{pmatrix} \\ &\times \sum_{\gamma_i \gamma_f} \langle \alpha_i J_i \| Z^\lambda(\gamma_i \gamma_f) \| \alpha_f J_f \rangle P^\lambda(\kappa_i \kappa_f; \gamma_i \gamma_f), \end{aligned} \quad (10)$$

where $\gamma_i \equiv n_i l_{ib} j_{ib}$ and $\gamma_f \equiv n_f l_{fb} j_{fb}$ represent orbitals in the initial and final ion wave functions, respectively, the subscript b being introduced to distinguish l and j for bound electrons from l and j of the free electron; λ corresponds to multipole order of the electron-electron Coulomb interaction ($|J_i - J_f| \leq \lambda \leq J_i + J_f$); the free-electron relativistic quantum number κ_u ($u = i$ or f) stands for both l_u and j_u with $\kappa_u = l_u$ if $j_u = l_u - \frac{1}{2}$ and $\kappa_u = -l_u - 1$ if $j_u = l_u + \frac{1}{2}$. The reduced matrix element $\langle \alpha_i J_i \| Z^\lambda(\gamma_i \gamma_f) \| \alpha_f J_f \rangle$ depends on the atomic structure of the target ion only, while $P^\lambda(\kappa_i \kappa_f; \gamma_i \gamma_f)$ depends on both bound- and free-electron orbitals. It is given by

$$\begin{aligned} P^\lambda(\kappa_i \kappa_f; \gamma_i \gamma_f) &= X^\lambda(\gamma_i \kappa_i; \gamma_f \kappa_f) + \sum_t (-1)^{\lambda+t} [\lambda]^2 \\ &\times \begin{Bmatrix} j_{ib} & j_f & t \\ j_i & j_{fb} & \lambda \end{Bmatrix} X^t(\gamma_i \kappa_i; \gamma_f \kappa_f), \end{aligned} \quad (11)$$

where X^λ and X^t contain the direct $R^\lambda(\gamma_i \kappa_i; \gamma_f \kappa_f)$ and exchange $R^t(\gamma_i \kappa_i; \kappa_f \gamma_f)$ two-electron radial integrals (see Eqs. (23) and (33) of Ref. [14]).

The main advantage of the factorization-interpolation method is to separate angular and radial integrations, reducing considerably the computing time and allowing efficient interpolation in evaluating the radial integrals. Inserting Eq. (10) into Eq. (8) and using the properties of $3j$ symbols [similar to Eqs. (6) and (7)], we obtain

$$\begin{aligned} \sigma(\alpha_i J_i M_i M'_i \rightarrow \alpha_f J_f M_f M'_f) &= \frac{2\pi}{k_i^2} \sum_{\lambda\lambda'\mu} \begin{pmatrix} J_i & \lambda & J_f \\ -M_i & \mu & M_f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_i & \lambda' & J_f \\ -M'_i & \mu & M'_f \end{pmatrix} \sum_{\substack{\gamma_i\gamma_f \\ \gamma'_i\gamma'_f}} \langle \alpha_i J_i \| Z^\lambda(\gamma_i\gamma_f) \| \alpha_f J_f \rangle \langle \alpha_i J_i \| Z^{\lambda'}(\gamma'_i\gamma'_f) \| \alpha_f J_f \rangle \\ &\times \sum_{\kappa_i\kappa'_i\kappa_f} i^{l_i-l'_i} e^{i(\delta_{\kappa_i}-\delta_{\kappa'_i})} [l_i, l'_i, j_i, j'_i] (-1)^{j_i+j'_i+j_f+2J_i+1/2+\mu-M_i-M'_i} \sum_{L \text{ Even}} [L]^2 \\ &\times \begin{pmatrix} l_i & l'_i & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda & \lambda' & L \\ \mu & -\mu & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} l_i & l'_i & L \\ j'_i & j_i & \frac{1}{2} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \lambda' & \lambda & L \\ j_i & j'_i & j_f \end{Bmatrix} P^\lambda(\kappa_i\kappa_f; \gamma_i\gamma_f) P^{\lambda'}(\kappa'_i\kappa_f; \gamma'_i\gamma'_f), \end{aligned} \tag{12}$$

where the summation over κ_u ($u = i$ or f) means summations over l_u and j_u .

Substituting Eq. (12) into Eq. (2) with slight rearrangements of some $3j$ symbols, one can eliminate the angular momentum projections $M_i, M'_i, M_f, M'_f, \mu$, using the following fundamental relation between $9j$ and $3j$ symbols:

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{M_i\mu M'_i \\ M_f M'_f}} \begin{pmatrix} J_i & \lambda & J_f \\ -M_i & \mu & M_f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_i & \lambda' & J_f \\ M'_i & -\mu & -M'_f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_i & J_i & K \\ -M_i & M'_i & Q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda & \lambda' & L \\ \mu & -\mu & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_f & J_f & K' \\ M_f & -M'_f & -Q \end{pmatrix} \\ = \begin{pmatrix} K & L & K' \\ Q & 0 & -Q \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} J_i & \lambda & J_f \\ J_i & \lambda' & J_f \\ K & L & K' \end{Bmatrix}. \end{aligned} \tag{13}$$

These manipulations lead to the final form of the multipole cross sections

$$\sigma_Q^{KK'}(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f) = \sum_{\substack{L=|K-K'| \\ L \text{ Even}}}^{K+K'} L \sigma_Q^{KK'}(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f), \tag{14}$$

with

$$\begin{aligned} L \sigma_Q^{KK'}(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f) &= \frac{2\pi}{k_i^2} (-1)^{K-Q} [K, K'] \sum_{\lambda\lambda'} (-1)^{\lambda'} \sum_{\substack{\gamma_i\gamma_f \\ \gamma'_i\gamma'_f}} \langle \alpha_i J_i \| Z^\lambda(\gamma_i\gamma_f) \| \alpha_f J_f \rangle \langle \alpha_i J_i \| Z^{\lambda'}(\gamma'_i\gamma'_f) \| \alpha_f J_f \rangle \\ &\times \sum_{\kappa_i\kappa'_i\kappa_f} i^{l_i-l'_i} e^{i(\delta_{\kappa_i}-\delta_{\kappa'_i})} (-1)^{j_i+j'_i+j_f+1/2} [l_i, l'_i, j_i, j'_i] P^\lambda(\kappa_i\kappa_f; \gamma_i\gamma_f) P^{\lambda'}(\kappa'_i\kappa_f; \gamma'_i\gamma'_f) \\ &\times [L]^2 \begin{pmatrix} l_i & l'_i & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K & L & K' \\ Q & 0 & -Q \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} l_i & l'_i & L \\ j'_i & j_i & \frac{1}{2} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \lambda' & \lambda & L \\ j_i & j'_i & j_f \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} J_i & \lambda & J_f \\ J_i & \lambda' & J_f \\ K & L & K' \end{Bmatrix}. \end{aligned} \tag{15}$$

Let us make a couple of remarks highlighting some useful properties of $\sigma_Q^{KK'}$ before going further in adapting the RDW program of FAC. First, one needs to calculate $\sigma_Q^{KK'}$ for $Q \geq 0$ only since, for $Q < 0$, one can use the following relationship:

$$\sigma_{-Q}^{KK'}(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f) = (-1)^{K+K'} \sigma_Q^{KK'}(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f). \tag{16}$$

This is readily obtained by using $(-1)^{-Q} = (-1)^Q$ and the symmetry relation of the $3j$ symbol involving Q [multiplication by $(-1)^{K+L+K'}$ under sign inversion of the second row], knowing that L is even. Consequently, for $Q = 0$, $\sigma_0^{KK'} \neq 0$ only if K and K' are of the same parity. This was already reported in Ref. [26] on the basis of symmetry considerations in the electron-ion collisional system. In fact, in the GPACR model [8,10], one needs to consider only $\sigma_Q^{KK'}$ with both K

and K' even. Among the state multipoles $\rho_Q^K(\alpha_u J_u)$ ($u = i$ or f) involved in this model, which characterize the density operator ρ of ions in the level $\alpha_u J_u$,

$$\begin{aligned} \rho_Q^K(\alpha_u J_u) &= \sum_{M_u M'_u} (-1)^{J_u-M_u} [K] \begin{pmatrix} J_u & J_u & K \\ M_u & -M'_u & -Q \end{pmatrix} \\ &\times \langle \alpha_u J_u M_u | \rho | \alpha_u J_u M'_u \rangle, \end{aligned} \tag{17}$$

only those with $Q = 0$ and even rank K are nonzero. The $Q = 0$ condition (due to axial symmetry) is related to the absence of coherence between sublevels of different M , whereas the even rank K condition stems from the fact that pairs of sublevels with M of opposite signs are equally populated [28].

The second remark concerns the splitting of the sum in Eq. (14) into $L = 0$ and $L \geq L_0$ contributions

$$\begin{aligned} & \sigma_Q^{KK'}(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f) \\ &= \sigma^K(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f) \delta_{KK'} \\ &+ \sum_{\substack{L \geq L_0 \\ L \text{ even}}}^L \sigma_Q^{KK'}(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f), \end{aligned} \quad (18)$$

with $L_0 = |K - K'|$ if $K \neq K'$, and 2 if $K = K' \neq 0$, the largest value of L being $K + K'$. The number of terms in the sum over $L \geq L_0$ is limited to K if $K = K'$ and $\min(K, K') + 1$ if $K \neq K'$. We will see later that, very often, the relative importance of these terms decrease with increasing L , and those for $L \geq 8$, when they exist (i.e., if $K + K' \geq 8$), are vanishingly small. In the case of $K = K' \geq 4$, the fourth $L = 6$ contribution is negligible. Hence, the number of terms effectively contributing to $\sigma_Q^{KK'}$ does not exceed 3, regardless of the values of K and K' .

The first term on the right-hand side of Eq. (18) corresponds to $L = 0$, i.e., ${}^0\sigma_Q^{KK'}(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f)$, and is nonzero only if $K = K'$. It is independent of Q for all possible values of K [$0 \leq K \leq 2 \min(J_i, J_f)$] since

$$(-1)^{-Q} \begin{pmatrix} K & 0 & K \\ Q & 0 & -Q \end{pmatrix} = \frac{(-1)^K}{[K]}. \quad (19)$$

For convenience, this term is denoted $\sigma^K(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f) \delta_{KK'}$. Letting $L = 0$ in Eq. (15), one obtains

$$\begin{aligned} & \sigma^K(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f) \\ &= [J_i]^2 \sum_{\lambda} (-1)^{J_i + J_f + K + \lambda} \\ & \times \begin{Bmatrix} J_i & J_i & K \\ J_f & J_f & \lambda \end{Bmatrix} \sigma_{\lambda}(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f), \end{aligned} \quad (20)$$

where

$$\begin{aligned} & \sigma_{\lambda}(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f) \\ &= \frac{2\pi}{[J_i, \lambda]^2 k_i^2} \sum_{\kappa_i \kappa_f} \left| \sum_{\gamma_i \gamma_f} \langle \alpha_i J_i \| Z^{\lambda}(\gamma_i \gamma_f) \| \alpha_f J_f \rangle P^{\lambda}(\kappa_i \kappa_f; \gamma_i \gamma_f) \right|^2 \end{aligned} \quad (21)$$

are the λ components of the standard cross section

$$\sigma(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f) = \sum_{\lambda} \sigma_{\lambda}(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f). \quad (22)$$

Another, more direct derivation of σ^K was given in Ref. [11] dealing with the impact excitation of ions by isotropic electrons. It is worth mentioning that, in the particular isotropic case, the multipole cross sections in Eq. (18) reduce to σ^K which satisfies the following symmetry relationship:

$$k_i^2 \sigma^K(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f; k_i^2) = k_f^2 \sigma^K(\alpha_f J_f \rightarrow \alpha_i J_i; k_f^2), \quad (23)$$

whereas for $L \neq 0$, ${}^L\sigma_Q^{KK'}(\alpha_f J_f \rightarrow \alpha_i J_i; k_f^2)$ and ${}^L\sigma_Q^{KK'}(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f; k_i^2)$ are not related.

Before closing this subsection, let us recall that in all the algebraic manipulations presented here, the z axis was chosen

along the incident electron wave vector \mathbf{k}_i . Now, if \mathbf{k}_i is in an arbitrary direction specified by the polar θ_i and azimuthal ϕ_i angles with respect to a fixed coordinate system of x, y, z axes, the conservation property of Q is lost (for $\theta_i \neq 0$) and one gets a very complicated formula for $\sigma_Q^{KK'}(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f; \theta_i, \phi_i)$. An important simplification takes place when one assumes uniform distribution over 2π for ϕ_i . Indeed, by using the following mathematical property of the spherical harmonics

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi_i Y_{l_i}^{m_i}(\hat{\mathbf{k}}_i) Y_{l_i'}^{m_i'}(\hat{\mathbf{k}}_i) = \delta_{m_i, m_i'} (-1)^{m_i} \\ & \times \frac{[l_i, l_i']}{4\pi} \sum_L [L]^2 \begin{pmatrix} l_i & l_i' & L \\ m_i & -m_i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_i & l_i' & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ & \times P_L(\cos \theta_i), \end{aligned} \quad (24)$$

where $P_L(\cos \theta_i)$ is the L -order Legendre polynomial, one obtains a relatively simple expression for the multipole cross section

$$\begin{aligned} & \sigma_Q^{KK'}(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f; \theta_i) \\ &= \sigma^K(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f) \delta_{KK'} \\ &+ \sum_{\substack{L \geq L_0 \\ L \text{ even}}}^L \sigma_Q^{KK'}(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f) P_L(\cos \theta_i). \end{aligned} \quad (25)$$

This expression is more general than Eq. (18) through the weighting factor $P_L(\cos \theta_i)$.

B. Extension of FAC to multipole cross sections

The cross section for the magnetic-sublevel transition $\alpha_i J_i M_i \rightarrow \alpha_f J_f M_f$ induced by incident electrons along the quantization axis z can be written in the following factorized form (see Eq. (51) of Ref. [14]):

$$\begin{aligned} & \sigma(\alpha_i J_i M_i \rightarrow \alpha_f J_f M_f) \\ &= \frac{2\pi}{k_i^2} \sum_{\lambda \lambda'} \begin{pmatrix} J_i & \lambda & J_f \\ -M_i & \mu & M_f \end{pmatrix} \\ & \times \begin{pmatrix} J_i & \lambda' & J_f \\ -M_i & \mu & M_f \end{pmatrix} \sum_{\substack{\gamma_i \gamma_f \\ \gamma_i' \gamma_f'}} \langle \alpha_i J_i \| Z^{\lambda}(\gamma_i \gamma_f) \| \alpha_f J_f \rangle \\ & \times \langle \alpha_i J_i \| Z^{\lambda'}(\gamma_i' \gamma_f') \| \alpha_f J_f \rangle \sum_{\kappa_i \kappa_f} i^{l_i - l_i'} e^{i(\delta_{\kappa_i} - \delta_{\kappa_f})} \\ & \times [l_i, l_i', j_i, j_i'] P^{\lambda}(\kappa_i \kappa_f; \gamma_i \gamma_f) P^{\lambda'}(\kappa_i' \kappa_f'; \gamma_i' \gamma_f') \\ & \times \sum_{m_{s_i} m_{s_f}} \begin{pmatrix} j_i & \frac{1}{2} & l_i \\ -m_{s_i} & m_{s_i} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_i' & \frac{1}{2} & l_i' \\ -m_{s_i} & m_{s_i} & 0 \end{pmatrix} \\ & \times \begin{pmatrix} j_i & \lambda & j_f \\ -m_{s_i} & -\mu & m_f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_i' & \lambda' & j_f \\ -m_{s_i} & -\mu & m_f \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (26)$$

The RDW excitation program of FAC allows to calculate this quantity, but not the multipole cross sections. One of the aims of the present work is to extend FAC (version 1.1.5) to be able to calculate $\sigma_Q^{KK'}(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f)$ for any combination of K ($= 0, \dots, 2J_i$), K' ($= 0, \dots, 2J_f$) and Q [$= -\min(K, K'), \dots, +\min(K, K')$]. By looking closely at

Eqs. (15) and (26), one finds that this extension can be achieved by making a couple of transformations: (i) replace the summation in the last two lines of Eq. (26)

$$\sum_{m_{s_i} m_{s_f}} \begin{pmatrix} j_i & \frac{1}{2} & l_i \\ -m_{s_i} & m_{s_i} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j'_i & \frac{1}{2} & l'_i \\ -m_{s_i} & m_{s_i} & 0 \end{pmatrix} \\ \times \begin{pmatrix} j_i & \lambda & j_f \\ -m_{s_i} & -\mu & m_f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j'_i & \lambda' & j_f \\ -m_{s_i} & -\mu & m_f \end{pmatrix}$$

by the algebraic expression

$$(-1)^{K-Q+\lambda'+j_i+j'_i+j_f+1/2} [K, K'] [L]^2 \begin{pmatrix} l_i & l'_i & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \times \begin{pmatrix} K & L & K' \\ Q & 0 & -Q \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} l_i & l'_i & L \\ j'_i & j_i & \frac{1}{2} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \lambda' & \lambda & L \\ j_i & j'_i & j_f \end{Bmatrix} \\ \times \begin{Bmatrix} J_i & \lambda & J_f \\ J_i & \lambda' & J_f \\ K & L & K' \end{Bmatrix};$$

(ii) remove the $3j$ symbols in the top two lines of Eq. (26). In the first transformation, the four integer variables K , K' , Q , and L are introduced within their ranges of allowed values, and the function routines “W6j” and “W9j” are used to get the required Wigner $6j$ and $9j$ symbols. This adaptation allows us to calculate ${}^L\sigma_Q^{KK'}(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f)$, and after performing the summation over L in Eq. (14) we get the multipole cross sections $\sigma_Q^{KK'}(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f)$.

We made preliminary calculations for $Q = 0$ to check whether the amended program provides consistent results. First, we calculated $\sigma_0^{00}(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f)$ for various transitions in O^{4+} and deduced the standard cross section $\sigma(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f)$ from Eq. (5). We compared the results with those obtained from the original, nonadapted FAC package and found a total agreement. Another more elaborate test was made by calculating $\sigma_0^{KK'}(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f)$, allowing K and K' to take all possible values. We deduced $\sigma(\alpha_i J_i M_i \rightarrow \alpha_f J_f M_f)$ by using

$$\sigma(\alpha_i J_i M_i \rightarrow \alpha_f J_f M_f) \\ = (-1)^{J_i - M_i + J_f - M_f} \sum_{KK'} [K, K'] \\ \times \begin{pmatrix} J_i & J_i & K \\ M_i & -M_i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_f & J_f & K' \\ M_f & -M_f & 0 \end{pmatrix} \\ \times \sigma_0^{KK'}(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f), \quad (27)$$

which stems from Eq. (2) letting $Q = Q' = 0$. The results were compared with those obtained directly from the original FAC package, and again found a complete agreement. These preliminary tests provide an indication that the modifications introduced here into FAC lead to consistent results.

Before proceeding further in calculating $\sigma_Q^{KK'}$ for $Q \neq 0$, let us outline the main steps of the computational methods used in the RDW program. Wave functions of the target ion are determined in the configuration mixing approximation, with the mixing coefficients obtained by diagonalizing the Dirac-Coulomb Hamiltonian expressed in basis states made of the configuration state functions (CSFs). The mixing involves CSFs of a given total angular momentum and parity that often arise from a single n -complex corresponding to all configurations

with the same set of principal quantum numbers. Each CSF is constructed in the jj coupling scheme from the one-electron radial functions obtained self-consistently as solutions of the Dirac equation with a modified Dirac-Fock-Slater central potential. This potential is determined using a fictitious mean configuration with fractional occupation numbers to represent all configurations included in the excitation calculations. To evaluate the radial scattering matrix elements involved in $P^\lambda(\kappa_i \kappa_f; \gamma_i \gamma_f)$, the free electron orbitals are obtained by solving the Dirac equation with the same central potential as for bound orbitals, meaning that all orbitals are orthogonal. For electric dipole and higher-order multipole allowed transitions (excluding weak spin change transitions that occur only through electron exchange), the partial wave contributions for large angular momenta of the free electron are taken into account in the Coulomb-Bethe approximation. More details on the numerical techniques implemented in FAC can be found in Ref. [14].

In the next section, numerical results are given in terms of the multipole collision strengths $\Omega_Q^{KK'}$, which are related to the multipole cross sections $\sigma_Q^{KK'}$ simply as

$$\Omega_Q^{KK'}(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f) = \frac{k_i^2}{\pi} \sigma_Q^{KK'}(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f). \quad (28)$$

Here $\sigma_Q^{KK'}$ is expressed in units of a_0^2 (2.800×10^{-17} cm²) and k_i^2 is related to the kinetic energy of the incident electron ε_i (in Hartree atomic units equivalent to 27.211 eV) as follows:

$$k_i^2 = 2\varepsilon_i \left(1 + \frac{\alpha^2}{2} \varepsilon_i \right), \quad (29)$$

where $\alpha = 1/137.036$ is the fine-structure constant. From Eqs. (5) and (28), one finds that the particular multipole collision strength Ω_0^{00} is equal to the standard collision strength Ω divided by $[J_i, J_f] \equiv [(2J_i + 1)(2J_f + 1)]^{1/2}$ recalling that $\Omega(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f) = \pi^{-1} [J_i]^2 k_i^2 \sigma(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f)$.

It is useful to point out that only the $\Omega_Q^{KK'}$ with $Q \geq 0$ need to be displayed since $\Omega_Q^{KK'} = \Omega_Q^{KK'}$ for even values of K and K' [see Eq. (16)]. Combining Eqs. (18) and (28) shows that $\Omega_Q^{KK'}$ can be expanded as

$$\Omega_Q^{KK'}(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f) = \Omega^K(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f) \delta_{KK'} \\ + \sum_{L \geq L_0} {}^L\Omega_Q^{KK'}(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f), \quad (30)$$

where $\Omega^K(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f)$ is given by the right-hand side of Eq. (20) after removing the factor $[J_i]^2$ and replacing σ_λ by Ω_λ , the λ component of the collision strength $\Omega(\alpha_i J_i \rightarrow \alpha_f J_f)$. It is given by the right-hand side of Eq. (21) without the factor $\pi/([J_i]^2 k_i^2)$. Note that the summation in Eq. (30) runs over the same values of L as in Eq. (18).

III. NUMERICAL RESULTS

To illustrate the present extension of the RDW excitation program of FAC, we performed detailed calculations of $\Omega_Q^{KK'}$ for transitions in Be-like O^{4+} , which are of interest in the solar atmosphere [19,29,30] and magnetic fusion plasmas [20–22]. In these calculations, 46 fine-structure levels of the nine configurations $2s^2$, $2s2p$, $2p^2$, and $2l3l'$ ($l = 0, 1; l' = 0-2$) were

TABLE I. Multipole collision strengths $\Omega_Q^{KK'}$ for $K = 0, 2; K' = 0, 2$, and the six selected transitions in O^{4+} at several incident electron energies ε_i . In Tables I to IV, ε_i is expressed in eV and the notation $x[y]$ means $x \times 10^y$.

ε_i	Ω_0^{00}	Ω_0^{02}	Ω_0^{20}	Ω_0^{22}	Ω_1^{22}	Ω_2^{22}	Ω_0^{00}	Ω_0^{02}	Ω_0^{20}	Ω_0^{22}	Ω_1^{22}	Ω_2^{22}
	$2s2p\ ^3P_1 \rightarrow 2s3p\ ^3P_1$						$2s2p\ ^3P_1 \rightarrow 2s3p\ ^3P_2$					
63	1.45[-1]	3.06[-3]	7.11[-4]	1.30[-1]	1.30[-1]	1.31[-1]	2.04[-2]	-6.31[-3]	2.75[-3]	-1.95[-3]	-1.49[-3]	-2.50[-3]
100	1.54[-1]	2.80[-3]	1.73[-3]	1.42[-1]	1.42[-1]	1.45[-1]	1.75[-2]	-4.50[-3]	3.00[-3]	-3.19[-3]	-3.67[-3]	-6.07[-3]
150	1.60[-1]	8.84[-4]	5.29[-4]	1.50[-1]	1.52[-1]	1.52[-1]	1.68[-2]	-3.02[-3]	2.56[-3]	-4.69[-3]	-6.05[-3]	-8.18[-3]
220	1.65[-1]	-2.31[-3]	-2.29[-3]	1.57[-1]	1.59[-1]	1.55[-1]	1.72[-2]	-1.65[-3]	1.67[-3]	-6.40[-3]	-8.39[-3]	-9.33[-3]
320	1.68[-1]	-6.30[-3]	-6.12[-3]	1.63[-1]	1.64[-1]	1.56[-1]	1.81[-2]	-3.49[-4]	4.78[-4]	-8.41[-3]	-1.04[-2]	-9.81[-3]
	$2s2p\ ^3P_2 \rightarrow 2s3p\ ^3P_1$						$2s2p\ ^3P_2 \rightarrow 2s3p\ ^3P_2$					
63	2.03[-2]	6.29[-3]	-2.07[-3]	-2.05[-3]	-1.60[-3]	-2.61[-3]	1.55[-1]	-8.92[-3]	-3.65[-3]	1.33[-1]	1.32[-1]	1.32[-1]
100	1.74[-2]	4.84[-3]	-2.47[-3]	-3.44[-3]	-3.83[-3]	-5.97[-3]	1.61[-1]	-6.78[-3]	-4.06[-3]	1.44[-1]	1.43[-1]	1.43[-1]
150	1.67[-2]	3.43[-3]	-2.26[-3]	-5.02[-3]	-6.25[-3]	-7.94[-3]	1.65[-1]	-3.23[-3]	-1.95[-3]	1.51[-1]	1.51[-1]	1.50[-1]
220	1.71[-2]	1.98[-3]	-1.57[-3]	-6.75[-3]	-8.59[-3]	-9.05[-3]	1.69[-1]	1.49[-3]	1.95[-3]	1.56[-1]	1.57[-1]	1.54[-1]
320	1.81[-2]	5.08[-4]	-5.65[-4]	-8.71[-3]	-1.06[-2]	-9.57[-3]	1.72[-1]	6.95[-3]	7.00[-3]	1.59[-1]	1.60[-1]	1.56[-1]
	$2s2p\ ^3P_1 \rightarrow 2s3d\ ^3D_2$						$2s2p\ ^3P_2 \rightarrow 2s3d\ ^3D_3$					
65	1.71[-1]	-4.05[-2]	-3.66[-3]	8.31[-2]	8.77[-2]	8.81[-2]	2.19[-1]	-3.74[-2]	3.71[-4]	1.56[-1]	1.54[-1]	1.63[-1]
100	2.34[-1]	-6.71[-2]	-9.06[-3]	1.16[-1]	1.27[-1]	1.39[-1]	2.90[-1]	-6.36[-2]	-1.45[-2]	2.13[-1]	2.16[-1]	2.44[-1]
150	3.10[-1]	-8.87[-2]	-1.11[-2]	1.55[-1]	1.72[-1]	1.95[-1]	3.80[-1]	-8.81[-2]	-2.84[-2]	2.83[-1]	2.89[-1]	3.33[-1]
220	3.95[-1]	-9.86[-2]	-9.65[-3]	2.00[-1]	2.22[-1]	2.52[-1]	4.82[-1]	-1.02[-1]	-3.81[-2]	3.65[-1]	3.72[-1]	4.26[-1]
320	4.87[-1]	-9.50[-2]	-5.22[-3]	2.54[-1]	2.76[-1]	3.11[-1]	5.95[-1]	-1.03[-1]	-4.25[-2]	4.59[-1]	4.66[-1]	5.20[-1]

considered together with a large number of transitions from the ground $2s^2\ ^1S_0$ and metastable $2s2p\ ^3P_{0,1,2}$ levels. Clearly, it is not possible to give a full account of the numerical results and we have to restrict ourselves to some selected excitations. Hence, we chose to focus on six excitations for their practical applications in plasma spectroscopy. The four excitations $2s2p\ ^3P_{1,2} \rightarrow 2s3p\ ^3P_{1,2}$ play a major role in populating the upper levels for plasmas with electron densities greater than 10^{11} cm^{-3} . These levels decay preferentially to $2s3s\ ^3S_1$, producing two intense UV lines at 2787 and 2781 Å. The polarizations and relative intensities of these lines were used for diagnosing the anisotropy of the electron velocity distribution in WT-3 tokamak [21,23]. The other two selected excitations $2s2p\ ^3P_1 \rightarrow 2s3d\ ^3D_2$ and $2s2p\ ^3P_2 \rightarrow 2s3d\ ^3D_3$ represent efficient processes for populating the upper levels of the blended lines $2s3d\ ^3D_{2,3} \rightarrow 2s2p\ ^3P_2$ at 192.90 Å, which are useful for electron density diagnostics of solar flares [16,17,19].

In Tables I to III, we collect the values of $\Omega_Q^{KK'}$ for different combinations of K and K' and the corresponding excitations. Table I is for $K, K' = 0, 2$, where all the six excitations are concerned. In Table II, we distinguish the five possible combinations of K and K' up to 4 along with the concerned excitations. Part (a) is for $K = 0, 2$ and $K' = 4$, where only four excitations are present. The two others ending at $2s3p\ ^3P_1$ do not appear because their K' value is at most equal to 2. In part (b), $K = 4$ and $K' = 0, 2$, hence only the three excitations from $2s2p\ ^3P_2$ can occur since for the three others originating from $2s2p\ ^3P_1$, K is restricted to 0 and 2. In part (c) where $K = K' = 4$, the results are associated with the excitations $2s2p\ ^3P_2 \rightarrow 2s3p\ ^3P_2$ and $2s2p\ ^3P_2 \rightarrow 2s3d\ ^3D_3$. Table III gives $\Omega_Q^{KK'}$ for different combinations of $K = 0, 2, 4$ and $K' = 6$. Here, the unique excitation concerned is $2s2p\ ^3P_2 \rightarrow 2s3d\ ^3D_3$. In these tables we limited ourselves to a few values of the incident electron energy ε_i , ranging from slightly above the excitation threshold to nearly five times this threshold.

To get more insight on these numerical results, we turn to the expansion of the multipole collision strength $\Omega_Q^{KK'}$ by examining the relative contributions of the L terms [see Eq. (30)]. In Table IV we dispatch the values of ${}^L\Omega_Q^{KK'}$ in six parts, distinguishing different combinations of $K = 2, 4$ and $K' = 2, 4, 6$. Parts (a), (b), (c), and (e) correspond to $(K, K') = (2, 2), (2, 4), (4, 2)$, and $(2, 6)$, respectively, and there are only three allowed values of L . Parts (d) and (f) correspond to $(K, K') = (4, 4)$ and $(4, 6)$, respectively. In these two parts, there are five allowed values of L but the last two L terms are negligibly small and omitted. Let us note that the third contributing terms ${}^6\Omega_0^{24}(2s2p\ ^3P_{1,2} \rightarrow 2s3p\ ^3P_2)$ [in part (b)], ${}^6\Omega_0^{42}(2s2p\ ^3P_2 \rightarrow 2s3p\ ^3P_{1,2})$ [in part (c)], and ${}^8\Omega_0^{26}(2s2p\ ^3P_2 \rightarrow 2s3d\ ^3D_3)$ [in part (e)] are also extremely small.

It is worth mentioning that, in Table IV, we show only the results for ${}^L\Omega_0^{KK'}$ knowing that those corresponding to $Q \neq 0$ can be readily deduced from ${}^L\Omega_0^{KK'}$, within an algebraic factor \mathcal{C} , as follows:

$${}^L\Omega_Q^{KK'} = (-1)^Q \frac{\begin{pmatrix} K & L & K' \\ Q & 0 & -Q \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} K & L & K' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}} {}^L\Omega_0^{KK'} \equiv \mathcal{C} {}^L\Omega_0^{KK'}, \quad (31)$$

which is straightforward from Eqs. (15) and (28). To extend Table IV to the case of $Q \neq 0$, we collect in Table V the values of \mathcal{C} for different combinations of K, K', Q , and L , knowing that \mathcal{C} remains the same by interchanging K and K' .

In addition to these tabulated values, and to illustrate qualitative trends as a function of energy, we give in Fig. 1 some curves of $\Omega_Q^{KK'}$ versus ε_i , covering a broad energy range, up to 1.55 keV. Figures 1(a) and 1(b) correspond to the transitions $2s2p\ ^3P_1 \rightarrow 2s3p\ ^3P_2$ and $2s2p\ ^3P_2 \rightarrow 2s3p\ ^3P_1$, respectively, and different curves are for selected combinations of K, K' , and Q . These two transitions were chosen because their Ω_Q^{22} exhibit a greater sensitivity to $Q = 0, 1, 2$

TABLE II. $\Omega_Q^{KK'}$ for (a) $K = 0, 2; K' = 4$, (b) $K = 4; K' = 0, 2$, (c) $K = K' = 4$ and the corresponding transitions.

(a)	ε_i	Ω_0^{04}	Ω_0^{24}	Ω_1^{24}	Ω_2^{24}	
$2s2p\ ^3P_1 \rightarrow 2s3p\ ^3P_2$						
	63	3.03[-4]	1.59[-3]	1.26[-3]	4.73[-4]	
	100	2.82[-4]	1.56[-3]	1.24[-3]	4.90[-4]	
	150	1.23[-3]	2.19[-3]	1.20[-3]	-8.34[-4]	
	220	2.34[-3]	2.85[-3]	1.09[-3]	-2.43[-3]	
	320	2.89[-3]	2.89[-3]	7.72[-4]	-3.42[-3]	
$2s2p\ ^3P_2 \rightarrow 2s3p\ ^3P_2$						
	63	-7.84[-5]	-1.12[-3]	-9.77[-4]	-6.00[-4]	
	100	-7.31[-5]	-2.28[-3]	-2.04[-3]	-1.36[-3]	
	150	-3.18[-4]	-1.64[-3]	-1.32[-3]	-5.68[-4]	
	220	-6.05[-4]	2.13[-4]	5.24[-4]	1.07[-3]	
	320	-7.47[-4]	2.95[-3]	3.10[-3]	3.06[-3]	
$2s2p\ ^3P_1 \rightarrow 2s3d\ ^3D_2$						
	65	-6.74[-3]	-6.85[-2]	-6.10[-2]	-4.23[-2]	
	100	-1.07[-2]	-1.09[-1]	-1.00[-1]	-7.54[-2]	
	150	-1.58[-2]	-1.42[-1]	-1.32[-1]	-1.03[-1]	
	220	-1.91[-2]	-1.58[-1]	-1.47[-1]	-1.17[-1]	
	320	-1.90[-2]	-1.54[-1]	-1.43[-1]	-1.15[-1]	
$2s2p\ ^3P_2 \rightarrow 2s3d\ ^3D_3$						
	65	1.01[-2]	-4.51[-2]	-3.98[-2]	-3.14[-2]	
	100	1.07[-2]	-8.73[-2]	-7.93[-2]	-5.95[-2]	
	150	1.32[-2]	-1.21[-1]	-1.11[-1]	-8.23[-2]	
	220	1.51[-2]	-1.37[-1]	-1.26[-1]	-9.36[-2]	
	320	1.47[-2]	-1.34[-1]	-1.23[-1]	-9.15[-2]	
(b)	ε_i	Ω_0^{40}	Ω_0^{42}	Ω_1^{42}	Ω_2^{42}	
$2s2p\ ^3P_2 \rightarrow 2s3p\ ^3P_1$						
	63	3.03[-4]	1.74[-3]	1.39[-3]	5.71[-4]	
	100	2.81[-4]	1.88[-3]	1.54[-3]	7.02[-4]	
	150	1.23[-3]	2.62[-3]	1.60[-3]	-5.54[-4]	
	220	2.34[-3]	3.30[-3]	1.50[-3]	-2.15[-3]	
	320	2.89[-3]	3.26[-3]	1.11[-3]	-3.18[-3]	
$2s2p\ ^3P_2 \rightarrow 2s3p\ ^3P_2$						
	63	-7.84[-5]	-1.34[-3]	-1.18[-3]	-7.45[-4]	
	100	-7.31[-5]	-2.78[-3]	-2.49[-3]	-1.68[-3]	
	150	-3.18[-4]	-2.30[-3]	-1.93[-3]	-1.00[-3]	
	220	-6.05[-4]	-4.64[-4]	-9.40[-5]	6.33[-4]	
	320	-7.47[-4]	2.38[-3]	2.58[-3]	2.69[-3]	
$2s2p\ ^3P_2 \rightarrow 2s3d\ ^3D_3$						
	65	7.33[-5]	2.48[-3]	2.02[-3]	1.41[-3]	
	100	2.51[-4]	-2.05[-3]	-1.99[-3]	-1.58[-3]	
	150	6.68[-4]	-5.97[-3]	-5.56[-3]	-4.50[-3]	
	220	1.10[-3]	-8.69[-3]	-8.09[-3]	-6.71[-3]	
	320	1.33[-3]	-1.02[-2]	-9.46[-3]	-7.92[-3]	
(c)	ε_i	Ω_0^{44}	Ω_1^{44}	Ω_2^{44}	Ω_3^{44}	Ω_4^{44}
$2s2p\ ^3P_2 \rightarrow 2s3p\ ^3P_2$						
	63	1.27[-1]	1.28[-1]	1.29[-1]	1.30[-1]	1.32[-1]
	100	1.44[-1]	1.44[-1]	1.43[-1]	1.43[-1]	1.42[-1]
	150	1.52[-1]	1.52[-1]	1.53[-1]	1.53[-1]	1.52[-1]
	220	1.55[-1]	1.56[-1]	1.58[-1]	1.61[-1]	1.61[-1]
	320	1.54[-1]	1.56[-1]	1.61[-1]	1.66[-1]	1.70[-1]
$2s2p\ ^3P_2 \rightarrow 2s3d\ ^3D_3$						
	65	7.16[-2]	7.20[-2]	7.33[-2]	7.58[-2]	8.00[-2]
	100	1.04[-1]	1.05[-1]	1.09[-1]	1.16[-1]	1.24[-1]
	150	1.43[-1]	1.45[-1]	1.50[-1]	1.59[-1]	1.70[-1]
	220	1.88[-1]	1.90[-1]	1.95[-1]	2.03[-1]	2.15[-1]
	320	2.39[-1]	2.40[-1]	2.44[-1]	2.50[-1]	2.60[-1]

TABLE III. $\Omega_Q^{KK'}$ for $K = 0, 2, 4; K' = 6$ and the transition $2s2p^3P_2 \rightarrow 2s3d^3D_3$.

ε_i	Ω_0^{06}	Ω_0^{26}	Ω_1^{26}	Ω_2^{26}	Ω_0^{46}	Ω_1^{46}	Ω_2^{46}	Ω_3^{46}	Ω_4^{46}
65	3.77[-4]	-7.79[-4]	-8.85[-4]	-9.36[-4]	-8.84[-2]	-8.62[-2]	-7.90[-2]	-6.51[-2]	-4.27[-2]
100	6.50[-5]	2.80[-3]	2.44[-3]	1.48[-3]	-1.47[-1]	-1.42[-1]	-1.25[-1]	-9.75[-2]	-6.04[-2]
150	-2.36[-4]	6.29[-3]	5.67[-3]	3.82[-3]	-1.96[-1]	-1.88[-1]	-1.63[-1]	-1.24[-1]	-7.48[-2]
220	-4.75[-4]	8.52[-3]	7.76[-3]	5.39[-3]	-2.21[-1]	-2.11[-1]	-1.81[-1]	-1.37[-1]	-8.13[-2]
320	-6.07[-4]	8.90[-3]	8.17[-3]	5.78[-3]	-2.17[-1]	-2.06[-1]	-1.77[-1]	-1.33[-1]	-7.88[-2]

(the upper three curves), comparatively to the other four transitions. Note that we have broken the y axis to avoid mismatch of the curves in the upper ($\Omega_{0,1,2}^{22}$) and lower (Ω_0^{02} and Ω_0^{20}) parts of each panel, and used different scales on both sides of the break for more clarity.

Before proceeding further, let us underline the fact that we have not shown the results for many other excitations such as those from $2s^2\ ^1S_0$ and $2s2p^3P_0$ levels having zero angular momentum. For such excitations, only the alignment-creation collision strengths, which can be readily deduced from the magnetic-sublevel collision strengths, can occur. As an example, in the case of the excitation from $2s^2\ ^1S_0$, we have [see Eq. (2)]

$$\begin{aligned} \Omega_0^{0K'}(2s^2\ ^1S_0 \rightarrow \alpha_f J_f) &= \sqrt{2K'+1} \sum_{M_f} (-1)^{J_f-M_f} \\ &\times \begin{pmatrix} J_f & J_f & K' \\ M_f & -M_f & 0 \end{pmatrix} \Omega(2s^2\ ^1S_0 \rightarrow \alpha_f J_f M_f). \end{aligned} \quad (32)$$

Likewise, the results for excitations to the final $J_f = 0$ levels (such as $2s2p^3P_{1,2} \rightarrow 2s3p^3P_0$) are also not given because only the alignment-destruction collision strengths can occur. The main purpose here is to compute the coherence-transfer collision strengths $\Omega_{Q \neq 0}^{KK'}$, which are not accessible from the magnetic-sublevel collision strengths.

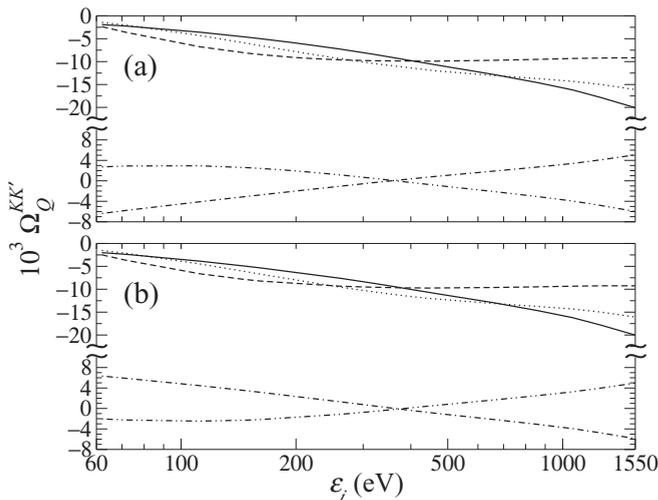


FIG. 1. Multipole collision strengths $\Omega_Q^{KK'}$ versus ε_i for (a) $2s2p^3P_1 \rightarrow 2s3p^3P_2$ and (b) $2s2p^3P_2 \rightarrow 2s3p^3P_1$ in O^{4+} . Solid, dotted, dashed, dot-dashed, and double-dot-dashed curves correspond to Ω_0^{22} , Ω_1^{22} , Ω_2^{22} , Ω_0^{02} , and Ω_0^{20} , respectively.

IV. DISCUSSIONS

Let us scrutinize the numerical results presented in Sec. III. Table I shows that in the case of $\Delta J = 0$ transitions $2s2p^3P_1 \rightarrow 2s3p^3P_1$ and $2s2p^3P_2 \rightarrow 2s3p^3P_2$, Ω_Q^{22} remains practically unchanged for $Q = 0, 1, 2$. For the other transitions, there is some sensitivity to Q , especially for $2s2p^3P_1 \rightarrow 2s3p^3P_2$ and $2s2p^3P_2 \rightarrow 2s3p^3P_1$, as we will discuss later. By examining the values of ${}^L\Omega_0^{22}$ ($L = 0, 2, 4$) in part (a) of Table IV, one notes that for both $2s2p^3P_1 \rightarrow 2s3p^3P_1$ and $2s2p^3P_2 \rightarrow 2s3p^3P_2$, practically only Ω^2 , the ($L = 0$) isotropic term, contributes to Ω_0^{22} , the $L = 2$ and $L = 4$ terms being negligibly small. This explains why $\Omega_{Q=1,2}^{22} \approx \Omega_0^{22}$ for these two excitations, recalling from Sec. II A that Ω^2 is independent of Q . The particularity of these two excitations, compared to the four others, lies in the involvement of the monopole ($\lambda = 0$) part of the electron–electron Coulomb interaction. According to our calculations, the monopole component σ_0 for the two excitations represents more than 85% of the usual cross section σ [cf. Eq. (22)]. This is probably why the contribution of the ($L = 0$) term Ω^2 to Ω_0^{22} is overwhelming.

Part (c) of Table II indicates that $\Omega_{Q=1,\dots,4}^{44} \approx \Omega_0^{44}$ for $2s2p^3P_2 \rightarrow 2s3p^3P_2$, consistent with the remarks made above on Ω_0^{22} . The very weak dependence on Q can be understood by noting that Ω^4 , the Q -independent $L = 0$ term, is the essential contribution to Ω_0^{44} [see part (d) of Table IV]. At this point, we would like to mention an important consequence of the quasi-equality of Ω_Q^{KK} ($K = 2, 4, \dots$) with different $|Q|$'s for a given transition. For an electron velocity distribution $f(v, \theta)$ cylindrically symmetric around the z axis, the multipole rate coefficient C_0^{KK} can be directly deduced from the cross section σ_0^{KK} as

$$C_0^{KK} \approx 2\pi \int_{v_{th}}^{\infty} \sigma_0^{KK} f_0(v) v^3 dv, \quad (33)$$

where v_{th} is the threshold-excitation velocity and $f_0(v)$ the isotropic part of the electron distribution

$$f_0(v) = \int_0^\pi f(v, \theta) \sin \theta d\theta. \quad (34)$$

Here v represents the modulus of the electron velocity and θ the angle between the velocity and the z axis.

As we pointed out earlier, the plots given in Fig. 1 are meant to illustrate qualitative trends of the variations of $\Omega_Q^{KK'}$ versus ε_i choosing a couple of transitions, where some sensitivity to Q is observed for Ω_Q^{22} . To capture the qualitative trends, we extended the energy range deliberately to values as high as 1.55 keV, corresponding to 25 times the excitation threshold. First, there is similarity of the curves for both transitions. The

TABLE IV. ${}^L\Omega_{Q=0}^{KK'}$ contributions in Eq. (30) corresponding to the first three allowed values of L . Parts (a) to (f) are for different combinations of $K = 2, 4; K' = 2, 4, 6$.

(a)	Transition	ε_i	Ω^2	${}^2\Omega_0^{22}$	${}^4\Omega_0^{22}$
	$2s2p\ {}^3P_1 \rightarrow 2s3p\ {}^3P_1$	63	1.30[-1]	-1.80[-4]	1.59[-4]
		100	1.43[-1]	-1.52[-3]	9.58[-6]
		220	1.57[-1]	1.43[-3]	-1.40[-3]
	$2s2p\ {}^3P_1 \rightarrow 2s3p\ {}^3P_2$	63	-1.98[-3]	4.44[-4]	-4.10[-4]
		100	-4.53[-3]	1.51[-3]	-1.68[-4]
		220	-8.37[-3]	1.10[-3]	8.64[-4]
	$2s2p\ {}^3P_2 \rightarrow 2s3p\ {}^3P_1$	63	-2.09[-3]	4.50[-4]	-4.08[-4]
		100	-4.61[-3]	1.33[-3]	-1.67[-4]
		220	-8.40[-3]	7.87[-4]	8.65[-4]
$2s2p\ {}^3P_2 \rightarrow 2s3p\ {}^3P_2$	63	1.32[-1]	2.49[-4]	6.63[-4]	
	100	1.43[-1]	2.96[-4]	2.90[-4]	
	220	1.55[-1]	1.27[-3]	-1.05[-3]	
$2s2p\ {}^3P_1 \rightarrow 2s3d\ {}^3D_2$	65	8.70[-2]	-1.55[-3]	-2.33[-3]	
	100	1.30[-1]	-1.00[-2]	-3.57[-3]	
	220	2.30[-1]	-2.36[-2]	-5.68[-3]	
$2s2p\ {}^3P_2 \rightarrow 2s3d\ {}^3D_3$	65	1.58[-1]	-4.51[-3]	2.35[-3]	
	100	2.27[-1]	-1.68[-2]	3.03[-3]	
	220	3.92[-1]	-3.24[-2]	5.42[-3]	
(b)	Transition	ε_i	${}^2\Omega_0^{24}$	${}^4\Omega_0^{24}$	${}^6\Omega_0^{24}$
$2s2p\ {}^3P_1 \rightarrow 2s3p\ {}^3P_2$	63	1.29[-3]	3.06[-4]	2.53[-10]	
	100	1.27[-3]	2.84[-4]	4.69[-10]	
	220	4.89[-4]	2.36[-3]	2.48[-10]	
$2s2p\ {}^3P_2 \rightarrow 2s3p\ {}^3P_2$	63	-1.05[-3]	-6.69[-5]	2.65[-9]	
	100	-2.22[-3]	-6.23[-5]	1.33[-9]	
	220	7.29[-4]	-5.16[-4]	-3.28[-9]	
$2s2p\ {}^3P_1 \rightarrow 2s3d\ {}^3D_2$	65	-6.70[-2]	-9.69[-4]	-5.60[-4]	
	100	-1.12[-1]	2.81[-3]	-7.19[-4]	
	220	-1.65[-1]	8.79[-3]	-1.67[-3]	
$2s2p\ {}^3P_2 \rightarrow 2s3d\ {}^3D_3$	65	-4.52[-2]	1.57[-3]	-1.47[-3]	
	100	-8.83[-2]	1.96[-3]	-9.60[-4]	
	220	-1.39[-1]	3.00[-3]	-8.36[-4]	
(c)	Transition	ε_i	${}^2\Omega_0^{42}$	${}^4\Omega_0^{42}$	${}^6\Omega_0^{42}$
$2s2p\ {}^3P_2 \rightarrow 2s3p\ {}^3P_1$	63	1.44[-3]	3.06[-4]	9.95[-11]	
	100	1.60[-3]	2.84[-4]	1.81[-10]	
	220	9.31[-4]	2.36[-3]	9.53[-11]	
$2s2p\ {}^3P_2 \rightarrow 2s3p\ {}^3P_2$	63	-1.27[-3]	-6.69[-5]	2.89[-9]	
	100	-2.71[-3]	-6.23[-5]	1.77[-9]	
	220	5.19[-5]	-5.16[-4]	-3.04[-9]	
$2s2p\ {}^3P_2 \rightarrow 2s3d\ {}^3D_3$	65	2.28[-3]	7.79[-5]	1.21[-4]	
	100	-2.21[-3]	1.38[-4]	2.10[-5]	
	220	-9.18[-3]	6.40[-4]	-1.53[-4]	
(d)	Transition	ε_i	Ω^4	${}^2\Omega_0^{44}$	${}^4\Omega_0^{44}$
$2s2p\ {}^3P_2 \rightarrow 2s3p\ {}^3P_2$	63	1.29[-1]	1.29[-1]	-1.71[-3]	-1.62[-4]
	100	1.43[-1]	1.43[-1]	5.04[-4]	-1.51[-4]
	220	1.59[-1]	1.59[-1]	-2.75[-3]	-1.25[-3]
$2s2p\ {}^3P_2 \rightarrow 2s3d\ {}^3D_3$	65	7.49[-2]	7.49[-2]	-3.54[-3]	2.37[-4]
	100	1.12[-1]	1.12[-1]	-8.57[-3]	-5.23[-5]
	220	1.99[-1]	1.99[-1]	-1.13[-2]	4.00[-5]
(e)	Transition	ε_i	${}^4\Omega_0^{26}$	${}^6\Omega_0^{26}$	${}^8\Omega_0^{26}$
$2s2p\ {}^3P_2 \rightarrow 2s3d\ {}^3D_3$	65	-1.07[-3]	2.87[-4]	-5.95[-19]	
	100	2.76[-3]	4.95[-5]	-3.71[-19]	
	220	8.88[-3]	-3.61[-4]	-1.70[-19]	
(f)	Transition	ε_i	${}^2\Omega_0^{46}$	${}^4\Omega_0^{46}$	${}^6\Omega_0^{46}$
$2s2p\ {}^3P_2 \rightarrow 2s3d\ {}^3D_3$	65	-9.09[-2]	1.93[-3]	5.13[-4]	
	100	-1.44[-1]	-2.99[-3]	8.85[-5]	
	220	-2.10[-1]	-1.01[-2]	-6.46[-4]	

TABLE V. Calculated values of \mathcal{C} from Eq. (31) for some combinations of K, K', Q, L .

K	K'	Q	L	\mathcal{C}	K	K'	Q	L	\mathcal{C}
2	2	1	2	1/2	2	6	1	4	$\sqrt{7}/3$
2	2	1	4	-2/3	2	6	1	6	$1/(2\sqrt{7})$
2	2	2	2	-1	2	6	1	8	$-2/\sqrt{7}$
2	2	2	4	1/6	2	6	2	4	$\sqrt{14/5}/3$
2	4	1	2	$\sqrt{5/6}$	2	6	2	6	$-\sqrt{10/7}$
2	4	1	4	$\sqrt{3/10}/2$	2	6	2	8	$\sqrt{5/14}/2$
2	4	1	6	$-2\sqrt{2/15}$	4	6	1	2	$\sqrt{14/15}$
2	4	2	2	$\sqrt{5/3}/2$	4	6	1	4	$\sqrt{21/10}/2$
2	4	2	4	$-3\sqrt{3/5}/2$	4	6	1	6	$\sqrt{5/42}$
2	4	2	6	$1/\sqrt{15}$	4	6	2	2	$2\sqrt{14/3}/5$
4	4	1	2	17/20	4	6	2	4	0
4	4	1	4	1/2	4	6	2	6	$-11/(2\sqrt{42})$
4	4	2	2	2/5	4	6	3	2	$2\sqrt{3}/5$
4	4	2	4	-11/18	4	6	3	4	$-\sqrt{3}/2$
4	4	3	2	-7/20	4	6	3	6	$-\sqrt{3}/2$
4	4	3	4	-7/6	4	6	4	2	$1/\sqrt{5}$
4	4	4	2	-7/5	4	6	4	4	$-3/\sqrt{5}$
4	4	4	4	7/9	4	6	4	6	$\sqrt{5}/2$

three ones in the upper part show negative values for $\Omega_{0,1,2}^{22}$, in the whole energy range. In the lower part of the panels, the couple of Ω_0^{02} and Ω_0^{20} curves change sign and cross each other at an energy near 370 eV.

Pushing further the analysis of the numerical results in Table I, one can see that for both $\Delta J = 0$ transitions, Ω_0^{02} changes sign at a certain energy ε_{i0} and $|\Omega_0^{02}|$ is two orders of magnitude lower than Ω_0^{22} . Our calculations yield $\varepsilon_{i0} \approx 169.5$ eV for $2s2p^3P_1 \rightarrow 2s3p^3P_1$ and $\varepsilon_{i0} \approx 197$ eV for $2s2p^3P_2 \rightarrow 2s3p^3P_2$. For a monoenergetic, unidirectional electron beam of density n_e , where the multipole rate coefficient is given by $C_0^{KK'} = v\sigma_0^{KK'}$, the alignment-creation flux $n_e|C_0^{02}|\rho_0^0$ may be comparable to the alignment-transfer flux $n_eC_0^{22}|\rho_0^2|$ outside a very narrow range of energy centered at ε_{i0} . The reason is that for the initial metastable levels $2s2p^3P_{1,2}$, $|\rho_0^2|$ is much lower than ρ_0^0 and could compensate the fact that $C_0^{22} \gg |C_0^{02}|$. Since the above fluxes enter in the GPACR model, one needs to solve its rate equations to calculate precisely the state multipoles ρ_0^K , and in particular, those of the initial levels ρ_0^2 . However, such calculations are quite elaborate and beyond the scope of the present work. Without solving the GPACR rate equations, one can still ascertain that, for metastable levels of angular momentum $J \geq 1$, $|\rho_0^K|/\rho_0^0 \ll 1$ ($K = 2, 4, \dots, 2J$). This is particularly true if n_e is sufficiently large so that the populations of metastable levels become comparable to that of the ground level. An example can be inspired from a recent paper [31], where we calculated the populations $N_{1/2}$ and $N_{3/2}$ of the $M = 1/2$ and $M = 3/2$ sublevels of the metastable level $2s^22p^2P_{3/2}$ of B-like Ar¹³⁺ ion. These calculations infer that the ratio $\rho_0^2/\rho_0^0 = (N_{1/2} - N_{3/2})/(N_{1/2} + N_{3/2})$ is, in absolute value, less than 10^{-3} under most conditions, but never exceeds 0.05.

Without knowing the signs of $\rho_0^2(2s2p^3P_{1,2})$, one cannot say whether the alignment-transfer flux should be added to or subtracted from the alignment-creation flux, that is, whether

the state multipoles ρ_0^2 of $2s3p^3P_{1,2}$ are enhanced or reduced by the transfer of alignment. At this point, we can only say that at energies near 169.5 eV for $2s2p^3P_1 \rightarrow 2s3p^3P_1$ and 197 eV for $2s2p^3P_2 \rightarrow 2s3p^3P_2$, C_0^{02} changes sign, which means that only the alignment-transfer flux contributes to ρ_0^2 for each final level.

Now, inspection of the values of Ω_0^{02} , Ω_0^{22} (in Table I) and Ω_0^{42} [in part (b) of Table II] for the transition $2s2p^3P_2 \rightarrow 2s3p^3P_1$ indicates that alignment of the final level is mainly determined by the flux $n_eC_0^{02}|\rho_0^0(2s2p^3P_2)|$ which dominates both $n_e|C_0^{22}|\rho_0^2(2s2p^3P_2)|$ and $n_eC_0^{42}|\rho_0^4(2s2p^3P_2)|$ fluxes. Comparing Ω_0^{02} for $2s2p^3P_1 \rightarrow 2s3p^3P_1$ and $2s2p^3P_2 \rightarrow 2s3p^3P_1$, and recalling from Refs. [32,33] that the population of $2s2p^3P_1$ is smaller than that of $2s2p^3P_2$ [i.e., $\rho_0^0(2s2p^3P_1) < \rho_0^0(2s2p^3P_2)$], one observes different tendencies depending on the electron energy ε_i . For $\varepsilon_i = 63, 100$, and 150 eV, the positive alignment-creation flux to $2s3p^3P_1$ is much more important from $2s2p^3P_2$ than from $2s2p^3P_1$. As for the higher energy $\varepsilon_i = 220$ eV, the alignment-creation fluxes from $2s2p^3P_1$ and $2s2p^3P_2$ to $2s3p^3P_1$ are of opposite signs and tend to cancel each other. But the alignment creation is expected to be less efficient from $2s2p^3P_1$ than from $2s2p^3P_2$, hence ρ_0^2 of $2s3p^3P_1$ due to the combined fluxes would remain positive. At the highest energy considered, $\varepsilon_i = 320$ eV, the sum of alignment-creation fluxes from $2s2p^3P_1$ and $2s2p^3P_2$ becomes negative if the ratio $\rho_0^0(2s2p^3P_1)/\rho_0^0(2s2p^3P_2)$ exceeds 0.08.

For the transition $2s2p^3P_1 \rightarrow 2s3p^3P_2$, the values of Ω_0^{02} and Ω_0^{22} in Table I show that the contribution to ρ_0^2 state multipole of final level is mainly due to the alignment-creation flux $n_eC_0^{02}|\rho_0^0(2s2p^3P_1)|$. In part (a) of Table II, Ω_0^{04} and Ω_0^{24} also show that the main contribution to ρ_0^4 of $2s3p^3P_2$ is due to the alignment-creation flux $n_eC_0^{04}|\rho_0^0(2s2p^3P_1)|$. As for the transition $2s2p^3P_2 \rightarrow 2s3p^3P_2$, one first notes that ρ_0^2 of $2s3p^3P_2$ due to the transfer of alignment is mostly determined by $n_eC_0^{22}|\rho_0^2(2s2p^3P_2)|$ rather than $n_eC_0^{42}|\rho_0^4(2s2p^3P_2)|$. A similar observation can be made for ρ_0^4 which is determined by $n_eC_0^{44}|\rho_0^4(2s2p^3P_2)|$ rather than $n_eC_0^{24}|\rho_0^2(2s2p^3P_2)|$. The alignment-transfer fluxes to $2s3p^3P_2$ may not be negligible with respect to the alignment-creation fluxes $n_eC_0^{02}|\rho_0^0(2s2p^3P_2)|$ and $n_eC_0^{04}|\rho_0^0(2s2p^3P_2)|$ in governing $\rho_0^2(2s3p^3P_2)$ and $\rho_0^4(2s3p^3P_2)$, even with $|\rho_0^2|/\rho_0^0 \ll 1$ and $|\rho_0^4|/\rho_0^0 \ll 1$ for the metastable level $2s2p^3P_2$. The rank-2 alignment creations in $2s3p^3P_2$ from $2s2p^3P_1$ and $2s2p^3P_2$ add up at $\varepsilon_i = 63, 100$, and 150 eV, but tend to cancel each other at 220 and 320 eV.

For the two optically allowed transitions $2s2p^3P_1 \rightarrow 2s3d^3D_2$ and $2s2p^3P_2 \rightarrow 2s3d^3D_3$, our numerical results show that Ω_0^{22} is larger than $|\Omega_0^{02}|$ by a factor up to 4, but since for both initial levels, $|\rho_0^2|/\rho_0^0$ is very small, the flux $n_eC_0^{02}|\rho_0^0$ should contribute to ρ_0^2 of the final level much more than $n_eC_0^{22}|\rho_0^2|$. Likewise, $n_eC_0^{04}|\rho_0^0$ should dominate over $n_eC_0^{24}|\rho_0^2|$ and $n_eC_0^{44}|\rho_0^4|$ in ρ_0^4 of the final level. On the other hand, for both transitions, the ratio $|\rho_0^4|/\rho_0^2$ characterizing the final level is small compared to 1 because $|\Omega_0^{02}/\Omega_0^{04}|$ is in the range between ~ 4 to 7. For the final level $2s3d^3D_3$, $|\rho_0^6|/\rho_0^2$ is very much below 1 because $|\Omega_0^{02}/\Omega_0^{06}|$ is larger than 100.

Before closing the detailed analysis of the numerical results for the six selected excitations, let us turn our attention to the population of the final levels by inspecting the values

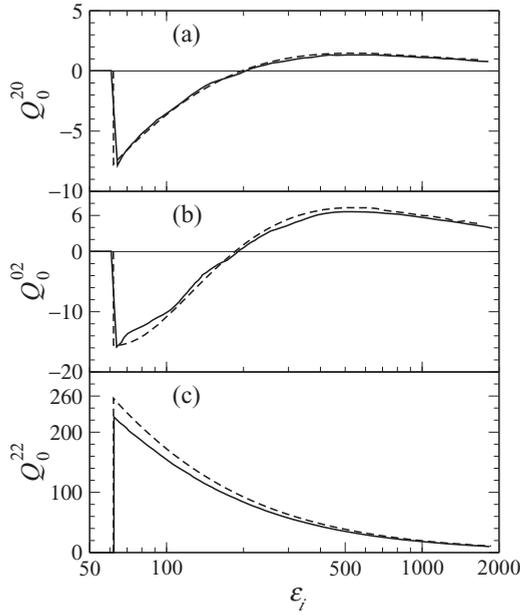


FIG. 2. Comparison of the multipole cross sections between present results (dashed curves) and those of Ref. [23] (solid curves); (a) Q_0^{20} , (b) Q_0^{02} , and (c) Q_0^{22} versus ε_i for $2s2p^3P_2 \rightarrow 2s3p^3P_2$ in O^{4+} . Q 's are in units of 10^{-20} cm^2 and ε_i in eV.

of Ω_0^{00} and Ω_0^{20} in Table I and those of Ω_0^{40} in Table II. One observes that the flux $n_e |C_0^{K0} \rho_0^K|$ ($K = 2, 4$) from the alignment of the initial metastable level to population of final level is negligibly small compared to the population-transfer flux $n_e C_0^{00} \rho_0^0$. This is because the ratio $C_0^{00}/|C_0^{K0}|$ is found to be greater than 5 and, as mentioned previously, $\rho_0^0/|\rho_0^K| \gg 1$.

Obviously, to validate the present extension of the RDW program of FAC, one needs to confront all the calculated $\Omega_Q^{KK'}$ data with computational modeling from independent sources. To the best of our knowledge, the only published calculations of $\Omega_Q^{KK'}$ (or $\sigma_{Q \neq 0}^{KK'}$) so far dealt with impact excitation of neutral atoms [7], employing the convergent close-coupling method. Unfortunately, we cannot use these calculations to test the validity of the modified RDW program because it is applicable only to ionized atoms, with a higher accuracy as the degree of ionization increases. Nevertheless, there is a possibility to check its consistency in the case of $\sigma_{Q=0}^{KK'}$ by resorting to the work of Iwamae *et al.* [23]. These authors used the nonunitarized RDW program of Zhang *et al.* [2], without having recourse to the factorization method as in FAC, to calculate the magnetic-sublevel cross sections from which they deduced the multipole cross sections denoted Q_0^{20} , Q_0^{02} , and Q_0^{22} . In Ref. [23], plots of Q_0^{20} , Q_0^{02} and Q_0^{22} versus ε_i were reported for the excitation $2s2p^3P_2 \rightarrow 2s3p^3P_2$ in O^{4+} , where a direct relationship exists with our multipole cross sections, namely, $Q_0^{20} \equiv \sigma_0^{02}/\sqrt{5}$, $Q_0^{02} \equiv \sqrt{5}\sigma_0^{20}$ and $Q_0^{22} \equiv \sigma_0^{22}$. In Fig. 2, we reproduce these plots together with our calculations, keeping the wide range of the incident electron energy ε_i adopted in Ref. [23] deliberately to make the comparison more reliable. A good agreement is observed both qualitatively since the two series of curves show similar trends, and quantitatively since the numerical values are quite close with differences not exceeding 12%.

However, it was reported in Ref. [23] that the theoretical calculations showed a strong discrepancy with tokamak experiments. The authors invoked some possible reasons for the failure of their theoretical model to describe the experimental data correctly. We agree with the fact that disregarding the contributions of resonances to the multipole rate coefficients and omitting the latter for elastic electron-ion collisions in solving the PACR rate equations can generate substantial inaccuracies in the calculations. But, in our opinion, the impact of alignment creation from the other triplet levels (for example, $2p^2^3P_{0,1,2}$) is weak, thus it is not expected to improve the agreement with the experiments. We think that collisional depopulation of all triplet levels other than $2s2p^3P_{0,1,2}$ should be quite negligible for electron densities in the WT-3 tokamak (below 10^{13} cm^{-3}), because of their very short radiative decay times (about 10^{-9} s). Besides these arguments, there may be other ones that could be invoked to improve the agreement with experiments. For example, one should take into account the coherence-transfer cross sections $\sigma_{Q=1,2}^{22}$ in determining the alignment-transfer rate coefficients C_0^{22} , and also incorporate the multipole rate coefficients with K and/or $K' = 4$ in the GPACR model. We mentioned in Sec. IV that the present calculated data can be applied to solve the GPACR rate equations to evaluate precisely the population ρ_0^0 and alignments ρ_0^K ($K = 2, 4, \dots$) of levels. These are needed in the interpretation of intensity and polarization of lines emitted from plasmas with an anisotropic electron velocity distribution. Such an application could bring a new insight to the origin of the large difference between theory and experiments [23] and will be the subject of a future work.

V. SUMMARY AND PROSPECTS

An expression of the multipole cross section $\sigma_Q^{KK'}$ for the excitation of ions by an electron beam is derived in the factorized form of the RDW approach. The program of the FAC package, originally designed for the calculation of excitation cross sections between magnetic sublevels, has been extended to allow calculations of $\sigma_Q^{KK'}$ for all possible combinations of K , K' , and Q including $Q \neq 0$. These kind of data are required to construct the GPACR model dedicated to the analysis of polarized line emissions from plasmas with an arbitrary, cylindrically symmetric electron velocity distribution. Particular attention is given to the coherence-transfer cross sections $\sigma_{Q \neq 0}^{KK'}$ needed in determining the alignment-transfer rate coefficients $C_0^{KK'}$ for the plasmas indicated above.

To illustrate this modified RDW program of FAC, detailed numerical results are compiled in terms of multipole collision strengths $\Omega_Q^{KK'}$ for selected excitations of O^{4+} from the metastable $2s2p^3P_{1,2}$ to $2s3p^3P_{1,2}$ and $2s3d^3D_{2,3}$ levels. Such excitations are relevant to the solar atmosphere and magnetic fusion plasmas in which electron beams, with anisotropic velocity distributions, form under certain conditions. The results are analyzed to identify the general trends and major physical processes involved in the selected transitions. We display the results proceeding progressively from the $K; K' = 0, 2$ cases where all the six transitions are concerned (Table I) to $K = 0, 2, 4; K' = 6$ where only one transition occurs (Table III). In this way, we are able to highlight the impact of the relevant parameters that

characterize initial and final atomic levels, assessing a subtle interplay between alignment-transfer and alignment-creation fluxes. Invoking some qualitative arguments, without knowing precisely the state multipoles ρ_0^K , we are able to draw conclusions on the relative importance of the components $\Omega_Q^{KK'}$, and define the conditions under which the $L = 0$ term dominates and those where the $L \geq 2$ allowed contributions are significant. For example, Ω_Q^{22} for $2s2p^3P_1 \rightarrow 2s3p^3P_1$ and $2s2p^3P_2 \rightarrow 2s3p^3P_2$, as well as Ω_Q^{44} for the second transition, are insensitive to Q and essentially determined by the $L = 0$ isotropic terms. For the transitions $2s2p^3P_1 \rightarrow 2s3p^3P_2$ and $2s2p^3P_2 \rightarrow 2s3p^3P_1$, some sensitivity of Ω_Q^{22} to Q is found implying that contributions from the $L = 2, 4$ terms should be taken into account.

For the $\Delta J = 0$ transitions, the transfer of alignment might compete with the creation of alignment, even if the initial metastable levels have a low degree of alignment. Depending on the electron energy, such a competition may lead to enhancement or reduction of the state multipole ρ_0^K of the final levels ($K = 2$ for $2s3p^3P_1$; $K = 2, 4$ for $2s3p^3P_2$). For the optically allowed transitions $2s2p^3P_1 \rightarrow 2s3d^3D_2$ and $2s2p^3P_2 \rightarrow 2s3d^3D_3$, the alignment of the final levels is characterized essentially by ρ_0^2 since $\rho_0^2 \gg \rho_0^4$ and for $2s3d^3D_3$, $\rho_0^2 \gg \rho_0^6$. The overwhelming parameter ρ_0^2 is governed by the alignment-creation fluxes, the transfer of alignment being negligible. On the other hand, the values of Ω_0^{00} and Ω_0^{K0} ($K = 2, 4$) show that the population of final levels from alignment of initial levels is negligibly small compared to transfer of population.

The indepth analysis made in Sec. IV offers a thorough picture of the present extended RDW program of FAC yielding systematically consistent numerical results. To check this, we compared our calculations of σ_0^{02} , σ_0^{20} , and σ_0^{22} with those reported in Ref. [23] for the excitation $2s2p^3P_2 \rightarrow 2s3p^3P_2$ and observed a good agreement. We made suggestions on the possible sources of discrepancy with the WT-3 tokamak experiments mentioned in Ref. [23], and presented alternative ways for more accurate theoretical calculations that could possibly improve the agreement with experimental data. We do hope that more theoretical calculations of $\sigma_Q^{KK'}$ including

$Q \neq 0$ will be available in the near future to allow a more extended comparison with our results. It is important to underline that the present modified version of the RDW program paves the way for computations of a large amount of multipole cross-section data serving in spectroscopic applications of anisotropic hot plasmas. The computations are made easier owing to a considerable saving time due to the factorization-interpolation method of Bar-Shalom *et al.* [15] implemented in FAC.

In this paper we present only a selection of results for optically allowed transitions and spin-allowed forbidden transitions. We postpone the investigation of spin-changing transitions that occur through exchange to the near future. The $\Omega_Q^{KK'}$ for such transitions are likely to be more sensitive to the approximations used, but this remains to be confirmed. We also intend to calculate the state multipoles of O^{4+} levels by solving the GPACR model rate equations. Such state multipoles would enable us to obtain the intensity angular distribution and polarization of the lines emitted from the upper levels $2s3p^3P_{1,2}$ and $2s3d^3D_{2,3}$ as functions of the electron beam energy and density. Then, we should be able to reach a deeper insight on the interplay between alignment-creation and alignment-transfer fluxes for different excitations to the same final level. This would also shed light on the sources of positive or negative alignments and the possible cancellations between them.

ACKNOWLEDGMENTS

We thank the referees for interesting comments and useful suggestions. We also wish to thank Dr. Ming Feng Gu from the University of California, Berkeley, USA, for helpful advice relating to the RDW excitation program of FAC. M.K.I. gratefully acknowledges fruitful collaboration with Dr. George Csanak (formerly from the Los Alamos National Laboratory, USA) on some theoretical aspects of multipole cross sections during the period 2012–2017. This work was performed within the PRFU Project No B00L02UN130120180004 of the Ministry of Higher Education and Scientific Research, Algeria.

-
- [1] M. K. Inal and J. Dubau, *J. Phys. B* **20**, 4221 (1987).
 - [2] H. L. Zhang, D. H. Sampson, and R. E. H. Clark, *Phys. Rev. A* **41**, 198 (1990).
 - [3] P. Beiersdorfer, D. A. Vogel, K. J. Reed, V. Decaux, J. H. Scofield, K. Widmann, G. Hölzer, E. Förster, O. Wehrhan, D. W. Savin, and L. Schweikhard, *Phys. Rev. A* **53**, 3974 (1996).
 - [4] S. W. Rachedi, M. K. Inal, and J. Dubau, *J. Phys. B* **38**, 547 (2005).
 - [5] K. L. Wong, P. Beiersdorfer, K. J. Reed, and D. A. Vogel, *Phys. Rev. A* **51**, 1214 (1995).
 - [6] T. Fujimoto and S. A. Kazantsev, *Plasma Phys. Control. Fusion* **39**, 1267 (1997).
 - [7] G. Csanak, D. P. Kilcrease, D. V. Fursa, and I. Bray, *Phys. Rev. A* **78**, 062716 (2008).
 - [8] T. Fujimoto, *Plasma Polarization Spectroscopy*, edited by T. Fujimoto and A. Iwamae, Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics, (Springer, Berlin, 2008), Chap. 4.
 - [9] J. Dubau, in *Proceedings of the Japan-US Workshop on Plasma Polarization Spectroscopy and The International Seminar on Plasma Polarization Spectroscopy*, edited by T. Fujimoto and P. Beiersdorfer, National Institute for Fusion Science Report No. NIFS-PROC-37 (1998), p. 9.
 - [10] G. Csanak, C. J. Fontes, P. Hakel, and D. P. Kilcrease, *J. Phys. B* **44**, 215701 (2011).
 - [11] M. S. Bentotoche, M. K. Inal, and M. Benmouna, *X-Ray Spectrom.* **49**, 65 (2020).
 - [12] L. Belluzzi, E. Landi Degl’Innocenti, and J. Trujillo Bueno, *Astron. Astrophys.* **551**, 84 (2013).
 - [13] M. Derouich, A. Alruhaili, and Badruddin, *New Astron.* **71**, 52 (2019).
 - [14] M. F. Gu, *Can. J. Phys.* **86**, 675 (2008).
 - [15] A. Bar-Shalom, M. Klapisch, and J. Oreg, *Phys. Rev. A* **38**, 1773 (1988).
 - [16] K. G. Widing, J. G. Doyle, P. L. Dufton, and A. E. Kingston, *Astrophys. J.* **257**, 913 (1982).

- [17] F. P. Keenan, P. L. Dufton, L. K. Harra, E. S. Conlon, K. A. Berrington, A. E. Kingston, and K. G. Widing, *Astrophys. J.* **382**, 349 (1991).
- [18] P. R. Young *et al.*, *Publ. Astron. Soc. Japan* **59**, S857 (2007).
- [19] D. R. Graham, L. Fletcher, and N. Labrosse, *Astron. Astrophys.* **584**, A6 (2015).
- [20] L. K. Huang, S. Lippmann, B. C. Stratton, H. W. Moos, and M. Finkenthal, *Phys. Rev. A* **37**, 3927 (1988).
- [21] T. Fujimoto, H. Sahara, T. Kawachi, T. Kallstenius, M. Goto, H. Kawase, T. Furukubo, T. Maekawa, and Y. Terumichi, *Phys. Rev. E* **54**, R2240 (1996).
- [22] K. Ikeda, Y. Nagayama, T. Itoh, E. Kawamori, Y. Okamoto, T. Tamano, N. Yamaguchi, K. Yatsu, and M. Yoshikawa, *Rev. Sci. Instrum.* **70**, 332 (1999).
- [23] A. Iwamae, A. Tanaka, T. Inoue, T. Fujimoto, H. L. Zhang, D. P. Kilcrease, and G. Csanak, in *Proceedings of the Third US-Japan Plasma Polarization Spectroscopy Workshop*, edited by P. Beiersdorfer and T. Fujimoto, University of California Lawrence Livermore National Laboratory Report No. UCRL-ID-146907 (2001), p. 165.
- [24] G. Csanak, C. J. Fontes, M. K. Inal, and D. P. Kilcrease, *J. Phys. B* **45**, 105202 (2012).
- [25] D. H. Sampson, H. L. Zhang, and C. J. Fontes, *Phys. Rep.* **477**, 111 (2009).
- [26] G. Csanak, C. J. Fontes, M. K. Inal, and D. P. Kilcrease, *J. Phys. B* **46**, 085202 (2013).
- [27] A. Messiah, *Mécanique Quantique* (Dunod, Paris, 1972), Vol. 2.
- [28] K. Blum, *Density Matrix Theory and Applications* (Plenum, New York, 1981).
- [29] J. G. Doyle, P. L. Dufton, F. P. Keenan, and A. E. Kingston, *Sol. Phys.* **89**, 243 (1983).
- [30] G. A. Doschek, U. Feldman, J. M. Laming, H. P. Warren, U. Schühle, and K. Wilhelm, *Astrophys. J.* **507**, 991 (1998).
- [31] S. W. Rachedi, M. K. Inal, and M. Benmouna, *J. Phys. B* **53**, 185701 (2020).
- [32] F. P. Keenan, K. A. Berrington, P. G. Burke, A. E. Kingston, and P. L. Dufton, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **207**, 459 (1984).
- [33] T. Fujimoto and M. Nakai, in *Proceedings of the International Seminar on Atomic Processes in Plasmas*, edited by T. Kato and I. Murakami, National Institute for Fusion Science Report No. NIFS-PROC-44 (2000), p. 77.

Résumé

Une expression des composantes multipolaires de sections efficaces d'excitation d'ions par impact d'électrons directifs a été établie pour la première fois dans le cadre de l'approche de l'onde distordue relativiste, en prenant en compte la cohérence entre les sous-niveaux magnétiques. Ces sections efficaces sont requises dans l'interprétation des raies émises à partir des plasmas chauds non-thermiques dont les électrons libres sont caractérisés par des distributions de vitesses ayant une symétrie cylindrique. Afin d'évaluer numériquement ces données collisionnelles, nous avons apporté des modifications au programme d'excitation entre sous-niveaux magnétiques de FAC (Flexible Atomic Code). Des calculs détaillés ont été effectués pour les transitions dans l'ion bérylliumoïde O^{4+} à partir des niveaux fondamentaux $2s^2 \ ^1S_0$ et métastables $2s2p \ ^3P_{0,1,2}$. Une série de résultats pour les transitions à partir des niveaux $2s2p \ ^3P_{1,2}$ vers $2s3p \ ^3P_{1,2}$ et $2s3d \ ^3D_{2,3}$, qui présentent un grand intérêt pour les plasmas de l'atmosphère solaire et de tokamak, est présentée dans cette thèse afin d'illustrer l'application du programme modifié proposé ici. Une analyse approfondie des résultats numériques et une comparaison préliminaire avec les données disponibles dans la littérature ont fourni une cohérence systématique du programme modifié, ouvrant la voie au calcul d'une grande quantité de données de sections efficaces multipolaires avec un gain de temps considérable.

Mots clés: composantes multipolaires de sections efficaces; ion bérylliumoïde O^{4+} ; onde distordue; plasmas chauds anisotropes; distribution d'électrons axialement symétrique.

Abstract

An expression for the multipole components of cross sections for excitation of ions by impact with directive electrons has been derived for the first time within the framework of the relativistic distorted Wave approach, taking into account the coherence between the magnetic sublevels. These cross sections are needed in the interpretation of lines emitted from non-thermal hot plasmas whose free electrons are characterized by velocity distributions having cylindrical symmetry. In order to compute this collisional data, we introduced modifications in the magnetic-sublevel excitation program of the flexible atomic code (FAC). Detailed calculations were carried out for transitions in the beryllium-like ion O^{4+} from the ground $2s^2 \ ^1S_0$ and metastable $2s2p \ ^3P_{0,1,2}$ levels. Various results for transitions from $2s2p \ ^3P_{1,2}$ to $2s3p \ ^3P_{1,2}$ and $2s3d \ ^3D_{2,3}$ levels, which have a great interest in the solar atmosphere and tokamak plasmas, are presented in this thesis to illustrate the application of the modified program proposed here. An in-depth analysis of the numerical results and a preliminary comparison with the data available in the literature allowed a systematic consistency of the modified program, paving the way for the calculations of a large amount of multipole excitation cross-section data with a considerable saving of time.

Key words: multipole components of excitation cross sections; beryllium-like ion O^{4+} ; distorted-wave; anisotropic hot plasmas; cylindrical symmetric electron distribution.

ملخص

تم إنشاء تعبير عن المكونات متعددة الأقطاب للمقاطع العرضية لإثارة الأيونات بتأثير الإلكترونات لأول مرة في إطار نهج الموجة المشوهة النسبية مع مراعاة التماسك بين المستويات الفرعية المغناطيسية. إن هذه المقاطع العرضية مطلوبة في تفسير الخطوط المنبعثة من البلازما الساخنة غير الحرارية التي تتميز إلكتروناتها الحرة بتوزيعات السرعة التي لها تناظر اسطواني. من أجل تقييم هذه المكونات عددياً، أدخلنا تعديلات على برنامج إثارة المغناطيسي ذي المستوى الفرعي للشفرة الدرية المرنة تم إجراء حسابات مفصلة للانتقالات في أيون البر ليوم من المستوى الأساسي والمستويات الغير مستقرة. تم إجراء عدة حسابات لانتقال ضمن الانتقالات عبر المستويات، والتي لها اهتمام كبير في بلازما الغلاف الجوف و التوكاماك. لقد أتاح التحليل المعمق لهذه النتائج العددية و المقارنة الأولية مع البيانات المتاحة الاتساق المنهجي للبرنامج المعدل مما مهد الطريق لحساب كمية كبيرة من المقاطع العرضية متعددة الأقطاب لمختلف الانتقالات بين مستويات الأيون مع توفير الوقت.

الكلمات المفتاحية: المكونات متعددة الأقطاب للمقاطع العرضية المثارة؛ أيون البر ليوم؛ الموجة المشوهة؛ البلازمية الساخنة الغير تناظرية؛ توزيعات الإلكترونات التناظرية الاسطوانية.

