



N° d'ordre : 9765

# THÈSE

Présentée pour obtenir le grade de

**DOCTEUR EN SCIENCES DE L'UNIVERSITÉ PARIS-SUD 11**

Spécialité : Physique

Par

**Nouha EL HASSAN**

Sujet :

**Étude des processus de photoexcitation et de photoionisation dans les ions multichargés**

soutenue le 27 Janvier 2010 devant la commission d'examen composée de :

M. Joël Arianer	Examineur
M. Azzedine Bennani	Président
M. Jean-Marc Bizau	Directeur de thèse
M. Christophe Blancard	Examineur
M. Francis Penent	Rapporteur
M. John West	Rapporteur

Thèse préparée au sein du **Laboratoire d'Interaction du rayonnement X Avec la Matière**



## Résumé

### **Etude des processus de photoexcitation et de photoionisation dans les ions multichargés**

Dans ce travail de thèse nous avons étudié les processus de photoionisation dans les ions multichargés. Les sections efficaces absolues de photoionisation d'ions de la série isonucléaire du fer ( $\text{Fe}^{2+}$  -  $\text{Fe}^{6+}$ ) ont été mesurées sur une gamme d'énergies de photon allant de 20 à 160 eV.

La technique utilisée consiste à mélanger colinéairement un faisceau d'ions produit dans une source à résonance cyclotronique électronique (RCE), avec un faisceau de rayonnement synchrotron. Le montage expérimental et la procédure utilisée pour effectuer nos mesures sont décrits dans la première partie de ce manuscrit. Les résultats obtenus sont ensuite présentés et comparés aux résultats de trois modèles différents : le modèle à électrons indépendants, le modèle MCDF et le modèle de la matrice R. D'une manière générale, cette comparaison a mis en évidence l'échec des modèles existants à décrire l'effet des excitations en couche interne 3p-3d, responsables de structures intenses dans les spectres de photoionisation. Suite à nos mesures, ces effets ont pu être modélisés correctement dans le cas de l'ion  $\text{Fe}^{4+}$ .

Une des difficultés des expériences en faisceaux colinéaires résulte de la mauvaise émittance des sources RCE, rendant difficile l'obtention d'un bon recouvrement entre les faisceaux d'ions et de photons. Dans le but d'optimiser l'émittance de la source RCE installée sur le nouveau montage expérimental MAIA sur la ligne de lumière PLEIADES de SOLEIL, nous avons également modélisé l'extraction du faisceau d'ions à la sortie de la source et son transport jusqu'au point focal du séparateur. Les résultats de ces simulations, comparés aux mesures qui vont être réalisées avec le montage, permettront d'optimiser la position des optiques ioniques et d'obtenir dans la zone d'interaction les courants ioniques élevés nécessaires aux nouvelles techniques qui vont être développées sur ce montage, les spectroscopies d'électrons et de fluorescence.

**Mots clés :** Photoionisation, Section efficace, Rayonnement synchrotron, Fer, Source d'ion à résonance cyclotronique électronique, Faisceau de transitions non résolues, Matrice R, MCDF



## Abstract

### **Study of photoexcitation and photoionisation processes for multi-charged ions**

In this thesis we have studied the photoionisation processes for multi-charged ions. Absolute photoionisation cross sections were measured along the isonuclear series of iron ( $\text{Fe}^{2+}$  -  $\text{Fe}^{6+}$ ) over the 30 – 160 eV photon energy range.

The technique used consists in merging collinearly an ion beam produced in an electron cyclotron resonance ion source (ECR) with a synchrotron radiation beam. First, we describe the experimental setup and the procedure used to extract the absolute photoionisation cross sections from our measurements. Then we present the results obtained on iron ions and their comparison to the predictions of three different models: independent electrons model, MCDF and R matrix calculations. In general, this comparison has demonstrated the failure of the models to describe the effects of 3p - 3d excitations, producing strong structures in the photoionisation spectra. Following our results, a good agreement was achieved in the case of  $\text{Fe}^{4+}$  ion.

One difficulty of the merged beam experiments is due to the bad emittance of the ECR ion sources, making it difficult to achieve a good overlap between the ion beam and the photon beam. In order to optimize the emittance of the ECR ion source that will be used on the new setup MAIA installed on the PLEIADES beam line of SOLEIL, we have modelled the extraction of the ion beam from the source as well as the transport of the ion beam up to the focal point of the separator. These results will help obtaining the high ion currents necessary for the development of new techniques on the MAIA setup, the electron and fluorescence spectrometries.

**Key words:** Photoionisation, Cross section, Synchrotron radiation, Iron, Electron cyclotron resonance ion source, Unresolved transition array, R-matrix, MCDF



*A mon père, à ma mère  
Grâce à vous je suis arrivée là, merci !*



## *Remerciements*

Tout d'abord, j'exprime ma chaleureuse reconnaissance à M. Jean-Marc Bizau d'avoir dirigé cette thèse. Aujourd'hui, lorsque je repense à ces quatre dernières années passées dans la recherche sous ta direction, je réalise à quel point cette expérience fut enrichissante tant sur le plan scientifique que sur le plan humain.

Je tiens à remercier M. Alain Huetz, directeur du LIXAM, pour m'avoir accueillie dans son laboratoire.

J'exprime ma plus profonde gratitude à M. Joël Arianer pour m'avoir guidée dans la partie « Simulations » et fourni les programmes que j'ai utilisés. J'aurais mis des années pour apprendre ce que vous m'avez appris en quelques mois dans le domaine de l'optique et du transport des faisceaux. Merci Joël d'avoir aussi accepté de participer à mon jury de soutenance.

Je tiens à exprimer mes remerciements à Denis Cubaynes pour son investissement dans ce travail et surtout pour sa participation fructueuse aux expériences. Merci aussi pour les discussions intéressantes et tes aides tout au long de ma thèse.

Mes vifs remerciements sont adressés à M. Azzedine Bennani d'avoir non seulement accepté d'être dans mon jury, d'en être son président, mais aussi pour tes conseils et ton support. Je suis pleine d'admiration pour tes profondes connaissances et ta sympathie.

Je tiens à remercier M. Christophe Blancard pour sa collaboration et bien sûr pour avoir accepté d'examiner mes travaux.

J'exprime mes profonds remerciements à MM. Francis Penent et John West pour avoir accepté la tâche de rapporteur.

Les expériences de photoionisation au Danemark n'ont pas pu se faire sans la contribution de M. Finn Folkmann. Merci pour votre disponibilité et votre participation.

Je souhaiterais aussi remercier tout le personnel du LIXAM, sans qui cette thèse n'aurait pas pu voir le jour et grâce à qui cette expérience fut très enrichissante. Merci à Eric Bouisset, Michael Meyer, Gérard Nicolas, Sylvie Apruzesse...

Merci Adnan et Farah pour les moments agréables passés ensemble à Orsay.

Inas et Ahmad: vous étiez toujours une source d'inspiration et d'encouragement pour moi. Je vous adresse aujourd'hui mes profondes reconnaissances.

Je souhaiterais bien sûr remercier toute ma famille pour leur éternel soutien : mes parents, mes sœurs Sarah et Jana, mais aussi et surtout Khaled, qui a su me tendre l'oreille et être là pour moi quand j'en avais le plus besoin

Un dernier merci à ma source de bonheur Julie-Wafa qui a rendu la dernière année de ma thèse difficile mais très agréable...

Merci à tous !



# Table des Matières

<b>CHAPITRE 1: INTRODUCTION GENERALE</b> .....	<b>3</b>
<b>BIBLIOGRAPHIE</b> .....	<b>10</b>
<b>CHAPITRE 2: MONTAGE EXPÉRIMENTAL</b> .....	<b>11</b>
<b>2.1 TECHNIQUE DES FAISCEAUX COLINEAIRES</b> .....	<b>11</b>
<b>2.2 DESCRIPTION DU MONTAGE EXPERIMENTAL D'ASTRID</b> .....	<b>12</b>
2.2.1 PHOTONS.....	13
2.2.1.1 Rayonnement synchrotron.....	13
2.2.1.2 Ligne de lumière Miyake.....	14
2.2.1.3 Cellule à gaz.....	16
2.2.2 IONS.....	18
2.2.2.1 Source à Résonance Cyclotronique Electronique (RCE).....	18
2.2.2.2 Production des ions de fer.....	21
2.2.2.3 Extraction des ions.....	24
2.2.2.4 Sélection des ions (aimant dipolaire).....	24
2.2.2.5 Transport des ions.....	25
2.2.3 ZONE D'INTERACTION PHOTONS-IONS.....	26
2.2.4 DETECTION DES PHOTOIONS.....	28
<b>2.3 PROCEDURE EXPERIMENTALE</b> .....	<b>29</b>
2.3.1 NOTION DE SECTION EFFICACE.....	30
2.3.2 DETERMINATION DE LA SECTION EFFICACE EXPERIMENTALE DE PHOTOIONISATION.....	31
2.3.3 VALIDATION DE LA PROCEDURE EXPERIMENTALE SUR LE CAS DE L'ION $He^+$ .....	35
<b>BIBLIOGRAPHIE</b> .....	<b>37</b>
<b>CHAPITRE 3: ETUDE DE LA SERIE ISONUCLEAIRE DU FER</b> .....	<b>39</b>
<b>3.1 INTRODUCTION</b> .....	<b>39</b>
<b>3.2 RESULTATS</b> .....	<b>40</b>
<b>3.3 COMPARAISON DE NOS RESULTATS EXPERIMENTAUX AVEC LES RESULTATS DES MODELES</b> .....	<b>52</b>
3.3.1 MODELES A ELECTRONS INDEPENDANTS.....	52
3.3.2 CALCULS MCDF (CODE OPAS).....	55
3.3.3 CALCULS DE LA MATRICE-R.....	61
3.3.4 COMPARAISON AVEC D'AUTRES RESULTATS EXPERIMENTAUX.....	71
3.3.5 CONCLUSION.....	73
<b>BIBLIOGRAPHIE</b> .....	<b>76</b>
<b>CHAPITRE 4: ETUDE DE L'EXTRACTION DES IONS A LA SORTIE DE LA SOURCE RCE ET DU TRANSPORT DU FAISCEAU D'IONS</b> .....	<b>77</b>
<b>4.1 INTRODUCTION</b> .....	<b>77</b>
<b>4.2 CHOIX DU LOGICIEL DES SIMULATIONS D'EXTRACTION</b> .....	<b>78</b>
<b>4.3 GEOMETRIE DU SYSTEME D'EXTRACTION</b> .....	<b>79</b>

<b>4.4 ETUDE DE L'EXTRACTION DU FAISCEAU D'IONS.....</b>	<b>81</b>
4.4.1 RESULTATS .....	81
4.4.2 ETUDE DE L'EFFET DE LA CHARGE D'ESPACE .....	83
4.4.3 EFFET DE LA TEMPERATURE DU PLASMA .....	84
<b>4.5 ETUDE DU TRANSPORT DU FAISCEAU D'ION JUSQU'A L'AIMANT .....</b>	<b>85</b>
<b>4.6 CONCLUSION.....</b>	<b>91</b>
<b>BIBLIOGRAPHIE.....</b>	<b>92</b>
<b>CHAPITRE 5: CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES.....</b>	<b>93</b>
<b>ANNEXES .....</b>	<b>97</b>

# Chapitre 1: Introduction générale

La majeure partie de la matière visible de l'univers est présente sous forme de plasma, un mélange d'ions et d'électrons en interaction avec le rayonnement électromagnétique. Ainsi, la connaissance des processus d'interaction ion-photon est primordiale pour la compréhension non seulement des observations astrophysiques, mais également des plasmas de laboratoire comme les plasmas produits par laser ou les plasmas de fusion. Par exemple, la détermination de l'opacité d'un plasma passe par la connaissance des sections efficaces de photoionisation et de son processus inverse par renversement du sens du temps, la recombinaison radiative, pour tous les ions présents dans le plasma. Le transport de l'énergie dans les plasmas denses et chauds comme les intérieurs stellaires est principalement gouverné par la photoabsorption par les ions du plasma, processus qui a une intensité maximale dans la gamme d'énergie XUV des photons. Le fer est l'élément le plus lourd formé par nucléosynthèse dans les étoiles, et possède ainsi une abondance cosmique élevée, comme on le voit sur la figure 1.1 qui donne les abondances des éléments légers dans le Système Solaire [Suess et Urey 1956]. Dans les étoiles, et en particulier le Soleil, ce sont les ions de fer qui contribuent essentiellement au transport de l'énergie du centre de l'étoile vers l'extérieur, les éléments légers ayant déjà perdu tout ou une grande partie de leurs électrons.

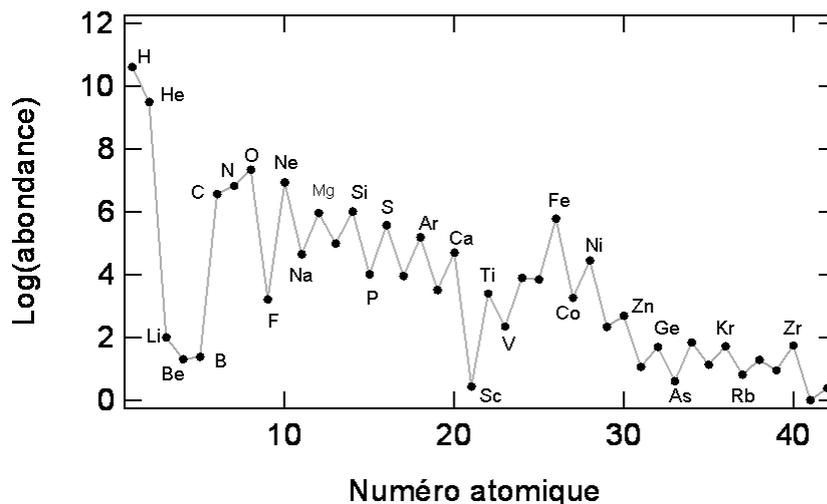
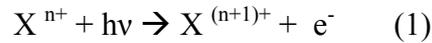


Figure 1.1 : Variation du logarithme des abondances des éléments légers dans le Système Solaire en fonction du numéro atomique. L'abondance du silicium est normalisée à  $10^6$  [Suess et Urey 1956]

Le travail présenté dans ce manuscrit porte sur l'étude expérimentale des processus de photoionisation dans les premiers ions de la série isonucléaire du fer ( $\text{Fe}^{2+}$  à  $\text{Fe}^{6+}$ ). Les processus de photoionisation peuvent globalement être schématisés par la relation générale :



signifiant qu'un photon d'énergie  $h\nu$  arrache un électron  $e^{-}$  à un ion X de charge n qui peut être laissé à l'état fondamental ou dans un état excité. Par commodité, on distingue souvent deux types de processus : la photoionisation directe et la photoionisation résonante. La figure 1.2 illustre comment ces processus peuvent être distingués sur une variation typique de section efficace de photoionisation tracée en fonction de l'énergie du photon.

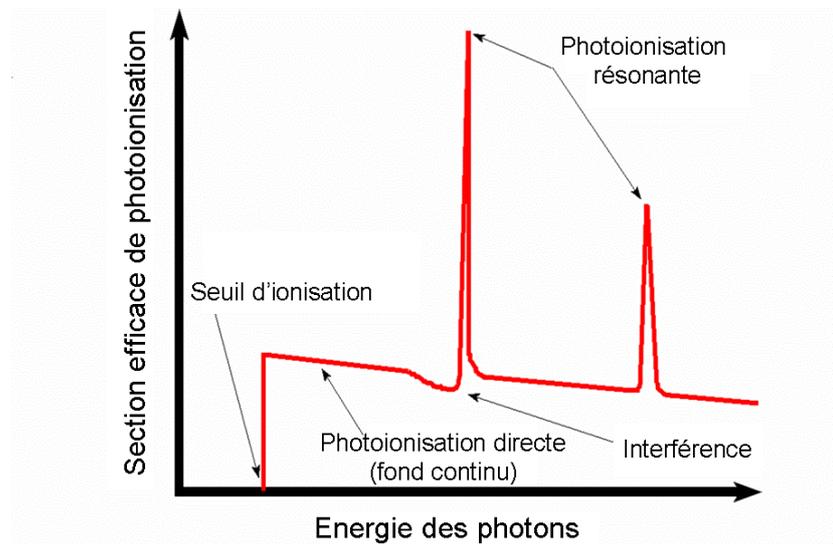
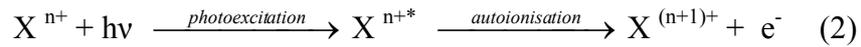


Figure 1.2 : Spectre typique de photoionisation

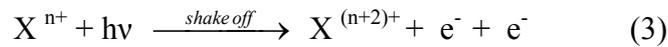
La photoionisation directe est responsable du fond continu, en général lentement décroissant, observé sur le spectre. Elle correspond à la transition directe d'un des électrons de l'ion vers un état du continuum. C'est un processus à seuil, qui n'est possible que si l'énergie du photon est supérieure à l'énergie de liaison de l'électron dans l'ion  $\text{X}^{n+}$ . Il est représenté schématiquement dans le cas de la photoionisation en sous couche 1s d'un atome de bore sur le panneau A de la figure 1.3.

La photoionisation résonante est un processus en deux étapes, photoexcitation et autoionisation, schématisée sur le panneau B de la figure 1.3 et représentée par la relation (2) :

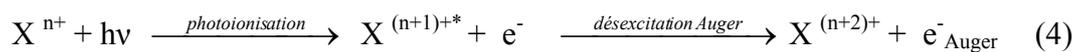


A certaines énergies de photon discrètes (on se limite ici aux énergies supérieures au premier seuil d'ionisation), le photon peut être absorbé par l'ion et transférer un ou plusieurs électrons vers des orbitales liées vacantes: c'est l'effet de photoexcitation, laissant l'ion dans un état excité  $X^{n+*}$  (fig. 1.3-B-a). Il est observé lorsque l'énergie de photon est égale à la différence des énergies de liaison des électrons dans les orbitales de départ et d'arrivée. L'ion est laissé dans un état très excité, souvent avec une lacune en couche interne. Si le mode privilégié de désexcitation est l'autoionisation: un électron externe vient combler la lacune interne, l'énergie libérée servant à émettre un électron vers le continuum. La photoionisation résonante est responsable des raies observées dans le spectre de la figure 1.2. Notons que les processus (1) et (2) ayant les mêmes états initial et final, ils peuvent interférer et produire des raies de forme asymétrique (profils de Fano) [Fano 1961].

Un autre effet des corrélations électroniques est la photoionisation multiple. Elle peut être directe ou résonante, soit par émission simultanée de deux électrons ou plus vers le continuum (processus « shake off », fig. 1.3-C-a) :



soit par désexcitation Auger (fig. 1.3-C-b) d'une lacune en couche interne créée suite à une photoionisation directe (1) ou une photoexcitation :



Un électron d'une couche plus externe vient combler la lacune de l'ion excité  $X^{(n+1)+*}$ , l'excès d'énergie ainsi dégagé servant à envoyer dans le continuum un second électron appelé « électron Auger ».

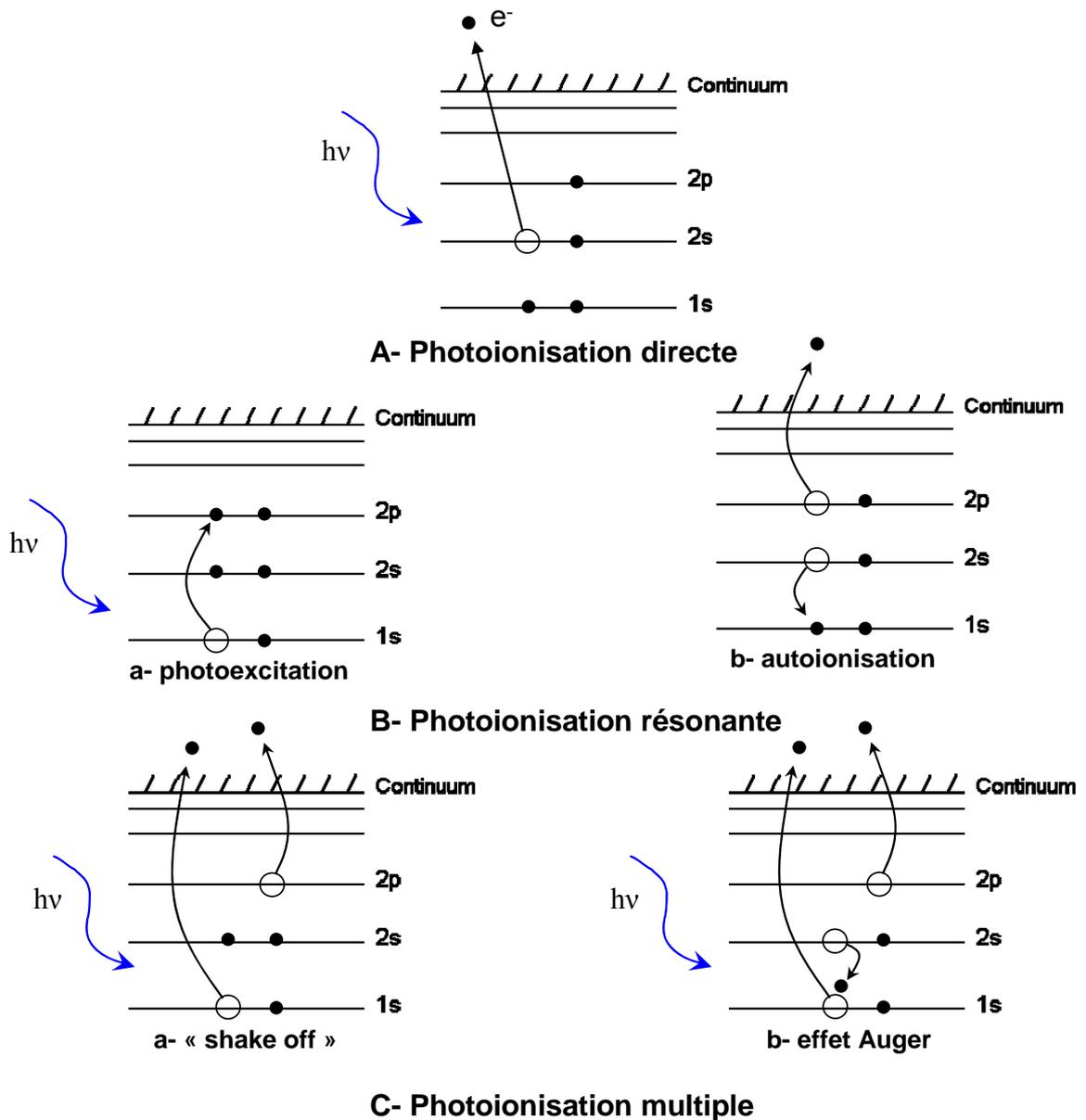


Figure 1.3: Illustration schématique des processus de photoionisation directe (A), photoionisation résonante (B) et photoionisation multiple (C) sur un schéma de niveaux de l'atome de bore.

Avant l'an 2000, les paramètres de la photoionisation pour les ions multichargés (énergies d'excitation, sections efficaces de photoionisation et recombinaison radiative, forces d'oscillateur des transitions...) étaient essentiellement connus grâce à des travaux théoriques, développés en particulier pour la modélisation des plasmas astrophysiques. Les premiers travaux ont reposé sur des modèles à électrons indépendants, dans lesquels l'effet des corrélations électroniques est considéré de façon globale par l'introduction d'un potentiel central d'écrantage de l'attraction nucléaire. Ces modèles ne peuvent décrire que le processus de photoionisation directe. [Reilman et Manson 1979, Verner et Yakovlev 1995]. Des modèles plus élaborés, permettant également de décrire les processus de photoionisation résonante, ont été développés par la suite. Parmi eux, les approches de type Hartree-Fock

multi-configurationnelle (MCDF) [Bruneau 1984] calculent séparément les sections efficaces de photoexcitation et de photoionisation directe, négligeant de ce fait le terme d'interférence entre ces deux voies. Le modèle de la matrice-R, qui permet de décrire l'effet d'interférence, a été également intensément utilisé, en particulier par des collaborations internationales telles que l'Opacity Project [Seaton 1987, Cunto et al. 1993] ou l'Iron Project [Hummer et al. 1993], mises en place pour la détermination de l'opacité des plasmas astrophysiques.

Le manque de données expérimentales était dû essentiellement à la difficulté de produire et de confiner des ions de charge bien définie aux densités élevées nécessaires pour compenser la faible intensité des sections efficaces de photoionisation. Ces mesures sont cependant indispensables pour tester la validité des résultats théoriques, et en particulier la validité des approximations faites par les modèles pour traiter les effets de corrélations électroniques. La première technique mise en œuvre pour étudier les différents processus de photoionisation dans les ions multichargés fut la photoabsorption, essentiellement dans des expériences de double plasmas produits par laser (DLPP) [Kennedy et al 2004]. Cette technique consiste à mesurer l'absorption par un plasma, produit par focalisation d'un laser pulsé intense sur une cible solide, des photons émis par un second plasma produit aussi par un laser, en fonction de l'énergie des photons. Cette méthode permet en particulier d'isoler une espèce ionique donnée dans des plasmas constitués d'ions légers et peu chargés, qui apparaissent à une distance de la cible solide et à un temps après l'impulsion laser bien séparés selon leur état de charge.

Dans les années 1980, la spectrométrie ionique a été développée à Daresbury dans des expériences en faisceaux colinéaires: un faisceau d'ions produits dans une source d'ions était mélangé à un faisceau de rayonnement synchrotron monochromatique, et le nombre d'ions ayant gagné une ou plusieurs charges dans l'interaction était mesuré en fonction de l'énergie des photons [Peart et al. 1987]. À l'aide de cette méthode, les sections efficaces de photoionisation simple et multiple peuvent être déterminées en valeur absolue. Suite au développement des onduleurs délivrant des faisceaux de photons de très faible divergence, avec des flux supérieurs de plusieurs ordres de grandeur à ceux émis par les aimants de courbure, cette technique s'est fortement développée dans les années 90, et de nouveaux montages sont apparus à ASTRID au Danemark [Kjeldsen et al. 1999], Super-ACO en France [Bizau et al. 2000, Champeaux 2003], ALS aux Etats-Unis [Covington et al. 2000], Photon Factory [Koizumi et al. 1996] et à Spring 8 au Japon [Oura et al. 2001]. Des revues détaillées des études expérimentales et théoriques sur les processus de photoionisation, en particulier par spectrométrie ionique, peuvent être trouvées dans [West 2001] et [Kjeldsen 2006].

Jusqu'à présent, la technique des faisceaux colinéaires a été la plus fructueuse pour étudier les processus de photoionisation dans les ions multichargés. Cependant, les états de charge étudiés n'ont pas dépassé 6 ou 7, et les plages d'énergie de photon explorées sont restées en-dessous de 300 eV. La raison principale de ces limitations est la faible densité d'ions dans la zone d'interaction. Une expérience récente couplant une source d'ions « EBIT » (Electron Beam Ion Trap) à différentes sources de photons (rayonnement synchrotron à BESSY II et Laser X à électrons libres FLASH à Hambourg) ouvre la voie à des études sur des états de charge plus élevés [Epp et al. 2007]. Une autre expérience en piège ionique (FT-ICR, Fourier Transform-Ion Cyclotron Resonance ion trap) [Thissen et al. 2008] a permis de mesurer récemment des sections efficaces de photoionisation pour des ions  $Xe^+$  entièrement relaxés dans l'état fondamental.

Dès 1991, l'équipe de J.-M. Bizau a démontré la faisabilité d'étudier la photoionisation d'espèce ionique par spectrométrie électronique [Bizau et al 1991]. Ce montage de faisceaux colinéaires, installé sur l'anneau de stockage Super-ACO d'Orsay et couplant une source d'ions avec un faisceau de rayonnement synchrotron issu d'un onduleur, permettait une analyse en énergie et en angle des électrons émis lors du processus de photoionisation à l'aide d'un spectromètre de type miroir cylindrique (CMA) [Al Mousallamani et al 1998]. Cette technique très performante donne accès à de nombreux paramètres des processus de photoionisation et permet d'identifier les sous-couches participant aux processus de photoionisation et de désexcitation non radiative des lacunes produites. Elle est cependant difficile à mettre en œuvre et est limitée à l'étude de processus de photoionisation résonante dans des ions de faible état de charge. Des expériences de coïncidence électron-ion pourraient cependant donner accès aux processus de photoionisation directe, comme il a été démontré par Richter et al. à Bessy I à Berlin [Richter et al. 1999].

Deux nouveaux montages expérimentaux sont actuellement en cours de construction, un par notre équipe dans le nouveau centre de rayonnement synchrotron français SOLEIL (expérience MAIA, Multi Analysis Ion Apparatus), et un sur PETRA III à Hambourg en Allemagne. Tous deux prévoient l'utilisation des spectrométries ionique et électronique.

Ce mémoire de thèse se compose de trois parties :

Dans la première partie, je décrirai les caractéristiques du dispositif expérimental installé sur l'anneau de stockage à électrons ASTRID de l'université d'Aarhus au Danemark, que nous avons utilisé pour nos mesures, ainsi que la procédure expérimentale utilisée pour

mesurer les sections efficaces de photoionisation en valeurs absolues. L'exemple de l'ion  $\text{He}^+$ , servant de test pour notre procédure expérimentale, sera présenté dans cette partie.

Les résultats obtenus sur les processus de photoionisation dans la série isonucléaire du fer seront présentés dans la deuxième partie. Les mesures expérimentales seront comparées aux résultats obtenus à l'aide de trois modèles différents : le modèle à électrons indépendants, le modèle MCDF et le modèle de la matrice-R.

Dans la troisième partie, je présenterai les résultats des simulations effectuées dans le but d'optimiser l'extraction des ions à la sortie de la source à résonance cyclotronique électronique (RCE) du dispositif MAIA.

## Bibliographie

- Al Mousallami S., thèse de doctorat, Université Paris Sud XI, (1998)  
Bautista M.A. and Pradhan A.K., *Astrophys. J.* 492, 650 (1998)  
Berrington K. A. et Ballance C., *J Phys B* 34, 2697 (2001)  
Bizau J. M. et al., *Phys. Rev. Lett.* 67, 576 (1991)  
Bizau J. M. et al., *Phys. Rev. Lett.* 84, 435 (2000)  
Bruneau J., *J. Phys. B* 17, 3009 (1984)  
Champeaux J.P., thèse de doctorat, Université Paris Sud XI, (2003)  
Covington A.M. et al., *Phys. Rev. Lett.* 87, 243002 (2000)  
Covington A.M. et al., *Phys.Rev.A* 66, 062710 (2002)  
Cunto W. et al., *Astron. Astrophys.* 275, L5 (1993)  
Epp S.W. et al., *Phys. Rev. Lett.* 98, 183001 (2007)  
Fano U., *Phys. Rev.* 124, 1866 (1961)  
Hummer D.G. et al., *Astron. Astrophys.* 279, 298 (1993)  
Kennedy E. T. et al., *Rad. Phys. Chem.* 70,291 (2004)  
Kjeldsen H. et al., *Astrophys. J.* 524, L143 (1999)  
Kjeldsen H., *J. Phys.B* 39, R325-R377 (2006)  
Koizumi T. et al. *J. Electron Spectroc. Relat. Phenom.* 79, 289 (1996)  
Oura et al., *Phys.Rev.A.* 63,014704 (2001)  
Peart B. et al., *J. Phys. B* 20,L673 (1987)  
Reilman R.F., Manson S.T., *Astrophys. J. Supl. Ser.* 40, 815 (1979)  
Richter et al., *Phys. Rev. Lett.* 82, 2068 (1999)  
Seaton M.J., *J. Phys. B* 20, 6363 (1987)  
Suess H. E. and Urey H. C., *Rev. Mod. Phys.* 28, 53(1956)  
Thissen R. et al., *Phys. Rev. Lett.* 100, 223001 (2008)  
Verner D.A., Yakovlev D.G., *Astron. Astrophys.* 109, 125 (1995)  
West J.B., *J. Phys. B* 34, R45–R91 (2001)

## Chapitre 2: Montage expérimental

### 2.1 Technique des faisceaux colinéaires

La technique des faisceaux colinéaires permet de mesurer en valeur absolue des sections efficaces de photoionisation aussi faibles que  $10^{-19}$  cm<sup>2</sup>, rendant possible l'étude d'un grand nombre d'ions simplement et multi-chargés sur un vaste domaine d'énergies de photon. Son principe consiste à mélanger colinéairement sur une distance aussi grande que possible un faisceau d'ions avec un faisceau de photons, généralement le rayonnement synchrotron issu d'un onduleur ou d'un aimant de courbure, et d'analyser la charge des ions après l'interaction avec les photons. Elle fut développée initialement pour des expériences d'impact électronique, et a été adaptée pour la première fois par Lyon et al. en 1986 [Lyon et al 1986] à Daresbury pour mesurer des sections efficaces de photoionisation d'ions monochargés produits par une source à décharge ou à ionisation de surface [Peart et al 1987]. Le développement des onduleurs dans les années 90 dans les centres de rayonnement synchrotron a apporté une forte augmentation du flux de photons disponible, ce qui a permis de construire de nouvelles expériences capables de mesurer des sections efficaces de photoionisation plus faibles et d'élargir le nombre des ions étudiés. L'expérience PISI (pour Photoionisation d'Ions pas Spectrométrie Ionique) montée par notre équipe sur l'anneau Super ACO du Laboratoire de l'Utilisation du Rayonnement Electromagnétique (LURE) d'Orsay a été la première à coupler une source d'ions multichargés RCE avec des photons issus d'un onduleur de cette machine [Bizau et al. 2000]. D'autres montages sont apparus pratiquement simultanément à l'ALS (Advanced Light Source) aux Etats-Unis [Covington et al. 2002], à la Photon Factory [Koizumi et al. 1996] et sur Spring 8 [Oura et al. 2001] au Japon, et à ASTRID au Danemark [Kjeldsen et al. 1999]. Cette dernière expérience, que j'ai utilisée pour réaliser les mesures absolues de sections efficaces de photoionisation dans la série isonucléaire du fer, sera décrite en détail dans la suite de ce chapitre.

Parallèlement à la réalisation de ces mesures, une nouvelle expérience a été conçue et construite au LIXAM par notre équipe. Elle est maintenant installée d'une façon permanente sur la ligne de lumière PLEIADES de l'anneau de stockage SOLEIL. Elle couple une source d'ions à résonance cyclotronique électronique au faisceau de rayonnement synchrotron de domaine spectral allant de 10 à 1000 eV, permettant en particulier d'étudier des états de charges élevés et des processus de photoionisation en couches plus profondes. Ce nouveau montage sera décrit brièvement dans la dernière partie de ce manuscrit.

## 2.2 Description du montage expérimental d'ASTRID

Une vue 3D du montage expérimental d'ASTRID est présentée sur la figure 2.1 [Kjeldsen et al. 2005]. C'est un montage classique en faisceaux colinéaires: un faisceau d'ions, produits dans une source et sélectionnés en charge et en masse, est mélangé à un faisceau de rayonnement synchrotron monochromatique, la charge des ions étant analysée après l'interaction. Dans un premier temps, je décrirai la source de photons utilisée, ainsi que la cellule à gaz servant à caractériser le faisceau de photons. Les techniques de production, de sélection et du transport du faisceau d'ions seront ensuite décrites. Les différents éléments d'optique ionique du dispositif sont schématisés figure 2.2. Dans la dernière partie de ce chapitre, je décrirai comment ce dispositif expérimental a été utilisé pour mesurer les sections efficaces absolues de photoionisation.

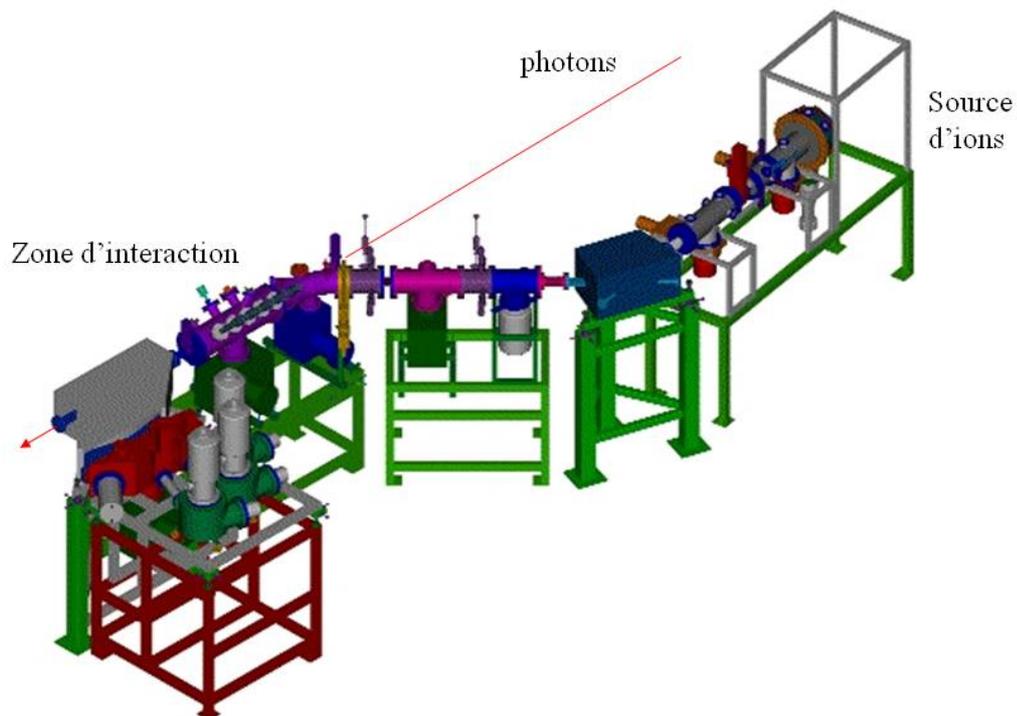


Figure 2.1 : Vue 3D du dispositif expérimental installé à ASTRID.

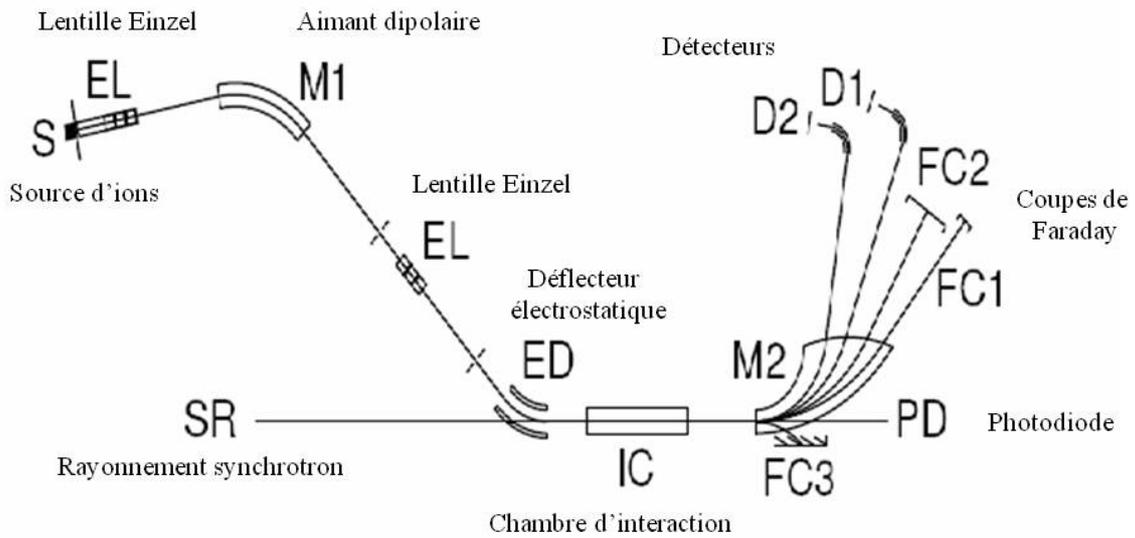


Figure 2.2 : Schéma représentatif du dispositif expérimental avec les principaux éléments d'optique ionique servant au transport du faisceau d'ions.

## 2.2.1 Photons

### 2.2.1.1 Rayonnement synchrotron

Le rayonnement synchrotron est le rayonnement électromagnétique émis par les particules chargées accélérées, comme les électrons qui se déplacent à des vitesses relativistes sur des trajectoires courbes dans les anneaux de stockage. L'utilisation de ce rayonnement présente plusieurs avantages pour nos expériences: une bonne intensité du flux de photons délivré, une grande stabilité et une large gamme spectrale qui permet d'étudier les processus de photoionisation dans les différentes sous-couches électroniques des ions.

Pour nos expériences, nous avons utilisé le rayonnement synchrotron produit par l'anneau de stockage ASTRID à l'université d'Aarhus au Danemark. Le montage expérimental est installé de façon permanente sur la ligne de lumière « Miyake » de l'unique onduleur d'ASTRID. Les principales caractéristiques de l'onduleur sont résumées dans la table 2.1.

Caractéristique	valeur
Domaine spectral (eV)	15-180
Période magnétique $\lambda_0$ (mm)	55
Nombre de périodes	30
Champ maximum $B_0$ (T)	0.56
Entrefer minimum $g$ (mm)	25
Kmax	2.36
Pouvoir résolvant	2000

*Table 2.1 : récapitulatif des caractéristiques de l'onduleur d'ASTRID.*

### **2.2.1.2 Ligne de lumière Miyake**

Le schéma optique de la ligne de lumière est montré figure 2.3. Le faisceau de photons issu de l'onduleur est focalisé horizontalement par un miroir sphérique MFH (Miroir de Focalisation Horizontale). Le monochromateur, de type Miyake, est constitué d'un réseau plan (RP) de 1200 traits/mm et d'un miroir cylindrique (MC) qui focalise le faisceau de photons sur une fente de sortie (FS) [Miyake et al, 1969]. A la sortie du monochromateur, le faisceau de photons est focalisé verticalement par un miroir sphérique MFV (Miroir de Focalisation verticale) et défléchi dans le plan horizontal par un miroir plan (MP). La ligne est équipée d'un hacheur (CH) et de filtres d'aluminium et de magnésium (F) pour éliminer la contribution des ordres supérieurs. L'énergie des photons est calibrée à l'aide d'une cellule à gaz (CG) et le flux est mesuré par une photodiode ( $Al_2O_3$ ) (PD) à la sortie de la zone d'interaction (ZI).

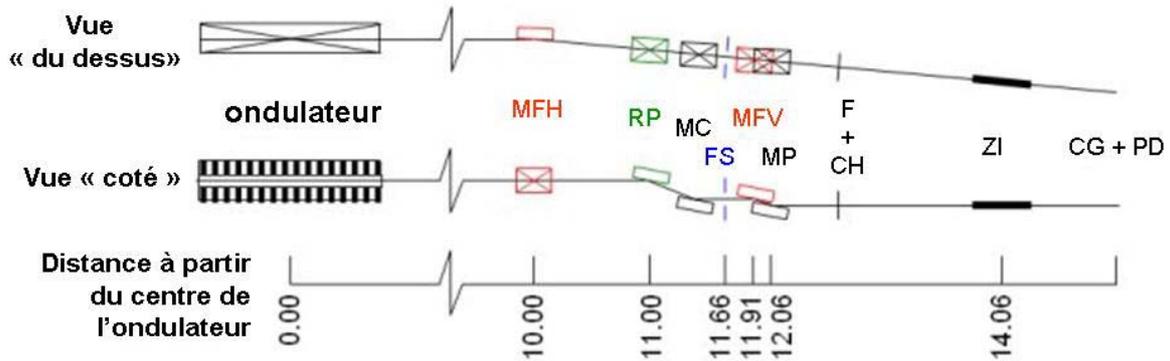


Figure 2.3 : Schéma représentatif de la ligne de lumière Miyake à Astrid. MFH: miroir de focalisation horizontale ( $R=150\text{ m}$ ,  $\theta=87,5^\circ$ ) ; RP: réseau plan (1200 traits/mm) ; MC: miroir cylindrique ( $R=2.4\text{ m}$ ) ; FS: fente de sortie du faisceau ; MFV: miroir de focalisation verticale ( $R=573\text{ cm}$ ,  $\theta=8,5^\circ-85,4^\circ$ ) ; MP: miroir plan ; F: filtres pour supprimer les ordres supérieurs ; CH : chopper ; ZI : zone d'interaction ; CG: cellule à gaz ; PD: Photodiode.

La figure 2.4 montre la variation du spectre d'émission de l'ondulateur, calculée pour plusieurs valeurs de l'entrefer (gap en anglais). Les différents pics correspondent aux harmoniques (paires et impaires) émises par l'ondulateur. Leur position varie en fonction de l'entrefer de l'ondulateur. Pour obtenir le nombre de photons disponibles au niveau de l'expérience, il faut convoluer ce spectre par la fonction de transmission des optiques de la ligne, qui a une valeur maximale d'environ 10% vers 120 eV [Kjeldsen 2006]. Afin d'obtenir le flux maximum, l'entrefer de l'ondulateur est varié simultanément avec l'angle du réseau pour rester au maximum d'une des harmoniques de l'ondulateur.

La résolution théorique de la ligne est donnée figure 2.5, pour une fente de sortie de 10  $\mu\text{m}$  de large. Elle est optimisée en variant l'angle et la position longitudinale du miroir cylindrique MC parallèlement à l'angle du réseau, de façon à garder la focalisation sur la fente de sortie. En pratique, un problème dans la translation du miroir ne permettait pas de varier continument sa position avec l'énergie des photons. ceci a notablement dégradé la résolution du monochromateur et nous a obligé à découper l'enregistrement des spectres de photoionisation en plusieurs sous-domaines d'énergie.

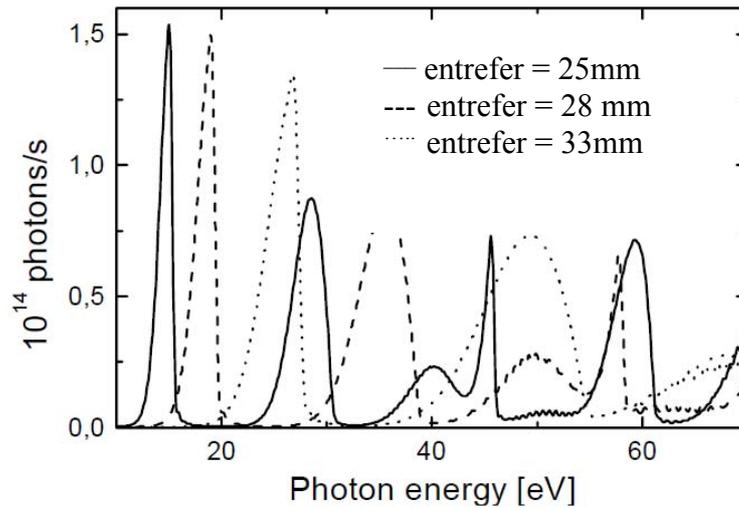


Figure 2.4 : Spectres d'émission de l'onduleur calculés pour différentes valeurs de l'entrefer

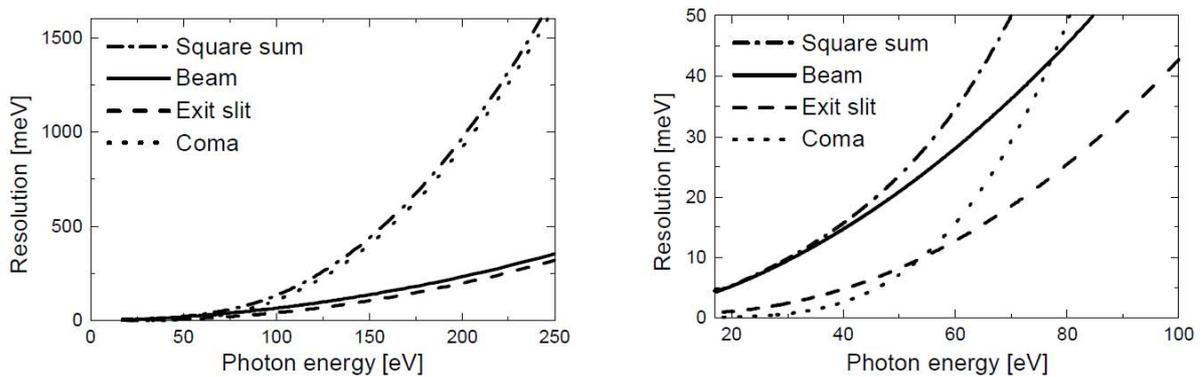


Figure 2.5: Résolution théorique (courbe en tiret-point) du monochromateur Miyake calculée pour une fente de sortie de  $10 \mu\text{m}$  [Kjeldsen 1999].

Des filtres de magnésium et d'aluminium peuvent être insérés dans le faisceau à la sortie du monochromateur, permettant de supprimer les ordres supérieurs diffractés par le réseau pour les énergies de photon respectivement inférieures à environ 50 eV et 70 eV.

### 2.2.1.3 Cellule à gaz

A la fin de la ligne de lumière, une cellule à gaz [Samson 1967] (CG sur figure 2.3) est installée pour permettre la calibration de l'énergie des photons délivrés par le monochromateur et la mesure en valeur absolue du flux de photons. Le principe de la cellule à gaz est le suivant: les ions produits par la photoionisation d'un gaz rare, l'hélium par exemple, sont collectés par une électrode. Le courant mesuré sur l'électrode est proportionnel à la

section efficace de photoionisation (connue dans la littérature), à la pression du gaz (mesurée par une jauge absolue) et au flux de photon recherché.

#### a- Calibration de l'énergie des photons

L'échelle en énergie donnée par le monochromateur peut différer de l'énergie réelle des photons de quelques dixièmes d'électronvolts à plus d'un électronvolt suivant la gamme d'énergie. Deux gaz rares, par exemple le krypton et l'hélium, dont l'énergie des raies de photoexcitation a déjà été mesurée avec précision [He : Madden et Codling 1963, Kr : Ralchenko et al. 2008] sont injectés dans la cellule à une pression de l'ordre de 0,1 mbar. L'énergie des photons est balayée autour des valeurs des raies d'ionisation dans ces gaz, et le spectre de photoionisation obtenu permet de corriger l'énergie réelle délivrée par le monochromateur. La figure 2.6 donne un exemple de spectre obtenu par ionisation du krypton.

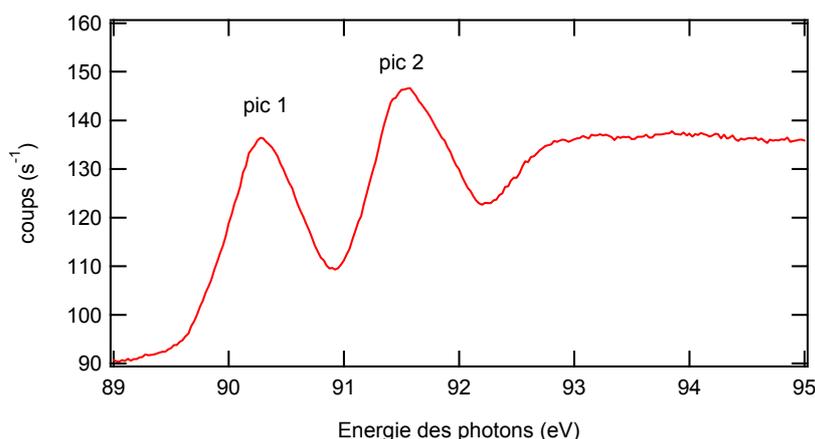
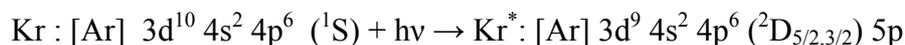


Figure 2.6 : Spectre d'ionisation du krypton dans la région 89-95 eV obtenu à l'aide de la cellule à gaz

Les deux pics observés correspondent aux composantes  $J=3/2$  et  $J=1/2$  du doublet  $^2P$  associées aux transitions :



Pour cet exemple, l'écart entre l'énergie indiquée par le monochromateur et l'énergie de référence était de 0,93 eV.

#### b- flux de photons

Afin de pouvoir déterminer les sections efficaces absolues de photoionisation, il faut connaître le flux de photons absolu dans la zone d'interaction. Les variations du flux en

fonction du temps (dus à la décroissance du courant d'électrons dans l'anneau de stockage) et en fonction de l'énergie des photons (dus au spectre d'émission de l'onduleur et à la transmission des optiques de la ligne) doivent être également corrigées. Le flux n'est mesuré qu'en valeur relative par la photodiode car son rendement peut varier avec le temps ou l'emplacement éclairé par les photons. Le rendement est déterminé après chaque enregistrement de spectre en injectant à différentes pressions dans la cellule des gaz rares (He ou Ne) dont la section efficace de photoionisation est connue [Samson et al 1994].

## **2.2.2 Ions**

### **2.2.2.1 Source à Résonance Cyclotronique Electronique (RCE)**

La première source à résonance cyclotronique électronique a été conçue et développée au CEA de Grenoble en 1967 dans le but d'étudier la fusion par confinement magnétique [Wolf, 1995]. Depuis leur conception, les sources RCE ont joué un rôle primordial dans le développement de la physique atomique et nucléaire, ainsi que dans d'autres domaines de la science et des technologies appliquées. Le choix de ce type de source pour nos expériences a été motivé par plusieurs avantages présentés par les sources RCE comparées aux autres sources d'ions:

- Elles produisent des courants élevés (de l'ordre du  $\mu\text{A}$  jusqu'à 1 mA) pour les ions d'état de charge moyennement élevé qui nous intéressent;
- Les faisceaux d'ions produits par ces sources sont continus et stables, ce qui est très important pour la mesure des sections efficaces de photoionisation, l'acquisition des spectres nécessitant plusieurs heures;
- Les sources à aimants permanents sont compactes.

Le principal inconvénient des sources RCE est qu'elles produisent des ions non seulement dans l'état fondamental, mais également dans des états excités métastables qui peuvent contribuer à nos spectres de photoionisation. Ce point sera discuté en détails dans le chapitre 3.

## Principe de fonctionnement d'une source RCE :

Dans une source RCE, un plasma est confiné magnétiquement dans une chambre qui sert de réservoir d'ions. Les ions sont produits par ionisation d'un gaz par collisions avec des électrons énergétiques. Sous l'influence du champ magnétique, les électrons du plasma spiralent autour des lignes de champ à leur fréquence cyclotronique (de l'ordre de quelques GHz à quelques dizaines de GHz). L'injection d'une onde électromagnétique à cette fréquence permet d'accélérer les électrons. Les atomes sont alors multi-ionisés par collisions successives avec les électrons.

### Confinement magnétique axial

Le confinement magnétique du plasma à l'intérieur de notre source se fait en utilisant des aimants permanents (champ dipolaire pour le confinement axial, hexapolaire pour le confinement radial). La figure 2.7 montre la variation du champ axial de notre source le long de l'axe de la source. Le plasma est confiné dans la zone centrale où le champ présente un minimum.

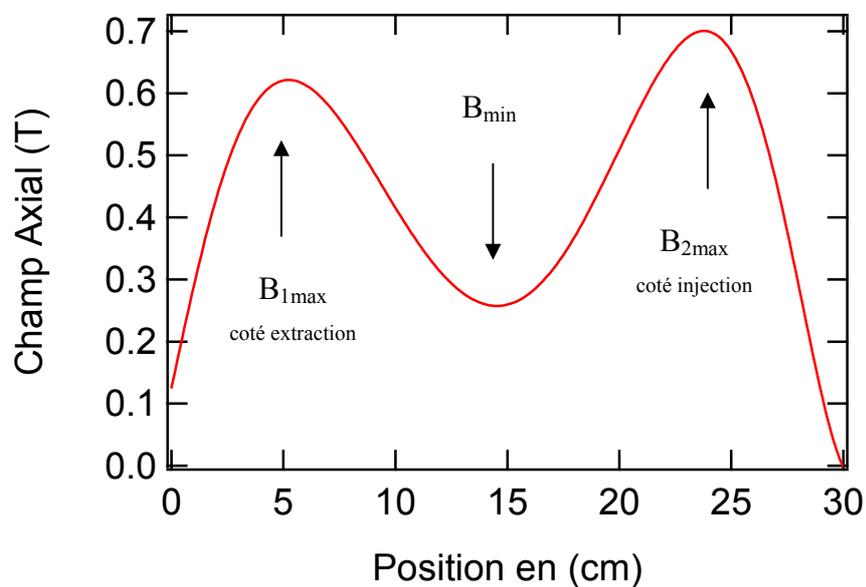


Figure 2.7 : Champ magnétique axial de la source ECR utilisée.

## Caractéristiques de notre source ECR :

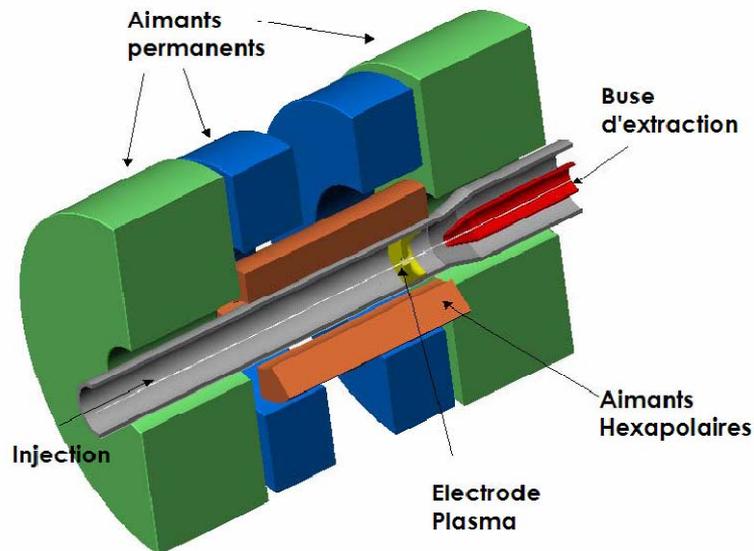


Figure 2.8: Schéma de la source RCE

La figure 2.8 montre une vue 3D de la source RCE utilisée. Elle a été développée au « Département de Recherche Fondamentale sur la Matière Condensée » du CEA de Grenoble. Elle a été utilisée à Super-ACO avant d'être transportée à ASTRID. Cette source est compacte, du type hexapolaire à aimant permanent. Les champs magnétiques axiaux et radiaux sont créés grâce à des aimants permanents en Samarium-Cobalt. Une extrémité, notée « coté injection », est équipée d'une entrée de gaz et de la sonde d'injection de l'onde HF, de fréquence 11 GHz et de puissance maximale 300 Watts. Les principales caractéristiques de notre source RCE sont regroupées dans la table 2.2.

Pour étudier des ions d'éléments qui sont naturellement à l'état solide, comme le fer, un four est utilisé pour évaporer les atomes. Il est inséré axialement dans la chambre à plasma coté injection. Ce point sera détaillé dans le paragraphe suivant.

Caractéristique	valeur
Poids	80 kg
Longueur	33 cm
Diamètre externe	26 cm
Diamètre interne	3 cm
Champ magnétique de résonance	0,36 T
Champ magnétique rémanent	1,27 T
Champ à l'injection	0,7 T
Champ à l'extraction	0,6 T
Champ central	0,25 T
Champ hexapolaire	0,27 T
Fréquence HF	11 GHz
Puissance HF max	300 W

*Table 2.2 : Caractéristiques de la source RCE utilisée.*

### 2.2.2.2 Production des ions de fer

Pour étudier des éléments dans l'état gazeux, la production des ions est simple : il suffit d'injecter le gaz en question à l'intérieur de la chambre plasma de la source RCE. Pour des éléments à l'état solide dans les conditions normales de température et de pression, deux solutions sont généralement employées: l'utilisation de composés volatils qui seront dissociés dans la source ou l'utilisation d'un four. Les deux méthodes ont été employées pour la production des ions de fer, le composé utilisé étant le ferrocène  $\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_5)_2$  [Bex et al, 1998]. Nous avons préféré l'utilisation d'un four, car il permet d'obtenir des courants d'ions plus stables et d'éviter la pollution des spectres de masse en sortie de source par les ions de carbone et d'hydrogène.

La figure 2.9 montre la courbe de tension de vapeur du fer en fonction de la température [Nesmeyanov 1963, Wolff 1995]. D'après cette courbe, le fer doit être chauffé à 1200°C pour obtenir une pression de vapeur saturante de l'ordre de  $10^{-4}$  Torr, pression de travail typique de la source RCE.

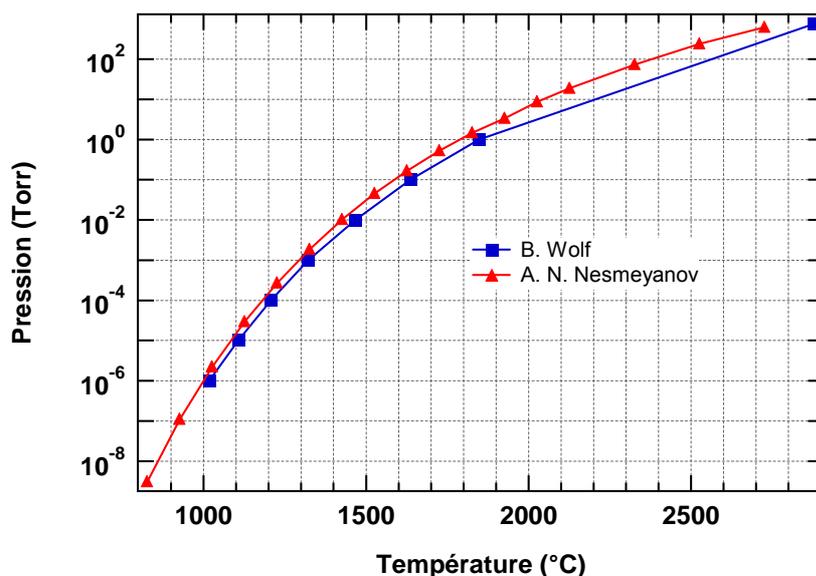


Figure 2.9 : Courbes de tension de vapeur du Fer. En bleu : B. Wolf [1995], en rouge: [A.N. Nesmeyanow1976]

Nous avons utilisé un four de type « GSI standard Oven » [Lang et al 2000], développé au Gesellschaft für Schwerionenforschung à Darmstadt en Allemagne. Il s'agit d'un four à chauffage résistif, permettant d'obtenir des températures jusqu'à 1500°C environ.

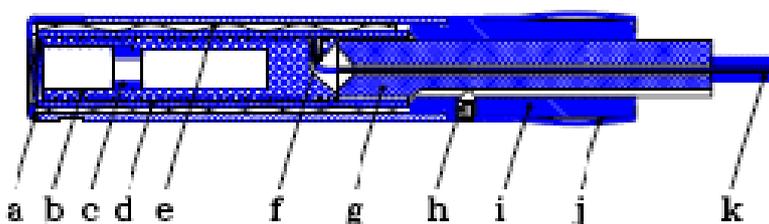


Figure 2.10 : Schéma du four développé au GSI : a) cylindre en tantale (Ta) ; b) creuset en alumine ( $Al_2O_3$ ) ; c) anneau d'ouverture en alumine ; d) tube de protection en alumine ; e) gaine (Ta) ; f) fil chauffant (WRe) ; g) broche en alumine ; h) vis ; i) guidage du four (Mo) ; j) contact électrique (CuBe) ; k) tube (Cu).

Le four est inséré axialement dans la source. Il est introduit dans la chambre plasma à l'aide d'une tige mobile qui permet d'optimiser sa position par rapport au plasma. Le schéma du four est représenté par la figure 2.10. On place les échantillons solides du fer, qui pèsent typiquement quelques centaines de milligrammes, à l'intérieur d'un creuset en alumine ( $Al_2O_3$ ) (b). Un anneau (c) placé à l'ouverture du four sert à éviter d'éventuels écoulements de fer liquide. Le chauffage se fait par un fil résistif (f) de tungstène (WRe) enroulé sur le creuset et dans lequel circule un courant de quelques Ampères. Le creuset et le fil sont placés dans un tube de protection en alumine et entourés d'une gaine de tantale.

Un paramètre critique pour le bon fonctionnement de la source d'ions ECR est le flux d'atomes injectés dans la chambre à plasma. Il était primordial de trouver, préalablement aux prises de données sur ASTRID, les conditions de fonctionnement pour l'évaporation du fer. Ce travail a été réalisé au LIXAM [Adrouche (2003), Blicck (2006)].

La première étape a été de caractériser la température du creuset en fonction de la puissance de chauffage (Figure 2.11). Le four a été placé dans une enceinte sous vide (pression typique de  $10^{-6}$  Torr) et la température du four a été mesurée en plaçant un thermocouple dans le creuset. La variation de la température du four suit une loi exponentielle en fonction de la puissance électrique fournie, et la température maximale est de  $1372^{\circ}\text{C}$ .

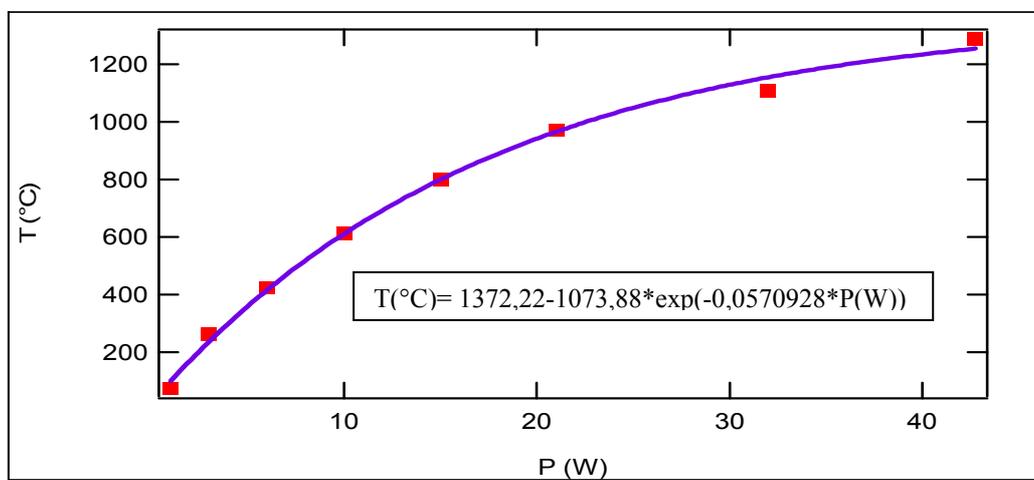


Figure 2.11 : Variation de la température interne du four en fonction de la puissance de chauffage. La courbe bleue est une fonction analytique, de variation exponentielle, dont les coefficients sont obtenus par ajustement sur les points de mesure montrés en rouge.

La deuxième étape a consisté à déterminer le taux d'évaporation  $Q$  d'atomes de fer par seconde en fonction de la puissance de chauffage du four. Dans la même enceinte sous vide, un échantillon solide de fer a été placé dans le creuset du four. Une balance à quartz placée à la sortie du four a permis de déterminer les taux d'évaporation. La Figure 2.12 montre la variation de  $Q$  en fonction de la puissance de chauffage du four, qui peut être ajustée par une fonction exponentielle.

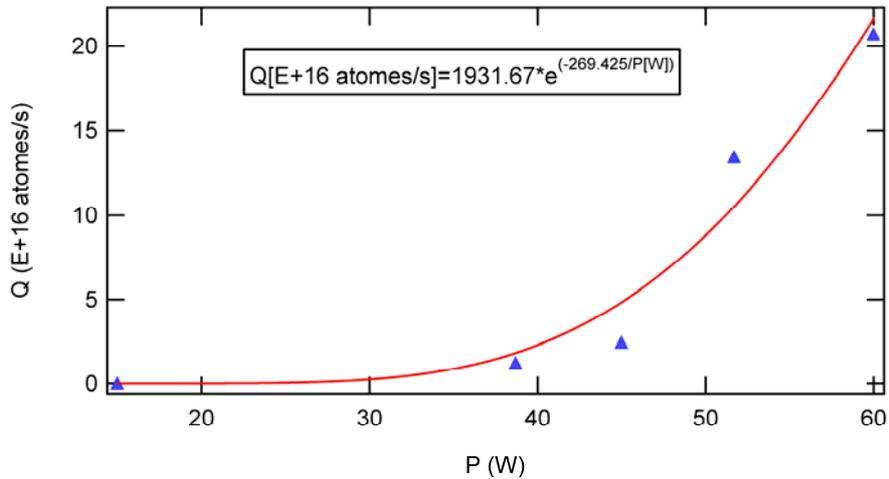


Figure 2.12 : Variation du taux d'évaporation d'atomes de fer par seconde en fonction de la puissance de chauffage du four. La courbe rouge est la fonction analytique, de variation exponentielle, dont les coefficients ont été obtenus par ajustement sur les points bleus expérimentaux.

Ce type de mesures effectuées précédemment sur le baryum et le samarium [Champeaux 2003] avait permis de déterminer que les conditions optimales de fonctionnement de la source étaient pour un taux d'évaporation de  $Q = (1.4 \pm 0.5) 10^{16}$  atomes/s. Pour le fer, ce taux est obtenu pour une puissance de 37 watts, correspondant à une température de 1200 °C et à une tension de vapeur de fer de quelques  $10^{-4}$  torr. Lors de la prise des données, la puissance de chauffage était typiquement de 40 W, proche de la valeur attendue.

### 2.2.2.3 Extraction des ions

Les ions multichargés produits à l'intérieur de la chambre plasma sont extraits à l'aide d'un système accel-décel à 4 électrodes. Une première tension accélératrice de 6 kV est appliquée, les ions étant ensuite décélérés par une différence de potentiel de 4 kV. L'énergie cinétique des ions en sortie du système est donc de  $2 \times Q$  keV, où Q est la charge des ions. Le faisceau d'ions extrait est ensuite focalisé à l'aide d'une lentille einzel située après l'électrode d'extraction.

### 2.2.2.4 Sélection des ions (aimant dipolaire)

A la sortie de la source RCE, le faisceau ionique contient des ions de masse et d'état de charge différents. Les ions que l'on veut étudier sont sélectionnés par un électro-aimant de

déflexion (séparateur magnétique) qui les sépare suivant le rapport masse sur charge. Le spectre de masse des ions en sortie de source est obtenu en faisant varier le courant circulant dans les bobines de l'aimant. La figure 2.13 montre un spectre de masse obtenu pour les ions de fer. Les courants ioniques sont mesurés à l'aide d'une coupe de Faraday amovible située derrière des fentes placées au point focal de l'aimant. On observe les pics correspondant aux ions de fer jusqu'à la charge  $Q=6$ , le maximum d'intensité étant obtenue pour l'ion  $Fe^{2+}$  pour lequel les paramètres de source avaient été optimisés. Il est à noter que le pic des ions  $Fe^{2+}$  ne peut être distingué de ceux des ions  $N_2^+$  et  $CO^+$ , qui peuvent être produits dans la source par les molécules du gaz résiduel. De même, le pic d'ions  $Fe^{4+}$  peut être mélangé à celui des ions  $N^+$ . Ce point sera détaillé dans le chapitre 3. On notera également la relativement faible intensité des pics de fer, de l'ordre de quelques nano-Ampères, alors que la source est censée en produire plusieurs dizaines de micro-ampères. Ceci est dû à la mauvaise extraction des ions de la source, installée sur un montage qui avait été initialement optimisé pour des sources à décharge de type Nielsen, connues pour avoir une bien meilleure émittance que la source RCE.

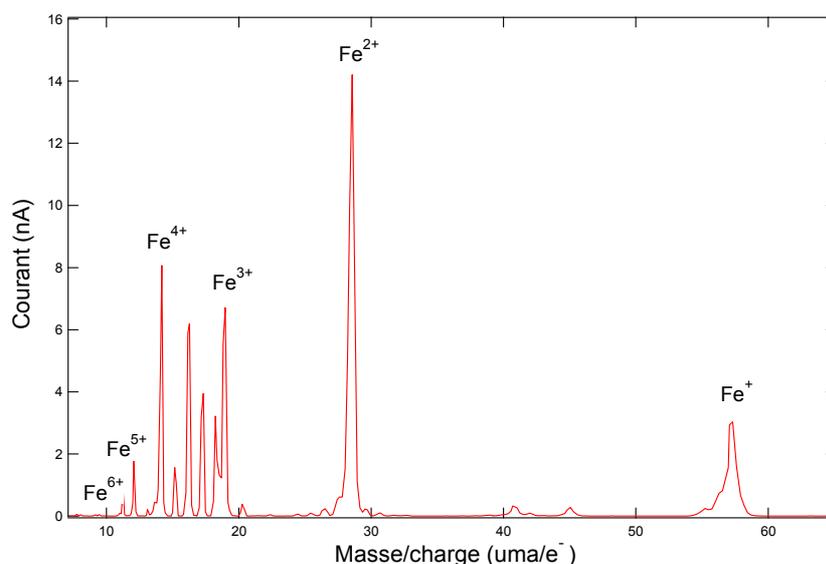


Figure 2.13: Spectre de masse des ions sortant de la source d'ions RCE. Le réglage de la source était optimisé pour la production d'ions  $Fe^{2+}$ .

### 2.2.2.5 Transport des ions

La figure 2.14 montre un schéma des différents éléments d'optique ionique servant à optimiser le transport du faisceau d'ions jusqu'à la zone d'interaction IR. La focalisation du faisceau est réalisée à l'aide de lentilles einzel (LEE) et son alignement à l'aide de déviateurs

électrostatiques (DEH et DEV). Des coupes de Faraday (MSH) peuvent être insérées à différents endroits dans le faisceau d'ions et servent à optimiser l'intensité du courant d'ions.

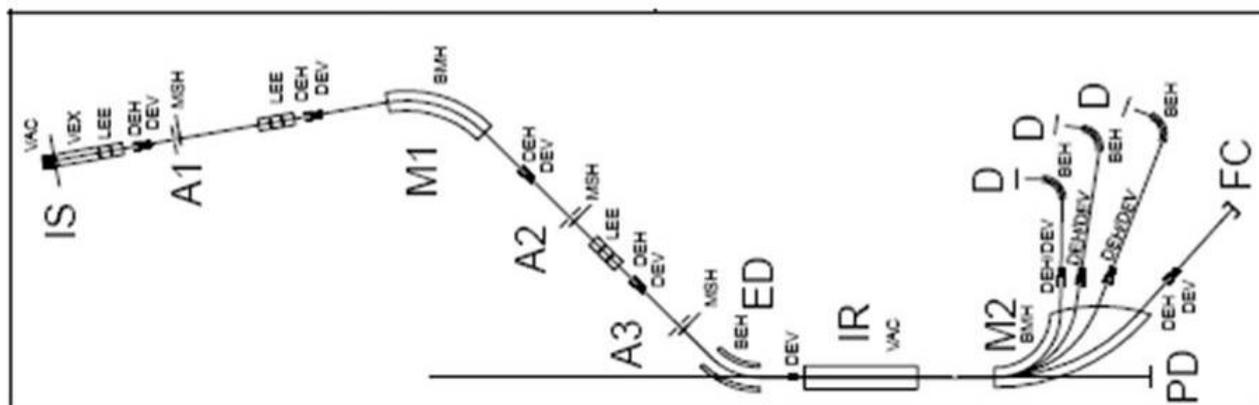


Fig. 2.14: Schéma des différents éléments optiques de l'expérience [Kjeldsen et al. 2005]. IS : source d'ions, VAC : voltage accélérateur, VEX : voltage d'extraction, LEE : lentille einzel, DEH : déviateur électrostatique horizontal, DEV : déviateur électrostatique vertical, BMH : aimant dipolaire, ED : déflecteur électrostatique, IR : zone d'interaction, PD : photodiode, FC : coupe de Faraday, D : détecteur.

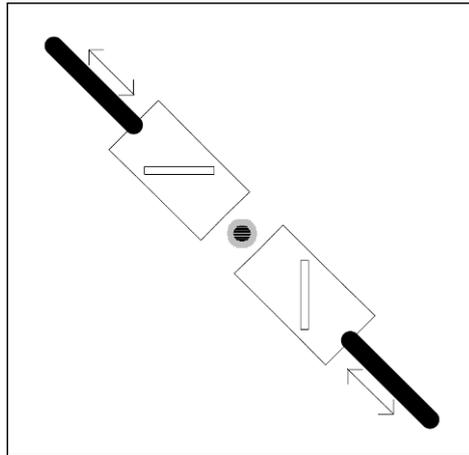
Le faisceau d'ions est collimaté à l'aide de deux séries de fentes A2 et A3 qui ramènent la section du faisceau d'ions dans la zone d'interaction à une taille du même ordre de grandeur que celle du faisceau de photons. Ceci permet de diminuer le bruit de fond produit dans les spectres de photoionisation par les processus d'ionisation collisionnelle sur le gaz résiduel.

### 2.2.3 Zone d'interaction photons-ions

L'intensité du signal de photoionisation dépend de la qualité du recouvrement entre le faisceau d'ions et celui des photons. Les deux faisceaux se recouvrent colinéairement sur une distance de 50 cm environ. Une tension accélératrice est appliquée sur la chambre d'interaction IR afin de définir la longueur de la zone d'interaction et de pouvoir séparer à l'aide d'un filtre de vitesse (BEH) les photoions qui ont gagné une charge à l'intérieur de cette zone et qui auront une vitesse différente de ceux qui l'ont gagné à l'extérieur.

La zone d'interaction est équipée de dix profileurs qui permettent de mesurer en cinq endroits différents les profils verticaux et horizontaux des deux faisceaux simultanément. Ils

permettent d'optimiser le recouvrement des deux faisceaux et de le quantifier. Chaque profileur est constitué d'une fente et d'un moteur qui permet de la translater perpendiculairement aux faisceaux à l'intérieur de la zone d'interaction. Un couple de profileurs est présenté figure 2.15. La largeur des fentes est égale à 0,24 mm et la distance entre deux couples de profileurs est de 12 cm. Le courant des ions qui passent à travers les fentes est mesuré sur la coupe de Faraday FC. Le flux de photons est mesuré par la photodiode PD.



*Figure 2.15 : Schéma d'un couple de profileurs horizontal et vertical. Le point noir représente les faisceaux d'ions et de photons [Rasmussen 1999].*

La figure 2.16 donne un exemple de profils de courants enregistrés avec trois séries de profileurs, situés au milieu et aux extrémités de la zone d'interaction. De tels profils sont enregistrés systématiquement à intervalles réguliers pendant la prise des spectres de photoionisation. Ceci est indispensable pour suivre, en particulier, la variation de la taille du faisceau de photons qui change avec l'énergie des photons.

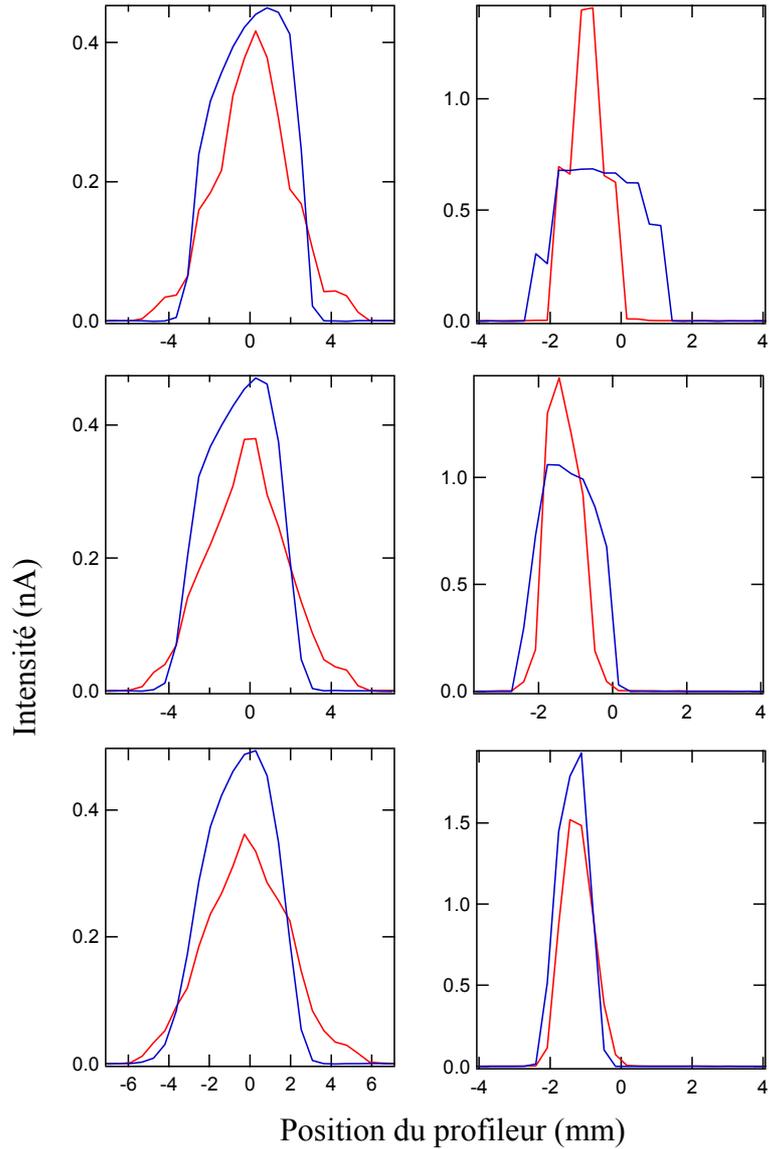


Fig. 2.16: Exemple de profils mesurés pour le faisceau de photons (en bleu) et d'ions (en rouge). De haut en bas : profils enregistrés avec le premier, le troisième et le dernier profileur. A gauche : les profils dans le plan horizontal, à droite : les profils dans le plan vertical.

### 2.2.4 Détection des photoions

Les photoions produits dans la zone d'interaction sont séparés des ions incidents à l'aide d'un second aimant dipolaire M2. Après avoir été sélectionnés en vitesse à l'aide des déflecteurs électrostatiques BEH, ils sont comptés par un des détecteurs D de type Johnston MM1-ISG. Sur ce montage initialement conçu pour les ions monochargés, quatre détecteurs avaient été prévus, permettant de détecter simultanément les photoions ayant gagné une, deux, trois et quatre charges dans l'interaction avec les photons. Pour adapter ce montage aux ions multichargés, une seconde coupe de Faraday a été ajoutée (FC2 sur la Fig. 2.2) et seuls les

deux premiers détecteurs D1 et D2 ont été utilisés selon la charge des ions incidents. L'efficacité des détecteurs est déterminée en envoyant un courant d'ions très faible (inférieur au femto-Ampère) sur les détecteurs et en comparant le taux de comptage résultant avec le courant mesuré directement sur la coupe de Faraday FC. Cette efficacité est croissante avec l'énergie des ions. La figure 2.17 montre la courbe de l'efficacité du détecteur utilisé pour nos mesures en fonction de la vitesse des ions.

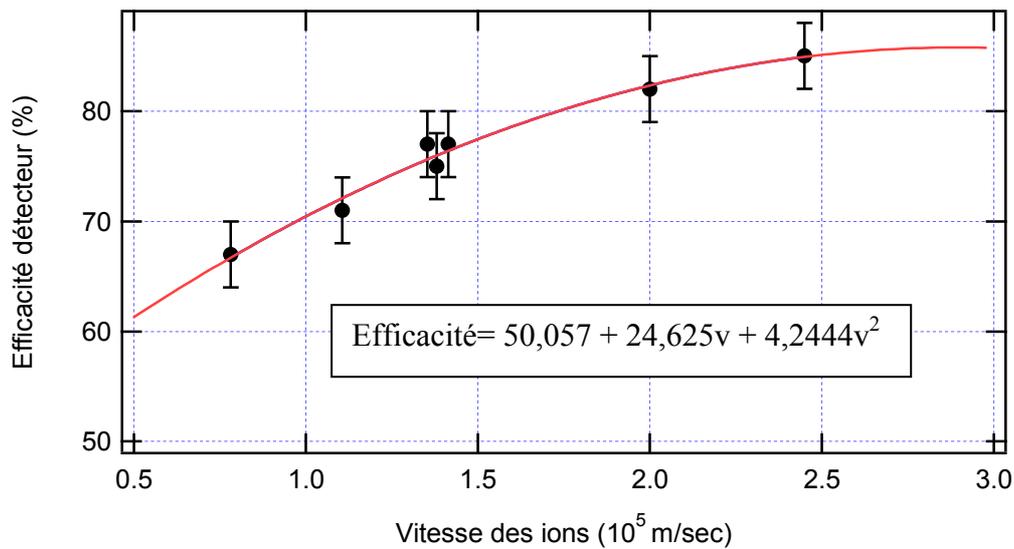


Figure 2.17 : efficacité du détecteur utilisé pour nos prises de données en fonction de la vitesse des ions.

Afin d'enregistrer un spectre de photoionisation, on ajuste le champ de l'aimant M2 ainsi que le potentiel appliqué sur la zone d'interaction de façon à détecter simultanément les ions incidents dans une coupe de Faraday FC1 ou FC2 et les photoions dans un détecteur D1 ou D2. Ce réglage trouvé, l'énergie des photons est ensuite balayée.

## 2.3 Procédure expérimentale

Dans cette section, nous allons décrire la procédure utilisée pour déterminer en valeur absolue les sections efficaces de photoionisation à partir des spectres enregistrés.

### 2.3.1 Notion de section efficace

Considérons le cas le plus général d'une interaction entre des particules cibles et des particules incidentes : la diffusion, schématisée figure 2.18.

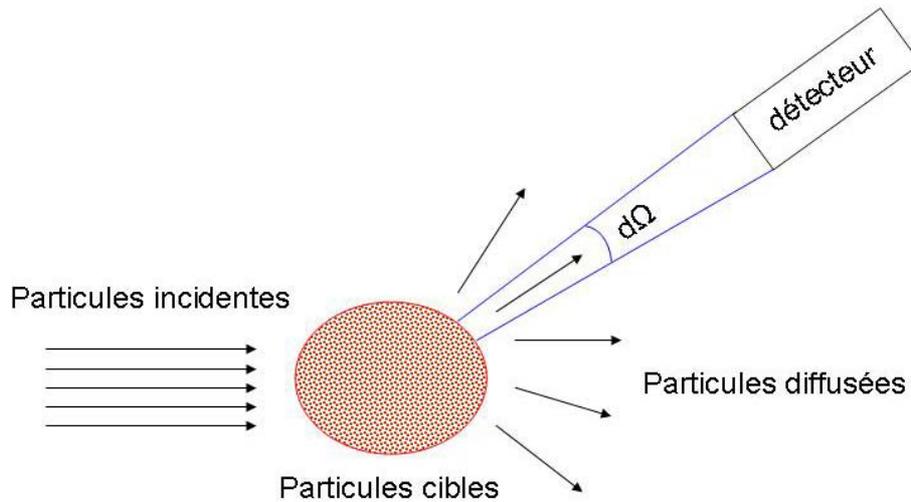


Figure 2.18 : schéma de l'expérience de diffusion

Soit  $J$  le flux des particules incidentes. Si  $n_i$  est le nombre des particules par unité de volume dans le faisceau incident et  $v$  leur vitesse par rapport à la cible, on a :

$$J = n_i v \quad (2.1)$$

Dans le cas où il n'y a pas d'interaction mutuelle entre les particules du faisceau incident, le nombre  $N$  de particules diffusées par la cible par unité de temps dans l'angle solide  $d\Omega$  s'écrit :

$$N = J \Sigma(\Omega) d\Omega \quad (2.2)$$

$\Sigma(\Omega)$  est une grandeur qui caractérise l'interaction entre une particule incidente et la cible. Elle a la dimension d'une surface et est appelée section efficace de diffusion de la particule par la cible dans la direction  $\Omega$ .

En pratique, sauf pour des cas comme celui de la diffraction dans les cristaux, la cible est constituée d'un grand nombre  $N_c$  de diffuseurs atomiques et les distances mutuelles de ces diffuseurs sont suffisamment grandes par rapport à la longueur d'onde des particules incidentes pour pouvoir négliger toute cohérence entre les ondes diffusées par chaque diffuseur. Chaque centre diffuseur agit donc indépendamment des autres. Pour les milieux dilués, les diffusions multiples sont négligeables, on peut écrire :

$$N = J N_c \sigma(\Omega) d\Omega \quad (2.3)$$

où  $\sigma(\Omega)$  est la section efficace de diffusion de la particule par le centre diffuseur dans la direction  $\Omega$ , ou section efficace différentielle de diffusion.

En intégrant sur l'angle  $\Omega$ , le nombre total  $N_{tot}$  des particules diffusées par unité de temps est égal à :

$$N_{tot} = J N_c \sigma_{tot} \quad (2.4)$$

avec

$$\sigma_{tot} = \int \sigma(\Omega) d\Omega \quad (2.5)$$

$\sigma_{tot}$  est appelée section efficace totale de diffusion. Elle est exprimée en barn ( $1 \text{ barn} = 10^{-24} \text{ cm}^2$ ).

### **2.3.2 Détermination de la section efficace expérimentale de photoionisation**

Dans le cas du processus de photoionisation, schématisé figure 2.19, les ions constituent la cible et les photons jouent le rôle des particules incidentes.

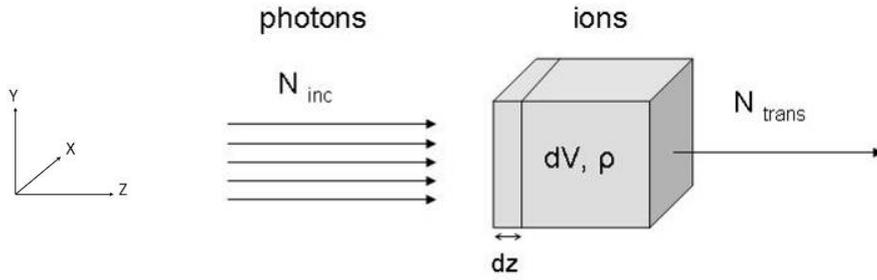


Fig. 2.19 : Transmission des photons à travers un volume d'ions

Soit  $dV$  le volume des ions cibles et  $\rho$  la densité de ce volume, considérée uniforme.  $N_{inc}$  est le nombre des photons incidents. Lors de l'interaction entre photons et ions, un nombre de photons sera absorbé et le reste sera transmis. La probabilité  $P_t$  qu'un photon traverse le volume sans être absorbé s'écrit :

$$P_t = \frac{N_{trans}}{N_{inc}} \quad (2.6)$$

Si on décompose le volume  $dV$  en tranches d'égale épaisseur  $dz$ , le nombre de photons incidents diminue à la traversée de chaque tranche de la quantité  $dN_{inc}$ . Cette diminution est proportionnelle à la densité d'ions contenus dans la tranche par unité de surface  $\rho dz$ .  $dN_{inc}$  s'écrit :

$$dN_{inc} = -N_{inc} \rho dz \times \sigma \quad (2.7)$$

où  $\sigma$  est la section efficace de photoionisation. Par intégration de l'équation sur  $z$ , nous obtenons le nombre de photons transmis à travers la cible sur une longueur  $z$  :

$$N_{trans} = N_{inc} \times e^{(-\rho z \sigma)} \quad (2.8)$$

Comme un photon sera soit absorbé soit transmis, la probabilité qu'un photon interagisse avec un ion s'écrit :

$$P_{int} = 1 - P_t \quad (2.9)$$

Ou, en substituant l'équation (2.8) dans (2.9) :

$$P_{int} = 1 - e^{-\rho z \sigma} \quad (2.10)$$

Soit  $I_{ph}$  le flux de photons incidents. Le nombre  $S$  de photoions, les ions qui ont gagné une ou plusieurs charges par absorption d'un photon, est égal à :

$$S = P_{int} I_{ph} = (1 - e^{-\rho z \sigma}) \cdot I_{ph} \quad (2.11)$$

Dans le cas de notre expérience, la densité du faisceau d'ions  $\rho$  à l'intérieur de la chambre d'interaction est faible : pour un faisceau d'ions  $\text{Fe}^{3+}$  de 6 keV d'énergie cinétique, leur vitesse est de  $1,9 \cdot 10^5$  m/s, et la densité est de l'ordre de  $10^4$  ions/  $\text{cm}^3$ . La longueur  $z$  de la zone d'interaction est de 50 cm. La surface caractéristique en physique atomique est de  $\pi a_0^2$  soit 0.9 Mbarn, où  $a_0$  est le rayon de Bohr. Le produit  $\rho z \sigma$  est donc très petit devant 1, et l'exponentielle peut être remplacée par son développement limité au premier ordre :

$$S = I_{ph} \times \rho \times z \times \sigma \quad (2.12)$$

Considérons maintenant un élément de volume  $\delta V = \delta x \delta y \delta z$  dans lequel la densité ionique est supposée constante. Soit  $j$  l'intensité élémentaire du faisceau d'ions :

$$j = \rho \langle v \rangle qe \delta x \delta y \quad (2.13)$$

où  $qe$  est la charge des ions et  $\langle v \rangle$  leur vitesse moyenne à l'intérieur du faisceau. La densité peut s'écrire alors :

$$\rho = \frac{j}{qe \langle v \rangle \delta x \delta y} \quad (2.14)$$

De la même façon, le flux de photons incidents dans cet élément de volume peut être rapporté au courant de photons  $i$  mesuré sur une photodiode de rendement  $\eta$ .

Le taux de comptage  $\delta S$ , associé au volume  $\delta V$ , mesuré sur le détecteur de rendement  $\Omega$  devient :

$$\frac{\delta S_{x,y,z}}{\Omega} = \left( \frac{j(x,y)}{qe \langle v \rangle \delta x \delta y} \right) \times \left( \frac{i(x,y)}{e \eta} \right) \times \sigma \times \delta z \quad (2.15)$$

L'intégration sur  $x$  et  $y$  donne :

$$\iint \frac{\delta S_{x,y,z}}{\Omega} dx dy = \left( \frac{\sigma \delta z}{qe^2 \langle v \rangle \eta} \right) \times \iint \frac{i(x,y) j(x,y)}{\delta x \delta y} dx dy \quad (2.16)$$

On introduit le facteur de forme  $F(z)$ , défini par :

$$F(z) = \frac{\iint idxdy \iint jxdy}{\iint ijxdy} \quad (2.17)$$

Kjeldsen [Kjeldsen 1999] a montré que ces intégrales à deux dimensions pouvaient être approximées avec une bonne approximation par un produit d'intégrales à une dimension.

En substituant  $F(z)$  dans l'équation (2.16), et en posant  $I = \iint idxdy$  et  $J = \iint jxdy$ , nous obtenons le taux de comptage  $S_z$  pour chaque tranche d'épaisseur  $\delta_z$  :

$$\frac{S_z}{\Omega} = \left( \frac{\sigma \delta z}{qe^2 \langle v \rangle \eta} \right) \times \frac{IJ}{F(z)} \quad (2.18)$$

Par intégration de  $S_z$  le long de la zone d'interaction de longueur  $L$ , nous obtenons une expression de la section efficace de photoionisation directement reliée aux grandeurs physiques mesurées expérimentalement :

$$\sigma = S \times \frac{qe^2 \langle v \rangle \eta \delta x \delta y}{IJ\Omega \int_0^L \frac{dz}{F(z)}} \quad (2.19)$$

où :

- $S$  est le taux de comptage des photoions mesuré par le détecteur;
- $I$  est le courant des ions cibles mesuré avec la coupe de Faraday et  $J/\eta$  est l'intensité du courant de photons mesuré avec la photodiode d'efficacité  $\eta$ ;
- $v$  est la vitesse des ions cibles dans la zone d'interaction et  $q$  leur charge;
- $\Omega$  est l'efficacité des détecteurs.
- $\delta x$  et  $\delta y$  sont les pas avec lesquels sont mesurés les courants élémentaires  $i(x,y)$  et  $j(x,y)$  à l'aide des profileurs, et  $F(z)$  est le facteur de forme.

Tous ces paramètres sont mesurés en valeur absolue pendant l'enregistrement des spectres. Leur grandeur caractéristique dans le cas de l'ion  $\text{Fe}^{5+}$  est reportée dans le tableau 2.3 à titre d'exemple :

Paramètre	valeur
Voltage d'accélération	2 kV
Voltage appliqué sur la chambre d'interaction	-1 kV
Courant d'ions $I$	~5-10 nA
Taux de comptage $S$ à 100 eV	8 Hz
Bruit	5 Hz
Longueur d'interaction	~50 cm
Efficacité des détecteurs	65-70 %
Recouvrement des faisceaux $\delta x \delta y F$	5-15 mm <sup>2</sup>
Flux des photons	~10 <sup>12</sup> photons/s
Résolution en énergie des photons	0,1-1 %
Efficacité de la photodiode	1-5 %
Incertitude systématique sur la section efficace absolue	10-15%

Table 2.3: Grandeur caractéristique des différents paramètres expérimentaux dans le cas de l'ion  $Fe^{5+}$  à 100 eV d'énergie de photon.

### 2.3.3 Validation de la procédure expérimentale sur le cas de l'ion $He^+$

Afin de tester la validité de notre procédure expérimentale, nous mesurons régulièrement la section efficace de photoionisation de l'ion  $He^+$ . Cet ion étant hydrogénoïde, sa section efficace de photoionisation peut être calculée analytiquement de façon exacte [Sobelman 1961]. La figure 2.20 montre les courbes de section efficace théorique et expérimentale. Le spectre expérimental est obtenu en fixant le champ de l'aimant M2 de façon à détecter les photoions  $He^{2+}$  sur le détecteur D1 et en variant l'énergie des photons entre 50 et 120 eV. On note le très bon accord entre les deux courbes. La dispersion des points expérimentaux autour de la courbe analytique est de l'ordre de 10%, inférieure à l'incertitude systématique sur nos mesures de sections efficaces absolues estimée entre 10 et 15%. Pour le spectre de la figure 2.20, l'incertitude statistique sur le nombre de photoions détectés, donnée par les barres d'incertitude sur chaque point mesuré, est de l'ordre de 5%. L'incertitude totale sur la détermination des sections efficaces est obtenue en sommant les incertitudes systématique et statistique.

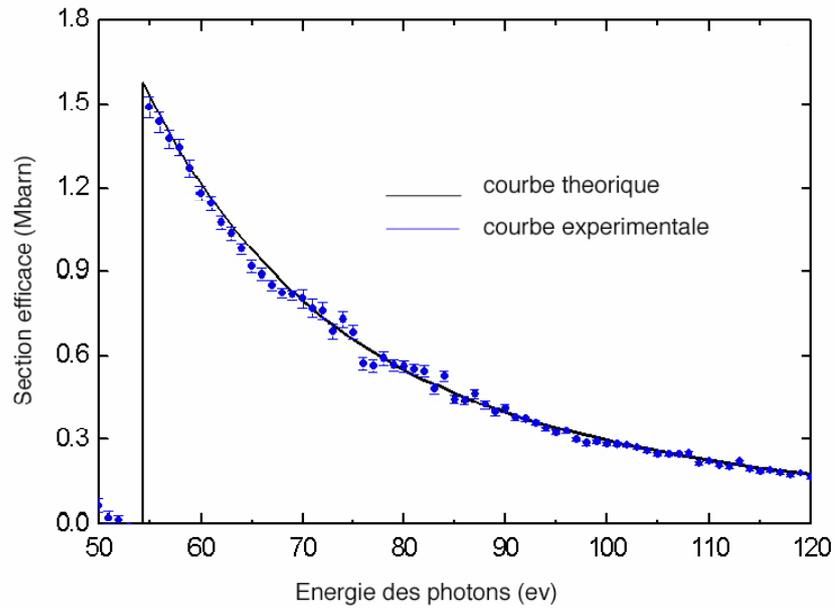


Figure 2.20 : Variation des sections efficaces théorique [Sobelman 1961] et expérimentale de photoionisation de l'ion  $He^+$ .

## Bibliographie

- Adrouche N., Rapport de stage de Master (Grands Instruments) (2003)
- Bex L. et al, Rev. Sci. Instrm. 69, 792 (1998)
- Bizau J.-M. et al., Phys. Rev. Lett. 84, 435 (2000)
- Blieck J., Rapport de stage de Master (Grands Instruments) (2006)
- Champeaux J. P., thèse de doctorat, Université Paris-Sud (2003)
- Covington A.M. et al., Phys. Rev. A 66, 062710 (2002)
- Domke M, Schulz K, Remmers G, Kaindl G and Wintgen D, Phys. Rev. A 53 1424 (1996)
- Kjeldsen, thèse de Master, Université d'Aarhus (Danemark) (1999)
- Kjeldsen H., Dissertation, Université d'Aarhus (Danemark) (2006)
- Kjeldsen H. et al., Astrophys. J. 524, L143 (1999)
- Kjeldsen H. et al., Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B 234, 349 (2005)
- Koizumi T. et al., J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. 79, 289 (1996)
- Lang R, J. Bossler, H. Schulte, K. Tinschert, Rev. of Sci. Instr. 71, 651 (2000)
- Lyon I.C. et al., J. Phys. B : At. Mol. Phys. 19, 4137 (1986)
- Madden R. P. and Codling K., Astrophys. J. 141, 364 (1963).
- Miyake K. P., Kato R. And Yamashita H., Sci. Light 18, 39 (1969)
- Nesmeyanov A.N. « Vapor Pressure of the Chemical Elements » Elsevier Press p439 (1963)
- Oura et al., Phys. Rev. A. 63, 014704 (2001)
- Peart B. et al., J. Phys. B : At. Mol. Phys. 6, 146 (1987)
- Rasmussen M. S. “*Photoionisation of  $K^+$  Using Synchrotron Radiation*” Master thesis at Institute of Physics and Astronomy, University of Aarhus (1999)
- Samson J A R, Techniques of Vacuum Ultra Violet Spectroscopy. John Wiley & Sons, New York (1967)
- Samson J.A.R. et al. J.Phys.B. 27, 887 (1994)
- Sobelman I. I. « Atomic spectra and radiative transitions » Springer-Verlag Press (1961)
- Wolf B. « Ion Sources » CRC Press p333 (1995)
- Yu. Ralchenko, A. E. Kramida, J. Reader, and The NIST ASD Team, NIST Atomic Spectra Database (Version 3.1.5), National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD, (2008), <http://physics.nist.gov/asd3>



# Chapitre 3: Etude de la série isonucléaire du fer

## 3.1 Introduction

Le fer est l'élément le plus lourd produit par les étoiles lors de la nucléosynthèse. Il a ainsi une abondance cosmique significative, lui conférant un rôle de première importance en astrophysique : les raies spectrales de ses ions ont été observées dans la plupart des plasmas d'intérêt astrophysique, dans différents états de charge d'autant plus élevés que le plasma est chaud [Bautista et Pradhan 1998].

La connaissance des grandeurs atomiques caractéristiques des ions de fer, telles que les seuils d'ionisation, les sections efficaces de photoionisation et de photoabsorption, les forces d'oscillateur..., est indispensable pour une modélisation correcte de ces plasmas. Par exemple, de l'observation des raies d'absorption d'un plasma, il est possible de déduire sa composition chimique si les énergies des ions qui le composent ont été au préalable déterminées avec précision [Becker et Butler 1992, Rodriguez et Rubin 2005]. D'autre part, les sections efficaces de photoabsorption atteignent leur maximum d'intensité dans le domaine spectral des XUV, entre quelques dizaines d'électronvolts et 1 keV. Ainsi, les ions de fer constituent le principal moteur du transfert d'énergie à l'intérieur des étoiles comme le Soleil. Là encore, la détermination de l'opacité des plasmas ne pourra se faire que si les sections efficaces de photoionisation sont connues avec précision.

Plusieurs expériences ont été développées jusqu'ici pour étudier les propriétés spectrales des ions de fer. Une a réalisé la mesure des spectres de photoabsorption de plasmas de fer produits par la source de rayons X du « Sandia National Laboratory » aux Etats Unis [Bailey et al. 2007]. Dans le cadre du « FERRUM Project », les forces d'oscillateur des raies spectrales de l'ion de fer simplement ionisé ont été déterminées par fluorescence induite par laser au « Lund Laser Center » [Johansson et al. 2002]. La photoionisation de l'ion  $\text{Fe}^{23+}$  a été étudiée par Epp et al. [2007] en couplant une source d'ions EBIT au laser à électrons libres FLASH à Hambourg.

La principale difficulté commune à toutes ces techniques est la production des ions avec une densité suffisante. Ceci est particulièrement vrai pour les ions de fer à cause de la température d'évaporation très élevée du fer métallique, et explique en partie le peu de données expérimentales disponibles sur les processus de photoionisation pour ces ions. En dehors des quelques résultats expérimentaux cités ci-dessus, les données disponibles sont fournies essentiellement par des études théoriques basées sur différents modèles incluant l'approximation du champ central [Reilman et Manson 1979, Verner et Yakovlev 1995],

MCDF (Multi Configurations Dirac Fock) [Bruneau 1984] et le modèle de la matrice-R. [Cunto et al. 1993, Nahar 1996, Berrington et Ballance 2001, Bautista 2006]

Les ions de fer faiblement chargés sont, avec les éléments de transitions, parmi les systèmes les plus complexes à modéliser en physique atomique, en grande partie à cause de la présence de l'orbitale 3d partiellement pleine. Une complication supplémentaire intervient dans la description de l'excitation d'un électron de la sous-couche interne 3p vers l'orbitale partiellement remplie 3d. La très grande multiplicité de l'état intermédiaire ainsi produit, due au grand nombre de niveaux rendus possibles par le couplage du trou 3p avec les électrons de la sous couche 3d, est responsable d'un nombre « colossal » de raies d'absorption. L'espacement de ces raies étant la plupart du temps inférieur à leur largeur naturelle, elles forment des structures larges et intenses appelées « faisceau de transitions non résolues » (UTA en anglais pour Unresolved Transitions Arrays). [Bauche-Arnoult et al. 1979]. De nombreuses études théoriques ont été menées sur les transitions 3p-3d, je ne citerai ici que celles sur les éléments de transition [Martins et al. 2006] et sur les ions simplement chargés [Hansen et al. 2007].

Dans ce chapitre, je vais décrire les résultats que j'ai obtenus sur les ions de la série isonucléaire du fer  $\text{Fe}^{2+}$  jusqu'à  $\text{Fe}^{6+}$ . Ces mesures complètent les résultats des études antérieures sur le fer atomique [Freist et al. 1996] et sur l'ion monochargé  $\text{Fe}^+$  [Kjeldsen et al. 2002]. Après la présentation des résultats expérimentaux, une comparaison détaillée avec les résultats des différents modèles existants sera réalisée.

## 3.2 Résultats

Les résultats présentés ici ont été obtenus à l'aide du montage expérimental en faisceau colinéaires d'ASTRID, décrit dans le chapitre précédent. Les procédures expérimentales d'acquisition et de traitement des spectres bruts pour déterminer les sections efficaces en valeur absolues sont similaires à celles déjà décrites pour l'ion  $\text{He}^+$ . Les variations entre 30 et 160 eV d'énergie de photon des spectres de photoionisation que j'ai obtenus pour les ions  $\text{Fe}^{2+}$  à  $\text{Fe}^{6+}$  sont montrés figure 3.1, comparés aux mesures de Freist et al. [1996] sur le fer neutre, ainsi qu'à celles de Kjeldsen et al [2002] sur l'ion  $\text{Fe}^+$  obtenues également avec le montage expérimental d'Astrid.

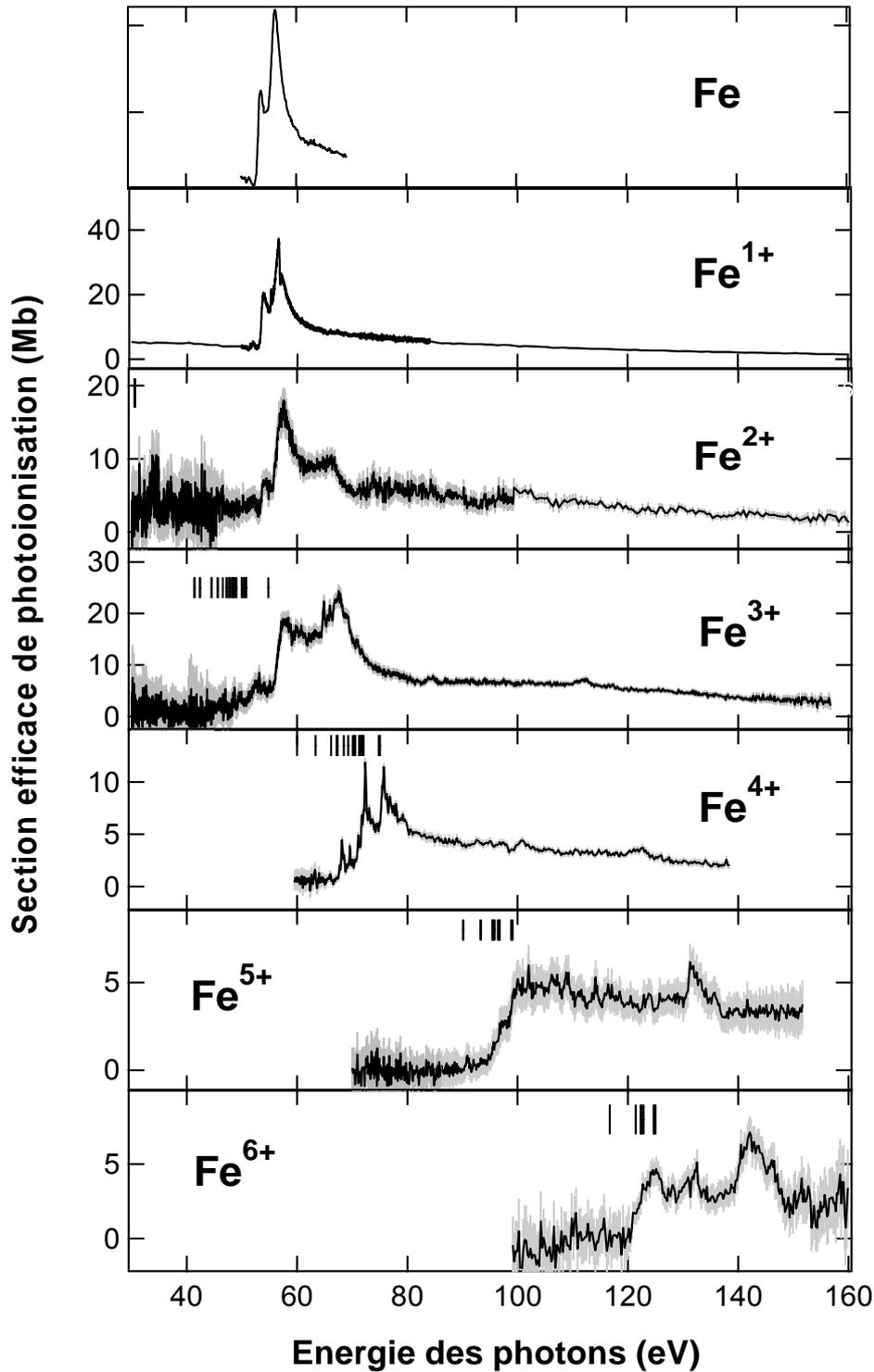


Figure 3.1 : Variation des sections efficaces absolues de photoionisation, de haut en bas, du fer atomique [Freist et al. 1996] et des ions  $Fe^+$  [Kjeldsen et al. 2002] jusqu'au  $Fe^{6+}$ , en fonction de l'énergie des photons. La zone en gris représente l'incertitude statistique sur chaque point. Les barres verticales au-dessus des spectres donnent la position des seuils d'ionisation pour chaque ion dans l'état fondamental et dans les états métastables de même configuration que le fondamental [Ralchenko et al. 2008]. L'unité des sections efficaces du  $Fe^0$  est arbitraire.

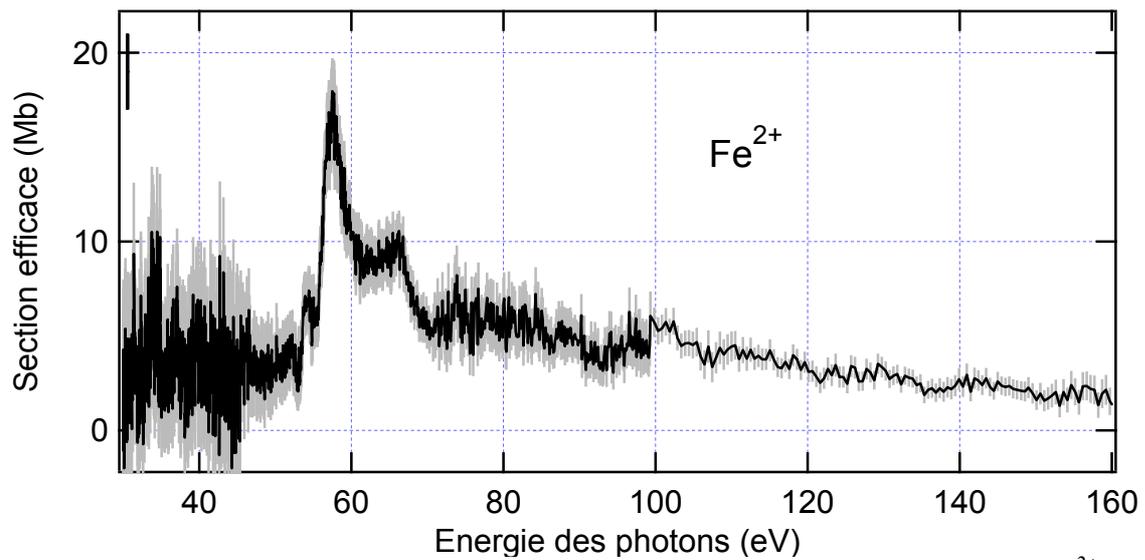


Figure 3.2 : Variation de la section efficace absolue de photoionisation de l'ion  $Fe^{2+}$  en fonction de l'énergie des photons.

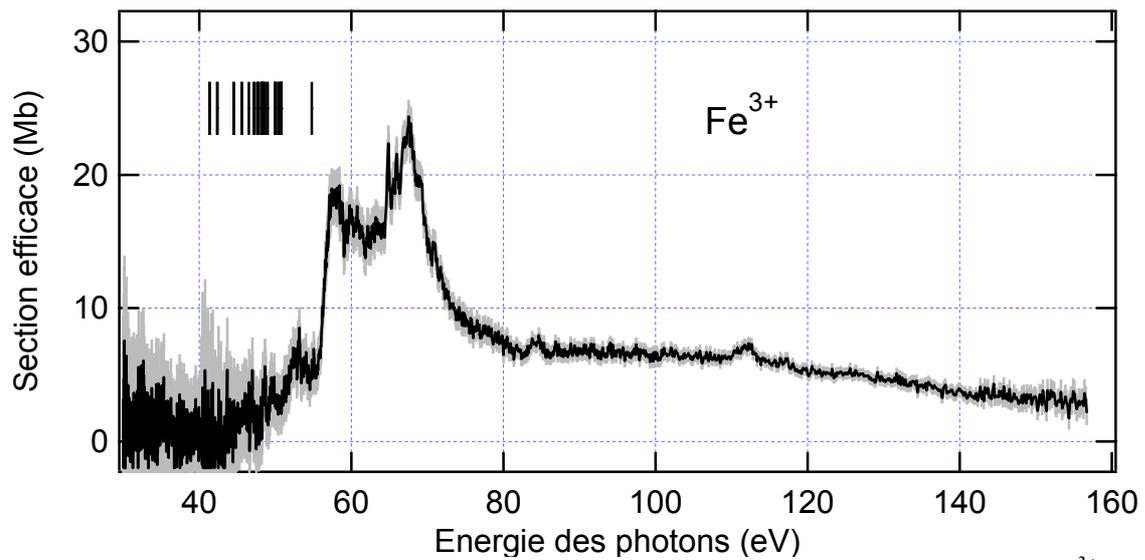


Figure 3.3 : Variation de la section efficace absolue de photoionisation de l'ion  $Fe^{3+}$  en fonction de l'énergie des photons.

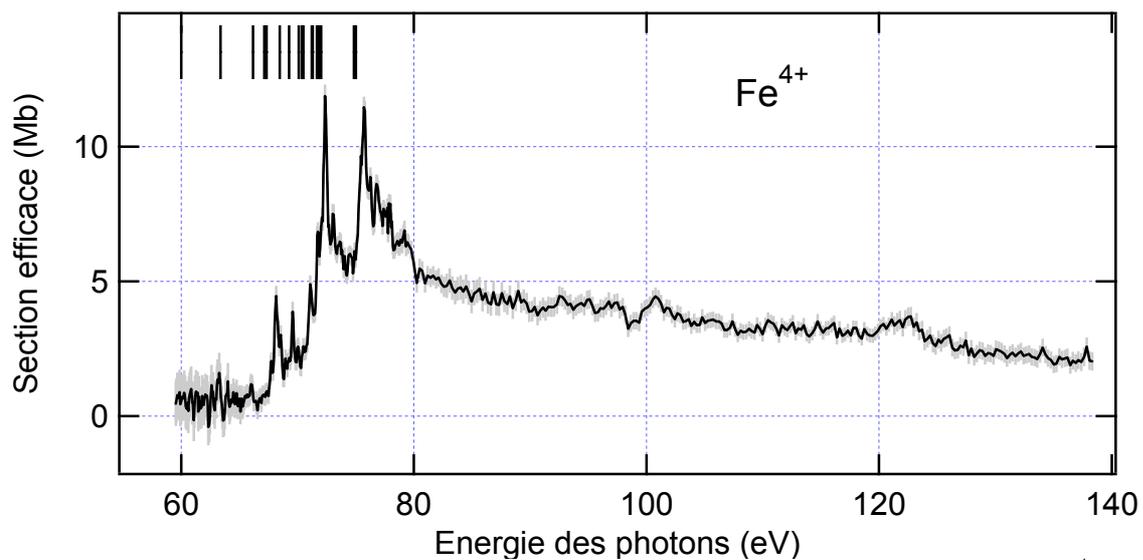


Figure 3.4 : Variation de la section efficace absolue de photoionisation de l'ion  $\text{Fe}^{4+}$  en fonction de l'énergie des photons.

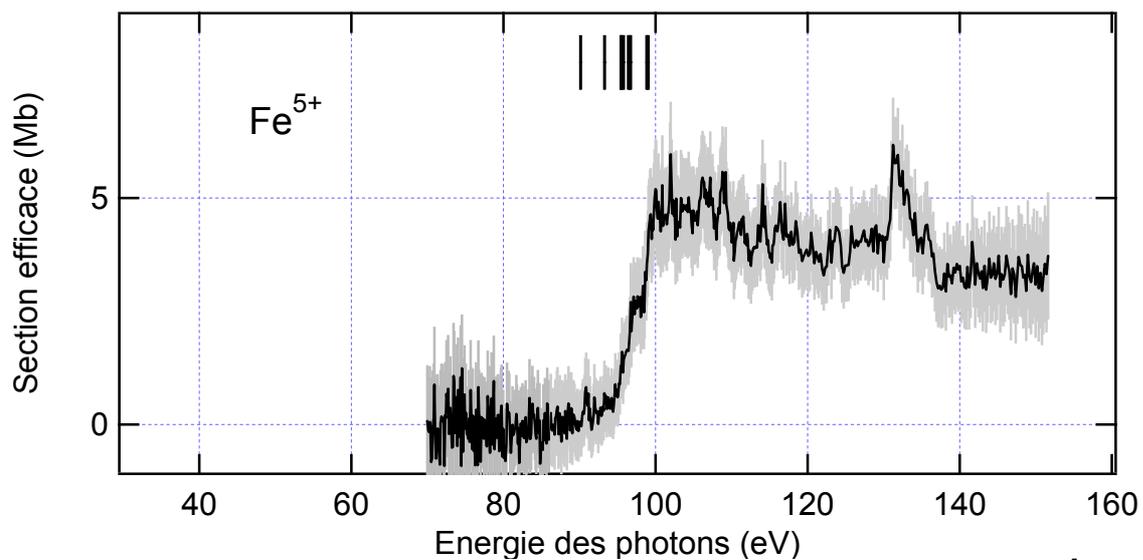


Figure 3.5 : Variation de la section efficace absolue de photoionisation de l'ion  $\text{Fe}^{5+}$  en fonction de l'énergie des photons.

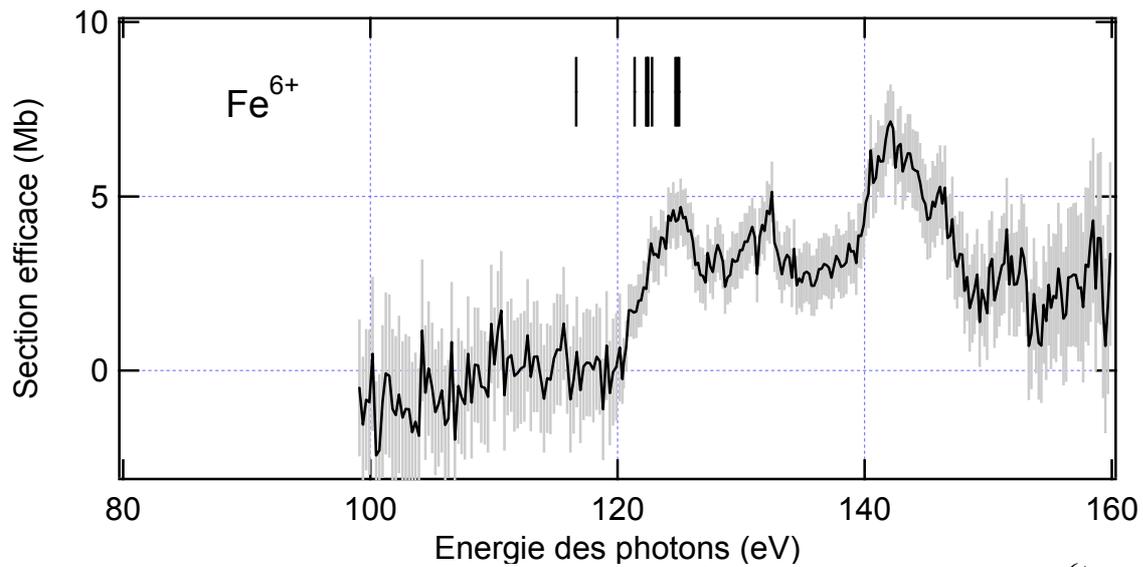


Figure 3.6: Variation de la section efficace absolue de photoionisation de l'ion  $Fe^{6+}$  en fonction de l'énergie des photons.

Les valeurs des bandes passantes du monochromateur utilisées pour obtenir ces spectres dans différentes gammes d'énergie sont données table 3.1. Pour compenser la faible densité des ions cibles dans la zone d'interaction, les spectres ont été enregistrés avec des ouvertures de la fente de sortie du monochromateur assez larges, en particulier dans la région des hautes énergies de photon où peu de résonances intenses sont attendues et où les sections efficaces sont dominées par les processus de photoionisation directe.

	Gamme d'énergie (eV)	Bande passante (eV)
Fe <sup>1+</sup>	16-26	0,005-0,01
	55-75	0,055-0,075
Fe <sup>2+</sup>	30-60	0,10-0,87
	60-100	0,24-0,87
	100-160	1,67-4,98
Fe <sup>3+</sup>	30-45	0,06-0,25
	45-65	0,13-0,43
	65-100	0,30-0,90
Fe <sup>4+</sup>	100-160	1,67-4,98
	60-80	0,13-0,27
Fe <sup>5+</sup>	80-140	0,49-1,87
	70-150	0,35-2,25
Fe <sup>6+</sup>	100-160	1,67-4,98

Table 3.1 : Limites inférieures et supérieures des bandes passantes du monochromateur utilisées dans différentes gammes d'énergie de photon pour obtenir les spectres de photoionisation de la série Fe<sup>2+</sup>-Fe<sup>6+</sup>. Les valeurs pour l'ion Fe<sup>+</sup> sont tirées de Kjeldsen et al [2002].

Chacun de mes spectres montrés figure 3.1 est le résultat de plusieurs acquisitions enregistrées pendant deux campagnes de mesures différentes. Ils représentent la variation de la section efficace absolue de photoionisation simple pour les ions incidents Fe<sup>Q+</sup>. Le spectre SE(hv) montré est obtenu comme la moyenne pondérée de tous les spectres enregistrés.

$$SE(h\nu) = \frac{\sum_i \frac{SE_i}{dSE_i^2}}{\sum_i \frac{1}{dSE_i^2}} \quad ; \quad dSE(h\nu) = \sqrt{\frac{1}{\sum_i \frac{1}{dSE_i^2}}}$$

où SE<sub>i</sub> est la section efficace mesurée à l'énergie de photon hv lors des acquisitions individuelles i et dSE<sub>i</sub> l'erreur statistique sur chaque acquisition de spectre. Les barres d'erreurs en gris représentent l'incertitude statistique sur chaque point enregistré dSE(hv). A l'incertitude statistique s'ajoute l'incertitude systématique, en général de l'ordre 10 à 15 %. Elle est due essentiellement à l'incertitude sur la détermination du recouvrement entre le faisceau d'ions et de photons, ainsi que sur la détermination du flux de photons. Elle atteint 20% dans les cas des ions Fe<sup>2+</sup> et Fe<sup>4+</sup> à cause d'une contamination des faisceaux d'ions incidents par d'autres ions qui ont les mêmes rapports masse sur charge que ceux étudiés et ne sont donc pas séparés à la sortie de l'aimant dipolaire. Pour l'ion Fe<sup>2+</sup>, il s'agit des ions CO<sup>+</sup> et N<sub>2</sub><sup>+</sup>, pour l'ion Fe<sup>4+</sup> de l'ion N<sup>+</sup>. Dans le cas de l'ion Fe<sup>4+</sup>, la contribution de l'ion N<sup>+</sup> dans le spectre obtenu a été estimée à partir de la section efficace de photoionisation déjà mesurée pour cet ion [Kjeldsen et al. 2002b]. Une contamination éventuelle du faisceau par des ions

$N_2^{2+}$  a été négligée [Bizau et al. 2006]. La quantité d'ions  $N^+$  présents dans le faisceau d'ions  $Fe^{4+}$  est déterminée en comparant l'intensité de la section efficace de photoionisation mesurée dans la région d'énergies de photon 40-45eV, en détectant les ions  $N^{2+}$ , avec celle publiée. Cette procédure a été répétée après chaque acquisition de spectre d'ion  $Fe^{4+}$ , en gardant les mêmes conditions expérimentales de production et de transport de faisceau d'ions cibles jusqu'à la zone d'interaction. La même procédure n'est pas applicable dans le cas de l'ion  $Fe^{2+}$  à cause de la double contamination du faisceau. La population d'ions de  $^{56}Fe^{2+}$  dans le faisceau incident a été déterminée à partir de l'intensité du pic non pollué de l'isotope  $^{54}Fe^{2+}$  observé sur les spectres de masse à la sortie du premier aimant dipolaire, tel que celui montré figure 3.7. Ces spectres de masse ont été enregistrés avant et après chaque acquisition de spectres de photoionisation pour l'ion  $Fe^{4+}$ . La quantité de fer présente dans le faisceau d'ions de rapport masse sur charge égal à 28 est déterminée directement à partir de la surface du pic de rapport masse sur charge égal à 27 corrigée du pourcentage de l'isotope  $^{54}Fe$  dans le fer naturel, qui est égal à 6,37% [Roseman et Taylor 1997].

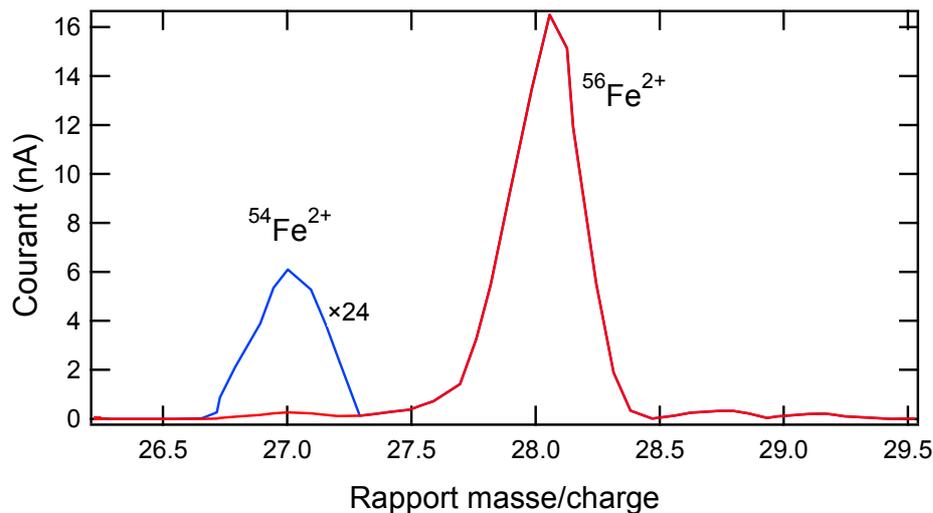


Figure 3.7 : Spectre de masse des ions à la sortie de la source d'ions RCE.

Pour interpréter les spectres expérimentaux, les traits communs observés pour l'ensemble des ions de la série de fer seront décrits en prenant comme exemple l'ion  $Fe^{5+}$ . Cet ion dans l'état fondamental a pour configuration électronique :  $[Ar] 3d^3$ . Le schéma de ses niveaux d'énergie ainsi qu'une schématisation des processus de photoionisation directe et résonante sont présentés sur le panneau de gauche de la figure 3.8. La section efficace mesurée pour l'ion  $Fe^{5+}$  est reproduite sur le panneau de droite.

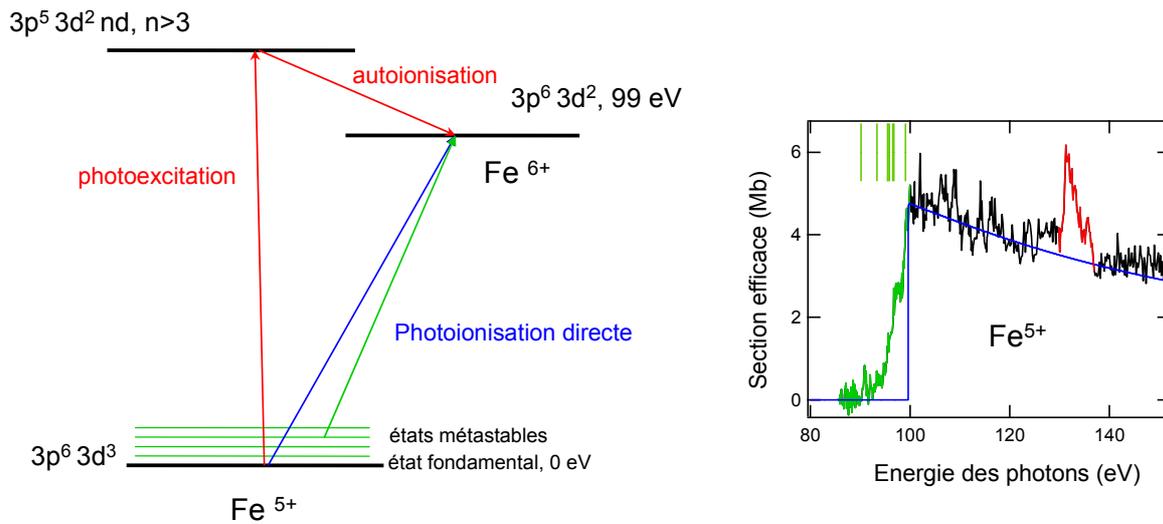
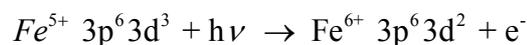


Figure 3.8 : Spectre de section efficace de photoionisation de l'ion  $Fe^{5+}$  (à droite) et schéma des niveaux d'énergie pour le même ion illustrant la photoionisation directe en bleu et la photoionisation résonante en rouge (à gauche).

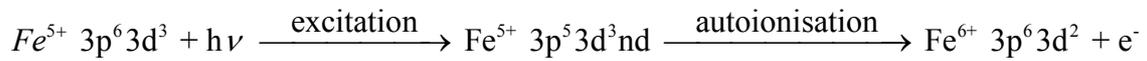
On observe sur le spectre de photoionisation de l'ion  $Fe^{5+}$  une augmentation par marches successives du signal, suivie d'une décroissance lente. Les marches à 91, 95,5, 96,7 et 99,1 eV sont le signe du passage de plusieurs seuils d'ionisation. Elles sont suivies d'un fond continu, associé à l'ionisation directe de l'ion  $Fe^{5+}$  vers l'ion  $Fe^{6+}$ , présenté par la couleur bleue sur la figure 3.8. Sur ce fond apparaissent des structures larges, la plus importante étant à 131.5 eV.

D'après les tables du NIST [Ralchenko et al. 2008], on peut identifier 13 termes qui ne peuvent se désexciter par transition dipolaire radiative, et sont métastables, dont 7 ont la même configuration que le terme fondamental. La position des marches est clairement associée à la position des seuils d'ionisation pour les ions dans ces 7 états métastables, reportée sur la figure par les barres verticales au-dessus du spectre. Le seuil pour le terme fondamental  $^4F$  est à 99 eV. L'observation du signal à plus basse énergie est le signe de la présence dans la zone d'interaction d'ions  $Fe^{5+}$  dans des états métastables. Ces états excités sont produits dans la source RCE, et ont une durée de vie supérieure au temps de vol des ions depuis la source jusqu'à la zone d'interaction. Les marches observées sur le spectre correspondent à l'ouverture des seuils de photoionisation directe en sous-couche 3d des ions  $Fe^{5+}$  dans l'état fondamental et dans les états métastables de même configuration que l'état fondamental. Ces processus peuvent être résumés par l'équation :



Les états de configuration  $3d^2 4s$  sont aussi métastables. Ils sont situés environ à 35 eV au-dessus de l'état fondamental. Aucun signal n'étant observé en-dessous de 91 eV, il est probable que ces états contribuent peu au spectre de photoionisation expérimental.

La structure large (UTA) à 131,5 eV peut être interprétée par un processus de photoionisation résonante dans lequel les photons, de cette énergie, excitent un électron de la sous-couche 3p vers une orbitale vide nd ou ns ( $n > 3$ ) et laissent l'ion  $Fe^{5+}$  avec une lacune en couche interne 3p. L'ion se déexcite alors par autoionisation (voie d'ionisation en rouge figure 3.8). Ce processus se résume par l'équation :



L'interférence quantique entre les voies de photoionisation directe et photoionisation résonante peut créer des profils asymétriques de Fano [Fano 1961]. Ils ne sont pas observés ici à cause du grand nombre de raies présentes et de la bande passante expérimentale insuffisante. Les mêmes caractéristiques générales sont observées sur l'ensemble des spectres expérimentaux. Les configurations et les positions des seuils d'ionisation pour l'état fondamental de chaque ion de la série de fer sont données dans la table 3.2.

ion	Configurations des états métastables	Nombre de termes métastables	Seuil d'ionisation à partir de l'état fondamental
Fe	$3d^6 4s^2$	8	7,9024 eV
	$3d^7 4s$	12	
Fe <sup>1+</sup>	$3d^6 4s$	22	16,1877 eV
	$3p^6 3d^7$	8	
Fe <sup>2+</sup>	$3p^6 3d^6$	14	30,6514 eV
	$3d^5 4s$	27	
Fe <sup>3+</sup>	$3p^6 3d^5$	16	54,8010 eV
	$3d^4 4s$	23	
Fe <sup>4+</sup>	$3p^6 3d^4$	16	75,0104 eV
	$3d^3 4s$	16	
Fe <sup>5+</sup>	$3p^6 3d^3$	8	99,0634 eV
	$3d^3 4s$	6	
Fe <sup>6+</sup>	$3p^6 3d^2$	5	124,9761 eV
	$3d 4s$	2	

Table 3.2: Configurations et valeurs des seuils d'après les tables du NIST pour la série Fe à Fe<sup>6+</sup>.

Le seuil d'apparition du signal est suivi par une décroissance lente sur le fond continu pour l'ensemble des spectres. Sur ce fond apparaissent des structures larges ou UTA de type 3p-3d pour les états de charge les moins élevés. Ces structures s'élargissent et leur position se décale lentement vers les hautes énergies avec l'état de charge de l'ion, le centre de la structure passant de 56 eV pour le fer neutre, à 64,6 eV pour l'ion Fe<sup>3+</sup>. La brusque diminution de l'intensité de la structure UTA observée pour l'ion Fe<sup>4+</sup> correspond à la superposition du seuil d'ionisation avec la position de l'UTA. Pour les ions de charge supérieure, l'UTA se situe à des énergies inférieures aux seuils d'ionisation. Les états peuplés se désexcitent alors par fluorescence et ne peuvent pas être observés sur nos spectres expérimentaux de photoionisation. Les structures observées sur les spectres des ions Fe<sup>5+</sup> et Fe<sup>6+</sup> correspondent aux excitations 3p-4d.

En plus de nos spectres de photoionisation simple, nous avons pu mesurer le spectre de photoionisation double pour l'ion Fe<sup>3+</sup>. Il est présenté sur la figure 3.9 avec les spectres de double photoionisation, mesuré par Freist et al. [1996] pour le fer neutre et par Kjeldsen et al. [2002] pour l'ion Fe<sup>+</sup>.

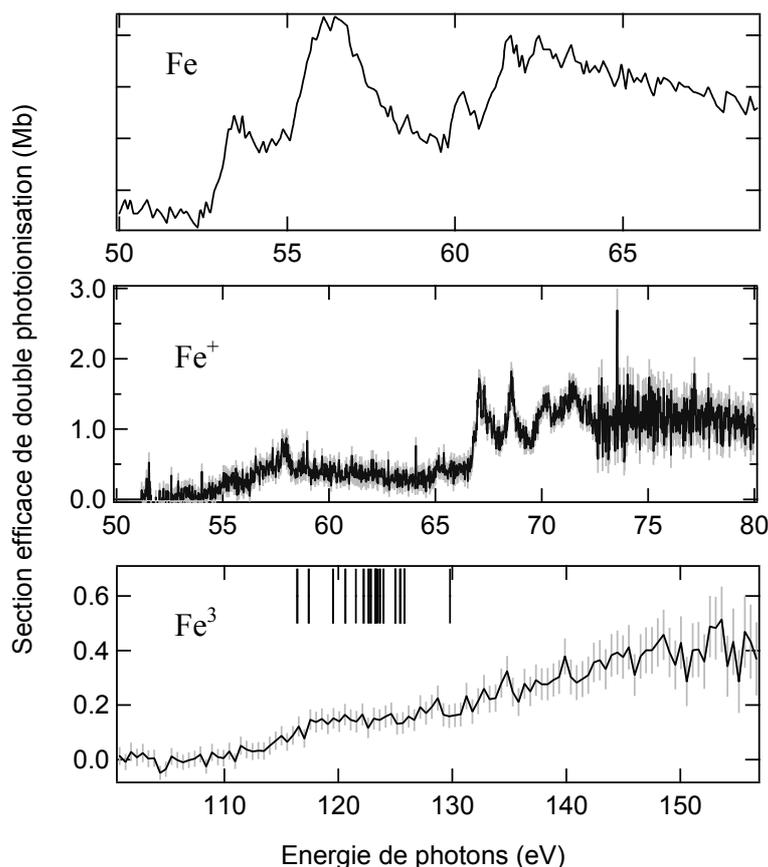


Figure 3.9: Spectres de section efficace de double photoionisation pour le fer neutre [Freist et al. 1996] et les ions  $Fe^{1+}$  [Kjeldsen et al. 2002a] et  $Fe^{3+}$  (ce travail). Les barres grises représentent l'incertitude statistique, les barres noires représentent les seuils donnés par le NIST pour l'ion  $Fe^{3+}$  pour l'état fondamental et les états métastables de même configuration. La section efficace du fer atomique est en unité arbitraire.

On note la faible intensité de ce processus, inférieure de près d'un ordre de grandeur à celle de la photoionisation simple. La structure UTA n'apparaît clairement que sur le spectre de fer neutre, suite à un processus de double photoionisation résonante comme décrit dans l'introduction. Elle est pratiquement invisible pour l'ion  $Fe^+$ . L'augmentation du signal vers 66,9 eV est interprétée par Kjeldsen et al. [2002a] comme due à une possible ouverture des seuils d'ionisation en sous-couche 3p, la lacune 3p se désexcitant par effet Auger. Il faut noter cependant que cette valeur est 10 eV plus basse que celle calculée par Verner et Yakovlev [1995], à 76,2 eV.

Comme pour la photoionisation simple, on observe sur le spectre de photoionisation double de l'ion  $Fe^{3+}$  une augmentation du signal à l'ouverture des seuils de double photoionisation. L'apparition du signal au dessous du seuil de l'état fondamental à 129, eV est une signature supplémentaire de la contribution d'ions dans des états métastables. Aucune structure résonante n'est observable sur ce spectre. Deux processus peuvent contribuer à l'intensité de la section efficace de double photoionisation : la double photoionisation directe

ou « shake off », et la photoionisation simple en sous-couche 3p suivie par l'émission d'un électron Auger. L'intensité du shake off est généralement nettement plus faible que la photoionisation directe en sous-couche 3p, en particulier près du seuil de double ionisation. La faible intensité mesurée au seuil de double photoionisation de l'ion  $\text{Fe}^{3+}$  peut s'expliquer par le fait que seul le processus shake off peut contribuer, le seuil de photoionisation en sous-couche 3p et la désexcitation de la lacune 3p n'est pas autorisée à cette énergie de photons. Au fur et à mesure que l'énergie de photon augmente, des seuils d'ionisation en sous-couche 3p accompagnés d'excitation s'ouvrent, et la désexcitation d'un trou en couche interne (3p) devient possible.

Il n'a pas été possible de mesurer la section efficace de double photoionisation pour l'ion  $\text{Fe}^{2+}$  à cause d'un rapport signal/bruit trop faible. Pour les états de charge plus élevés, les seuils de double photoionisation sont à une énergie supérieure au maximum d'énergie de photon disponible sur la ligne.

Afin d'interpréter plus avant mes spectres expérimentaux, je vais dans la suite comparer mes résultats avec les résultats théoriques existants, utilisant des modèles de complexité croissante : les modèles à électrons indépendants, un modèle MCDF (code OPAS), et des modèles matrice-R.

## 3.3 Comparaison de nos résultats expérimentaux avec les résultats des modèles

### 3.3.1 Modèles à électrons indépendants

Pour certaines applications, il est parfois suffisant de ne conserver que l'allure générale des sections efficaces de photoionisation en négligeant les structures résonantes. Pour y parvenir, plusieurs méthodes ont été utilisées: une consiste à calculer les sections efficaces de photoionisation en se basant sur un modèle simplifié négligeant la plupart des corrélations électroniques (modèles dits à électrons indépendants) et en ne traitant que le cas de la photoionisation directe [Reilman et Manson 1979, Verner et Yakovlev 1995]. Une seconde consiste à moyenniser l'effet des résonances présentes dans des sections efficaces de photoionisation préalablement calculées avec un modèle traitant explicitement les corrélations électroniques, comme il a été fait par Bautista [Bautista et al. 1998] et Verner [Verner et al. 1996] à partir des données de l'« Opacity Project ». Je ne parlerai ici que de la première approche, la deuxième n'étant qu'un cas particulier des résultats matrice-R de l'Opacity Project qui seront discutés plus loin.

Les calculs de Reilman-Manson [1979] dérivent d'une approche Hartree-Slater (HS) non relativiste. Les calculs de Verner et Yakovlev [1995], basés sur une approche Hartree-Dirac-Slater (HDS), sont très semblables aux précédents, incluant en plus quelques corrections relativistes. Les auteurs donnent une forme analytique qui permet de représenter les sections efficaces de photoionisation dans les différentes sous-couches de tous les atomes et les ions des éléments de l'hydrogène jusqu'au zinc ( $Z \leq 30$ ).

La figure 3.10 présente les résultats de ces calculs, comparés à nos spectres expérimentaux. Comme prévu, les deux calculs donnent des résultats très proches, les effets relativistes ne jouant pas un grand rôle dans les ions légers et aux basses énergies de photon considérées ici. Dans les deux calculs, seules les sections efficaces de photoionisation des ions dans l'état fondamental sont considérées. Les marches observées sur les sections efficaces calculées sont dues à l'ouverture des voies d'ionisation en sous couche 3d, 3p et 3s. Seuls les seuils d'ionisation en sous-couche 3d sont observés expérimentalement mais à une énergie plus basse que celle calculée, en partie à cause de la contribution des états métastables dans les spectres expérimentaux. A l'exception des ions  $\text{Fe}^{2+}$  et  $\text{Fe}^{5+}$ , l'intensité des sections efficaces de photoionisation directe prédite par les calculs reproduisent assez bien nos mesures, bien que les calculs ne considèrent que les ions dans l'état fondamental. Ceci peut

s'expliquer par le fait que seuls les ions dans les états métastables de même configuration que l'état fondamental contribuent aux spectres expérimentaux et que les sections efficaces de photoionisation directes sont indépendantes des termes initiaux de même configuration dans un modèle négligeant les corrélations électroniques. Pour l'ion  $\text{Fe}^{5+}$ , les calculs représentent correctement la variation de la section efficace, mais avec une intensité systématiquement plus faible de 25% par rapport au fond continu du spectre expérimental. Dans le cas de l'ion  $\text{Fe}^{2+}$ , l'intensité de la section efficace mesurée est plus faible que celle calculée jusqu'à un facteur deux aux énergies de photon plus basses que les UTA.

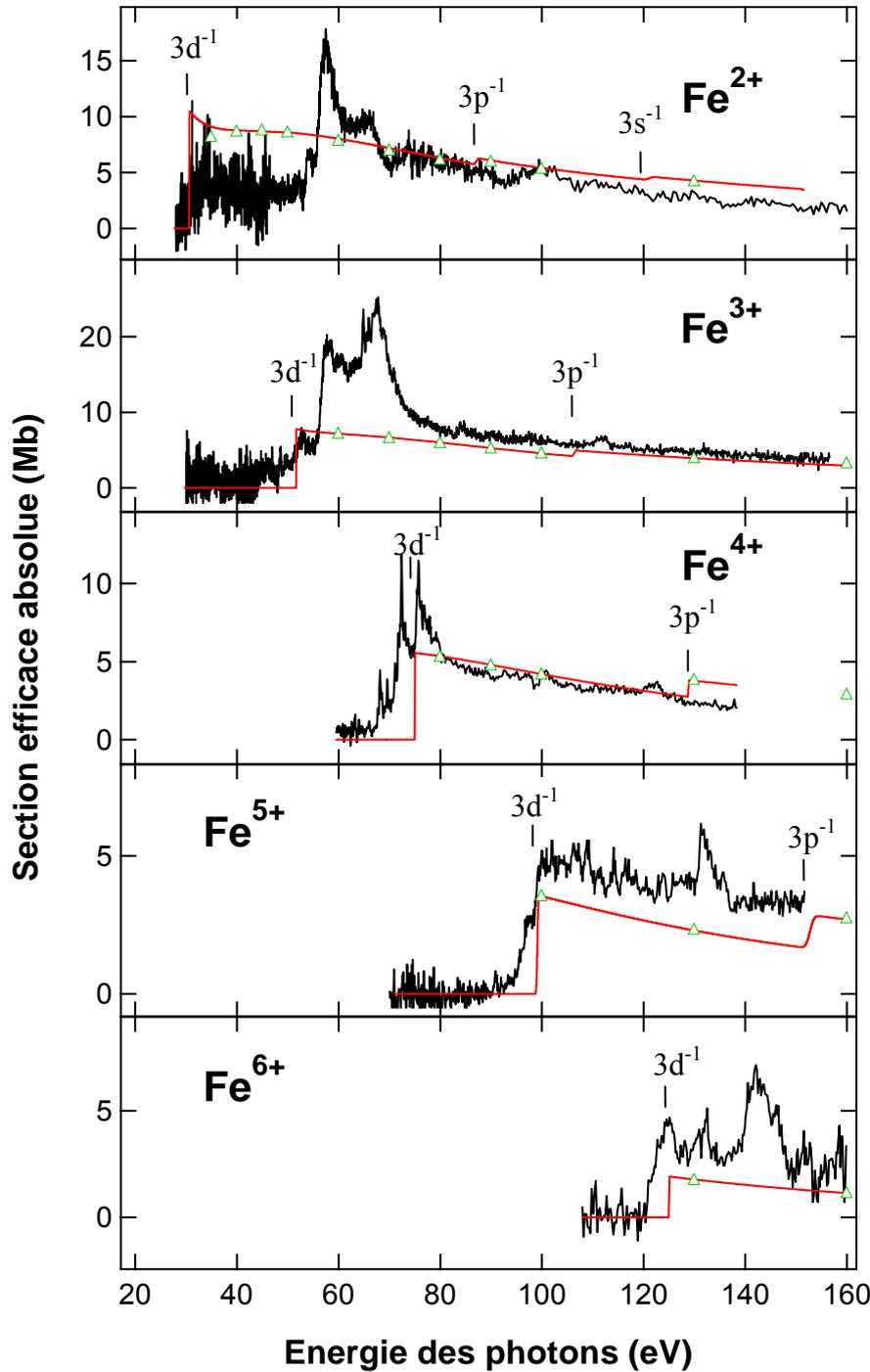


Figure 3.10 : Comparaison des sections efficaces de photoionisation expérimentales (courbes en noir) pour la série  $Fe^{2+}$ - $Fe^{6+}$  avec les résultats des calculs utilisant un modèle à électrons indépendants: Verner et Yakovlev [1995], courbes en rouge et Reilman et Manson [1979], triangles verts. La position des seuils d'ionisation en sous-couches 3d, 3p et 3s calculées par Verner et Yakovlev sont indiquées par les barres au-dessus des spectres.

La figure 3.11 montre le spectre expérimental de double photoionisation de l'ion  $Fe^{3+}$ , comparé à la section efficace de photoionisation en sous-couche 3p calculée par Verner et Yakovlev (1995).

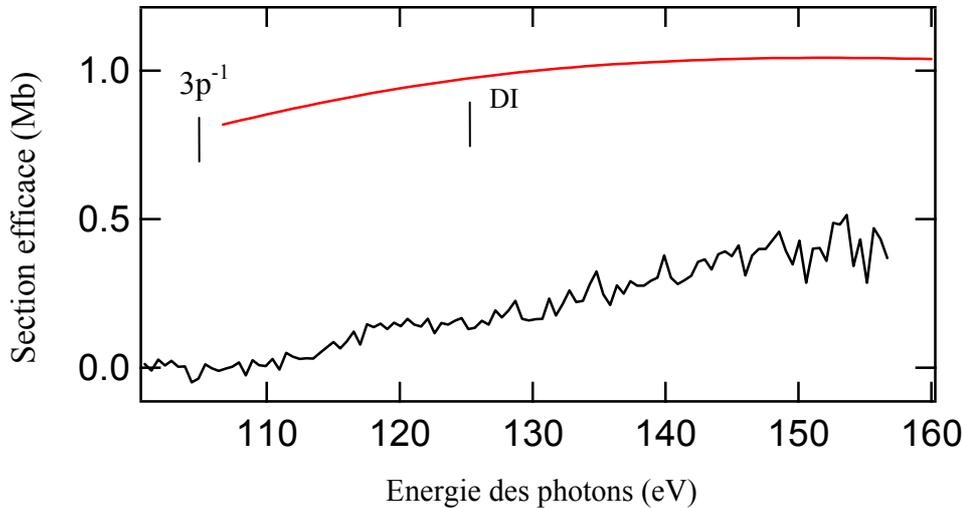


Figure 3.11: Spectre mesuré de section efficace de double photoionisation pour l'ion  $Fe^{3+}$  (en noir) comparé avec les calculs de Verner [1995] pour la photoionisation simple en sous-couche 3p (courbe rouge).

L'intensité de la section efficace calculée est deux à trois fois plus élevée que celle mesurée. Le seuil de photoionisation en sous-couche 3p est à 106,7 eV d'après Verner et Yakovlev, soit plus de 20 eV plus bas que le seuil de double ionisation donné par Ralchenko et al. [2008]. Seul le processus shake off, d'intensité bien plus faible que la section efficace de photoionisation en sous-couche 3p, peut contribuer à la section efficace de double photoionisation aux énergies de photon inférieures au seuil de double photoionisation.

### 3.3.2 Calculs MCDF (Code OPAS)

Nos mesures de sections efficaces de photoionisation sur la série isonucléaire du fer ont été réalisées en collaboration avec des théoriciens du CEA de Bruyères-le-Chatel dans le but de tester leur code OPAS, développé pour la modélisation des plasmas denses et chauds. Le code est basé sur une approche de type Dirac-Fock multi-configurationnelle [Bruneau 1984]. Les calculs de sections efficaces de photoexcitation et de photoionisation directe sont effectués indépendamment, négligeant de ce fait le terme d'interférence entre les deux voies de photoionisation. Le calcul des sections efficaces de photoexcitation donne accès à la position, à l'intensité et à la largeur naturelle des raies d'excitation vers les niveaux autoionisants, tandis que le calcul de la photoionisation directe renseigne les variations du fond continu. Les sections efficaces de photoionisation directe des sous-couches 3s, 3p et 3d sont déterminées à partir des calculs à électrons indépendants. Les fonctions d'onde radiales

des électrons liés sont déterminées en minimisant l'énergie de la configuration de l'état fondamental en utilisant la méthode du potentiel optimisé [Talman et Shadwick 1976] qui permet d'optimiser plusieurs états au cours d'un même calcul. Les fonctions radiales des électrons libres sont calculées avec le même potentiel optimisé. Les transitions  $3p \rightarrow ns, nd$  sont incluses dans le calcul des sections efficaces de photoexcitation jusqu'à  $n=6$ . Pour chaque paire de configurations connectées par une transition dipolaire électrique, le calcul en couplage intermédiaire des raies individuelles est réalisé à l'aide d'un code MCDF [Bruneau 1984]. Pour respecter la règle de sommation de Thomas-Reich-Kuhn, la force d'oscillateur totale est normalisée à celle déterminée par le modèle à électrons indépendants en utilisant des fonctions d'onde radiales liées, calculées par la méthode du potentiel optimisé citée plus haut. La figure 3.12 montre une comparaison des spectres expérimentaux avec les résultats du code OPAS. Pour les comparer aux résultats expérimentaux, les spectres théoriques ont été reconstitués en effectuant la somme des sections efficaces de photoionisation individuelles pour chaque terme de même configuration que le terme fondamental, pondérée par le poids statistique du niveau :

$$SE(h\nu) = \frac{\sum (2j+1) \times SE_i(h\nu)}{\sum (2j+1)}$$

où  $2j+1$  est le poids statistique du niveau,  $SE(h\nu)$  la section efficace reconstituée de l'ion et  $SE_i(h\nu)$  la section efficace individuelle du niveau.

Afin de simuler l'élargissement expérimental, chaque spectre théorique  $SE(h\nu)$  est convolué par une fonction gaussienne de largeur à mi-hauteur variable représentant la variation de la bande passante expérimentale donnée par la table 3.1 pour les différentes gammes d'énergie.

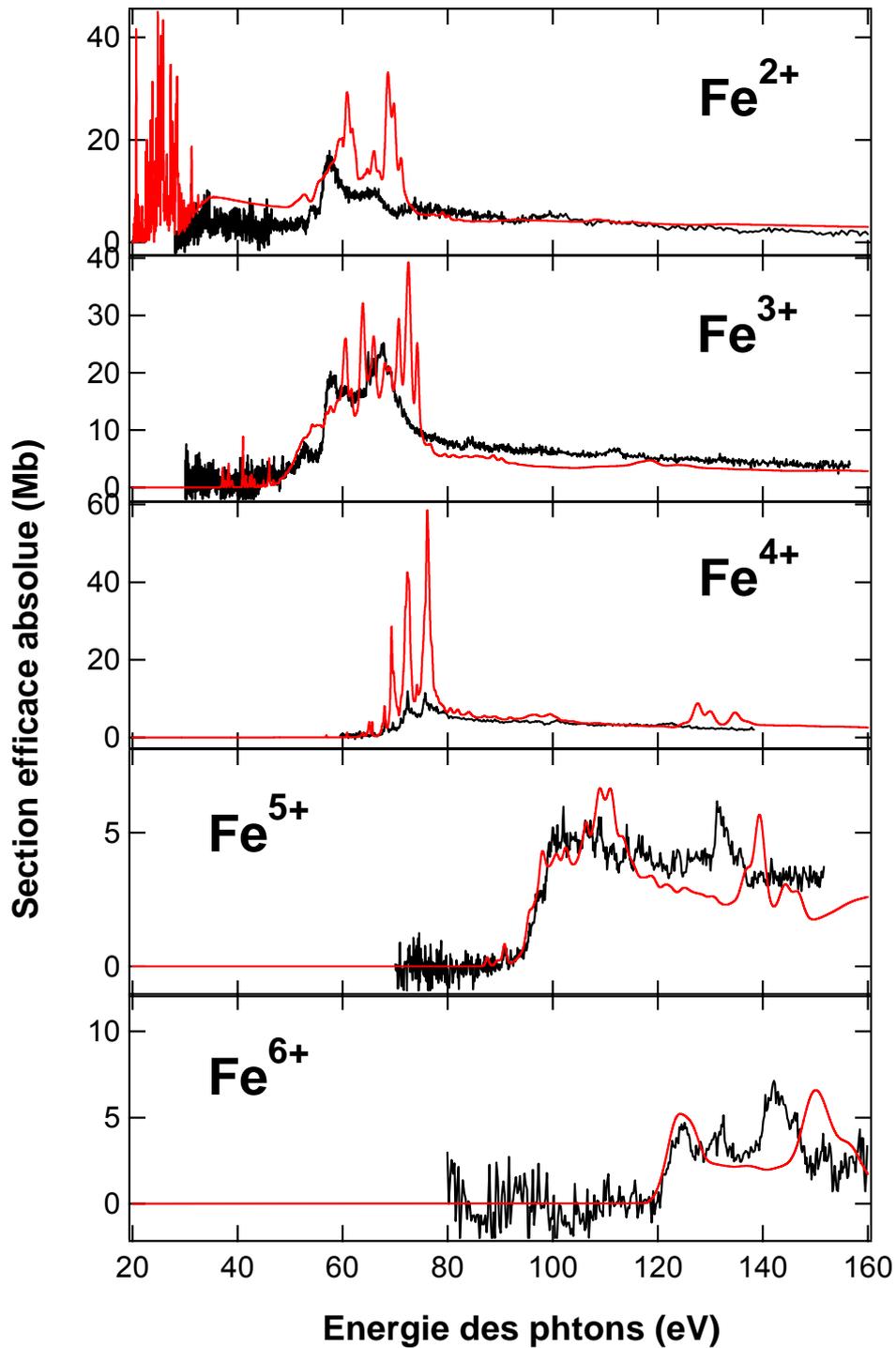


Figure 3.12 : Comparaison des sections efficaces absolues de photoionisation expérimentales (courbes en noir) pour la série  $\text{Fe}^{2+}$ - $\text{Fe}^{6+}$  avec les spectres reconstruits à partir des calculs réalisés avec le code OPAS (courbes en rouge). La courbe expérimentale pour  $\text{Fe}^{3+}$  est la somme des sections efficaces de simple et de double photoionisation.

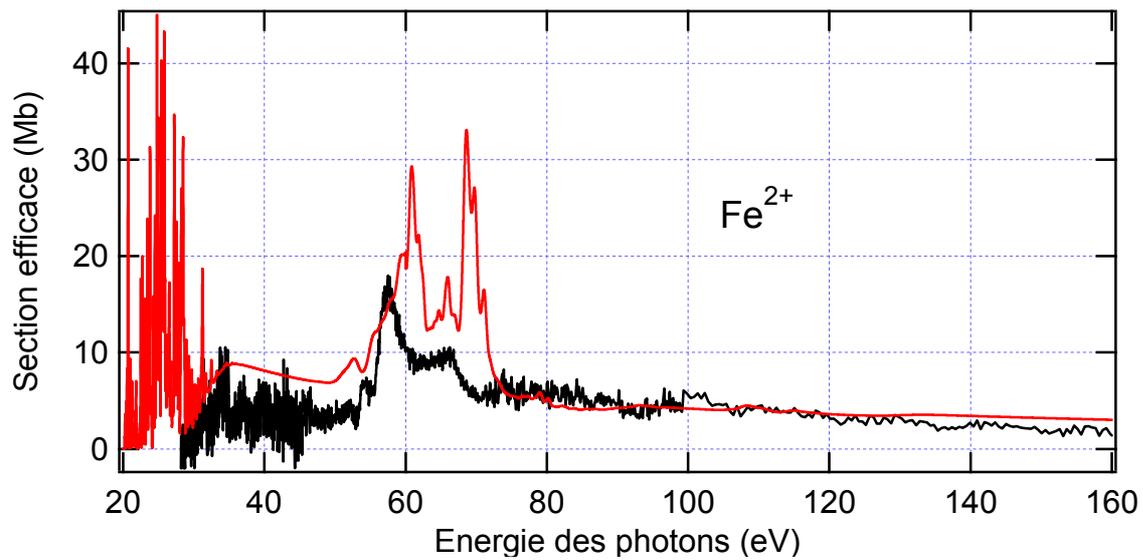


Figure 3.13 : Comparaison de la section efficace absolue de photoionisation expérimentale de l'ion  $Fe^{2+}$  (courbe en noir) avec le spectre reconstruit à partir des calculs réalisés avec le code OPAS (courbes en rouge).

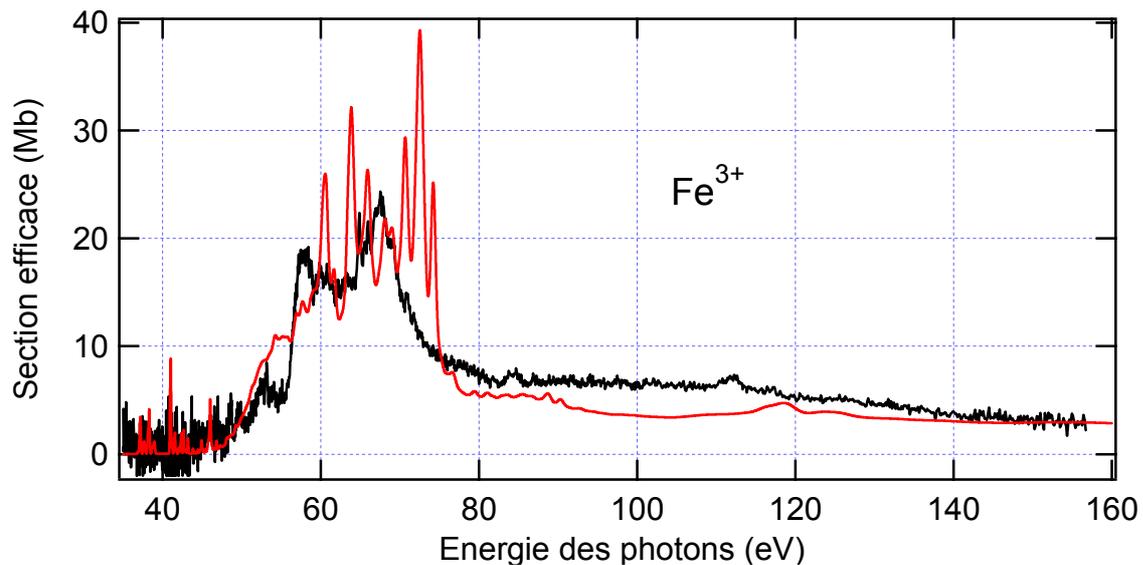


Figure 3.14 : Comparaison de la section efficace absolue de photoionisation expérimentale de l'ion  $Fe^{3+}$  (courbe en noir) avec le spectre reconstruit à partir des calculs réalisés avec le code OPAS (courbes en rouge).

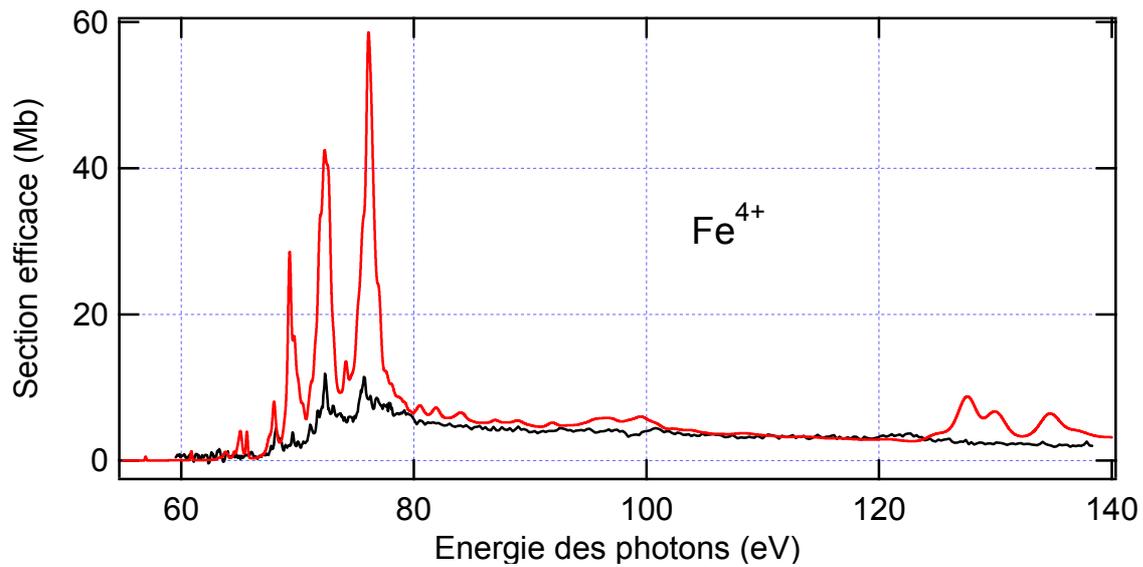


Figure 3.15 : Comparaison de la section efficace absolue de photoionisation expérimentale de l'ion  $Fe^{4+}$  (courbe en noir) avec le spectre reconstruit à partir des calculs réalisés avec le code OPAS (courbes en rouge).

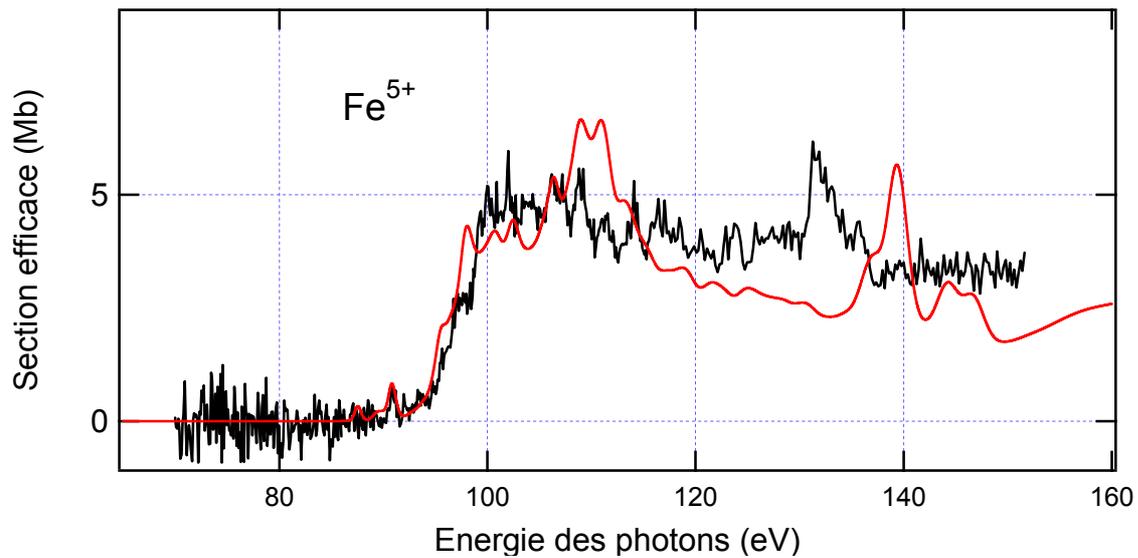


Figure 3.16 : Comparaison de la section efficace absolue de photoionisation expérimentale de l'ion  $Fe^{5+}$  (courbe en noir) avec le spectre reconstruit à partir des calculs réalisés avec le code OPAS (courbes en rouge).

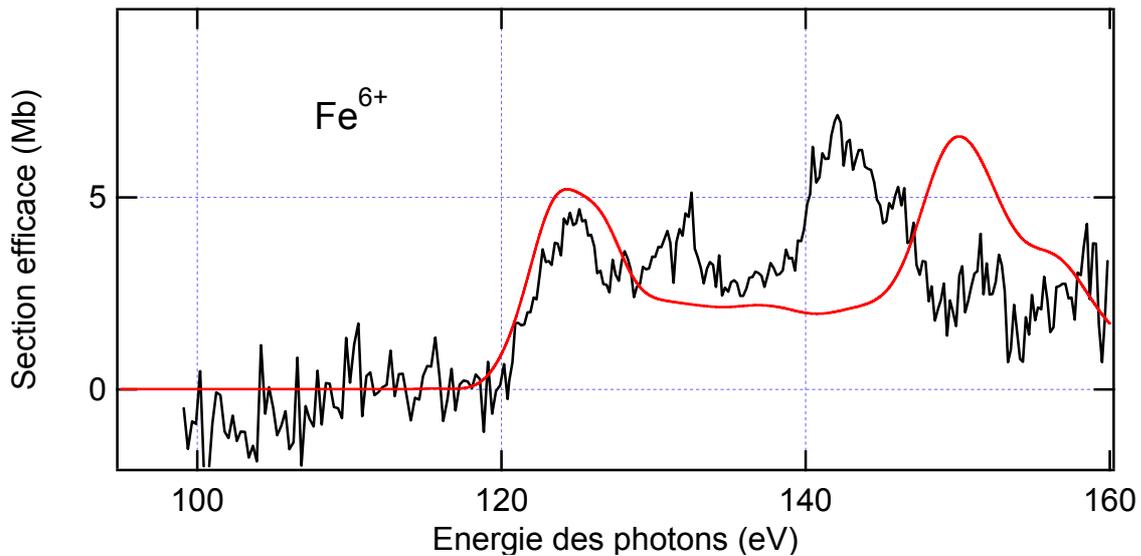


Figure 3.17 : Comparaison de la section efficace absolue de photoionisation expérimentale de l'ion  $Fe^{6+}$  (courbe en noir) avec le spectre reconstruit à partir des calculs réalisés avec le code OPAS (courbes en rouge).

A l'exception des ions  $Fe^{2+}$  et  $Fe^{4+}$ , les résultats de ces calculs sont en bon accord général avec l'expérience. En particulier, le fond continu des spectres calculés se situe dans les barres d'incertitudes expérimentales pour tous les états de charge, en particulier dans la région des hautes énergies de photon. Les positions des seuils d'ionisation et celles des structures résonantes sont bien reproduites mais la structure des UTA est mal reproduite. Ceci est peut être dû à une sous-estimation des largeurs naturelles des raies des transitions.

On note trois désaccords importants entre ces calculs et nos expériences : pour l'ion  $Fe^{2+}$ , dans la région d'énergie de photon 30-55 eV, la section efficace de photoionisation directe calculée est trois fois plus élevée que celle mesurée. Ceci peut être dû au processus d'interférences entre les voies de photoionisation directe et résonante qui n'est pas pris en compte par ces calculs. Ce même effet a été observé sur le spectre de section efficace de photoionisation de l'ion  $Fe^+$  [Kjeldsen et al. 2002] et a été bien décrit par les calculs Matrice-R de Berrington et Ballance [2001] qui tiennent compte des interférences entre les deux voies de photoionisation. Le deuxième désaccord se révèle dans l'intensité de la section efficace de photoionisation de l'ion  $Fe^{3+}$  dans la gamme d'énergie 80-120 eV, où les sections efficaces expérimentales sont 30 % plus intenses. Le dernier désaccord concerne l'intensité des UTAs pour les ions  $Fe^{2+}$  et  $Fe^{4+}$ . Elle est surestimée d'un facteur 2 dans le cas du  $Fe^{2+}$  et d'un facteur 3 dans le cas du  $Fe^{4+}$ .

### 3.3.3 Calculs de la matrice-R

La méthode de la matrice-R (R pour réaction) fut introduite pour la première fois en physique nucléaire par Wigner et Eisenbud [1947]. Elle fut ensuite appliquée à la physique atomique par Burke et Robb [1975]. Cette méthode consiste à séparer l'espace en deux régions distinctes, limitées par une sphère de rayon  $a$  : une région interne dans laquelle les interactions du système électrons-noyau sont fortes et relèvent d'un problème à N corps : la résolution de l'équation de Schrödinger entraîne le traitement d'un système d'équations intégral-différentielles couplées en raison de l'existence d'un potentiel direct et d'un potentiel d'échange non local. Dans la région externe, les termes d'échange sont négligés. Les fonctions d'onde internes et externes sont ensuite raccordées pour donner la fonction d'onde totale du système.

La méthode de la matrice-R permet de traiter la photoionisation des atomes et des ions positifs à couches complètes et incomplètes sur un domaine d'énergie assez étendu. Son avantage par rapport au modèle à électrons indépendants est le traitement des différents types de résonances. De nombreux calculs basés sur la méthode de la matrice-R ont été réalisés pour déterminer les sections efficaces absolues de photoionisation pour les ions de fer: calculs de l'Opacity Project [Cunto et al. 1993], Bautista [1996, 2006], Nahar [Nahar 1996, Nahar *et al.* 1998, Nahar et Bautista 1999], Berrington et Ballance [2001].

#### a. Opacity Project

Les premiers résultats théoriques utilisant la méthode de la matrice-R ont été réalisés dans le cadre de l'« Opacity Project ». Ils sont disponibles dans la base de données « TopBase » [Cunto et al. 1993]. Ce projet international a été créé en 1984 pour déterminer numériquement l'opacité des enveloppes stellaires. Il fournit les sections efficaces de photoionisation sur une très large gamme d'énergie de photons, pour tous les atomes et les ions de numéro atomique inférieur ou égal à 26. Les calculs ont été réalisés dans l'approximation du couplage LS et incluent les processus de photoionisation directe et les processus résonnants impliquant la plupart du temps la photoexcitation des électrons externes seulement. Ainsi, pour les ions de fer, à l'exception du  $\text{Fe}^{2+}$ , les structures UTA résultant des excitations d'un électron en sous-couche interne 3p ne sont pas décrites dans ces calculs. La figure 3.18 montre la comparaison des spectres expérimentaux avec les résultats des calculs

de l'Opacity Project. Les spectres théoriques ont été reconstruits d'une façon similaire à celle présentée précédemment pour le code OPAS. Ils incluent la contribution de tous les ions dans les termes métastables de même configuration que le fondamental, en supposant une population statistique des différents termes. Le résultat a été ensuite convolué par un profil gaussien de largeur à mi hauteur égale aux bandes passantes expérimentales données table 3.1.

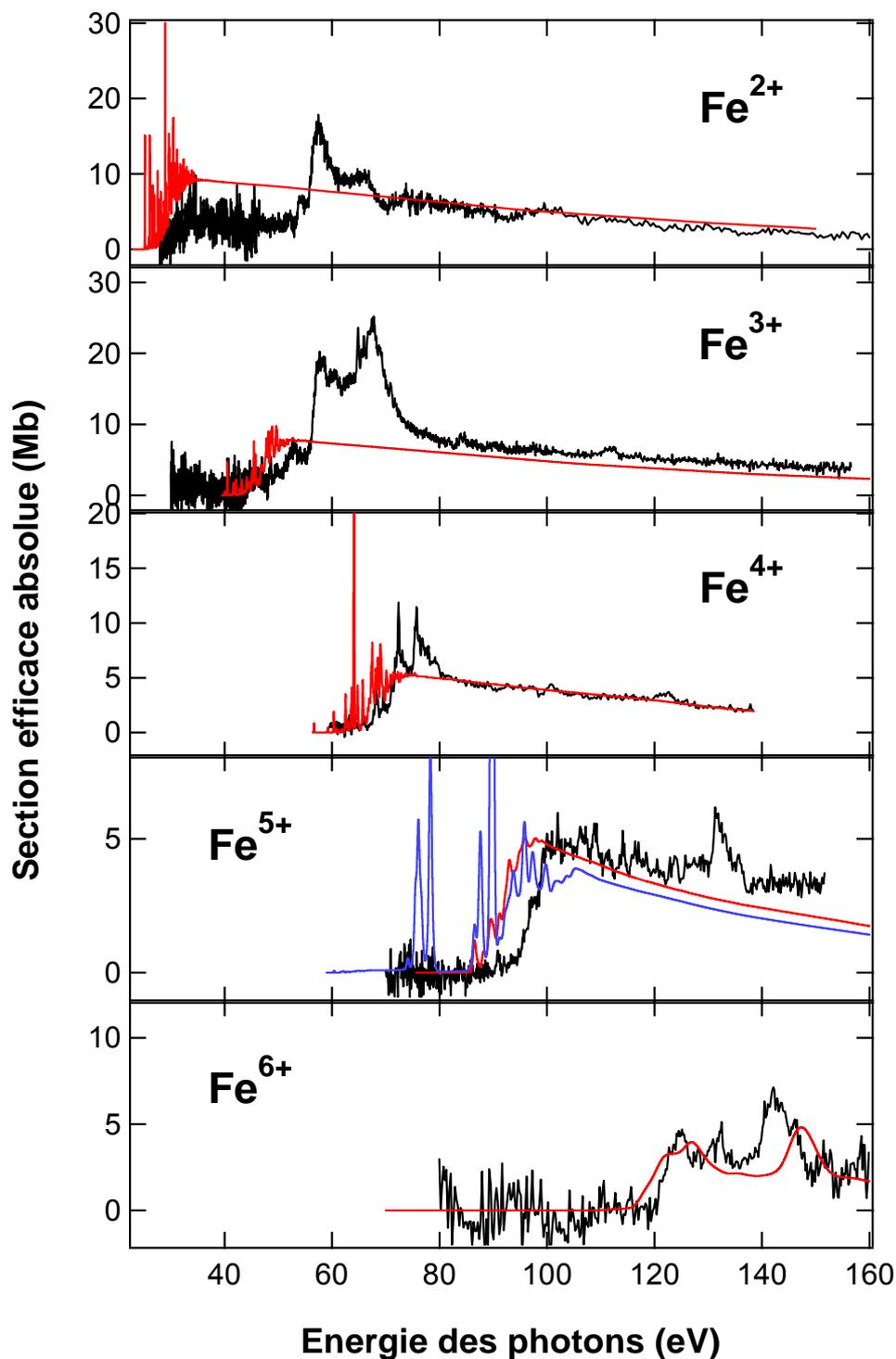


Figure 3.18 : Comparaison des spectres expérimentaux (courbes en noir) pour les ions de la série  $\text{Fe}^{2+}$ - $\text{Fe}^{6+}$  avec les spectres reconstitués à partir des sections efficaces de photoionisation de la TopBase (courbes en rouge). Pour l'ion  $\text{Fe}^{5+}$ , la courbe bleue représente la section efficace de photoionisation reconstituée en incluant tous les états métastables de configuration  $3d^2 4s$  et  $3d^3$ .

Afin de vérifier que la contribution des états excités qui ont un électron en sous-couche 4s est négligeable dans les sections efficaces expérimentales, nous avons reconstruit pour l'ion  $\text{Fe}^{5+}$  le spectre théorique, en bleu sur la figure 3.18, incluant les sections efficaces de photoionisation pour tous les termes des configurations  $3d^3$  et  $3d^24s$ . L'ion  $\text{Fe}^{5+}$  a été choisi car il a été obtenu en utilisant la plus grande puissance HF (30W) pour produire les ions dans la source RCE, ce qui favorise la production des états excités. Sur le spectre reconstruit apparaissent des structures intenses à 78 eV et 89,5 eV qui ne sont pas présentes sur le spectre expérimental. Ceci confirme que seuls les états métastables de même configuration que le fondamental contribuent de façon notable dans les spectres expérimentaux.

On note que les spectres théoriques sous-estiment systématiquement la position des seuils d'ionisation, le décalage atteignant 5 eV dans le cas des faibles états de charge. Concernant le fond continu, il est bien reproduit pour l'ensemble des spectres, à l'exception de l'ion  $\text{Fe}^{3+}$  où il apparaît plus bas que le fond continu mesuré. Pour l'ion  $\text{Fe}^{2+}$ , comme avec le code OPAS, la section efficace calculée est deux fois plus haute à basse énergie.

## **b. Calculs de Nahar et Bautista**

Dans le but d'améliorer les données disponibles dans la TopBase, des calculs plus récents, basés également sur la méthode de la matrice-R, ont été réalisés par les théoriciens de l'Opacity Project, incluant notamment les effets d'excitation d'un électron en couche interne. Les résultats des calculs de Nahar et Bautista sur les ions  $\text{Fe}^{2+}$  [Nahar, 1996],  $\text{Fe}^{3+}$  [Nahar et al. 1998] et  $\text{Fe}^{4+}$  [Bautista 2006 et Nahar et Bautista 1999] sont présentés sur la figure 3.19. Les spectres sont reconstruits comme les précédents en incluant la contribution de tous les termes métastables de même configuration que le terme fondamental.

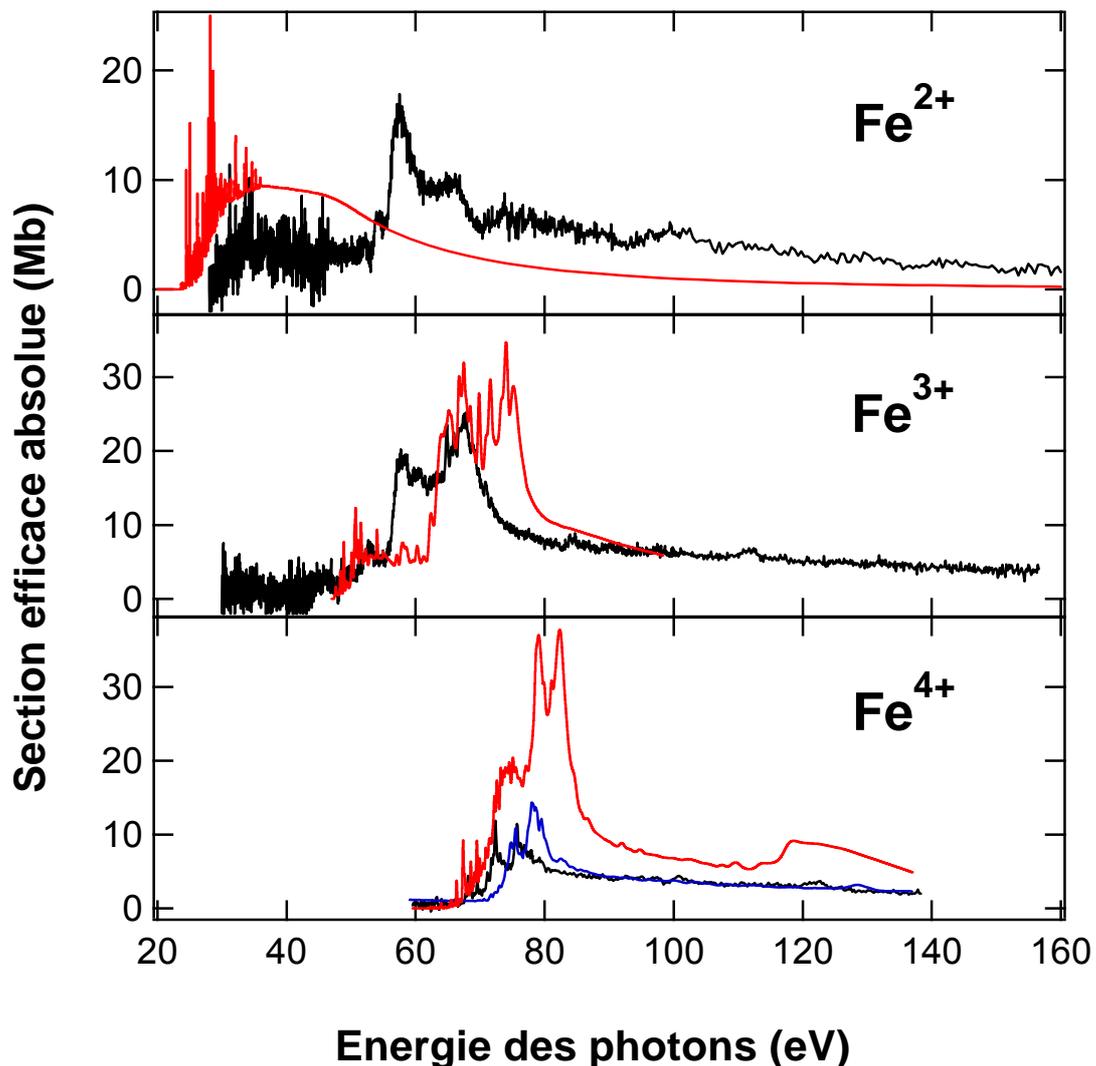


Figure 3.19 : Comparaison des sections efficaces expérimentales de photoionisation des ions  $Fe^{2+}$ ,  $Fe^{3+}$  et  $Fe^{4+}$  avec les spectres reconstitués à partir des calculs récents de la matrice-R, montrés en rouge, [Nahar 1996, Nahar et al. 1998, Nahar et Bautista, 1999], et en bleu [Bautista 2006].

Pour ces nouveaux calculs sur l'ion  $Fe^{2+}$ , présentés par la courbe rouge sur le panneau supérieur de la figure 3.19, un développement de 49 fonctions propres a été utilisé, contre 16 pour les données disponibles dans la TopBase, sans toutefois introduire les excitations d'un électron 3p. Malgré cette amélioration, qui porte essentiellement sur la description de l'excitation des électrons externes, le nouveau spectre théorique présente un moins bon accord général avec le spectre expérimental que le spectre obtenu précédemment avec les données de l'Opacity Project.

Les excitations 3p-3d ont été prises en compte dans les nouveaux calculs [Nahar et al. 1998, Nahar et Bautista 1999] concernant les ions  $Fe^{3+}$  et  $Fe^{4+}$ . Dans le cas de l'ion  $Fe^{3+}$ , la

structure large vers 70 eV est en effet reproduite, mais elle apparaît légèrement plus intense et présente plus de structures que celle du spectre expérimental. Elle est également déplacée en énergie d'environ 10 eV par rapport à la position mesurée.

Le spectre théorique pour l'ion  $\text{Fe}^{4+}$  a été obtenu en utilisant une base de fonctions propres incluant 39 termes. La structure UTA entre 70 et 80 eV est très mal décrite. Son intensité et celle du fond continu sont fortement surestimées.

Seuls les derniers calculs de Bautista [2006], obtenus après la publication de notre spectre expérimental pour l'ion  $\text{Fe}^{4+}$ , présentés par la courbe bleue sur la figure 3.19, décrivent correctement la structure UTA du spectre expérimental. Afin d'obtenir cet accord, plusieurs effets ont dû être pris en compte:

a- Les orbitales à un électron utilisées pour représenter l'ion cible doivent être optimisées non seulement sur la cible elle-même, mais aussi sur les états finals de l'ion pour avoir la bonne position des UTA.

b- Les états de configuration  $3s^23p^53d^5$  sont considérés comme des états intermédiaires. Ils sont distribués dans la région du seuil de photoionisation et sont par la suite fortement couplés au continuum. Dans les calculs de Bautista, les états  $3s^23p^53d^4$  de l'ion cible  $\text{Fe}^{5+}$  sont pris en compte pour le couplage des états  $3s^23p^53d^5$  avec le continuum.

c- Les résonances fines et intenses non résolues et de nature non physique qui sont générées par le calcul doivent être systématiquement éliminées du spectre final. Les points consécutifs dont la section efficace varie d'un rapport supérieur à 5 sont donc éliminés des spectres de photoionisation.

Le principal désaccord restant entre le spectre expérimental de l'ion  $\text{Fe}^{4+}$  et le spectre calculé par Bautista est un déplacement en énergie de 3 eV de la structure UTA.

### **c. Calculs de Berrington et Ballance**

Ces calculs incluent les processus de photoionisation en couche interne, en particulier les excitations 3p-3d, pour les ions dans l'état fondamental uniquement. Si la non prise en compte des états métastables a peu d'influence sur l'intensité des sections efficaces de photoionisation directe, elle va par contre réduire fortement le nombre de transitions dans les UTA et diminuer par la suite leur largeur. La figure 3.20 montre les résultats des calculs relativistes de matrice-R menés par Berrington et Ballance [2001] comparés à nos mesures.

On voit sur la figure un bon accord avec l'expérience pour les états de charge élevés  $\text{Fe}^{5+}$  et  $\text{Fe}^{6+}$ . Pour l'ion  $\text{Fe}^{2+}$ , l'intensité du fond continu et de l'UTA est surestimée. L'effet d'interférence entre la voie directe et la voie résonante est prédit aux énergies de photon inférieures à l'UTA, mais peut être masqué dans le spectre expérimental par l'effet des états

métastables présents. Pour l'ion  $\text{Fe}^{3+}$ , l'intensité du fond continu et la position de la structure résonante sont bien reproduites, contrairement aux autres calculs de la matrice-R. La largeur de l'UTA est, comme attendu, sous-estimée. Pour l'ion  $\text{Fe}^{4+}$ , la comparaison révèle une différence très marquée entre les deux spectres expérimental et théorique qui est liée probablement à une surestimation de la section efficace de photoionisation directe. Le spectre théorique a une intensité systématiquement supérieure par un facteur 2,5 à la section efficace mesurée.

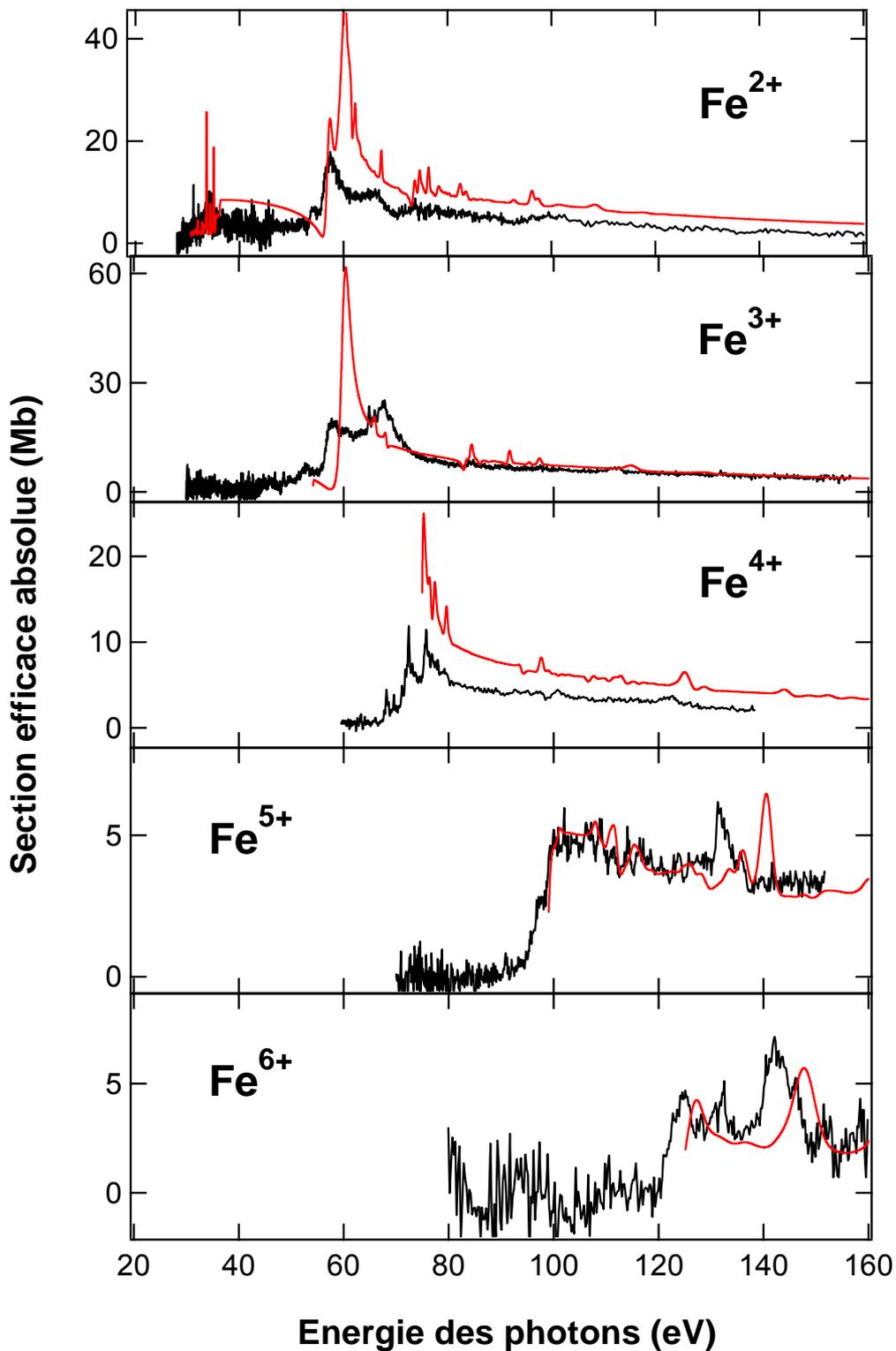


Figure 3.20 : Comparaison des spectres expérimentaux (courbes en noir) pour les ions  $\text{Fe}^{2+}$ - $\text{Fe}^{6+}$ , avec les spectres reconstitués à partir des sections efficaces de photoionisation calculées par Berrington et Ballance (2001) (courbes en rouge).

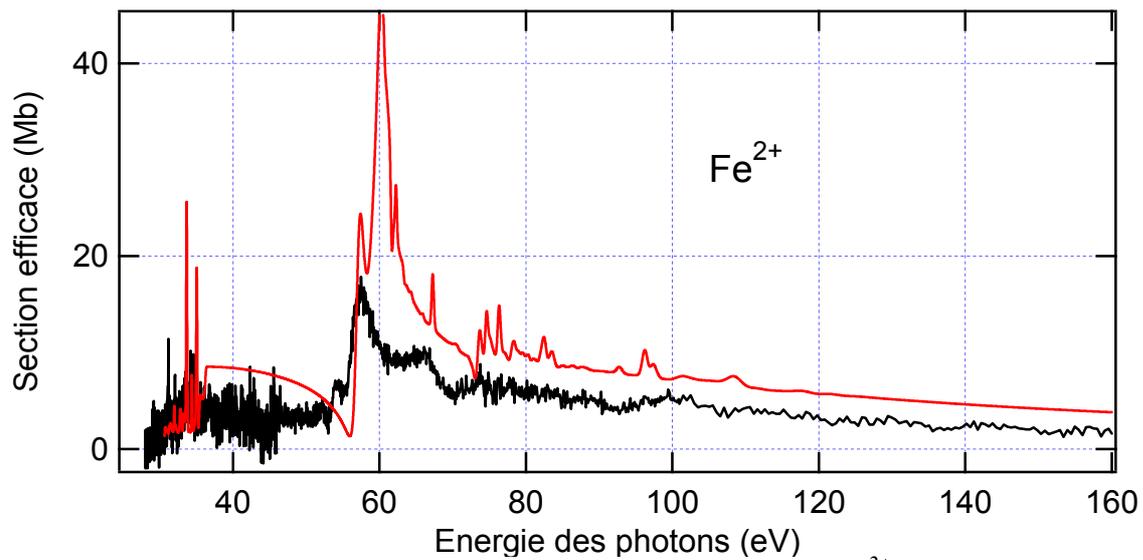


Figure 3.21 : Comparaison du spectres expérimental de l'ions  $Fe^{2+}$  (courbe en noir) avec le spectre reconstitué à partir des sections efficaces de photoionisation calculées par Berrington et Ballance (2001) (courbe en rouge).

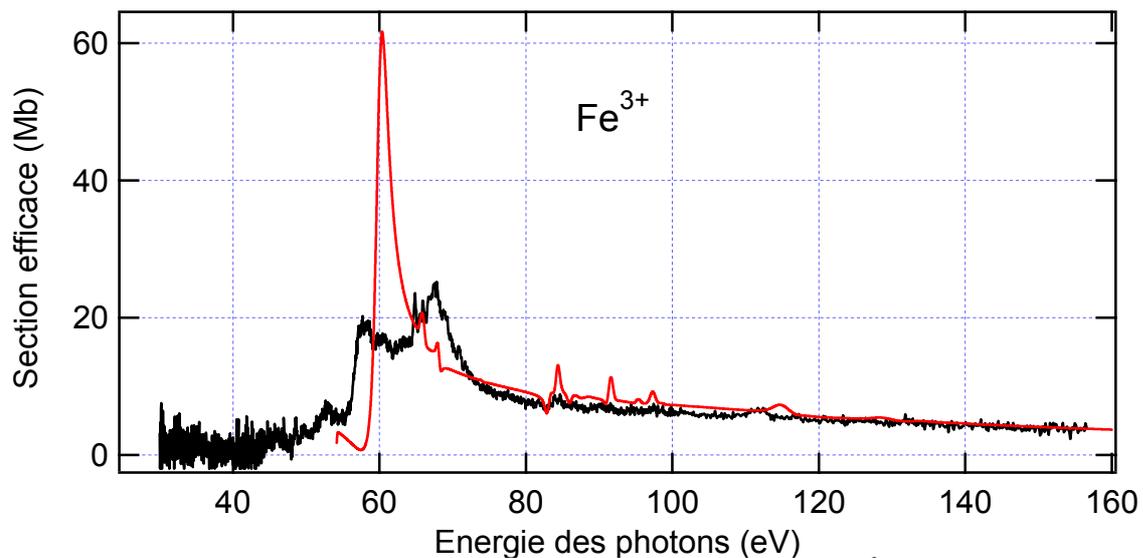


Figure 3.22 : Comparaison du spectres expérimental de l'ions  $Fe^{3+}$  (courbe en noir) avec le spectre reconstitué à partir des sections efficaces de photoionisation calculées par Berrington et Ballance (2001) (courbe en rouge).

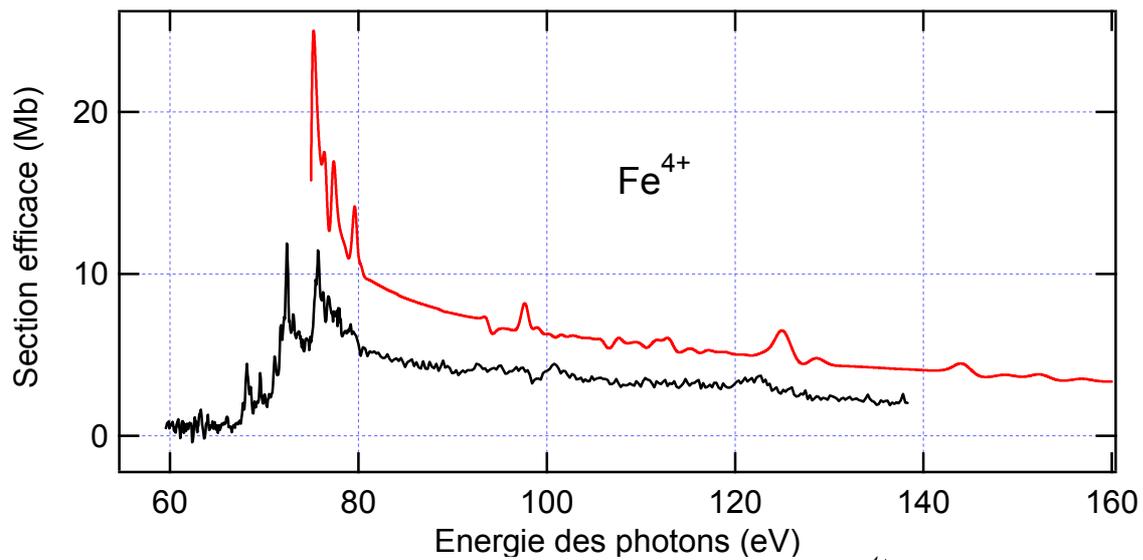


Figure 3.23 : Comparaison du spectres expérimental de l'ions  $Fe^{4+}$  (courbe en noir) avec le spectre reconstitué à partir des sections efficaces de photoionisation calculées par Berrington et Ballance (2001) (courbe en rouge).

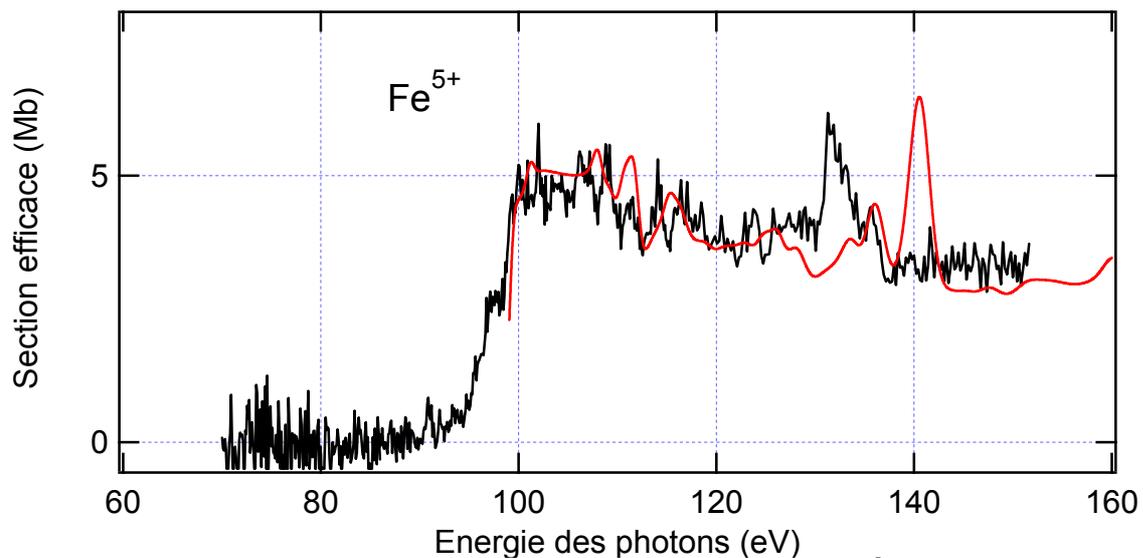


Figure 3.24 : Comparaison du spectres expérimental de l'ions  $Fe^{5+}$  (courbe en noir) avec le spectre reconstitué à partir des sections efficaces de photoionisation calculées par Berrington et Ballance (2001) (courbe en rouge).

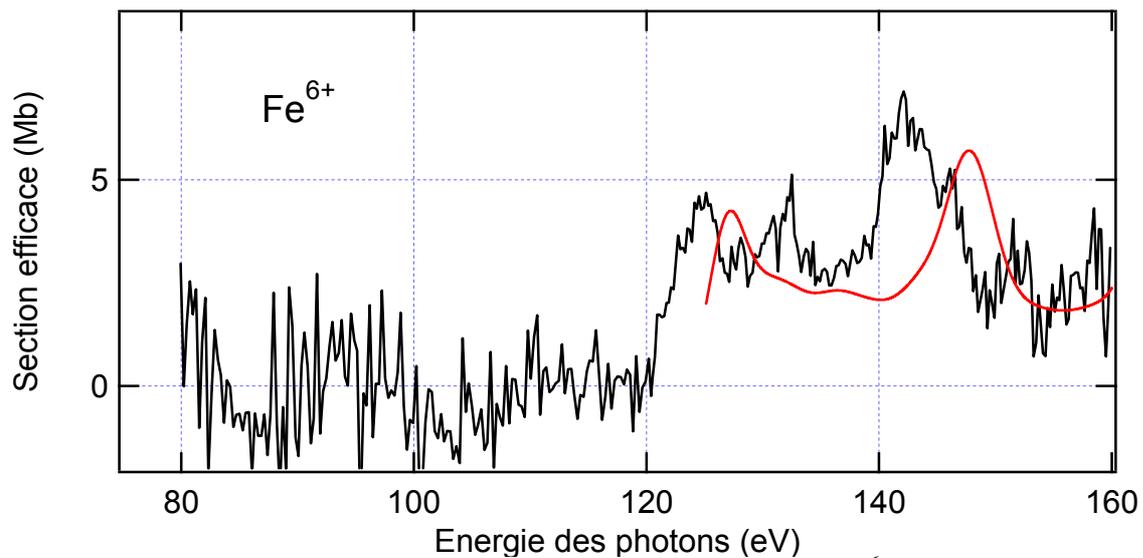


Figure 3.25 : Comparaison du spectre expérimental de l'ions  $Fe^{6+}$  (courbe en noir) avec le spectre reconstitué à partir des sections efficaces de photoionisation calculées par Berrington et Ballance (2001) (courbe en rouge).

### 3.3.4 Comparaison avec d'autres résultats expérimentaux

Les sections efficaces de photoionisation pour les ions  $Fe^{3+}$ ,  $Fe^{5+}$  et  $Fe^{7+}$  ont été mesurées à l'ALS dans le cadre de travail de thèse de Gharaibeh [2005] mais ces résultats n'ont pas été publiés. La figure 3.26 montre une comparaison de nos spectres de photoionisation pour les ions  $Fe^{3+}$  et  $Fe^{5+}$  avec les spectres obtenus à l'ALS.

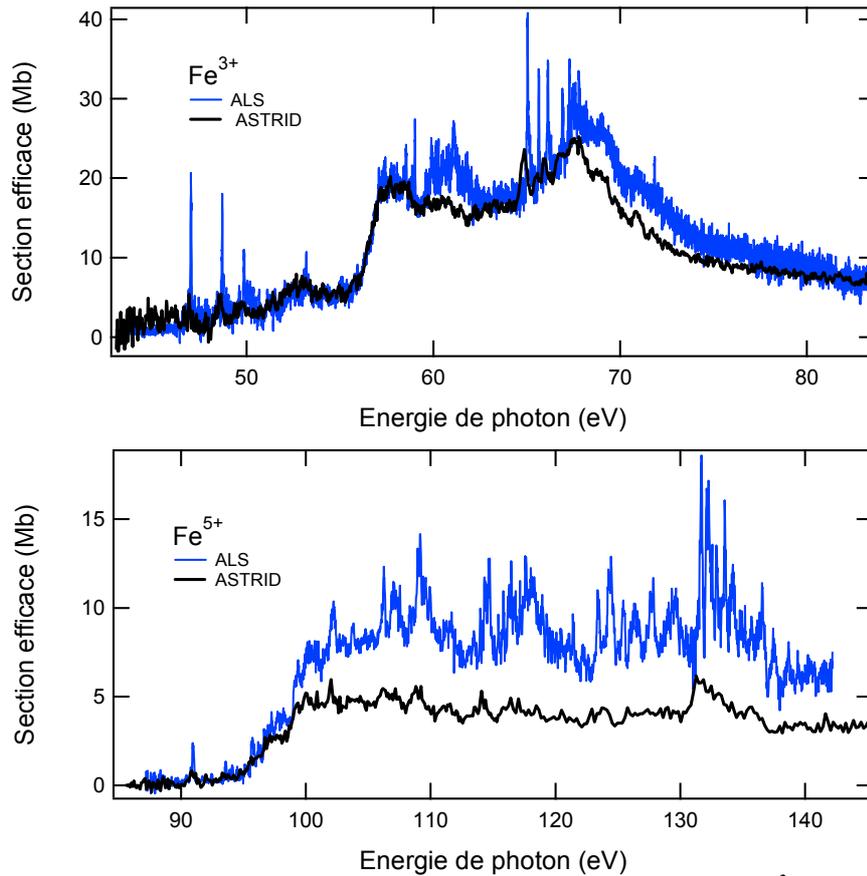


Figure 3.26 : Comparaison des spectres de photoionisation des ions  $Fe^{3+}$  et  $Fe^{5+}$  obtenus à ASTRID (en noir) et à l'ALS (en Bleu).

Les spectres de l'ALS ont été obtenus avec une meilleure résolution, ce qui explique la plus grande intensité des raies fines aux plus basses énergies de photon. Pour l'ion  $Fe^{3+}$ , les deux expériences sont en bon accord général. Cependant, les intensités des structures à 60 eV et à 69 eV sont plus intenses de 6 Mb environ sur le spectre de l'ALS. Ceci peut être dû à une population des états métastables dans la source utilisée à l'ALS différente de la population dans notre source RCE. Dans le cas de l'ion  $Fe^{5+}$ , l'intensité du spectre de l'ALS est deux fois plus forte que celle de notre mesure. Il est à noter que les sections efficaces mesurées à l'ALS peuvent être entachées d'une plus grande incertitude systématique que celles mesurées à ASTRID car elles sont, dans un premier temps, obtenues en valeur relative avant d'être normalisées sur des mesures absolues réalisées à quelques énergies de photon. Une telle différence d'un facteur 2 entre les mesures de l'ALS [Aguilar et al. 2003] et d'ASTRID [Kjeldsen et al. 2002] a déjà été observée dans le cas de l'ion  $O^+$ , les mesures de l'ALS étant là aussi les plus élevées. Une surestimation des sections efficaces peut venir d'une perte non contrôlée de photoions entre la zone d'interaction et le détecteur. Dans les deux cas,  $Fe^{5+}$  et  $O^+$ , les sections efficaces de photoionisation directe calculées sont en meilleur accord avec les mesures d'ASTRID.

### **3.3.5 Conclusion**

Avec celles, non publiées, obtenues pendant la thèse de Gharaibeh [2005], nos expériences fournissent les premières mesures de sections efficaces de photoionisation en valeur absolue réalisées pour des ions multichargés de la série isonucléaire du fer, sur une large gamme d'énergie de photon allant du premier seuil d'ionisation jusqu'à 160 eV. Ces mesures ont été confrontées à des résultats théoriques provenant de différents calculs : des calculs utilisant le code OPAS qui ont été menés par une collaboration entre notre équipe et les théoriciens au CEA Bruyères-le-Chatel, plusieurs calculs de matrice-R et le modèle à électrons indépendants qui sont utilisés en particulier pour déterminer l'opacité des plasmas astrophysiques.

De cette comparaison, il ressort qu'afin d'obtenir le bon ordre de grandeur des sections efficaces de photoionisation nécessaire pour calculer l'opacité des plasmas, il est nécessaire d'inclure l'effet des excitations en couche interne 3p. A l'exception des derniers calculs de matrice-R réalisés par Bautista, toutes les théories décrivent mal les structures UTA produites par les excitations 3p-3d, et surestiment en général leur intensité. Même à l'intérieur d'une même série de calculs, on observe une grosse disparité dans la reproduction des sections efficaces expérimentales en fonction de l'état de charge de l'ion. Le désaccord avec l'expérience peut atteindre un facteur deux. En général, les modèles à électrons indépendants semblent suffisants pour décrire de façon satisfaisante la photoionisation directe des ions.

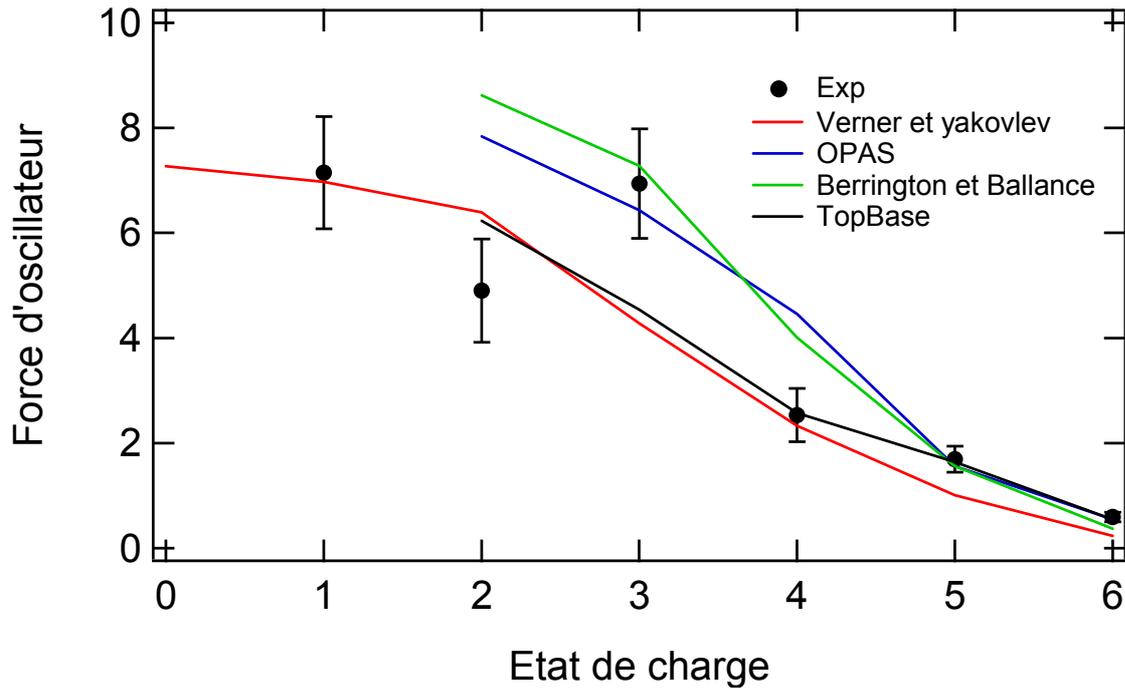


Figure 3.27 : Forces d'oscillateur déterminées en intégrant les spectres de sections efficaces de photoionisation expérimentales et théoriques entre 20 et 140 eV.

La figure 3.27 montre les forces d'oscillateurs déterminées par intégration des spectres sur une gamme d'énergie qui s'étend entre 20 et 140 eV en fonction de l'état de charge des ions incidents. La force d'oscillateur de l'ion  $\text{Fe}^{1+}$  est calculée à partir des données de Kjeldsen et al. [2002]. Les valeurs expérimentales représentées par des points noirs sont comparées avec les résultats déjà présentés du code OPAS représentés par les points en bleu, TopBase en noir, Berrington et Ballance en vert et les calculs à électrons indépendants en rouge. On remarque une décroissance de la force d'oscillateur avec l'état de charge des ions. Elle est liée à l'effet combiné de la diminution du nombre d'électrons et de l'augmentation de la position des premiers seuils d'ionisation avec l'augmentation de l'état de charge des ions due à la diminution de l'écrantage du potentiel attractif du noyau par les électrons externes. En particulier, une forte diminution d'environ un facteur trois est observée entre les forces d'oscillateurs expérimentales des ions  $\text{Fe}^{3+}$  et  $\text{Fe}^{4+}$ . Elle est due au glissement des seuils d'ionisation vers les hautes énergies de photon plus rapide que celui de la position de l'UTA. Pour l'ion  $\text{Fe}^{4+}$ , la structure résonante se superpose aux seuils d'ionisation, faisant de cet ion un test particulièrement rigoureux de la validité des modèles.

On note sur la figure 3.27 que la valeur de la force d'oscillateur de l'ion  $\text{Fe}^{2+}$  est plus basse que pour les ions voisins  $\text{Fe}^+$  et  $\text{Fe}^{3+}$ . Un artefact expérimental ne peut être exclu, comme la non prise en compte de la contribution de la double photoionisation dans le calcul de la force d'oscillateur ou une possible contamination du pic de  $^{54}\text{Fe}^{2+}$  qui sert à estimer la

densité de fer dans le faisceau d'ions. Une nouvelle investigation expérimentale pour cet ion est nécessaire pour vérifier la valeur de la force d'oscillateur et l'intensité de la section efficace de photoionisation sur toute la gamme d'énergie, en utilisant le fer isotopique  $^{54}\text{Fe}$  pour la production des ions.

Concernant les résultats théoriques, ils se divisent en deux groupes : les calculs incluant l'effet des transitions 3p-3d (OPAS et Berrington et Ballance) qui sont en bon accord avec l'expérience pour l'ion  $\text{Fe}^{3+}$  mais pas pour l'ion  $\text{Fe}^{4+}$ . Les calculs qui n'incluent pas les effets des transitions 3p-3d (TopBase et modèle à électrons indépendants) et sont censés être moins précis, révèlent en fait un meilleur accord avec les valeurs mesurées pour les ions  $\text{Fe}^{2+}$  et  $\text{Fe}^{4+}$ . Une interprétation possible de ces observations pourrait être que la force d'oscillateur mesurée pour l'ion  $\text{Fe}^{3+}$  est surestimée. Il semble cependant que la mesure faite à l'ALS confirme notre valeur. Aucun des modèles ne reproduit la valeur basse mesurée pour l'ion  $\text{Fe}^{2+}$ . Ces résultats montrent la nécessité d'améliorer les modèles pour mieux décrire les UTA pour les ions de faible état de charge.

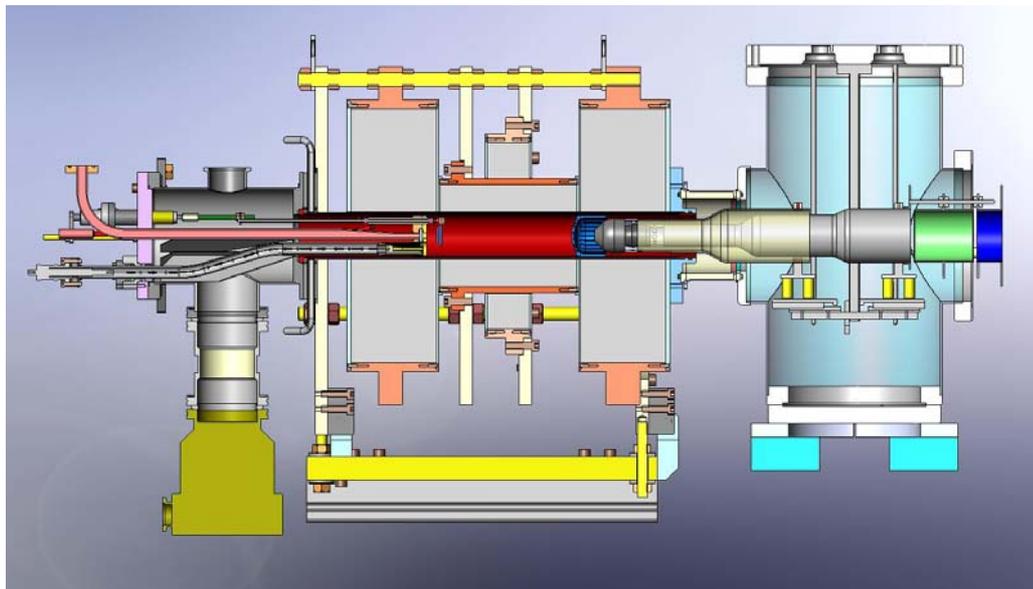
## Bibliographie

- Bailey J.E. et al, Phys. Rev. Lett. 99, 265002 (2007)
- Bauche-Arnoult C., Bauche, Klapisch M., Phys. Rev. A 20, 2424 (1979)
- Bautista M. A., Astron. Astrophys. Suppl. Ser. 119, 105 (1996)
- Bautista M. A. et al, Astrophys. J. Suppl. Ser. 118, 259 (1998)
- Bautista M. A., J. Phys. B 39, L361 (2006)
- Bautista M.A. and Pradhan A. K., Astrophys. J. 492, 650 (1998)
- Becker S.R. and Butler K., Astron. Astrophys. 265, 647 (1992)
- Berrington K. A. et Ballance C., J Phys B 34 2697 (2001)
- Bizau J.M. et al, Phys. Rev. A 73, 020707(R) (2006)
- Bruneau J., J. Phys. B 17, 3009 (1984)
- Burke P.G. et Robb W.D., Advances in Atom. and Mol. Phys. 11,143 (1975)
- Covington A. M. et al, Phys. Rev. A 75, 022711 (2007)
- Cunto W. et al, A&A 275, L5 (1993)
- Ekberg J.O., Astron. Astrophys. 101, 1 (1993)
- Epp S.W. et al., PRL 98, 183001 (2007)
- Fano U., Phys. Rev. 124, 1866 (1961)
- Feist H. et al, Phys. Rev. A 53, 760 (1996)
- Gharaibeh M., thèse de doctorat, Université de Nevada, Reno (Etats Unis) (2005)
- Hansen J.E. et al, J. Phys. B 40, 293 (2007)
- Johansson S. et al, Physica Scripta T100, 71 (2002)
- Kjeldsen H. et al., J. Phys. B., 35:3655 (2002) (a)
- Kjeldsen et al Astrophys. J. Suppl. Ser. 138, 219 (2002) (b)
- Martins M. et al, J. Phys. B 39, R79 (2006)
- Nahar S. N., Phys. Rev. A 53, 1545 (1996)
- Nahar S. N., M. A. Bautista, and A. K. Pradhan, Phys. Rev. A 58, 4593 (1998)
- Nahar S. N. and M. A. Bautista, Astrophys. J., Suppl. Ser. 120, 327 (1999)
- Ralchenko Yu., Kramida A. E., Reader J., and The NIST ASD Team, NIST Atomic Spectra Database (Version 3.1.5), National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD, 2008, <http://physics.nist.gov/asd3>
- Reilman R.F., Manson S.T., Astrophys. J. Suppl. Ser. 40,815 (1979)
- Rodríguez M. and Rubin R.H., Astrophys. J. 626, 900 (2005)
- Rosman K.J.R. and Taylor P.D.P. , in *Isotopic Compositions of the Elements* (1997), available at <http://physics.nist.gov/PhysRefData/Compositions/index.html>
- Talman J. D. and Shadwick B. A., Phys. Rev. A 14, 36 ( 1976)
- Verner D.A., Yakovlev D.G., Astron. Astrophys. 109, 125 (1995)
- Verner D.A. et al, Astrophys. J. 465, 487 (1996)
- Wigner E.P. et Eisenbud L., Phys. Rev. 72, 29 (1947)
- Aguilar A. et al, Astrophys. J. Suppl., 146, 467 (2003)
- Kjeldsen H. et al, Astrophys. J. Suppl., 138, 219 (2002)

# Chapitre 4: Etude de l'extraction des ions à la sortie de la source RCE et du transport du faisceau d'ions

## 4.1 Introduction

La possibilité de mesurer des sections efficaces absolues de photoionisation à l'aide de la technique des faisceaux colinéaires est contingentée par les performances de la source d'ions et la qualité du faisceau d'ions conduit dans la zone d'interaction, ainsi que par le flux de rayonnement synchrotron disponible en ce lieu. Dans le but d'accroître la palette d'ions étudiés et de sonder l'action de cette photoionisation sur des couches plus profondes, un nouveau dispositif expérimental a été construit et installé de façon permanente sur la ligne de lumière PLEIADES du synchrotron SOLEIL. Ce nouveau dispositif est équipé d'une source d'ions à résonance cyclotronique électronique (RCE) conçue et développée au CEA de Grenoble. Elle est schématisée sur la figure 4.1.



*Figure 4.1 : Schéma de la source d'ions RCE et de son optique d'extraction, installée sur l'expérience MAIA à SOLEIL.*

Dans les expériences de faisceaux colinéaires, la qualité du faisceau d'ions incident joue un rôle très important. Le challenge est d'amener le faisceau vers la zone d'interaction sans perdre trop d'ions dans son transport tout en minimisant sa divergence. Tout se joue au niveau de l'extraction juste à la sortie de la source d'ions.

Dans la majorité des cas rencontrés pratiquement, le faisceau se propage suivant  $z$  avec une dispersion en  $z$  négligeable et des vitesses  $\dot{x}$  et  $\dot{y} \ll \dot{z}$ . Par ailleurs, les plans  $xx'$  et  $yy'$  sont le plus souvent découplés, de sorte que l'on peut substituer à la notion d'hypervolume à six dimensions celle de double figure d'émittance transverse  $xx'$  et  $yy'$  dans l'espace dit des traces (le prime dénotant la dérivation par rapport à  $z$ ). En symétrie cylindrique, la figure devient simple en  $rr'$ . Dans le cas de faisceaux à faible vergence,  $x'$ ,  $y'$  et  $r'$ , qui sont des tangentes, sont assimilées à des angles  $\alpha$ . L'unité d'émittance est donc le m.rad.

A cause de leurs grandes ouvertures de sortie, nécessaires pour obtenir de fortes intensités émises, ces sources RCE délivrent des faisceaux d'ions de relativement grandes émittances. Ceci est aggravé par la forte température du plasma nécessaire à la production d'ions très chargés et la présence d'un champ magnétique axial qui accroît le moment azimutal donc l'espace des phases du faisceau de sortie. Un mauvais dessin de l'espace accélérateur peut dégrader l'émittance initiale et une grande attention doit être accordée à son optimisation, que ce soit la géométrie des électrodes qui le constituent ou bien les tensions appliquées sur ces électrodes. Le paramètre divergence de cette émittance doit être limité à ce que la dimension des optiques de transport peut accepter.

Le but de l'étude présentée dans ce chapitre est de décrire comment nous avons effectué cette optimisation, ainsi que l'étude du transport des ions jusqu'à l'aimant dipolaire de sélection des rapports charge-sur-masse. Les simulations ont été réalisées avec le logiciel IGUN pour la partie extraction et avec le code ECRopt [annexe A] pour la partie transport.

## 4.2 Choix du logiciel des simulations d'extraction

Les codes de calcul numérique dédiés à la génération et au transport de particules chargées sont apparus dans les années 60, avec l'avènement des gros calculateurs, et connaissent des développements incessants permettant d'inclure un nombre croissant d'effets secondaires (charge d'espace, ionisation, interaction coulombienne, aberrations, etc.). Quelques uns permettent de résoudre l'équation de mouvement des particules en trois dimensions tout en résolvant les équations de détermination des champs électromagnétiques (AXCEL, LORENTZ3D, CPO...). Suivant leurs principes de calcul, les codes qui existent actuellement se divisent en trois catégories :

- 1- Des codes qui déterminent les champs électromagnétiques par résolution itérative de l'équation de Poisson (méthode des différences finies), ou par calcul variationnel de l'extremum d'une fonction physique (méthode des éléments finis). Les plus rapides

traitent les problèmes en symétrie rectangulaire ou axiale. Sans tracé de trajectoires, ils sont majoritairement utilisés pour la mise au point d'éléments d'optique particulière (VECTOR FIELD).

- 2- Des codes qui assument la fonction précédente et calculent, en plus, les trajectoires par intégration pas-à-pas des équations différentielles du mouvement, par une méthode d'intégration numérique du type Runge-Kutta, de N macroparticules représentatives du faisceau avec prise en compte de la distribution des charges sur le potentiel en tous points (EGUN, IGUN, PBGUN, MAGIC...).
- 3- Des codes de pur transport qui évaluent la variation globale de la figure d'émittance, supposée elliptique, en simulant tous les éléments optiques par des matrices de transfert. Ces codes sont utilisés surtout pour des faisceaux à haute énergie (TRANSPORT, COSY..).

L'étude de l'extraction du faisceau d'ions a été réalisée à l'aide du logiciel IGUN [Becker 1992], universellement utilisé. Ce dernier est basé sur le logiciel EGUN [Herrmannsfeldt 1973] qui est un code de calcul de potentiels et de trajectoires en 2D tenant compte de la charge d'espace, utilisant les différences finies et l'intégration des équations différentielles du mouvement.

### **4.3 Géométrie du système d'extraction**

L'extraction des ions d'une source s'est d'abord faite en aménageant un trou ou une fente dans celle-ci faisant face à une électrode polarisée négativement. Ce simple espace d'extraction est toujours violemment focalisant sauf en cas de forte répulsion coulombienne entre les ions extraits. Tant que l'émission n'est pas limitée, l'intensité extraite croît comme la puissance trois demis ( $3/2$ ) de la polarisation et le faisceau a une forme indépendante de cette polarisation. Il n'y a pas de paramètre de réglage et le transport doit « vivre avec ».

La communauté des concepteurs s'est accordée sur un système incluant une électrode intermédiaire à polarisation ajustable [Keller 1990]. Il en résulte deux scénarios possibles d'extraction : deux espaces successifs accélérateurs, c'est le système accel-accel, ou un espace très accélérateur suivi d'un autre décélérateur, c'est le système accel-decel. Les équations générales dans un système optique purement électrique montrent qu'une accélération longitudinale est toujours focalisante et qu'une décélération est toujours défocalisante.

Le système à trois électrodes permet donc d'avoir l'équivalent d'un doublet optique composé d'une lentille convergente suivi tantôt d'une autre convergente tantôt d'une divergente, les distances focales, dépendantes des polarisations respectives, étant couplées. Il permet de reprendre quasiment toutes les émittances initiales, en tentant au mieux de les conserver, mais en créant la possibilité de minimiser la divergence pour atteindre la première lentille du transport.

Notre système d'extraction, figure 4.2, est conforme à ce schéma: l'électrode plasma appelée par la suite  $E_p$  est, de fait, la partie aval de la source dans laquelle est aménagé le trou d'extraction, la première électrode d'extraction appelée  $E_{ext}$  (pour extérieure) et une troisième électrode portée au potentiel de la Terre appelée  $E_{int}$  (pour intérieure), c'est l'entrée de la tubulure de transport. L'énergie finale du faisceau sera donc toujours donnée par  $E_p$  et la distance focale globale du doublet sera fondamentalement gérée par  $E_{ext}$ .

Les distances inter-électrodes ( $g_1 = E_p - E_{ext}$ ,  $g_2 = E_{ext} - E_{int}$ ) peuvent être ajustées sans casser le vide.

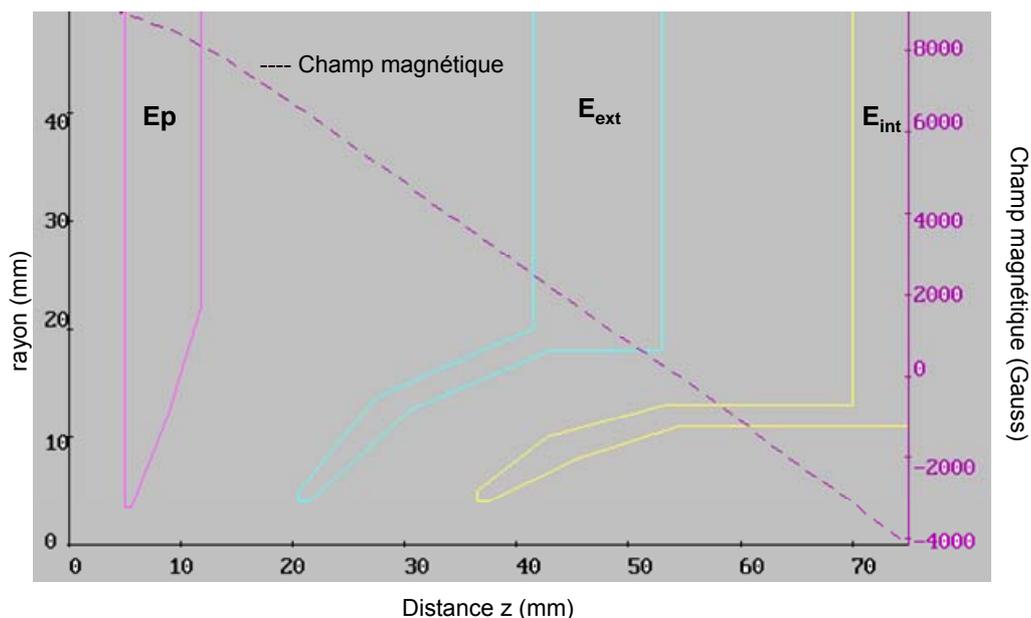


Figure 4.2: Géométrie du système d'extraction. La courbe en pointillé représente le champ magnétique dipolaire.

	$g_2$ minimum	$g_2$ maximum
$g_1$ minimum = 10 mm	5 mm	41 mm
$g_1$ maximum = 35 mm	5 mm	16 mm

Table 4. 1 : Limites des distances inter-électrodes

Une lentille unipotentielle (« Einzel » en allemand) est placée derrière les électrodes. Elle est constituée de trois cylindres de même rayon interne de 65 mm. Le cylindre médian a une longueur de 69 mm et les autres de 35 mm. La focalisation d'une telle lentille n'est jamais abordée simplement dans les codes, parce que les propriétés de focalisation ne sont pas aisément quantifiables, c'est la raison pour laquelle nous utilisons un code léger original, résolvant ce problème, dédié à un transport incluant une telle lentille: ECRopt [annexe A].

## 4.4 Etude de l'extraction du faisceau d'ions

La première étape de l'étude d'extraction est de déterminer les valeurs optimales des distances inter-électrodes  $g_1$  et  $g_2$ . La procédure suivie pour les déterminer est la suivante :  
Fixer  $g_1$  et faire varier  $g_2$  pour deux tensions  $V_p$  et  $V_{ext}$  données : la valeur optimale de  $g_2$  est celle qui correspond au minimum de divergence, et éventuellement d'émittance. Il faut noter ici qu'on s'intéresse surtout aux valeurs de la divergence maximale du faisceau qui doivent être inférieures au tiers du diamètre de la lentille unipotentielle. [Regenstreif 1967]

Fixer  $g_2$  trouvé et faire varier  $g_1$

Vérifier que les valeurs trouvées sont optimales pour plusieurs couples de tensions  $V_p$  et  $V_{ext}$ .

La deuxième étape consiste à trouver les tensions  $V_p$  et  $V_{ext}$  pour une meilleure extraction. La procédure suivie est la suivante :

Fixer  $g_1$  et  $g_2$  optimum trouvés

Fixer une tension  $V_p$  et faire varier  $V_{ext}$  pour trouver sa valeur optimale

Fixer la valeur  $V_{ext}$  trouvée et faire varier  $V_p$

Déterminer le rapport  $V_{ext}/V_p$  pour  $g_1$  et  $g_2$  donnés. Ce rapport doit être constant quel que soit le couple de tension appliqué.

Une étape de vérification consiste à répéter la dernière procédure pour deux autres couples de valeurs  $g_1$  et  $g_2$ .

### 4.4.1 Résultats

Les courbes suivantes sont obtenues pour l'ion type  $Ar^{5+}$ , pour une densité de courant de  $5.10^{-5}$  A/cm<sup>2</sup> qui correspond à un courant réel de  $1,4.10^{-5}$  A. Les émittances et les divergences sont calculées dans le plan  $z=75$  mm. Les tensions appliquées sont toutes positives. Dans un premier temps, les effets de la charge d'espace et de la température du plasma sont négligés.

D'après la figure 4.3 qui montre les variations des émittances et des divergences en fonction du rapport  $V_{ext}/V_p$  pour plusieurs valeurs de gaps  $g_1$  et  $g_2$ , les gaps optimaux correspondent à une distance de 15 mm. En ce qui concerne la divergence, les valeurs minimales correspondent aux tensions d'extraction les plus élevées, ce qui est logique puisque que les émittances géométriques s'amortissent avec la vitesse ionique. toutefois en tenant compte des conditions de notre expérience, qui consiste à faire interagir un faisceau d'ions avec un faisceau de photons, nous devons extraire des ions qui ne sont pas « trop » rapides, c.à.d. qu'il faut extraire à moins de 15 kV. Pour  $g_1=g_2=15$  mm, les divergences minimales pour des tensions  $V_p$  comprises entre 6 et 12 kV sont bien inférieures à 50 mrad.

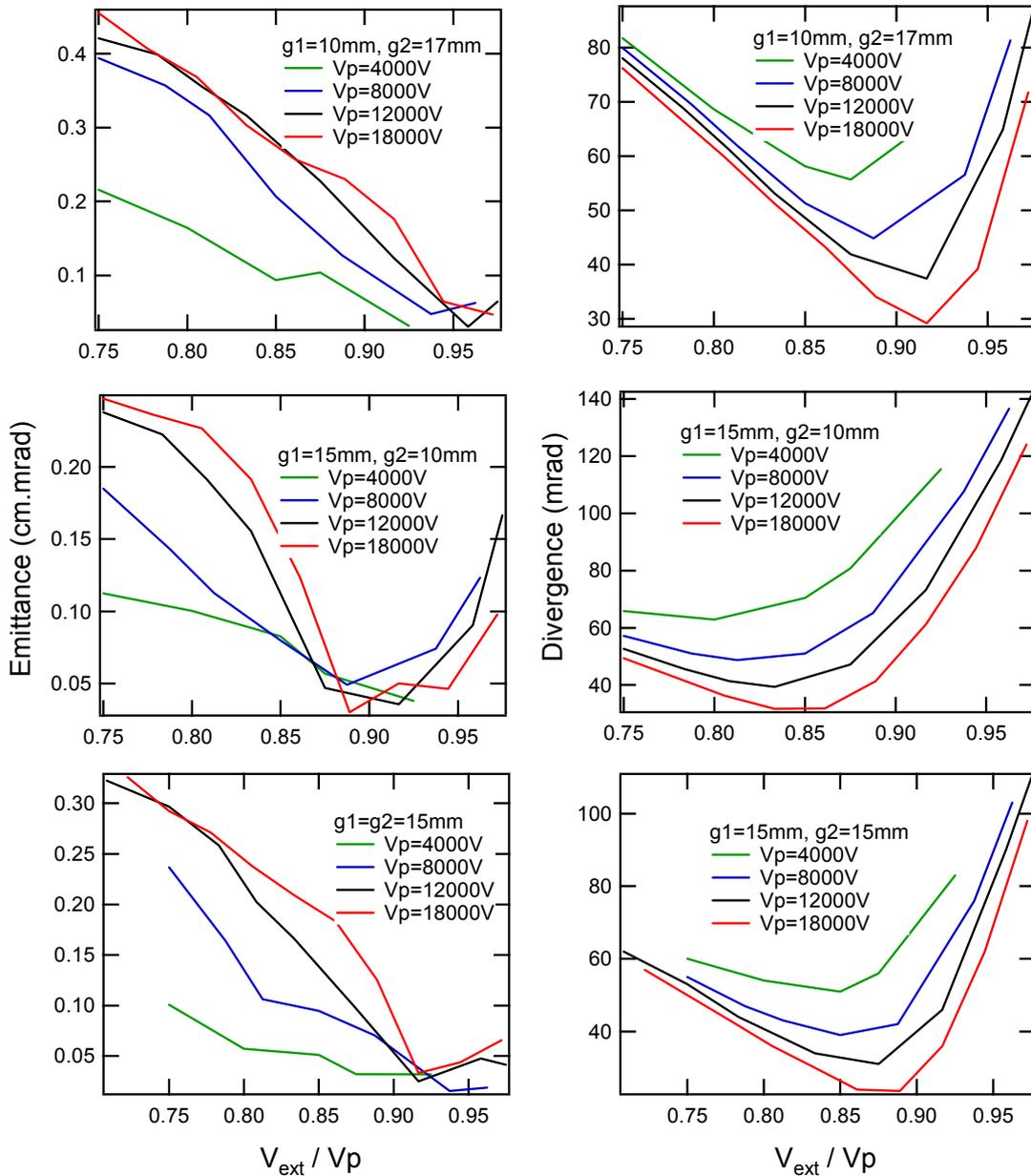


Figure 4.3: Courbes d'émittance (à gauche) et de divergence (à droite) en fonction du rapport  $V_{ext}/V_p$  pour l'argon  $5^+$ , dans le plan  $z=75mm$ .

La figure 4.4 montre la forme du faisceau d'ions  $\text{Ar}^{5+}$  pour trois couples de distances inter-électrodes différentes. Pour  $g_1=10\text{mm}$  et  $g_2=17\text{mm}$ , le faisceau diverge nettement plus que dans les deux autres cas. Pour  $g_1=g_2=15\text{mm}$ , le faisceau est le plus parallèle à l'axe.

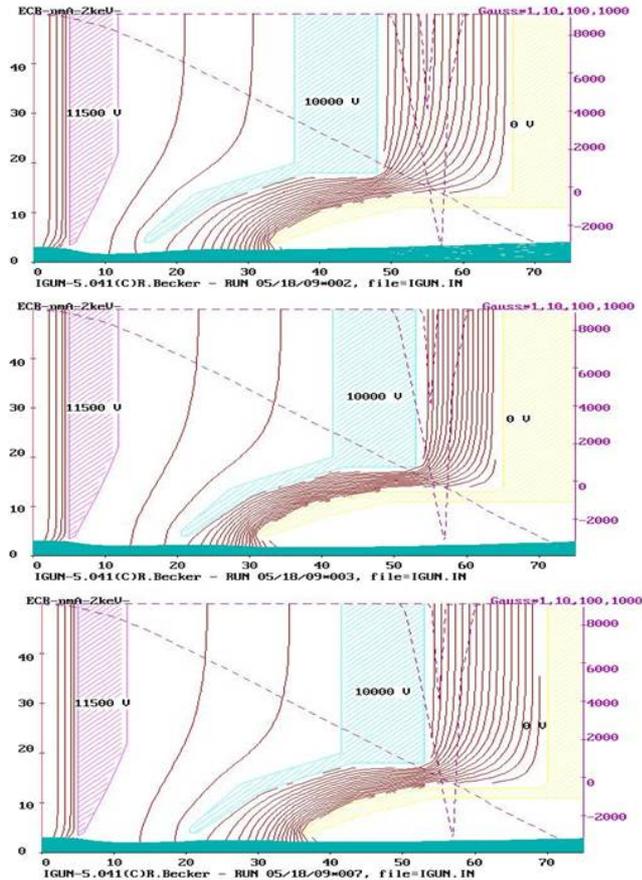


Figure 4.4 : Forme du faisceau d'ions pour  $g_1=10$  et  $g_2=17$  mm en haut,  $g_1=15$  et  $g_2=10\text{mm}$  au milieu,  $g_1=g_2=15$  mm en bas pour  $V_p=11500$  et  $V_{ext}=10000\text{V}$ .

#### 4.4.2 Etude de l'effet de la charge d'espace

L'ion est d'autant plus susceptible d'être soumis à la charge d'espace qu'il est plus lourd et plus intense. La figure 4.5 montre les courbes d'émittance et de divergence pour l'ion  $\text{Xe}^{9+}$  et un courant de  $100\mu\text{A}$ . On voit sur ces courbes que les valeurs d'émittance augmentent d'un facteur deux tandis que la valeur de la divergence reste inférieure à  $50$  mrad, valeur limite pour que le faisceau puisse entrer sans perte dans la lentille Einzel.

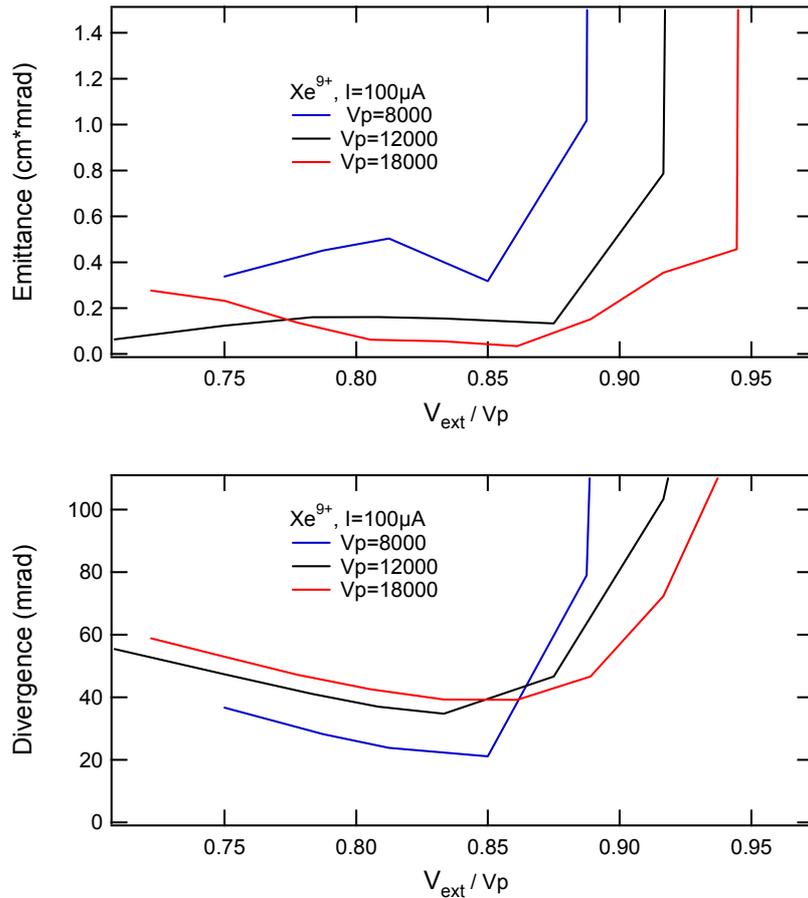


Figure 4.5 : Courbes d'émittance et de divergence en fonction du rapport  $V_{ext}/V_p$  pour un courant d'ions  $Xe^{9+}$  égal à  $100 \mu A$ .

Cette étude montre que la charge d'espace n'a pas d'effet considérable dans ce cas, qui représente sans doute le pire qui puisse être rencontré dans nos expériences. Notons ici que la géométrie de Pierce [Geller 1996] de l'électrode plasma (angle  $67^\circ$ ) n'a pas d'intérêt dans ce cas.

#### 4.4.3 Effet de la température du plasma

Les résultats obtenus jusqu'à présent le sont sans déclarer la température du plasma à l'intérieur de la source. Sa valeur n'est pas aisément accessible. Dans le cas de notre source, les références bibliographiques donnent  $T \sim 5 Z_i \text{ eV}$ ,  $Z_i$  étant le nombre de charges des ions [Geller 1996]. Dans le cas des ions  $Ar^{5+}$ , nous avons retracé les courbes de divergence et d'émittance en fonction du rapport  $V_{ext}/V_p$ . Elles sont présentées par la figure 4.6. Notons que, dans le logiciel IGUN, le plasma est considéré en équilibre thermodynamique entre les ions et les électrons.

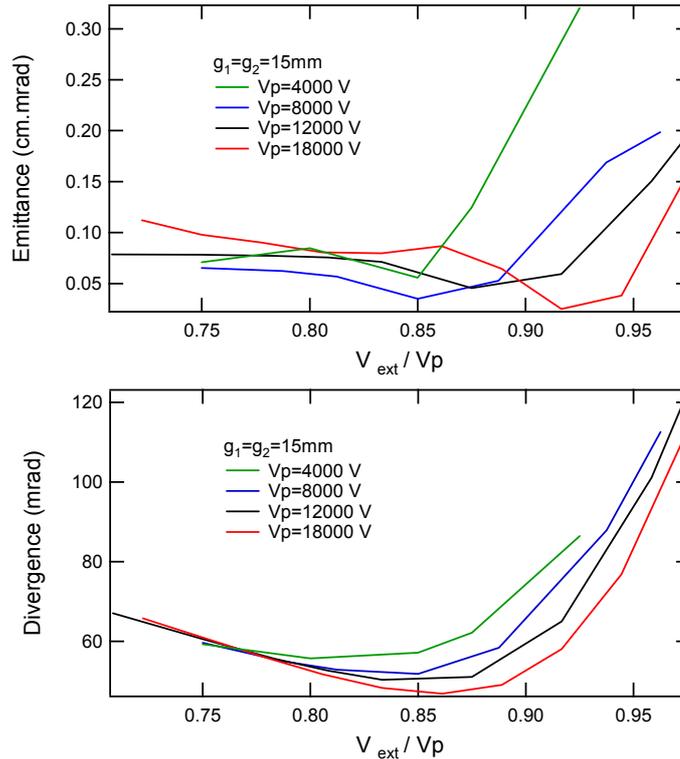


Figure 4.6 : Courbes d'émittance et de divergence en fonction du rapport  $V_{ext}/V_p$  pour l'ion  $Ar^{3+}$ , avec une température ionique de plasma  $T$  égale à  $5 \times Z_i$  eV soit 25 eV

D'après la figure 4.6, on voit que le rapport optimal  $V_{ext}/V_p$  reste inchangé. Quant aux divergences, l'allure des courbes est modifiée mais leurs gammes de valeurs restent les mêmes pour un rapport  $V_{ext}/V_p$  entre 0,8 et 0,9.

## 4.5 Etude du transport du faisceau d'ion jusqu'à l'aimant

Après l'extraction à la sortie de la source RCE, le faisceau d'ions est transporté jusqu'à l'aimant dipolaire. L'optique de transport à ce stade est composée d'une lentille unipotentielle focalisante et d'un aimant. L'étude de transport a été réalisée à l'aide du code ECRopt. Pour simuler les trajectoires des ions, le faisceau est représenté par des particules dont les variables de position sont distribuées dans deux diagrammes d'émittance  $xx'$  et  $yy'$ . L'énorme avantage de ce code est le traitement de la lentille unipotentielle. En effet, le calcul du comportement des faisceaux dans les lentilles électrostatiques nécessite la résolution de l'équation de Laplace, ce qui fait appel à des codes lourds. On obtient une solution de remplacement en faisant un développement limité d'une distribution axiale du potentiel accessible pour des géométries figées. Dans le cas de la lentille einzel, il n'y a pas de formule analytique d'une telle distribution axiale, mais on peut obtenir une expression générale de cette distribution en géométrie cylindrique entre deux électrodes tubulaires, espacées de diamètres différents [annexe B]

## Equations de base utilisées dans la simulation

La relation fondamentale de la dynamique appliquée à une particule de masse  $m$ , de charge  $q$  et de coordonnées  $(x,y,z)$ , se déplaçant dans un champ magnétique  $\vec{B}$  et soumise à un champ électrique  $\vec{E}$  :

$$m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = q \cdot \vec{E} + q \cdot (\vec{v} \times \vec{B})$$

donne les équations de mouvement suivantes :

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = q \cdot E_x + q \cdot (v_y B_z - v_z B_y)$$

$$m \frac{d^2 y}{dt^2} = q \cdot E_y + q \cdot (v_x B_z - v_z B_x)$$

$$m \frac{d^2 z}{dt^2} = q \cdot E_z + q \cdot (v_x B_y - v_y B_x)$$

Au lieu de résoudre les équations en fonction du temps, nous prendrons comme variable d'intégration la position  $z$  de la particule au temps  $t$  correspondant. Dans ce cas les équations du mouvement en  $x$  et  $y$  s'écrivent :

$$\frac{d^2 x}{dz^2} = x'' = \eta \frac{E_x}{v_z^2} + \eta \left( \frac{y' B_z - B_y}{v_z} \right) - \eta \frac{x' E_z}{v_z^2} - \eta \left( \frac{x'^2 B_y - x' y' B_x}{v_z} \right)$$

$$\frac{d^2 y}{dz^2} = y'' = \eta \frac{E_y}{v_z^2} + \eta \left( \frac{B_x - x' B_y}{v_z} \right) - \eta \frac{y' E_z}{v_z^2} - \eta \left( \frac{x' y' B_y - y'^2 B_x}{v_z} \right)$$

$\eta=q/m$  est le rapport charge sur masse de la particule considérée,  $E_x$ ,  $E_y$  et  $E_z$  sont les composantes du champ électrique suivant  $x$ ,  $y$  et  $z$ ,  $B_x$ ,  $B_y$  et  $B_z$  sont les composantes du champ magnétique suivant  $x$ ,  $y$  et  $z$ .

Pour résoudre ces équations, il faut connaître l'induction  $B$  et le champ  $E$  (ou le potentiel  $V$ ) en tout point de l'espace. L'intégration se fait par une variante de la méthode Runge-Kutta du 4<sup>ème</sup> ordre. La connaissance des champs se fait soit à partir d'expressions analytiques, soit de développements limités.

L'expression du champ d'une lentille est déduite de l'expression du potentiel axial existant entre deux tubes de rayon  $a$ , séparés par un espace  $2d$ , aux potentiels  $V_1$  et  $V_2$  :

$$V(0, z) = \frac{V_1 + V_2}{2} + \frac{V_2 - V_1}{2} \frac{a}{2wd} \operatorname{Ln} \left( \frac{ch \frac{w(z+d)}{a}}{ch \frac{w(z-d)}{a}} \right)$$

où  $w=1,315$

La connaissance des champs se fait à partir de développements limités s'ils sont à symétrie axiale. Au premier ordre on sait que :

$$V(r, z) = V(0, z) - \frac{r^2}{4} \frac{d^2 V(0, z)}{dz^2}$$

L'expression des composantes du champ électrique est donc :

$$E_x = \frac{x}{2} \frac{\partial^2 V(0, z)}{\partial z^2}$$

$$E_y = \frac{y}{2} \frac{\partial^2 V(0, z)}{\partial z^2}$$

$$E_z = -\frac{\partial V(0, z)}{\partial z}$$

A partir des données initiales et des équations du mouvement ainsi que des expressions du champ électrique, on trouve les valeurs finales des coordonnées des particules. Notons ici que les données initiales sont ceux déterminées par IGUN lors de l'étude de l'extraction.

### Trajectoires des ions dans l'optique de transport

Le but de cette simulation est de déterminer la tension à appliquer sur l'électrode centrale de la lentille Einzel ( $V_L$ ) et trouver éventuellement une meilleure géométrie de transport. La géométrie actuelle de la ligne est faite pour que la lentille focalise au point objet de l'aimant, c'est à dire à 40 cm à la sortie de la lentille et à 75 cm devant l'aimant. L'aimant étant symétrique, il focalise également à 75 cm.

Une simulation des trajectoires dans les plans horizontal et vertical tout au long de l'optique de transport est représentée sur la figure 4.7. Pour un faisceau d'ions  $Ar^{5+}$  extraits à  $V_p=12$  kV et  $V_{ext}=10,8$  kV, le faisceau est focalisé à peu près aux deux endroits prévus avec une tension  $V_L$  égale à 7450 V Pour déterminer la valeur de  $V_L$ . Nous avons augmenté progressivement la tension appliquée sur l'électrode centrale de la lentille einzel. Nous avons vérifié également que ces résultats sont obtenus quelle que soit la tension d'extraction  $V_p$  appliquée pour un rapport  $V_L/V_p$  constant. Le rectangle représente l'acceptance géométrique maximale de la chambre à vide à l'intérieur de l'aimant.

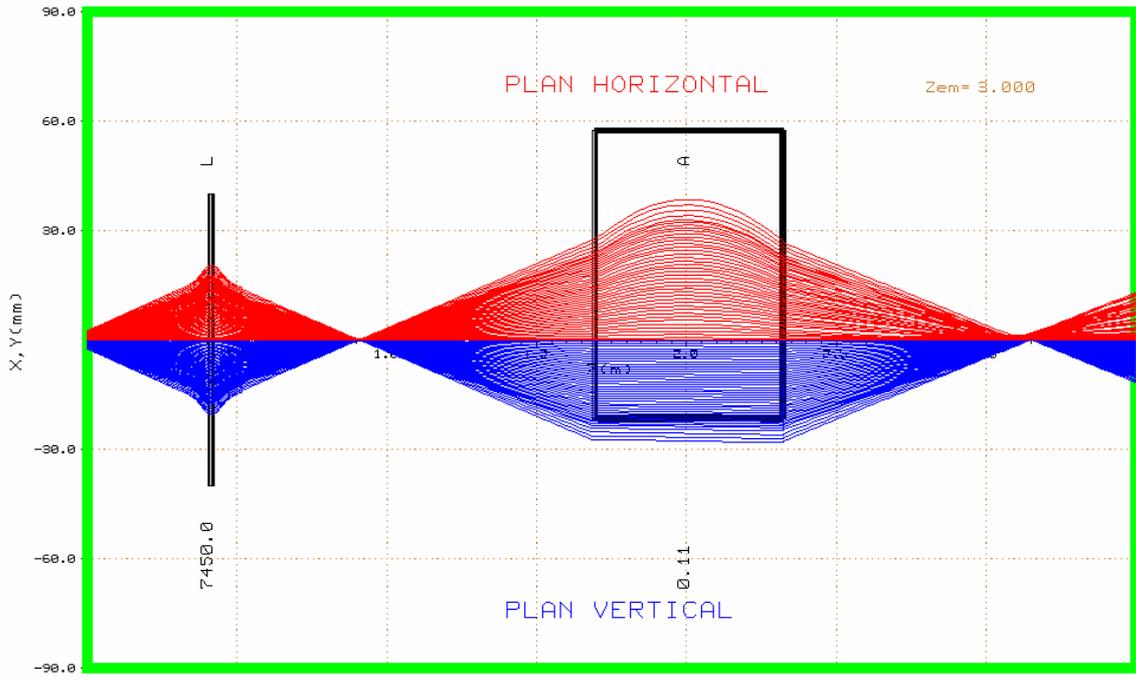


Figure 4.7 : Simulation des trajectoires des ions  $Ar^{5+}$  à l'intérieur de la lentille unipotentielle  $L$  et l'aimant dipolaire  $A$  pour une distance lentille-aimant égale à 1150 mm. Les trajectoires dans le plan horizontal sont représentées en rouge, celles dans le plan vertical en bleu. Un carreau représente 0,5 m.

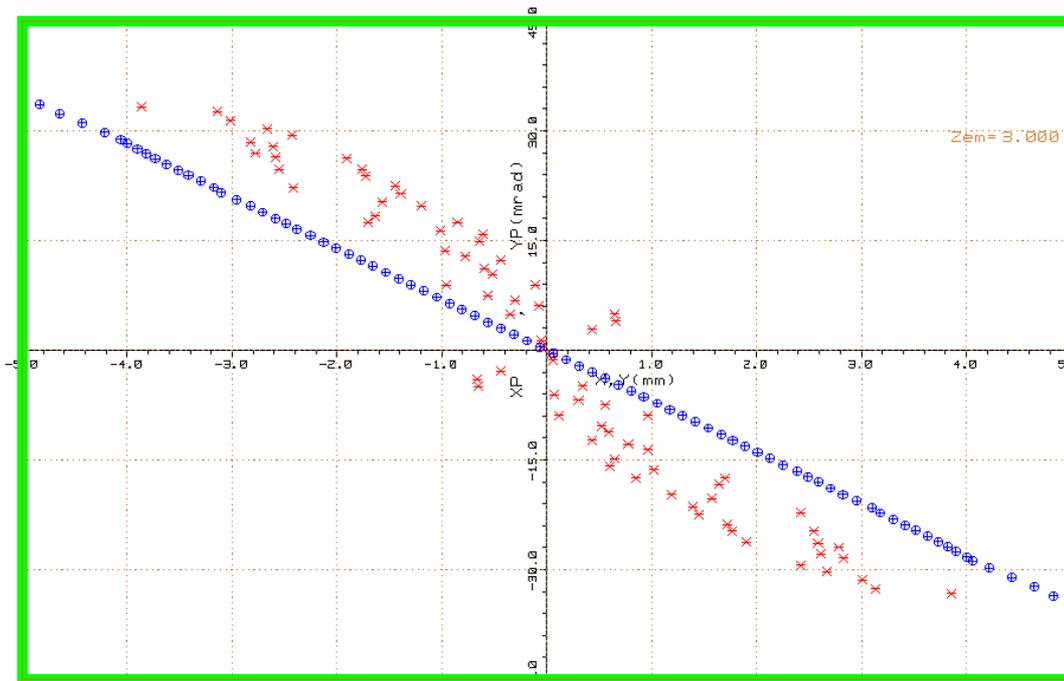


Figure 4.8 : Emittances du faisceau d'ions  $Ar^{5+}$  à  $z=3$  m : en rouge l'émittance dans le plan horizontal, en bleu celle dans le plan vertical.

La figure 4.7 montre aussi que des ions sont perdus dans le plan vertical au niveau de l'aimant dipolaire. Cette perte est la conséquence de la grande distance lentille d'extraction-lentille Einzel. Une des modifications à apporter à la configuration de la ligne de transport, afin de diminuer les pertes, consiste à réduire la distance système d'extraction-lentille focalisante. Nous avons simulé la même ligne de transport mais avec une distance Ep-LE réduite de 10 cm (290 mm au lieu de 390 mm). La figure 4.9 montre les trajectoires des ions dans ce cas. On peut constater une nette amélioration du transport. En effet, les amplitudes des trajectoires d'ions sont nettement inférieures à celles du cas précédent et la tache de l'émittance est plus petite. Les figures 4.8 et 4.10 montrent les émittances du faisceau d'ion dans le plan  $z=3\text{m}$  pour des distances Ep-LE égales à 390 mm et 290 mm respectivement.

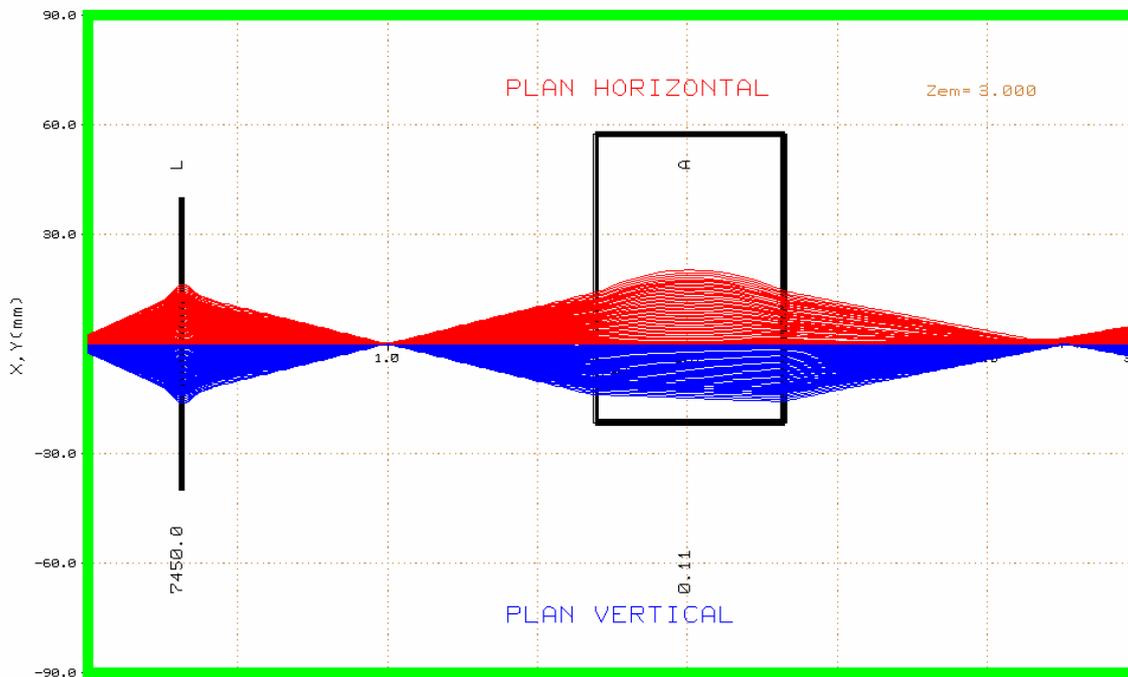


Figure 4.9 : Simulation des trajectoires des ions  $Ar^{5+}$  à l'intérieur de la lentille unipotentielle  $L$  et l'aimant dipolaire  $A$  pour une distance lentille-aimant égale à 1250 mm. Les trajectoires dans le plan horizontal sont représentées en rouge, celles dans le plan vertical en bleu.

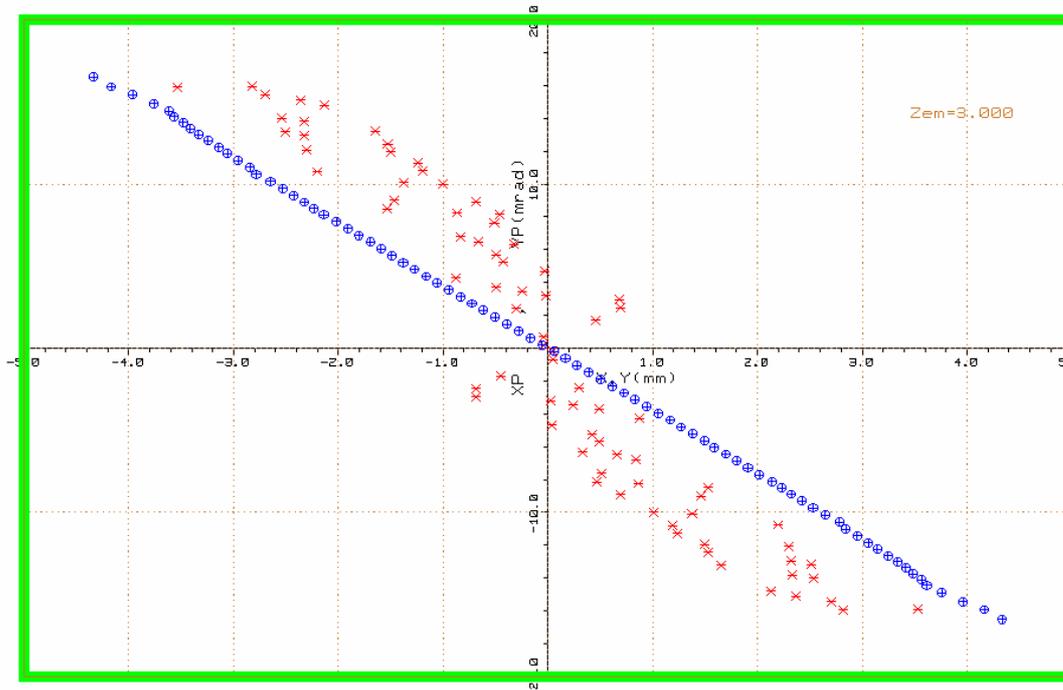


Figure 4.10 : Emittances du faisceau d'ions  $Ar^{5+}$  à  $z=3m$  : en rouge l'émittance dans le plan horizontal, en bleu celle dans le plan vertical.

## 4.6 Conclusion

Dans ce chapitre, Nous avons déterminé les paramètres géométriques de l'espace d'extraction pour des caractéristiques optiques de faisceau compatibles avec le dessin du transport imposé. Nous avons aussi montré que la charge d'espace et la température plasma n'avaient pas d'effets radicaux, et que la polarisation  $V_{ext}$  permet de rattraper les écarts qu'elles créent. En effet, La figure 4.11 montre une comparaison des divergences du faisceau d'ions pour trois cas différents : le cas d'un faisceau d'argon 5+ sans déclarer la température du plasma, le cas d'un faisceau d'argon 5+ en déclarant une température ionique de 25 eV et le cas d'un faisceau de xenon 9+ où des effets de charges d'espace peuvent être présents. On voit bien que les valeurs de la divergence varient peu d'un cas à l'autre.

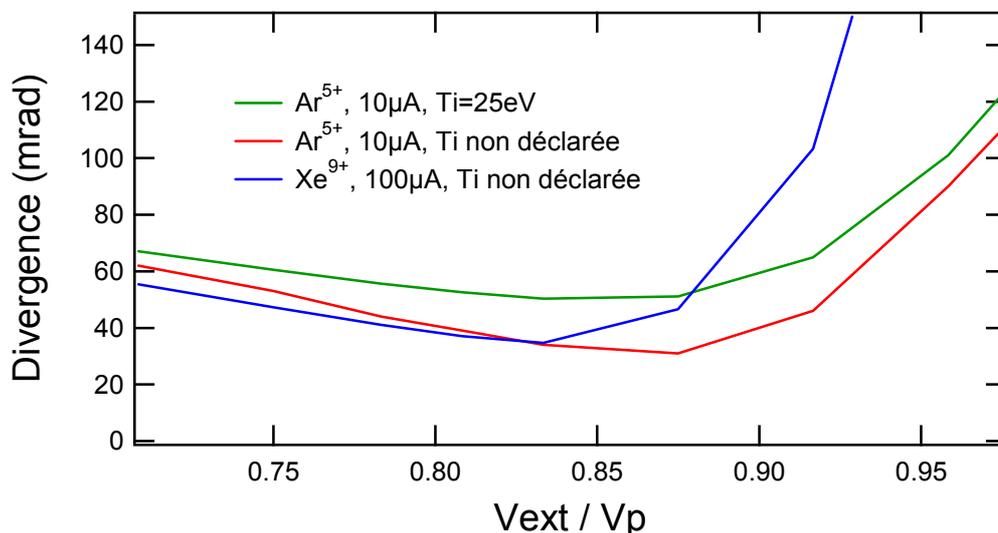


Figure 4.11 : Courbes de divergence en fonction du rapport  $V_{ext}/V_p$  pour : en vert l'ion  $Ar^{5+}$  avec une température ionique de plasma égale à 25 eV (25 eV pour l' $Ar^{5+}$ ), en rouge l'ion  $Ar^{5+}$  sans déclarer la température du plasma et en bleu l'ion  $Xe^{9+}$  pour un courant de 100  $\mu A$ .

Dans la deuxième partie, nous avons déterminé la tension qu'il faut appliquer à l'électrode centrale de la lentille Einzel pour focaliser aux points objet et image de l'aimant dipolaire. Le rapport entre cette tension et celle appliquée à l'électrode plasma, qui détermine la vitesse des ions, est de l'ordre de 0,62. Avec le dessin de transport imposé, on constate une perte d'ions qui peut être évitée en réduisant la distance entre le système d'extraction et la lentille einzel. La géométrie de notre électrode intérieure nous permettra de réduire cette distance par le simple fait de réduire la longueur de l'électrode. Des mesures d'émittance seront réalisées sur MAIA à  $z = 3$  m. La comparaison de ces mesures avec les résultats de ces simulations permettra de valider les conditions initiales obtenues à l'aide de IGUN et d'optimiser, par la suite, le transport du faisceau jusqu'à la zone d'interaction.

## **Bibliographie**

Becker R. & Herrmannsfeldt W.B., Rev. Sci. Instrum. **63**, 2756 (1992)

Geller R., « Electron cyclotron resonance ion sources and ECR plasma », Institute of Physics publishing (1996)

Herrmannsfeldt W.B., Rapport SLAC 166, Stanford Linear Accelerator Center, Stanford, California (1973)

Keller R. Nucl. Instr. Meth. A **298**, 247 (1990)

Regenstreif E., Focusing of charges particles (Ed. Septier A.), Academic Press (1967)

## Chapitre 5: Conclusions et perspectives

Dans ce mémoire de thèse j'ai présenté les résultats que j'ai obtenus sur les processus de photoionisation en couche M d'ions de la série isonucléaire du fer, ions qui jouent un rôle particulièrement important dans les plasmas astrophysiques. Nos mesures ont été réalisées en utilisant la technique des faisceaux colinéaires qui consiste à mélanger un faisceau de rayonnement synchrotron avec un faisceau d'ions produit par une source RCE. Par spectrométrie ionique, j'ai déterminé en valeur absolue les sections efficaces de photoionisation pour les ions  $\text{Fe}^{2+}$  jusqu'à  $\text{Fe}^{6+}$ , sur une large gamme d'énergie de photon allant du premier seuil d'ionisation jusqu'à 160 eV. La précision sur ces mesures est de l'ordre de 10 à 15%. Les techniques et les procédures expérimentales ont été décrites et validées sur l'hélium monochargé. La contribution d'ions dans des états métastables produits dans notre source a été discutée en détail.

Une attention particulière a été apportée à l'étude des excitations  $3p \rightarrow 3d$ , responsables de structures larges et intenses dans les spectres expérimentaux. Nos mesures ont été confrontées à des résultats théoriques provenant de plusieurs modèles : des calculs utilisant le code OPAS qui ont été menés par une collaboration entre notre équipe et les théoriciens au CEA Bruyères-le-Chatel, des calculs de matrice-R dont ceux de l'Opacity Project, et des calculs utilisant un modèle à électrons indépendants. Cette comparaison a montré la nécessité d'inclure les excitations en couche interne  $3p$  pour décrire correctement l'opacité des plasmas composés d'ions de fer. D'une façon générale, presque tous les calculs réussissent à reproduire de façon satisfaisante le fond continu des spectres expérimentaux, qui correspond au processus de photoionisation directe. Cependant, à l'exception des derniers calculs de matrice-R réalisés par Bautista suite à la publication de nos mesures sur l'ion  $\text{Fe}^{4+}$ , toutes les théories échouent à décrire les structures  $3p$ - $3d$  et surestiment en général leur intensité.

En ce qui concerne l'ion  $\text{Fe}^{2+}$ , il reste une incertitude sur l'intensité de la section efficace de photoionisation expérimentale à cause de la contamination du faisceau d'ions par des ions qui ont le même rapport masse sur charge. Une nouvelle étude est envisagée en utilisant l'isotope pur  $^{54}\text{Fe}$  pour s'affranchir de ce problème.

Les possibilités de mesurer expérimentalement les sections efficaces de photoionisation restent limitées par les performances des sources d'ions et les flux de rayonnement synchrotron disponibles. Une nouvelle expérience a été construite et est maintenant installée d'une façon permanente sur la ligne de lumière PLEIADES du nouvel

anneau de stockage de 3<sup>ème</sup> génération SOLEIL. Elle est équipée d'une source d'ions RCE plus puissante que celle utilisée à ASTRID, nous permettant d'accéder à des états de charge plus élevés et d'obtenir des courants d'ions plus importants. Les performances du montage de SOLEIL, comparées à celui d'ASTRID, sont données dans la table 5.1.

	ASTRID	SOLEIL
h $\nu$	20-160 eV	10-1000eV
dh $\nu$ /h $\nu$	~0.01-1%	~0.002%
flux de photons	10 <sup>12</sup> -10 <sup>13</sup> ph/s	10 <sup>12</sup> -10 <sup>13</sup> ph/s
spectroscopies	ionique	Ionique, électronique, fluorescence

*Table5.1 : Comparaison entre les principales caractéristiques des montages d'ASTRID et de SOLEIL*

Le gain en brillance de photons, associé au gain en courants d'ions disponibles et à la plus longue zone d'interaction, augmentera notre sensibilité de détection, donnant accès à des processus de section efficace plus faible et à l'utilisation de spectroscopies complémentaires, celles d'électrons et de fluorescence. De plus, le domaine spectral couvert ira de quelques électrons-volts à 1 keV, avec une résolution fortement accrue, permettant entre autres l'étude d'ions plus chargés et de processus de photoionisation en couches plus internes. Ce nouveau montage expérimental est attendu pour être un des plus élaborés et les plus performants parmi les dispositifs permettant d'étudier les processus de photoionisation non seulement dans les ions multichargés, mais aussi dans les ions négatifs. Un schéma de ce montage est présenté figure 5.1. Une étude de l'extraction des ions multichargés à la sortie de la nouvelle source RCE a été présentée dans ce manuscrit. Elle sera confrontée à des mesures d'émittance du faisceau d'ions.

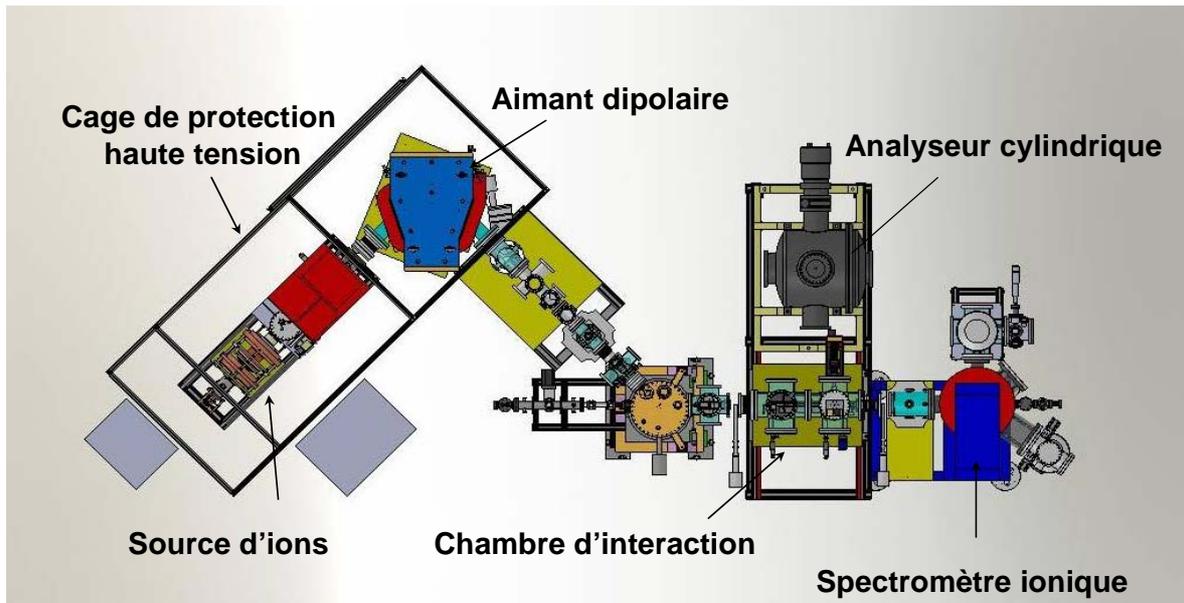


Figure 5.1 : Dispositif MAIA installé d'une façon permanente à SOLEIL.

La mesure absolue des sections efficaces de photoionisation dans les ions multichargés constitue une avancée en physique atomique et physique des plasmas. Il y a peu de temps, la majorité de l'information disponible dans ce domaine provenait d'études théoriques. Les travaux expérimentaux ont permis déjà un premier test de la validité des résultats théoriques. Les nouvelles expériences, comme celles en développement à SOLEIL, PETRA III ou sur les X-FEL, apporteront un test encore plus précis des modèles, permettant de les améliorer en incluant de nouveaux effets pour s'approcher le plus possible de la réalité.



# Annexes

Annexe A : Programme ECROpt

Annexe B : Etude du comportement des faisceaux dans les lentilles électrostatiques

Annexe C : El Hassan N. et al., Phys. Rev. A, 79, 033415 (2009)



# Annexe A

```
C | ***** PROGRAMME ECROPT08 *****
C CE PROGRAMME ETUDIE LA FOCALISATION D'UN FAISCEAU D'IONS DE
C RAPPORT NB de MASSE/NB de CHARGES=AMASS AVEC LES DONNEES
C ISSUES DE IGUN DANS UN SYSTEME SIMPLE LENTILLE ELECTROSTATIQUE
C & ELEMENT A SECTEUR MAGNETIQUE.
C VERSION DEDIEE D'ISOL DU 06/2009.
C
C -----
```

```
IMPLICIT REAL*4 (A-H,O-Z)
DIMENSION X(101),XP(101),Y(101),YP(101),U(4),DC(2),EC(2),
1XPLOT(4000,101),YPLOT(4000,101),ZPLOT(4000),AC(2),BC(2),CC(2),
2AA(4),B(4),C(4),CK(6),Q(6),XDRAW(4000),YDRAW(4000),DELTVA(101),
3XEM(101),XP(101),YEM(101),YP(101),DUM1(101),DUM2(101),
4DUM3(101),DUM4(101),BBC(2),DDC(2),EEC(2)
REAL*8 X,Y,XP,YP,U,AA,B,C,Q,CK
NAMELIST/DONNE/VA,YMAXS,XMAXS,AMASS,DISPEN,UNITE,KMAX,ZM
CHARACTER*50 FIC1,FIC2,FIC3,TITRE
```

```
C-----
C     DONNEES RUNGE-KUTTA.
C METHODE D'INTEGRATION CLASSIQUE DONT LA PROGRAMMATION EST
C TIREE DE TRIWHEEL, CODE MSU.
```

```
C-----
AA(1)=0.5
AA(2)=0.29289322
AA(3)=1.70710678
AA(4)=0.16666667
B(1)=2.
B(2)=1.
B(3)=1.
B(4)=2.
C(1)=0.5
C(2)=AA(2)
C(3)=AA(3)
C(4)=0.5
Q(1)=0.
Q(2)=0.
Q(3)=0.
Q(4)=0.
Q(5)=0.
Q(6)=0.
KTYPE=1
XRL=1.
YRL=1.
XPG=10.
YPG=6.5
```

```
C-----
C     LE PROGRAMME EST COMPILE ET LINKE PAR CVF6 et UGLRP7.
C     LES DONNEES SONT EN MKSA, MAIS LES IMPRESSIONS ET DESSINS
C     SONT FAITS AVEC DES DIMENSIONS TRANSVERSES EN MM.
```

```
C-----
WRITE(*,*) ' NOM DU FICHER D'ENTREE SANS.DAT'
READ (*,998) FIC3
L=INDEX(FIC3,' ')-1
```

```

FIC1=FIC3(1:L)///'.DAT'
OPEN(UNIT=8,FILE=FIC1)
L=INDEX(FIC1,' ')-1
FIC2=FIC1(1:L-4)///'.RET'
OPEN(UNIT=9,FILE=FIC2)
READ(8,998)TITRE
998 FORMAT(A50)
READ(8,DONNE)
READ(8,*)(I,DUM1(I),X(I),XP(I),DUM2(I),I=1,KMAX)

```

```

C-----
C   CES DONNEES SONT ISSUES D'IGUN.OUT EN R,R'. KMAX=MAXRAY.
C   ON LES TRANSFORME EN DONNEES RELATIVES  DANS LES 2 PLANS CARTESIENS
C   X,X',Y,Y' EN AJOUTANT DE LA DISPERSION EN ENERGIE ALEATOIRE, MAIS
C   CONFORME AUX DONNEES DU TYPE DE SOURCE (DE# 10eV X CHARGE).
C   LES COURANTS ET ENERGIE EN SORTIE DE IGUN NE SERVENT PAS D'OU DUM.
C-----

```

```

DO I=1,KMAX
X(I)=UNITE*X(I)
Y(I)=0.
YP(I)=0.
X(KMAX+I)=0.
XP(KMAX+I)=0.
Y(KMAX+I)=X(I)
YP(KMAX+I)=XP(I)
ENDDO

```

```

      NINT=KMAX
      KMAX=2*KMAX
      DO I=1,KMAX
      DELTVA(I)=DISPEN*RAND(0)
      ENDDO

```

```

C-----
C   DONNEES DE CONFIGURATION DE UGL
C   ++++++
C   YMAXS EST,EN MM,L'ORDONNEE MAX EN X,Y SUR LE DESSIN,
C   XMAXS EST,EN M, L'ABSCISSE MAX EN Z SUR LE DESSIN.
C-----

```

```

      CALL DEVICE(KTYPE,XPAGE,YPAGE)
      CALL NOBORD
      CALL ORIGIN(XRL,YRL)
      CALL SETSUB(XPG,YPG)
      CALL SETCLR('WHITE')
      CALL FILBKG
      CALL HEIGHT(0.1)
      CALL XLABEL('Z(m)',100)
      CALL YANGLE(0.)
      CALL YLABEL('X,Y(mm)          $',100)
      CALL CROSS
      CALL SETCLR('BLACK')
      CALL XMARKS(10)
      CALL YMARKS(5)
      CALL AXES2D(0.,0.,XMAXS,-YMAXS,0.,YMAXS)
      CALL SETCLR('ORAN')
      CALL DOT
      CALL GRID(1,1)

```

```

        CALL RELMSG('Zem=',4,0.8*XMAXS,0.85*YMAXS)
        CALL RELRNO(ZM,3,0.85*XMAXS,0.85*YMAXS)
CALL RESET ('DOT')
CALL SETCLR('GREEN')
CALL FRMWID(0.1)
CALL FRAME
CALL RESET('DOT')
CALL CRVWID(0.05)
CALL ANGLE(90.)
        CALL SETCLR('BLACK')

BC(1)= 0.5*YMAXS
BC(2)=-0.5*YMAXS
DC(1)=BC(1)
DC(2)=BC(1)
EC(1)=BC(2)
EC(2)=BC(2)
LPRT=1
NIJ=(KMAX-1)/2
NEX=NIJ+1
NSTEP=100
        KEM=0
100 FORMAT ( )
1000 FORMAT(35X,'*****')
        WRITE(9,1000)
        WRITE(9,1002)KMAX
1002 FORMAT(/,15X,'KMAX=',I4,/)
        Z=0.
        DZ=0.001
        V=VA
        PI=3.14159
        ETA=1.759E+11
        E=1.602177E-19
        AMPRO=1.67262158E-27
        VL=SQRT(2.*E*VA/(AMASS*AMPRO))
C-----
1 READ(8,*)ISYST
C-----
C LE CODE 1 (ISYST=1) DEFINIT UN ESPACE LIBRE
C LE CODE 3 (ISYST=3) DEFINIT UNE LENTILLE ELECTROSTATIQUE
C LE CODE 5 (ISYST=5) DEFINIT UN SECTEUR MAGNETIQUE.
C ON PEUT MULTIPLIER LES CODES A L'INFINI, C'EST LE PRINCIPE DE
C "TRANSPORT".
C-----
C WRITE(9,1000)
C WRITE(9,1003)(I,X(I),XP(I),Y(I),YP(I),I=1,KMAX)
C WRITE(9,1000)
1003 FORMAT(4X,'I=',I3,3X,'X=',F8.5,4X,'XP=',F8.5,4X,'Y=',F8.5,4X,
1'YP=',F8.5,4X)
        IF (ISYST.EQ.1) GO TO 2
        IF (ISYST.EQ.3) GO TO 5
        IF (ISYST.EQ.5) GO TO 6
        IF (ISYST.EQ.999) GO TO 999
C-----
C ESPACE LIBRE DE LONGUEUR ZL.ON FAIT UNE APPLICATION
C LINEAIRE.
C-----

```

```

2 READ(8,*)ZL
  WRITE(9,1023)ZL
1023 FORMAT (/,3X,'ESPACE LIBRE*****','L=',E9.3,3X,/)
  DZL=ZL/NSTEP
  DO 57 KJ=1,NSTEP
  DO J=1,KMAX
  X(J)=X(J)+DZL*XP(J)
  Y(J)=Y(J)+DZL*YP(J)
  XPLOT(LPRT,J)=1000.*X(J)
  YPLOT(LPRT,J)=1000.*Y(J)
  END DO
  ZPLOT(LPRT)=Z
    IF(Z.GE.ZM.AND.KEM.EQ.0)THEN
    DO I=1,KMAX
    DUM1(I)=X(I)
    DUM2(I)=Y(I)
    DUM3(I)=XP(I)
    DUM4(I)=YP(I)

    WRITE(9,*)I,X(I),XP(I),Y(I),YP(I)
    ENDDO
    KEM=1
    ENDIF
  Z=Z+DZL
  LPRT=LPRT+1
57 CONTINUE
  GOTO 1
C-----
C  LENTILLE ELECTROSTATIQUE SIMPLE POLARISEE A VLENT, LES CHAMPS ET
C  POTENTIEL SONT DEDUITS D'UNE EXPRESSION ANALYTIQUE ORIGINALE.
C-----
5  READ(8,*)VLENT,RA,RB,GAP,EPAIS
  ZL=4.*RA+2.*GAP+EPAIS
  ZMAX=Z+ZL
  ZORIG=Z+ZL/2.
  AC(1)=ZORIG
  AC(2)=ZORIG
    CALL CURVE(AC,BC,2,0)
    CALL RELMSG('L',1,AC(1),0.6*YMAXS)
    CALL RELRNO(VLENT,1,AC(1),-0.85*YMAXS)
  ZZL=1000.*ZL
  WRITE(9,1029)VLENT,ZZL
1029 FORMAT(/,3X,'LENTILLE ELECTR. *****',3X,'POLAR. CENT.=',
1F7.1,3X,'LONGUEUR(MM)=' ,F7.1,/)
C  LA SOURCE ECR ETANT A LA HT (VA), VLENT EST LE POTENTIEL REEL
C  APPLIQUEE SUR L'ELECTRODE CENTRALE DE LA LENTILLE
C  IL N'EMPECHE QUE TOUS LES RAISONNEMENTS SUIVANTS SUR L'ACTION DE
C  CETTE LENTILLE SONT BASES SUR L'ENERGIE DU FAISCEAU AU LIEU
C  CONSIDERE.
C  RAPPELONS QUE LES POTENTIELS SONT NEGATIFS, ICI LES CALCULS SONT FAITS
C  EN VALEUR ABSOLUE! ATTENTION A L'EXPRESSION DES CHAMPS!!!!!!!!!!
  OMEGA=1.318
  PARAM1=RA+RB+GAP*OMEGA
  V1=VA
  V2=VA-VLENT
  VPREC=VA
  VPPREC=0.

```

```

V1A=V1-0.5*V2
V2A=0.5*V2
V1B=V2A
V2B=V1A
PHI1A=(RA*V2A+RB*V1A+GAP*V1A*OMEGA)/PARAM1
EZA=(PHI1A-V1A)*OMEGA/RA
PHI1B=(RA*V2B+RB*V1B+GAP*V1B*OMEGA)/PARAM1
EZB=(PHI1B-V1B)*OMEGA/RA
PHI2A=PHI1A+GAP*EZA
PHI2B=PHI1B+GAP*EZB
81 ZREF=Z-ZORIG
C L'ORIGINE DES EXPRESSIONS ANALYTIQUES EST AU MILIEU DE L'ELECTRODE
C CENTRALE.
20 IF(ZREF+GAP+EPAIS/2.)21,21,22
21 ARG1=TANH(OMEGA*(ZREF+GAP+EPAIS/2.)/RA)
ARG2=TANH(OMEGA*(EPAIS/2.-ZREF)/RB)
V=PHI1A+(PHI1A-V1A)*ARG1-PHI2B-(V2B-PHI2B)*ARG2
GOTO 35
22 IF(ZREF+EPAIS/2.)23,23,24
23 ARG1=PHI1A+(ZREF+GAP+EPAIS/2.)*EZA
ARG2=TANH(OMEGA*(EPAIS/2.-ZREF)/RB)
V=ARG1-(V2B-PHI2B)*ARG2-PHI2B
GOTO 35
24 IF(ZREF-EPAIS/2.)25,25,26
25 ARG1=(V2A-PHI2A)*TANH(OMEGA*(EPAIS/2.+ZREF)/RB)
ARG2=(V2B-PHI2B)*TANH(OMEGA*(EPAIS/2.-ZREF)/RB)
V=ARG1-ARG2+PHI2A-PHI2B
GOTO 35
26 IF(ZREF-GAP-EPAIS/2.)29,29,30
29 ARG1=(ZREF-EPAIS/2.)*EZB-PHI2B
ARG2=(V2A-PHI2A)*TANH(OMEGA*(EPAIS/2.+ZREF)/RB)
V=ARG1+PHI2A+ARG2
GOTO 35
30 ARG1=(PHI1B-V1B)*TANH(OMEGA*(ZREF-GAP-EPAIS/2.)/RA)
ARG2=(V2A-PHI2A)*TANH(OMEGA*(EPAIS/2.+ZREF)/RB)
V=ARG1+ARG2-PHI1B+PHI2A
35 V=V1+V
VPRIM=(V-VPREC)/DZ
VPREC=V
VPPRIM=(VPRIM-VPPREC)/DZ
VPPREC=VPRIM
C ON CALCULE DV/DZ ET D2V/DZ2 PAR MAC LAURIN
CEX=-VPPRIM/(4.*V)
CEY=CEX
CEZ=-VPRIM/(2.*V)
C-----
C INTEGRATION PAR RUNGE-KUTTA5
C-----
56 DO J=1,KMAX
U(1)=X(J)
U(2)=XP(J)
U(3)=Y(J)
U(4)=YP(J)
DO L=1,4
CK(1)=DZ*U(2)
CK(2)=DZ*(CEX*U(1)+CEZ*U(2))
CK(3)=DZ*U(4)

```

```

CK(4)=DZ*(CEY*U(3)+CEZ*U(4))
  DO M=1,4
TT=AA(L)*(CK(M)-B(L)*Q(M))
U(M)=U(M)+TT
Q(M)=Q(M)+3.*TT-C(L)*CK(M)
  END DO
END DO
X(J)=U(1)
XP(J)=U(2)
Y(J)=U(3)
YP(J)=U(4)
END DO
DO J=1,KMAX
XPLOT(LPRT,J)=1000.*X(J)
YPLOT(LPRT,J)=1000.*Y(J)
END DO
ZPLOT(LPRT)=Z
LPRT=LPRT+1
IF(Z-ZMAX)58,1,1
58 Z=Z+DZ
GO TO 81

```

```

C-----
C FOCALISATION D'AIMANT AMENANT UNE DEVIATION PHI
C PAR UNE INDUCTION BOZ SUR UNE MASSE AMASS.
C LA MATRICE PRINCIPALE EST SCINDEE EN 20.LES MATRICES DES
C ANGLES DE POLES JOUENT EN LEUR LIEU. RAPPELONS QUE BET1 ET BET2
C SONT COMPTEES + SI LES NORMALES AUX POLES SONT EXTERIEURES/CENTRE
C DE COURBURE.L'INDICE EST UN10!
C-----

```

```

6 READ(8,*)PHI,RHO,BETENT,BETSOR,UN10
EPSX=SQRT(1.-UN10)
EPSY=SQRT(UN10)
TRARAD=3.14159/180.
PHI=PHI*TRARAD
DPHI=PHI/20.
SP=SIN(DPHI)
CP=COS(DPHI)
BET1=TRARAD*BETENT
BET2=TRARAD*BETSOR
BOZ=AMASS*AMPRO*VL/(E*RHO)
TG1=TAN(BET1)/RHO
TG2=TAN(BET2)/RHO
ZL=ABS(PHI*RHO)
AC(1)=Z
AC(2)=Z
CC(1)=Z
  BBC(1)=-21.5
  BBC(2)=57.5
  DDC(1)=BBC(1)
DDC(2)=BBC(1)
EEC(1)=BBC(2)
EEC(2)=BBC(2)
  CALL CURVE(AC,BBC,2,0)
  CALL RELMSG('A',1,Z+ZL/2.,0.6*YMAXS)
  CALL RELRNO(BOZ,2,Z+ZL/2.,-0.85*YMAXS)

```

```

WRITE(9,1032)RHO,BOZ
1032 FORMAT(3X,'FOCAL. AIMANT 2 PLANS***',3X,'RAYON=',E9.3,3X,
1'B=',E9.3)
C   EFFET GLOBAL DE L'ANGLE D'ENTREE
DO I=1,KMAX
XP(I)=TG1*X(I)+XP(I)
YP(I)=-TG1*Y(I)+YP(I)
ENDDO
C   EFFETS DES 20 AIMANTS ELEMENTAIRES
DO KJ=1,20
Z=Z+ZL/20.
SP=SIN(EPSX*DPHI)
A11=COS(EPSX*DPHI)
A12=RHO*SP/EPSX
A13=RHO*(1.-A11)
A21=-SP/RHO
A22=A11
A23=SP
DO I=1,KMAX
X(I)=A11*X(I)+A12*XP(I)+A13*DELTVA(I)/(2.*VA)
XP(I)=A21*X(I)+A22*XP(I)+A23*DELTVA(I)/(2.*VA)
END DO
B11=COS(EPSY*DPHI)
IF(EPSY.EQ.0.)THEN
B12=RHO*SIN(DPHI)
ELSE
B12=RHO*SIN(EPSY*DPHI)/EPSY
ENDIF
B21=-EPSY*SIN(EPSY*DPHI)/RHO
B22=COS(EPSY*DPHI)
DO I=1,KMAX
Y(I)=B11*Y(I)+B12*YP(I)
YP(I)=B21*Y(I)+B22*YP(I)
END DO
DO J=1,KMAX
XPLOT(LPRT,J)=1000.*X(J)
YPLOT(LPRT,J)=1000.*Y(J)
END DO
ZPLOT(LPRT)=Z
LPRT=LPRT+1
ENDDO
C   EFFET GLOBAL DE L'ANGLE DE SORTIE
DO I=1,KMAX
XP(I)=TG2*X(I)+XP(I)
YP(I)=-TG2*Y(I)+YP(I)
ENDDO
AC(1)=Z
AC(2)=Z
CC(2)=Z
CALL CURVE(AC,BBC,2,0)
CALL CURVE(CC,DDC,2,0)
CALL CURVE(CC,EEC,2,0)
GO TO 1

```

C-----

C DONNEES DU DESSIN UGL-DISSPLA

```

C-----
999 LPRTMX=LPRT-1
    CALL CRVWID(0.01)
    DO I=1,KMAX
    DO J=1,LPRTMX
    XDRAW(J)=ABS(XPLOT(J,I))
    YDRAW(J)=-ABS(YPLOT(J,I))
    END DO

    CALL SETCLR('RED')
    CALL CURVE(ZPLOT,XDRAW,LPRTMX,0)
    CALL SETCLR('BLUE')
    CALL CURVE(ZPLOT,YDRAW,LPRTMX,0)

    END DO
    CALL RESET ('ALL')
    CALL HEIGHT(0.15)
    CALL SETCLR('RED')
    CALL RELMSG('PLAN HORIZONTAL',20,0.4*XMAXS,0.85*YMAXS)
    CALL SETCLR('BLUE')
    CALL RELMSG('PLAN VERTICAL',18,0.4*XMAXS,-0.95*YMAXS)
    CALL SETCLR('MAGENTA')
    CALL HEIGHT(0.25)
C    CALL COMPLX
C    CALL DEFALF('ITALI')
    CALL PTITLE(TITRE,40,3,1)
    CALL STOPLT(0)

```

```

C-----
C TRACE DES EMITTANCES
C-----

```

```

DO I=1,KMAX
X(I)=1000.*DUM1(I)
Y(I)=1000.*DUM2(I)
XP(I)=1000.*DUM3(I)
YP(I)=1000.*DUM4(I)
ENDDO
    XL1=0.
    XL2=0.
YPL1=0.
YPL2=0.
    DO I=1,KMAX
    IF(ABS(X(I)).GT.XL1) XL1=ABS(X(I))
    IF(ABS(Y(I)).GT.XL2) XL2=ABS(Y(I))
    IF(ABS(XP(I)).GT.YPL1) YPL1=ABS(XP(I))
    IF(ABS(YP(I)).GT.YPL2) YPL2=ABS(YP(I))
    END DO
XLIM=XL1
IF(XL2.GT.XLIM) XLIM=XL2
XPLIM=YPL1
IF(YPL2.GT.XPLIM) XPLIM=YPL2
XRL=1.
YRL=1.
XPG=10.
YPG=6.5
DO I=1,NINT
    XEM(I)=X(I)
    XPEM(I)=XP(I)

```

```

ENDDO

DO I=NINT+1,KMAX
YEM(I-NINT)=Y(I)
YPEM(I-NINT)=YP(I)
ENDDO

CALL DEVICE(KTYPE,XPAGE,YPAGE)
CALL NOBORD
CALL ORIGIN(XRL,YRL)
    CALL SETSUB(XPG,YPG)
        CALL SETCLR('WHITE')
    CALL FILBKG
        CALL SETCLR('BLACK')
    CALL HEIGHT(0.1)
CALL XMARKS(5)
CALL YMARKS(5)
CALL XLABEL('X,Y(mm)          $',100)
CALL YLABEL('XP , YP(mrad)    $',100)
CALL CROSS
CALL AXES2D(-XLIM,0.,XLIM,-XPLIM,0.,XPLIM)
    CALL SETCLR('GREEN')
CALL FRMWID(0.1)
CALL FRAME
CALL SETCLR('ORAN')
    CALL RELMSG('Zem=',4,0.8*XLIM,0.85*XPLIM)
    CALL RELRNO(ZM,3,0.9*XLIM,0.85*XPLIM)
CALL DOT
CALL GRID(1,1)
CALL RESET('DOT')
CALL MARKER(8)
    CALL SETCLR('RED')
CALL CURVE(XEM,XPEM,NINT,-1)

    CALL MARKER(8)
CALL CURVE(-XEM,-XPEM,NINT,-1)
CALL SETCLR('BLUE')

    CALL MARKER(10)
CALL CURVE(YEM,YPEM,NINT,-1)

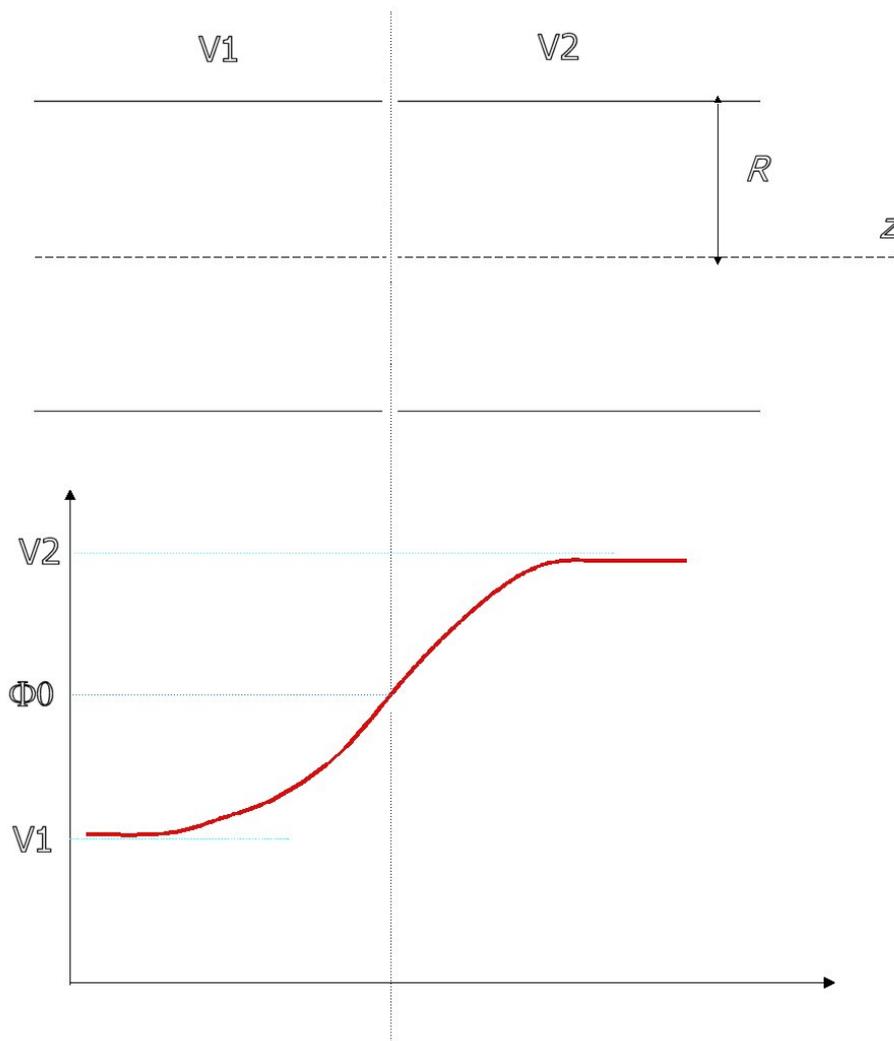
    CALL MARKER(10)
CALL CURVE(-YEM,-YPEM,NINT,-1)
CALL SETCLR('MAGENTA')
    CALL HEIGHT(0.25)
CALL PTITLE(TITRE,40,3,1)
CALL STOPLT(0)
CALL FINPLT

CLOSE(8)
CLOSE(9)
END
C
C

```

## Annexe B

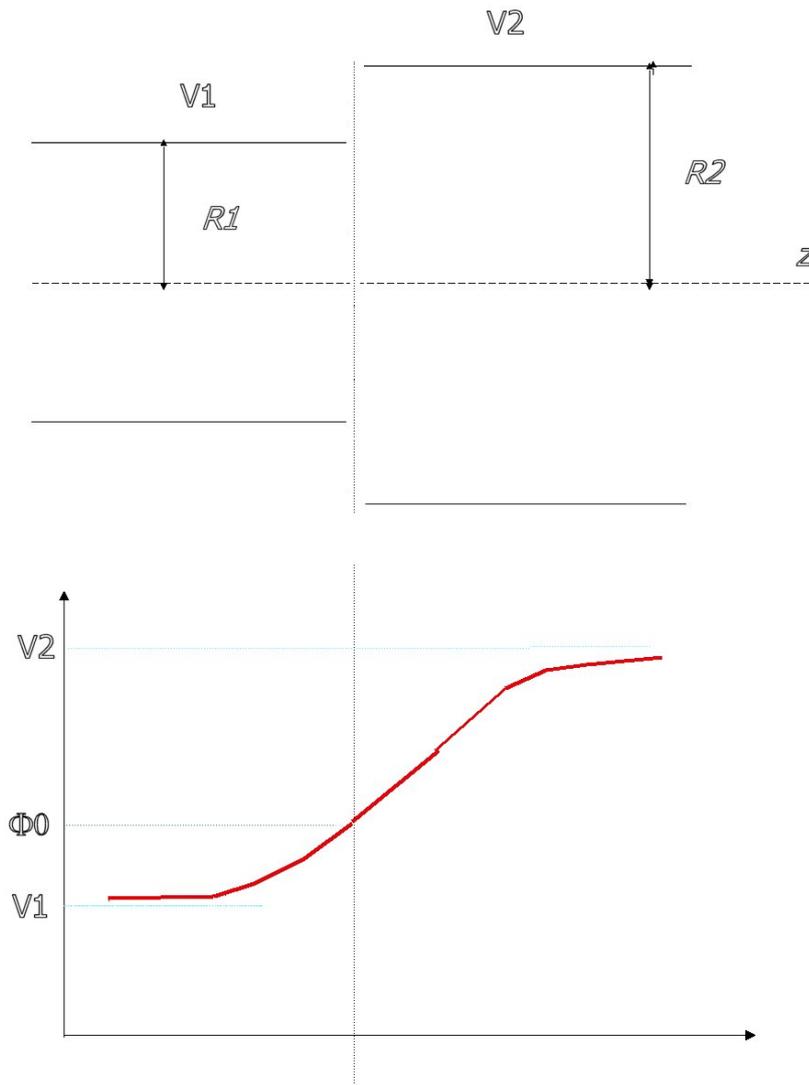
Le calcul du comportement des faisceaux dans les lentilles électrostatiques nécessite la résolution de l'équation de Laplace, ce qui fait appel à des codes lourds. On obtient une solution de remplacement en faisant un développement limité d'une distribution axiale du potentiel accessible pour des géométries figées. Dans le cas général de la lentille unipotentielle (« einzel » en allemand), il n'y a pas de formule analytique dans la littérature d'une telle distribution axiale. Le but de cette note est de montrer que l'on peut obtenir une expression générale de cette distribution en géométrie cylindrique entre deux électrodes tubulaires, espacées et de diamètres différents, qui reflète de très près la distribution réelle.



Une distribution connue est celle correspondant à 2 tubes de même diamètre séparé par un espace négligeable. On constate que la solution analytique faisant appel aux fonctions de Bessel modifiées de première espèce est remarquablement représentée par la fonction simple :

$$\Phi_z = \frac{V_1 + V_2}{2} + \frac{V_1 - V_2}{2} \operatorname{th} \omega \frac{z}{R}$$

dans laquelle  $\Phi_z$  est le potentiel axial et  $\omega$  un facteur égal à 1.315. Le potentiel  $\Phi_0$  est la demi-somme des potentiels des tubes. On remarque que pour  $z > 2R$ , la tangente hyperbolique vaut 0.99.



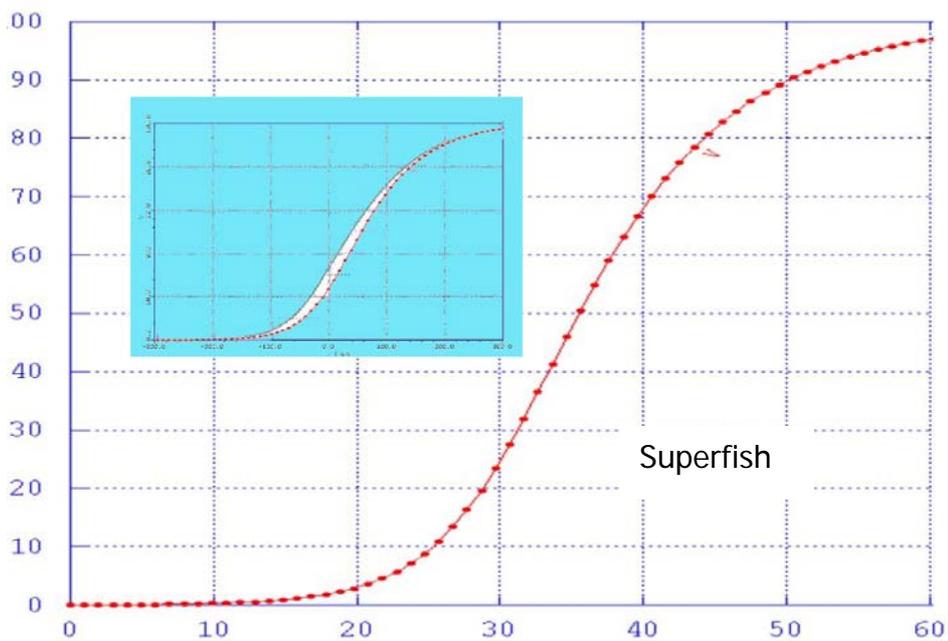
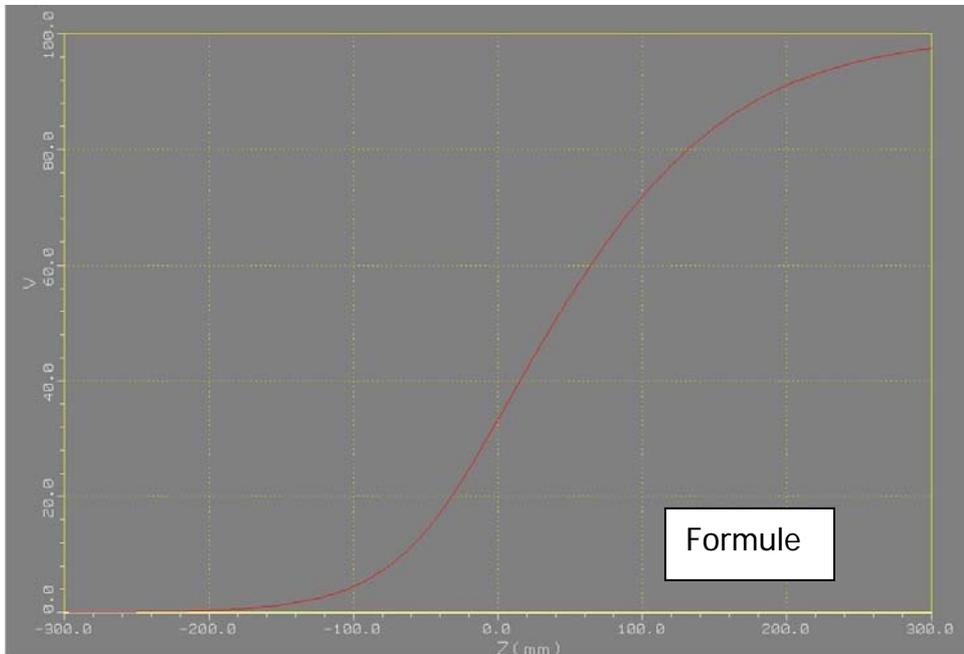
Toujours dans le cas de tubes contigus mais de diamètres différents, il existe une fonction analytique approchée qui est suffisante au premier ordre. Pour l'origine en  $z$  au milieu de l'espace inter-tube (le « gap »), on peut écrire :

$$\Phi_{1,z} = \Phi_0 + (\Phi_0 - V_1) \operatorname{th} \omega \frac{z}{R_1} \text{ pour } z \leq 0$$

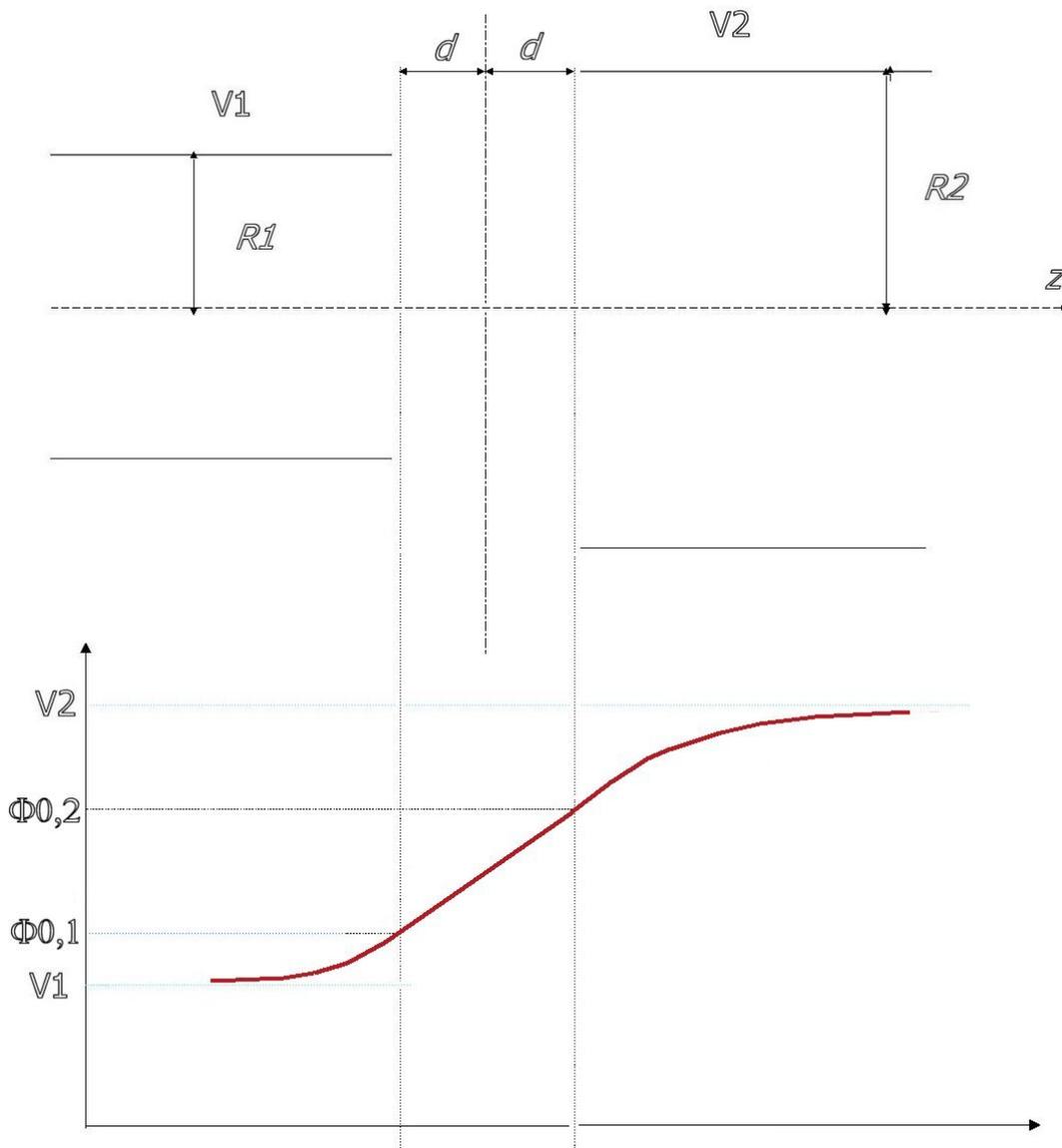
$$\Phi_{2,z} = \Phi_0 + (V_2 - \Phi_0) \operatorname{th} \omega \frac{z}{R_2} \text{ pour } z > 0$$

La continuité des dérivées impose :

$$\Phi_0 = \frac{V_2 R_1 + V_1 R_2}{R_1 + R_2}$$



Pour  $R_2=2R_1$ , on voit sur la figure une bonne concordance entre le résultat de Superfish et la formule analytique pour  $V_2=100$  et  $V_1=0$ .



Si l'on introduit un gap de  $2d$  entre les 2 tubes, on peut prendre un développement en th dans les tubes à partir de  $\Phi_{0,1}$  et  $\Phi_{0,2}$  mais il reste à trouver ces valeurs. On peut faire l'hypothèse, vérifiée par la suite, que le champ électrique  $E$  est constant dans le gap d'où l'on déduit les équations :

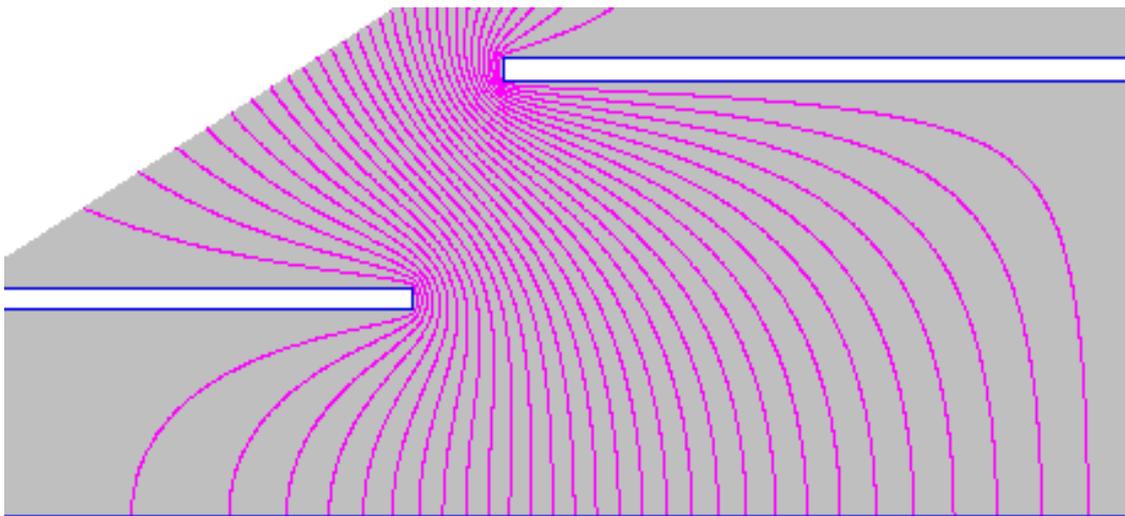
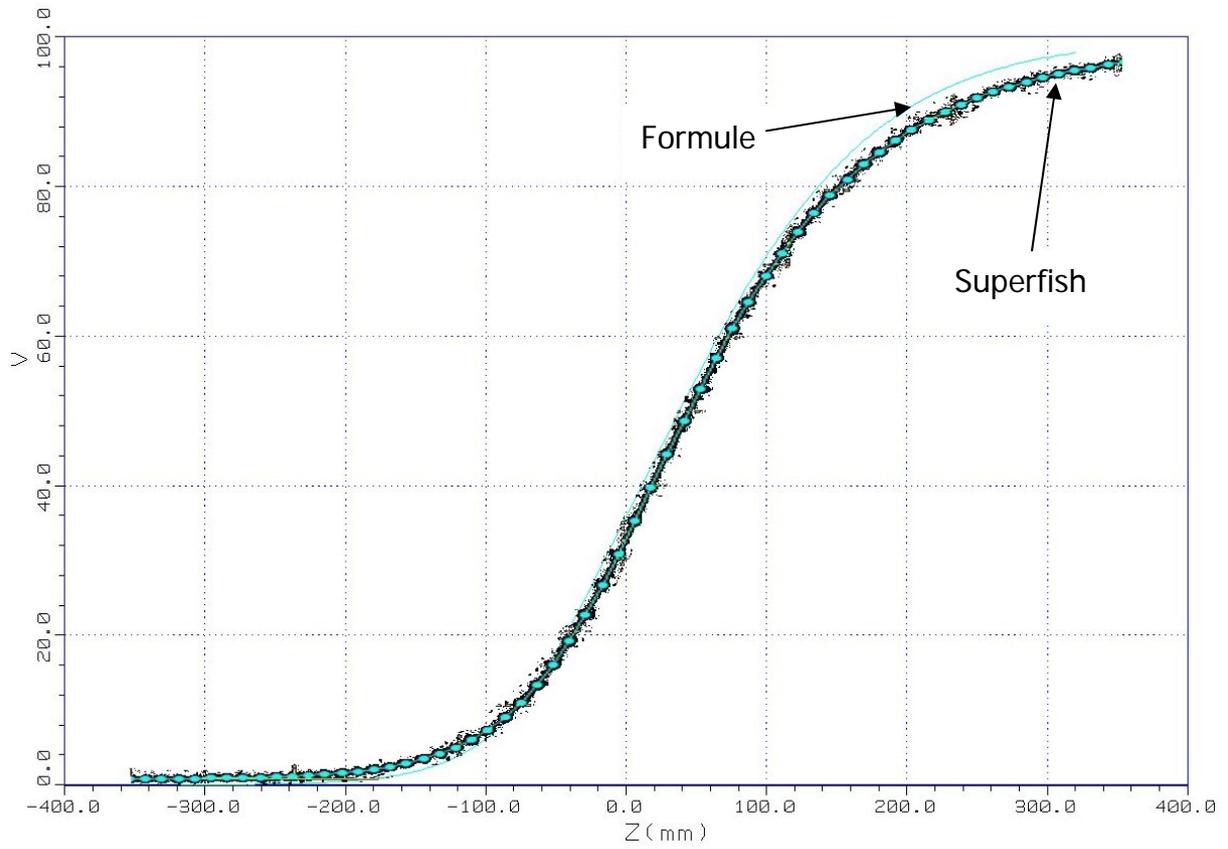
$$\Phi_{1,z} = \Phi_{0,1} + (\Phi_{0,1} - V_1) \operatorname{th} \omega \frac{z+d}{R_1} \text{ pour } z \leq -d$$

$$\Phi_{2,z} = \Phi_{0,2} + (V_2 - \Phi_{0,2}) \operatorname{th} \omega \frac{z-d}{R_2} \text{ pour } z > d$$

La continuité de la dérivée  $\Phi'_z = E$  pour  $z = -d$  et  $+d$  permet d'écrire :

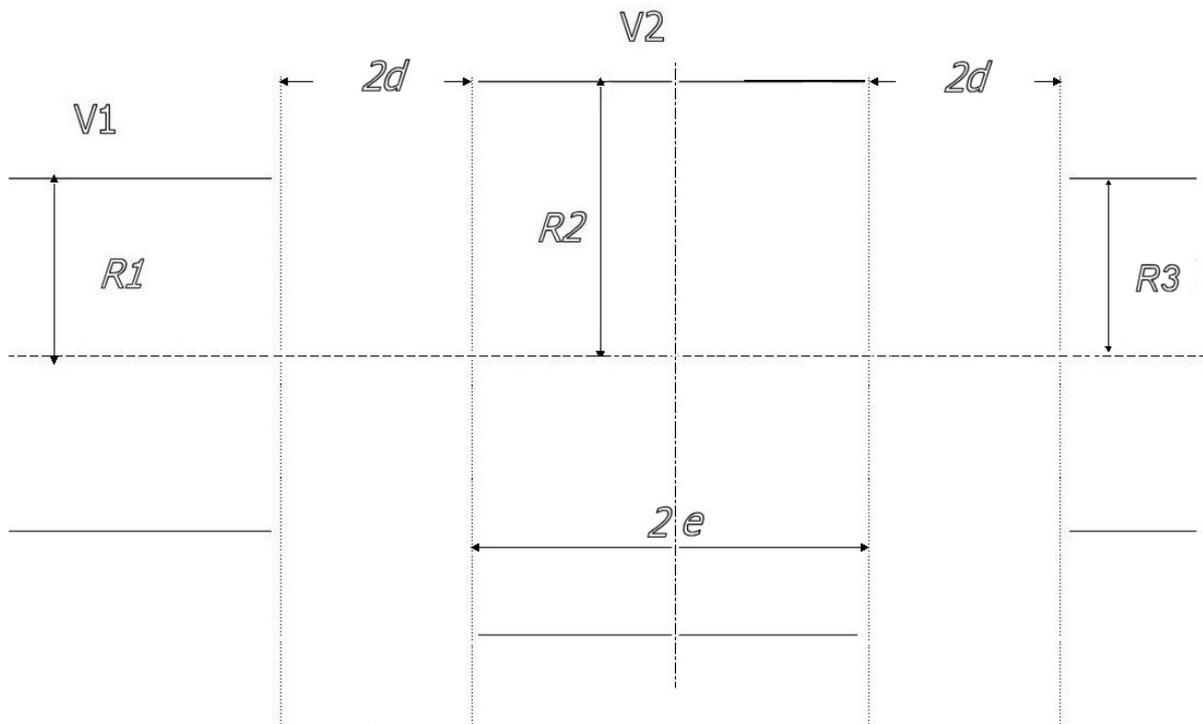
$$(\Phi_{0,1} - V_1) \frac{\omega}{R_1} = (V_2 - \Phi_{0,2}) \frac{\omega}{R_2} = E$$

$$\Phi_{0,2} = \Phi_{0,1} + 2dE$$



Les 2 figures précédentes montrent :

- que le champ électrique est bien quasi-constant dans le gap centré sur  $z=0$ .
- Que la formule analytique donne une excellente approximation de la répartition axiale du potentiel.



La lentille unipotentielle combine 2 des espaces précédents. La solution est l'addition des solutions des 2 configurations ci-jointes. L'écriture des équations ne présente pas de difficultés majeures. En écrivant :

$$E = 2e$$

$$GAP = 2d$$

$$PHI1A = \Phi_{0,1}^{\alpha}$$

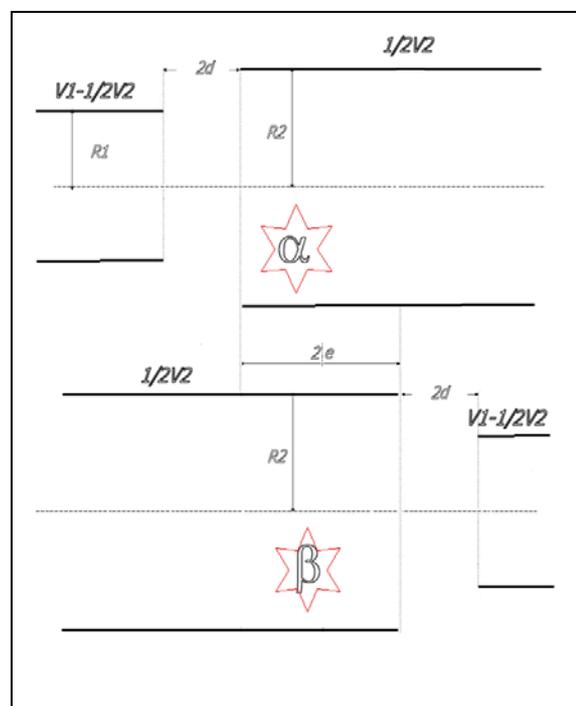
$$PHI2A = \Phi_{0,2}^{\alpha}$$

$$PHI1B = \Phi_{0,1}^{\beta}$$

$$PHI2B = \Phi_{0,2}^{\beta}$$

Et en prenant l'origine des  $z$  au milieu du tube central, on obtient le listing FORTRAN :

$$ZMAX = R1 + R2 + R3 + 2.*GAP + E$$



```

OMEGA=1.318
PARMA=R1+R2+GAP*OMEGA
PARMB=R3+R2+GAP*OMEGA
V1A=V1-0.5*V2
V2A=0.5*V2
V1B=V2A
V2B=V1A
PHI1A=(R1*V2A+R2*V1A+GAP*V1A*OMEGA)/PARMA
EZA=(PHI1A-V1A)*OMEGA/R1
PHI1B=(R3*V2B+R2*V1B+GAP*V1B*OMEGA)/PARMB
EZB=(PHI1B-V1B)*OMEGA/R3
PHI2A=PHI1A+GAP*EZA
PHI2B=PHI1B+GAP*EZB
DZ=ZMAX/200.
DO I=1,200
Z=FLOAT(I)*DZ
ZREF=Z-ZMAX/2.

IF(ZREF+GAP+E/2.)1,1,2
1 ARG1=TANH(OMEGA*(ZREF+GAP+E/2.)/R1)
  ARG2=TANH(OMEGA*(E/2.-ZREF)/R2)
  VZ(I)=PHI1A+(PHI1A-V1A)*ARG1-PHI2B-(V2B-PHI2B)*ARG2
  GOTO 15

2 IF(ZREF+E/2.)3,3,4
3 ARG1=PHI1A+(ZREF+GAP+E/2.)*EZA
  ARG2=TANH(OMEGA*(E/2.-ZREF)/R2)
  VZ(I)=ARG1-(V2B-PHI2B)*ARG2-PHI2B
  GOTO 15

4 IF(ZREF-E/2.)5,5,6
5 ARG1=(V2A-PHI2A)*TANH(OMEGA*(E/2.+ZREF)/R2)
  ARG2=(V2B-PHI2B)*TANH(OMEGA*(E/2.-ZREF)/R2)
  VZ(I)=ARG1-ARG2+PHI2A-PHI2B
  GOTO 15

6 IF(ZREF-GAP-E/2.)9,9,10
9 ARG1=(ZREF-E/2.)*EZB-PHI2B
  ARG2=(V2A-PHI2A)*TANH(OMEGA*(E/2.+ZREF)/R2)
  VZ(I)=ARG1+PHI2A+ARG2
  GOTO 15

10 ARG1=(PHI1B-V1B)*TANH(OMEGA*(ZREF-GAP-E/2.)/R3)
  ARG2=(V2A-PHI2A)*TANH(OMEGA*(E/2.+ZREF)/R2)
  VZ(I)=ARG1+ARG2-PHI1B+PHI2A
15 ZPL(I)=1000.*ZREF
  VZ(I)=V1+VZ(I)
  ENDDO

```

$$VMX=V1$$

$$IF(V2.GT.VMX)VMX=V2$$

La comparaison avec Superfish (cas  $R3=R1$ ) montre encore une excellente concordance quels que soient le rapport des rayons et le gap, mais se limite à  $e>R1$ , ce qui correspond à une lentille « épaisse » et ce du fait de l'hypothèse d'un champ constant entre les tubes. En conclusion, cette distribution analytique est conforme à la solution numérique à mieux que 5% dans les cas pratiques de lentilles épaisses. Les champs électriques déduits de ces formules s'expriment sans difficultés, avec les développements limités :

$$\Phi_{r,z} = \Phi_z - \frac{r^2}{4} \frac{d^2 \Phi_z}{dz^2}$$

$$E_r = -\frac{\partial \Phi_{r,z}}{\partial r} = \frac{r}{2} \frac{d^2 \Phi_z}{dz^2}$$

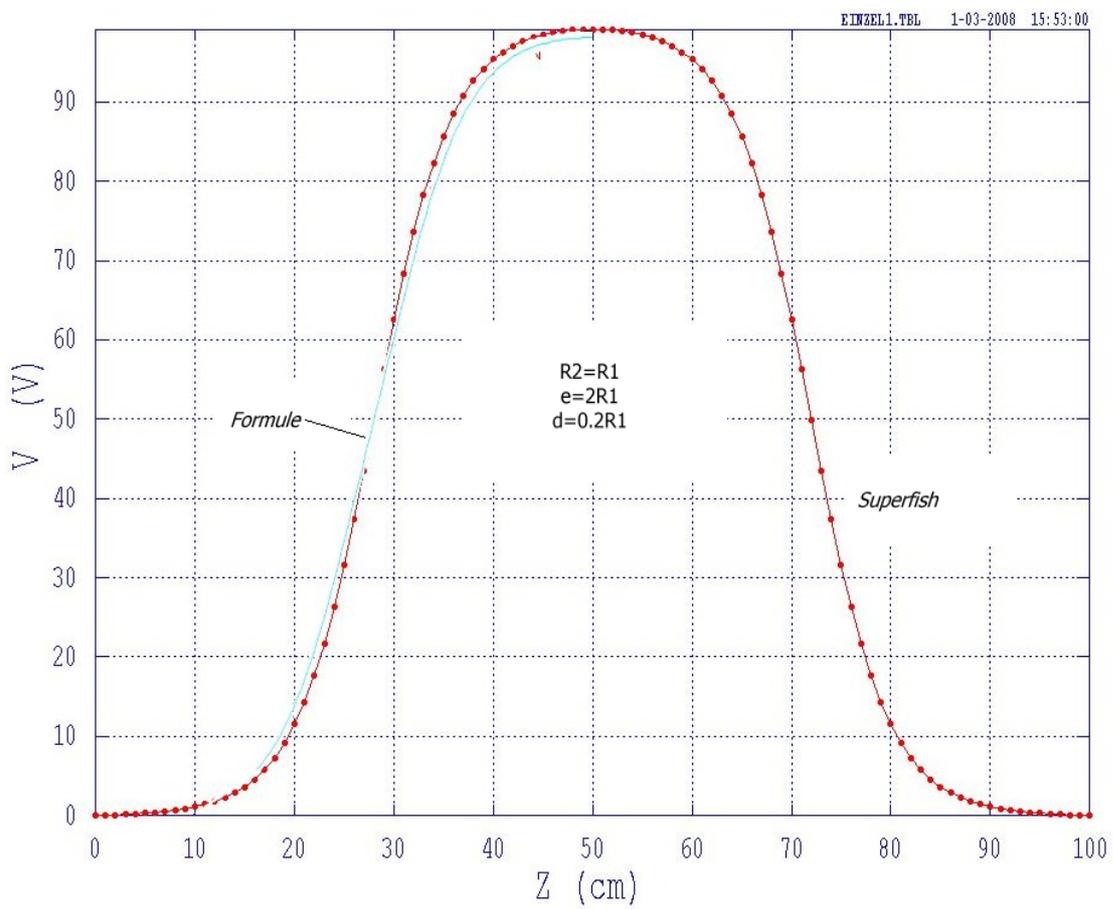
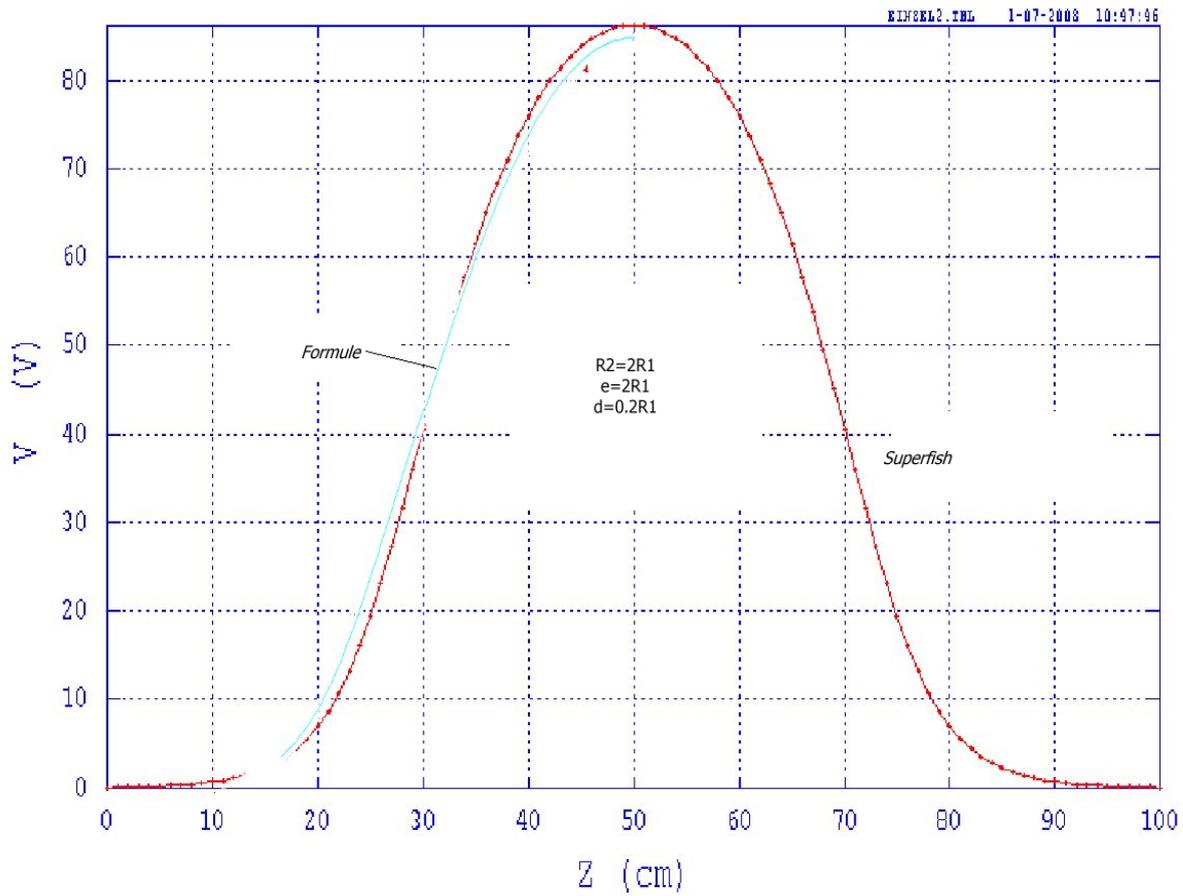
$$E_z = -\frac{\partial \Phi_{r,z}}{\partial z} = \frac{d\Phi_z}{dz}$$

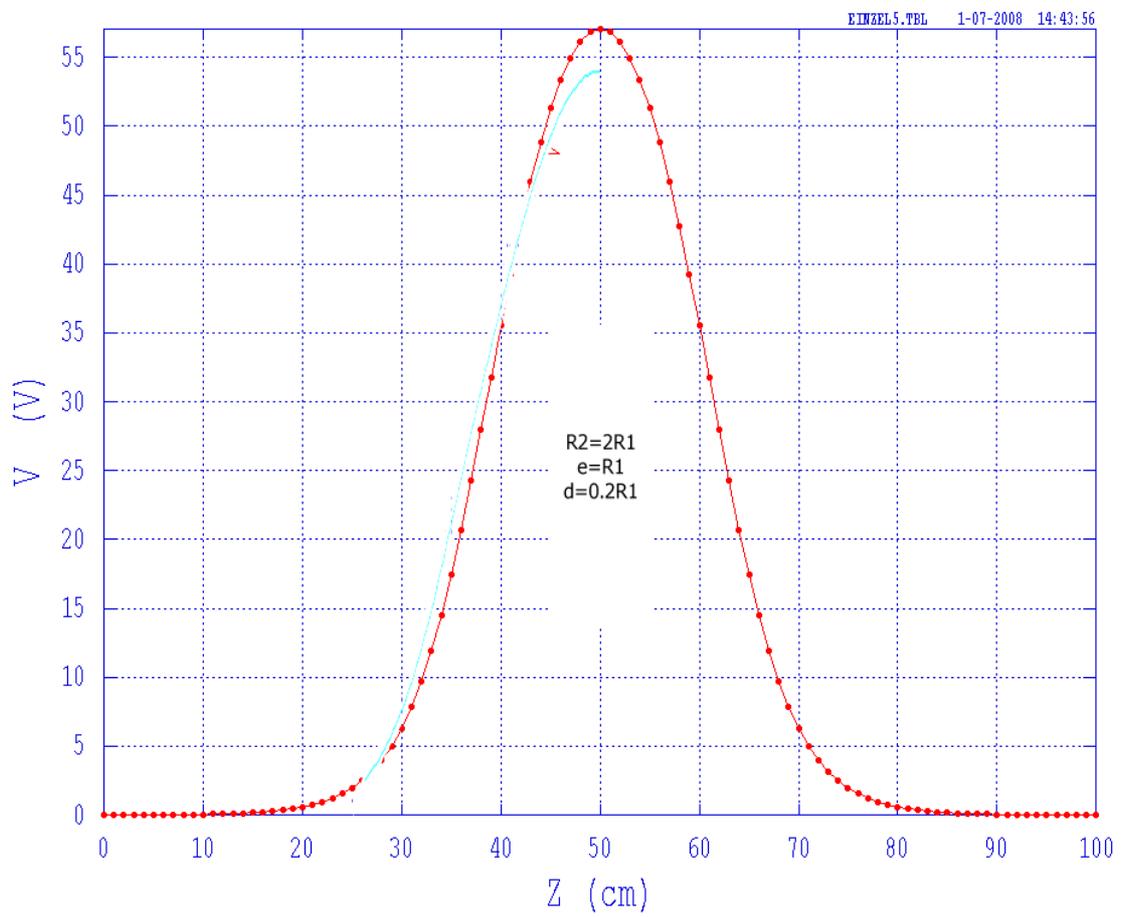
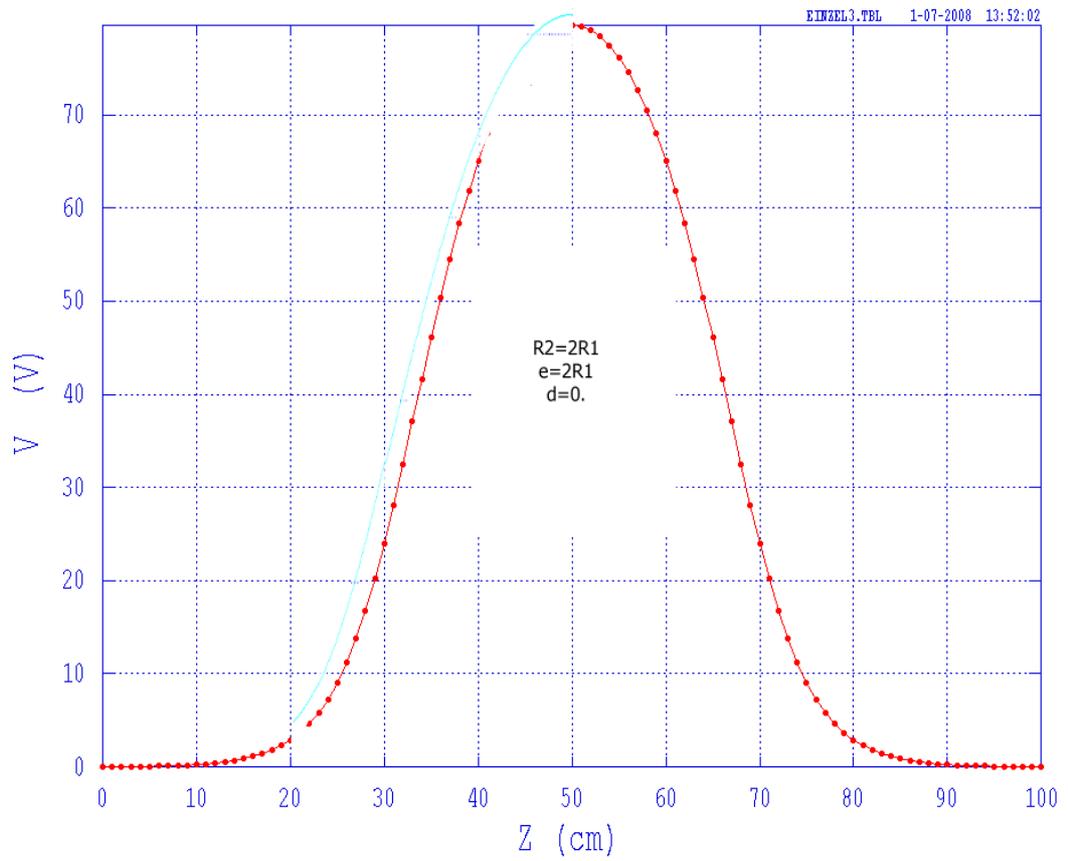
Que l'on intègre dans les équations classiques du mouvement en coordonnées cartésiennes :

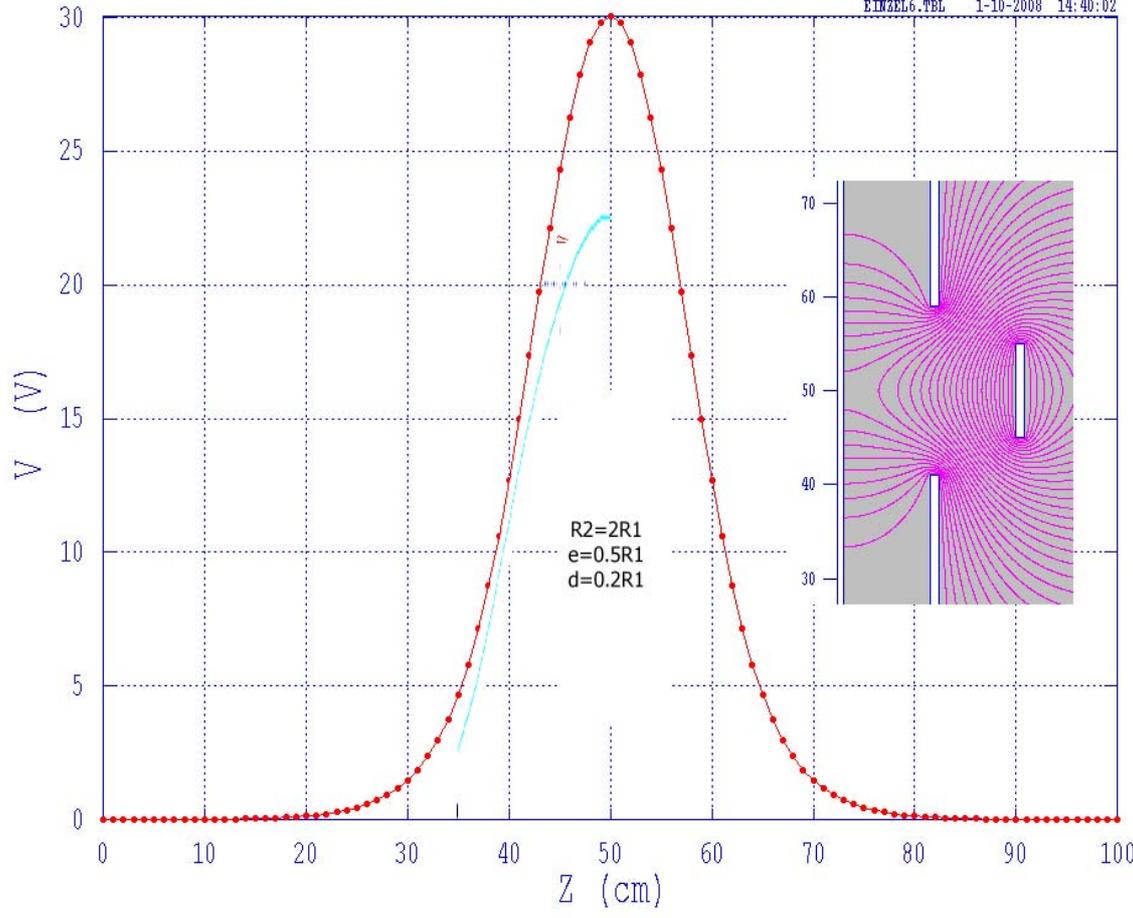
$$\eta^{-1} \ddot{z} x'' = x' y' B_x - (1 + x'^2) B_y + y' B_z + \dot{z}^{-1} (E_x - x' E_z)$$

$$\eta^{-1} \ddot{z} y'' = (1 + y'^2) B_x - x' y' B_y + x' B_z + \dot{z}^{-1} (E_y - y' E_z)$$

$$\dot{z}^2 = \frac{2\eta V}{1 + x'^2 + y'^2}$$







## Annexe C

## Photoionization cross sections of iron isonuclear sequence ions: Fe<sup>2+</sup> to Fe<sup>6+</sup>

N. El Hassan,<sup>1</sup> J. M. Bizau,<sup>1</sup> C. Blancard,<sup>2,3</sup> P. Cossé,<sup>2</sup> D. Cubaynes,<sup>1</sup> G. Faussurier,<sup>2</sup> and F. Folkmann<sup>4</sup>

<sup>1</sup>*Laboratoire d'Interaction des Rayons X avec la Matière (LIXAM), UMR 8624 du CNRS, Université Paris-Sud, B. 350, 91405 Orsay Cedex, France*

<sup>2</sup>*CEA/DAM/DIF, F-91297 Arpajon, France*

<sup>3</sup>*LUTH, Observatoire de Paris, CNRS, Université Paris-Diderot, 5 Place Jules Janssen, 92190 Meudon, France*

<sup>4</sup>*Department of Physics and Astronomy, University of Aarhus, DK-8000 Aarhus C, Denmark*

(Received 19 December 2008; published 24 March 2009)

We have measured the absolute photoionization cross sections of Fe<sup>2+</sup> to Fe<sup>6+</sup> ions in the photon energy range covering the first ionization threshold up to 160 eV. Particular interest is emphasized on the region of the  $3p \rightarrow 3d$  excitations. The experimental data are compared to the results of calculations we have performed using a spectral opacity code, as well as to available *R*-matrix and one-electron calculations. It is shown that often the theoretical results tend to overestimate the intensity of the  $3p \rightarrow 3d$  photoexcitations. An anomalously low value of the integrated oscillator strength is measured for Fe<sup>2+</sup> ion.

DOI: [10.1103/PhysRevA.79.033415](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.79.033415)

PACS number(s): 32.80.Fb, 32.80.Zb

### I. INTRODUCTION

This paper presents our experimental and theoretical determinations of the photoionization cross sections into the *M* shell of the first ions of the iron isonuclear sequence. Because iron is the heaviest element synthesized during the regular life of the stars, it presents a relatively high cosmic abundance and plays a particular role in astrophysics. Most of the astronomical objects exhibit spectral features of iron ions in various charge state depending on the plasma temperature [1]. Fe ions are, therefore, of great diagnostic values over a broad spectral range, from infrared to hard x-rays. For example, the determination of the chemical composition of ionized plasmas, which present a particularly strong contribution of low ionization states of iron, can be deduced from the observation of the Fe ion photoabsorption lines if their excitation energy and oscillator strength are precisely known [2,3]. Iron ions are also the principal contributors to energy transfer inside the stellar shells. Photoabsorption, which is the main process for energy deposition, reaches its maximum intensity in the extreme ultraviolet (xuv) spectral range (a few tens of eV to 1 keV) [4,5]. The same process is responsible, in fusion research, for cooling of the plasmas—iron acting like an impurity [6]. The determination of plasma opacity requires, in particular, the accurate knowledge of photoionization cross sections.

Several experimental approaches have been developed to study the spectral properties of iron ions, individually or in plasmas. One consists in the measurement of the photoabsorption spectrum of plasmas. For example, the dynamic hohlraum x-ray source at the Sandia National Laboratories Z facility has been used to measure the transmission of a mixed Mg-Fe plasma heated to  $156 \pm 6$  eV at a density of  $n_e = 6.9 \pm 1.7 \times 10^{21}$  cm<sup>-3</sup> [7]. Laser-induced fluorescence, among other techniques, was used also at the Lund Laser Centre to determine reliable oscillator strengths for spectral lines of singly-ionized iron group elements (FERRUM Project) [8]. An alternative approach, allowing to determine absolute photoionization cross sections for mass- and charge-selected ions, uses the merged-beam technique [9,10]. Con-

cerning iron ions, only results for singly [11] and four times charged [12] ions have been published up to now, both obtained at the ASTRID Danish synchrotron-radiation facility in Aarhus University.

All these techniques share the difficulty to produce sufficient density ionic targets. This is particularly true for metallic iron due to the high temperature needed for its vaporization. This explains why experimental results on the photoionization processes on metallic ions are still scarce. Most of the photoionization parameters are known from theoretical investigations [9,10]. In particular, extensive databases of photoionization cross sections on ionic species are available from calculations performed using various atomic models, from the simplest central field approximation [13–15] to the sophisticated *R*-matrix model. The last one was used first in the frame of the Opacity Project [16] and Iron Project [17]. Then, it has been improved by including relativistic effects using the Breit-Pauli approximation, and it has been used to calculate inner-shell excitations [18].

Together with the transition elements, the low charge states of iron ions represent one of the most complex systems regarding fundamental atomic physics. The large number of allowed states arising from the open  $3d$  subshell results in very complex atomic systems that are extremely difficult to describe due to the strong influence of electron correlations. The situation is further complicated in the region of the  $3p \rightarrow 3d$  “giant resonance” by the addition of one hole in the  $3p$ -inner subshell, producing numerous resonance lines overlapping due to their large natural width, the so-called unresolved transition arrays (UTAs). Many studies have already focused on the behavior of  $3p \rightarrow 3d$  transitions, in particular along  $3d$  metal atoms [19] and singly-charged ion [20] sequences.

In the following, we will present the results of our measurements on the photoionization processes on the Fe<sup>2+</sup> to Fe<sup>6+</sup> ions obtained using the merged-beam technique at the ASTRID storage ring. The photon energy region we have investigated covers the first ionization threshold of each charge state up to 160 eV, including the region of the  $3p \rightarrow 3d$  excitations. We have performed calculations using a code developed for the determination of the spectral opacity

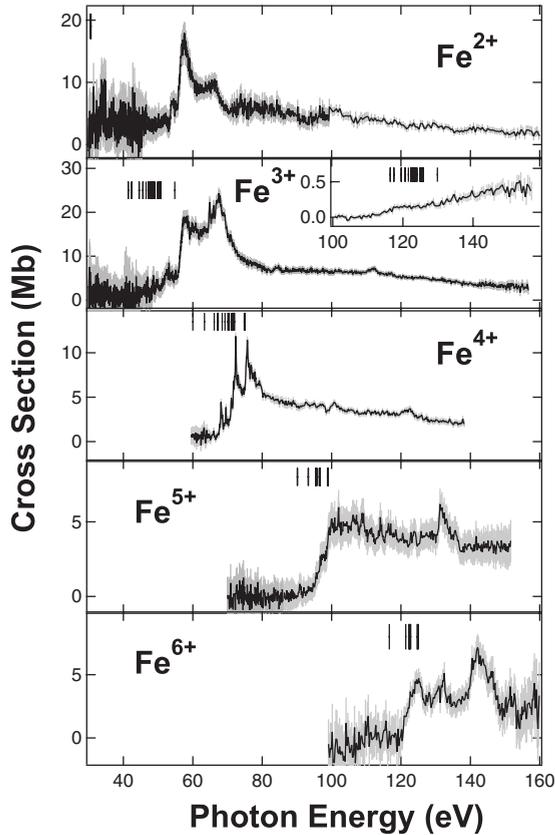


FIG. 1. Variation in the experimental photoionization cross sections, from top to bottom, of  $\text{Fe}^{2+}$  to  $\text{Fe}^{6+}$  ions as a function of photon energy. The zones in gray represent the statistical uncertainty. The ionization thresholds for ions in the levels with the same configuration as the ground state are shown as vertical bars [24]. The inset in the second panel from the top displays the double photoionization cross section for  $\text{Fe}^{3+}$  ion.

of hot plasmas (OPAS). The experimental cross sections will be compared to the results of this code, as well as the results of previously published central field and  $R$ -matrix calculations.

## II. EXPERIMENTAL DETAILS AND RESULTS

The measurements were performed using the same setup as in our previous experiments on  $\text{Fe}^{4+}$  ions [12]. Here, we will give only a short description of the setup and experimental procedure. More extensive details could be found in Ref. [21]. In short, iron ions are produced within an electron cyclotron resonance ion source (ECRIS) with the help of the resistively heated standard micro-oven developed at the Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI) in Darmstadt [22]. The oven is introduced into the plasma chamber, and a temperature of about 1300 °C is needed to obtain a vapor pressure of the order of  $10^{-3}$  mbar in the chamber. After extraction of the  $\text{Fe}^{Q+}$  ions from the source by application of a 6 kV extraction voltage followed by deceleration to  $2Q$  keV kinetic energy, the ions are selected using a dipole magnet. Typical ion-beam currents in the interaction region were of the order of 10 nA. The photoionization cross sec-

TABLE I. Lower and upper limits of the photon bandpasses used in different photon energy regions to measure the cross section for the various ion states.

	Energy region (eV)	Bandpass range (eV)
$\text{Fe}^{2+}$	30–60	0.10–0.87
	60–100	0.24–0.87
	100–160	1.67–4.98
$\text{Fe}^{3+}$	30–45	0.06–0.25
	45–65	0.13–0.43
	65–100	0.30–0.90
$\text{Fe}^{4+}$	100–160	1.67–4.98
	60–80	0.13–0.27
	80–140	0.49–1.87
$\text{Fe}^{5+}$	70–150	0.35–2.25
$\text{Fe}^{6+}$	100–160	1.67–4.98

tions are obtained by merging the selected ion beam with the monochromatized photon beam emitted from the ASTRID undulator and measuring the resulting  $\text{Fe}^{(Q+n)+}$  ion yield as a function of photon energy with  $n=1$ . In the case of the  $\text{Fe}^{3+}$  ion, we have measured also the  $n=2$  double-ionization process. The  $\text{Fe}^{(Q+n)+}$  ions are separated from the  $\text{Fe}^{Q+}$  parent ion beam using a second dipole magnet and are counted with a Johnston multiplier. All the parameters needed to extract absolute cross sections are recorded simultaneously, including the spatial overlap between the photon and ion beams and the absolute photon flux [21]. To compensate for the low density of the ionic targets, the spectra were recorded with rather large exit slit widths on the monochromator, especially in the high-energy region where no strong resonance lines are expected. It results in relatively high photon bandpasses, whose calculated values are summarized in Table I for the various energy regions explored for each ion state [21]. The spectral resolutions increase smoothly with the photon energy inside the limits given in the table. Below the 50 eV photon energy, an aluminum filter was inserted in the photon beam to suppress the contribution of higher-order radiation diffracted by the grating. Typical counting rates recorded at the photon energy of the larger resonance with the chopper open and close, respectively, are 12 and 1 Hz for  $\text{Fe}^{2+}$ , 20 and 6 Hz for  $\text{Fe}^{3+}$ , 20 and 13 Hz for  $\text{Fe}^{4+}$ , 6 and 3 Hz for  $\text{Fe}^{5+}$ , and 16 and 10 Hz for  $\text{Fe}^{6+}$ .

The results of these measurements are shown as black curves on Fig. 1 for  $\text{Fe}^{2+}$  to  $\text{Fe}^{6+}$  ions from top to bottom, respectively. They correspond to the variation as a function of photon energy of the absolute single photoionization cross sections. Each curve results from the average of several scans recorded during two different beam-time periods. The gray vertical error bars on the figure give the statistical uncertainty on each data points. The variation in the amplitude of the error bars observed on each spectrum as a function of photon energy is due to a large extent to the variation in the photon flux with photon energy. The magnitude of the cross section displayed here for  $\text{Fe}^{4+}$  ion is close to the one previously published [12] but with a statistical uncertainty im-

proved by more than a factor of 2. The difference arises from a wrong determination of the uncertainty in the previously published data.

The systematic uncertainty on the measured cross sections is usually between 10% and 15%, and is mainly due to the uncertainty on the beam overlap and photon flux determinations [21]. It is higher, of the order of 20%, for the present determination of  $\text{Fe}^{2+}$  and  $\text{Fe}^{4+}$  cross sections because of contamination of the incident ion beam by ions with the same mass to charge ratio not separated by the first dipole magnet, namely,  $\text{N}_2^+$  and  $\text{CO}^+$  for  $\text{Fe}^{2+}$  ion and  $\text{N}^+$  for  $\text{Fe}^{4+}$  ion. In the case of  $\text{Fe}^{4+}$  ion, it was possible to estimate the percentage of the contaminant because the photoionization cross section for  $\text{N}^+$  ion was previously measured [12]. The same procedure cannot be applied in the case of  $\text{Fe}^{2+}$  ions since two contaminants can contribute. The relative population of  $^{56}\text{Fe}^{2+}$  ion in the incident ion beam was estimated from the intensity of the expected nonpolluted  $^{54}\text{Fe}^{2+}$  isotope peak observed in the mass spectra recorded before and after each photon energy scan using the first dipole magnet. The relative population of  $^{54}\text{Fe}$  isotope in the natural iron (6.37%) was taken from Ref. [23]. Below 35 eV, the cross sections are not reliable as they can be affected by higher-order contribution.

It is well known that ECRIS produces ions in ground and excited states. All the excited states with decaying lifetime longer than the time of flight of the ions between the source and the interaction region (typically a few microseconds) can contribute to the recorded spectra. Concerning the  $\text{Fe}^{Q+}$  ions with  $Q=2-6$ , this is the case for all the excited states having the same configuration as the ground state, namely,  $\text{Fe}^{Q+} 3p^6 3d^{(8-Q)}$ . The states of the first-excited configuration, namely,  $\text{Fe}^{Q+} 3p^6 3d^{(7-Q)} 4s^1$ , have the same parity as the ground state, and ions in these excited states can also be present in the interaction region. The position of the ionization threshold for each term with the same configuration as the ground state are shown on Fig. 1 as the black vertical bars above the cross section for each charge state [24]. The position of the threshold for ions in the ground state corresponds to the bar at the highest energy. For all charge state, the rise of the signal appears in the same energy range as these thresholds, showing that the ionic targets are composed of ions in the different states with the same configuration as the ground state. In opposite, no clear signal is observed below, indicating that there is no important contribution of the higher excited states with one electron in the  $4s$  orbital. This point will be discussed further during the discussion on the Opacity Project results.

After the onset of the cross sections at the thresholds, prominent  $3p \rightarrow 3d$  UTAs are observed for the lower charge states above the slowly decreasing continuous signal due to direct photoionization process. The energy of the UTA is slowly increasing and they are broadening with increasing charge state (the barycenter of the structure is at 56.0 eV for neutral Fe [25], 57.9 eV for  $\text{Fe}^+$  [11], 60.6 eV for  $\text{Fe}^{2+}$ , and 64.6 eV for  $\text{Fe}^{3+}$ ). As their position shifts more slowly than the position of the ionization thresholds, a crossing occurs for  $\text{Fe}^{4+}$  ion. All the transitions of the UTA lying below the thresholds decay via fluorescence and cannot be observed here. In the case of  $\text{Fe}^{5+}$  and  $\text{Fe}^{6+}$  ions, all  $3p \rightarrow 3d$  transi-

tions are at lower energy than the thresholds, and the observed structures correspond mainly to the  $3p \rightarrow 4d$  excitations.

It was possible to measure the double photoionization cross section in the case of the  $\text{Fe}^{3+}$  incident ion only. It is shown on the inset in the second panel starting from the top. In the case of  $\text{Fe}^{2+}$  ion, a too low signal-to-noise ratio prevented us from observing the double-ionization signal. For  $\text{Fe}^{4+}$  ions and higher charge states, thresholds for double ionization are already higher than the maximum energy range considered here.

### III. OPAS CODE

We have performed calculations using a spectral opacity code (OPAS). For each ionic state, the total photoionization cross section is evaluated as a sum of direct and resonant contributions from all the levels of the ground configuration. The direct photoionization cross sections from  $3d$ ,  $3p$ , and  $3s$  subshells are evaluated from one-electron calculations using the length form of the electric-dipole operator. The radial functions for bound electrons are obtained from the minimization of the ground configuration energy using the optimized potential method [26]. The radial functions for free electrons are calculated in the same optimized potential. The energy thresholds are evaluated from the initial and final configuration average energies independently minimized, and a statistical relativistic energy shift is included. The edges are dressed using a profile taking into account the initial and final configuration energy variances. The resonant photoexcitation cross sections involving  $3p \rightarrow ns, nd$  transitions have been considered. The calculations were limited here to principal quantum number up to 6. For each pair of configurations connected by an electric-dipole transition, the calculation of the individual lines, based on a full intermediate coupling in the  $jj$  basis, is performed using a MCDF code [27]. The Babushkin gauge, which corresponds to the length form in a nonrelativistic calculation, is used. In order to preserve the  $f$ -sum rule, the total oscillator strength is normalized to the one deduced from the one-electron calculation using bound radial functions computed in the optimized potential mentioned above. Once again, the length form of the electric-dipole operator is used. Then, only photoexcited levels above the first ionization limit were retained, and a statistical population of the initial levels was assumed. A Lorentzian profile was used for each line shape with a full width at half maximum (FWHM) equal to the natural width which is dominated here by autoionization processes. The autoionization rates are evaluated using bound radial functions computed in the optimized potential of the photoexcited configurations. The resulting spectrum was then convoluted with a Gaussian function with variable FWHM as indicated in Table I to account for the finite spectral resolution.

The results are shown as gray curves on Fig. 2, compared with the experimental cross sections (black curves). The experimental cross section given here (and in the following figures) for  $\text{Fe}^{3+}$  ion is the sum of the single and double photoionization cross sections shown separately on Fig. 1.

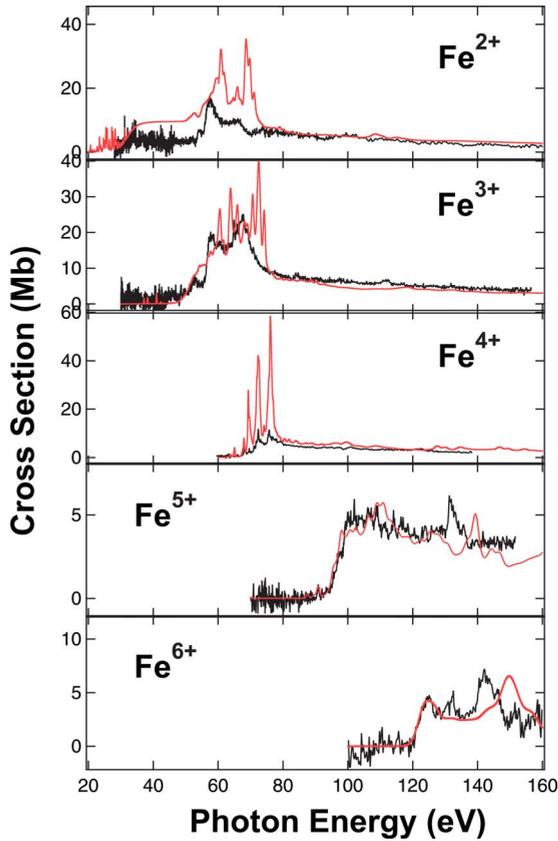


FIG. 2. (Color online) Comparison of the synthetic spectra (gray curves) reconstructed from the photoexcitation and photoionization cross sections we have calculated using the OPAS code (see text for details) with the experimental spectra (black curves). On this figure and the following, the experimental cross section for  $\text{Fe}^{3+}$  ion is obtained as the sum of single and double photoionization cross sections.

Except for  $\text{Fe}^{2+}$  and  $\text{Fe}^{4+}$  ions, the overall agreement with experiment is satisfactory. In particular, the direct photoionization process is well described, within the experimental uncertainties, for all charge states in the high-energy region, and position of the ionization thresholds is in good agreement with previous determinations [24]. The position of the UTA is also well reproduced, but the calculations predict more structures than observed in the experimental spectra, indicating that the natural width of the transitions is underestimated. In contrast, our previous calculations for  $\text{Fe}^{4+}$  ion [12] were strongly overestimating the width. The difference arises from a wrong calculation of the autoionization rates in the previously published calculations. Three major discrepancies are noticeable. First, for  $\text{Fe}^{2+}$  ion, the calculated direct photoionization is too high by a factor of 3 in the 30–55 eV photon energy range. One explanation, at least in the 40–55 eV energy range, could be interference effects between the direct and resonant photoionization processes, effect which is not taken into account in the OPAS code. Indeed, such effect was previously observed in the photoionization cross section of  $\text{Fe}^+$  ion [11] and was well described by  $R$ -matrix calculations, taking into account this interference effect [28]. The second main difference lies in the photoionization cross section of  $\text{Fe}^{3+}$  in the 80–120 eV photon energy range, which is

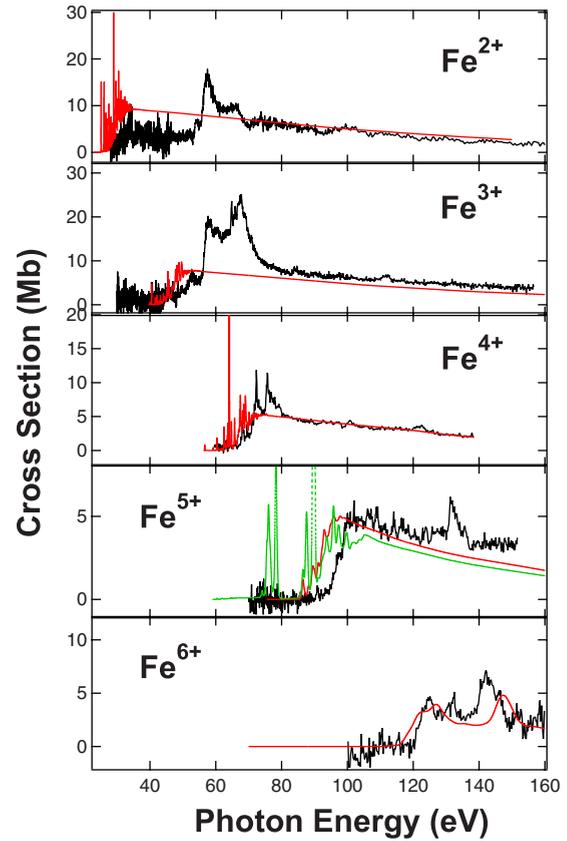


FIG. 3. (Color online) Comparison of the synthetic spectra (gray curves) reconstructed from the photoionization cross sections available in the TOPbase [38] (see text for details) with the experimental spectra (black curves). For  $\text{Fe}^{5+}$  ion, the dotted curve gives the synthetic spectrum constructed including the contribution of all the terms of the  $3d^2 4s$  and  $3d^3$  configurations.

30% lower in the calculations. Finally, the intensity of the UTA is overestimated in the calculations by a factor of 2 in the case of  $\text{Fe}^{2+}$  ion and a factor of 3 for  $\text{Fe}^{4+}$  ion. If there is no straight explanation for  $\text{Fe}^{2+}$  ion, in the case of  $\text{Fe}^{4+}$  ion it is worthwhile to emphasize the extreme sensitivity of the UTA calculated intensity to the calculated position of the overlapping thresholds [29]. Our calculations predict that only half of the intensity of the UTA lies above the thresholds. This intensity can be reduced by a factor of 2 if we arbitrarily increase the thresholds energy by 4 eV.

## IV. COMPARISON WITH OTHER THEORIES

### A. $R$ -matrix calculations

A large number of  $R$ -matrix calculations have been performed to determine the photoionization cross sections of iron ions, resumed in at least nine publications only restricting to  $\text{Fe}^{2+}$  to  $\text{Fe}^{6+}$  ions [29–37]. The first calculations were performed in the frame of the Opacity Project and are available in the TOPbase [38]. Their results for  $\text{Fe}^{2+}$  to  $\text{Fe}^{6+}$  ions are displayed on Fig. 3 as the thin continuous gray lines in comparison with the experimental cross sections. These synthetic theoretical spectra have been obtained using the same

procedure as for the OPAS results by summation of the individual photoionization cross sections of each term with the same configuration as the ground state, weighted by their statistical weight. The resulting spectra were then convoluted with a Gaussian function with the variable FWHM given in Table I to account for the finite experimental bandpass. All the Opacity Project calculations have been performed in *LS* coupling, and because the preliminary goal of this large international collaboration was to provide an extended number of photoionization cross sections for all the ions of the astrophysical abundant elements (of atomic number  $Z \leq 26$ ) in the ground state and many excited states, only the discrete photoexcitation of the most outer electron was in general considered. Then the UTA structures, involving excitation of a  $3p$  inner-shell electron, are not reproduced, resulting in a large underestimate of the cross sections by up to a factor 4 in the energy range of the UTA. The  $3p \rightarrow 3d$  excitations were included in the case of  $\text{Fe}^{6+}$  ion [31]. A systematic shift of the ionization thresholds toward the low photon energies is observed for all charge states, up to 5 eV for the lower charge states. At higher photon energy, the direct photoionization cross sections are well described except for an underestimate of the cross section for  $\text{Fe}^{3+}$  ion. Let us note also that for  $\text{Fe}^{2+}$  ion, as predicted by the OPAS calculations, the calculated cross section is twice higher than the experimental one in the energy range 30–50 eV.

In order to investigate the effect of a possible contribution of ions in excited states with one electron promoted to the  $4s$  orbital for the experimental spectra, we have rebuilt a synthetic spectrum for  $\text{Fe}^{5+}$  ion including also the calculated photoionization cross sections for all the terms with  $3d^24s$  configuration available in the TOPbase in addition to the  $3d^3$  configuration, assuming a statistical population of all the terms. The result is given by the dotted curve on Fig. 3.  $\text{Fe}^{5+}$  ion was chosen because the experimental spectrum for this ion was recorded using the highest radio frequency power for heating of the ECRIS plasma (30 W), giving the most favorable conditions for excited states production. Our synthetic spectrum predicts very strong lines, in particular around 78 and 89.5 eV, which are not observed in the experimental spectrum, strengthening our assumption that mainly excited states with the same configuration as the ground state contribute significantly to the experimental spectra.

Results of more recent *R*-matrix calculations, performed as an extension of the Opacity and Iron Projects for  $\text{Fe}^{2+}$  [32],  $\text{Fe}^{3+}$  [35], and  $\text{Fe}^{4+}$  [29,36] ions, are displayed as gray curves in Fig. 4, from top to bottom, respectively (data from Refs. [32,35,36] are available at websites given in Ref. [43]). The same procedure as for OPAS and TOPbase results was applied to reconstruct the synthesized theoretical spectra; they are obtained from the weighted sum of the cross sections for all terms with the same configuration as the ground state and then convoluted with a Gaussian function with variable FWHM. The  $\text{Fe}^{2+}$  calculations were performed using an extended eigenfunction expansion (49 states against 16 for the TOPbase data [30]) but not including the  $3p \rightarrow 3d$  excitations. Despite the extended base, the agreement of these *R*-matrix results with the experimental spectrum appears to be worse than the one achieved by the TOPbase calculations, especially in the high-energy region where the cross section

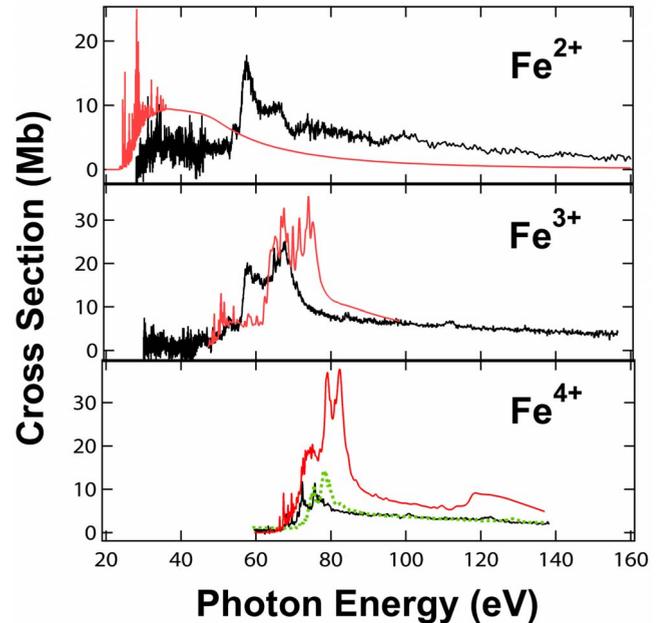


FIG. 4. (Color online) Comparison of the synthetic spectra (gray continuous curves) reconstructed from the photoionization cross sections obtained from *R*-matrix calculations for  $\text{Fe}^{2+}$  [32],  $\text{Fe}^{3+}$  [35], and  $\text{Fe}^{4+}$  [36] ions (see text for details) with the experimental spectra (black curves). For  $\text{Fe}^{4+}$  ion, the dotted curve gives the synthetic spectrum constructed from the most recent *R*-matrix calculations [29].

for the direct photoionization process is strongly underestimated. The  $3p \rightarrow 3d$  inner-shell excitations are included in the  $\text{Fe}^{3+}$  and  $\text{Fe}^{4+}$  calculations. For the first one, the width of the UTA is rather well reproduced but with more pronounced structures than observed on the experimental spectrum, in the same way as the OPAS results. The intensity is slightly overestimated, and the position is too high by 5 eV compared to the UTA position. For  $\text{Fe}^{4+}$  ion, the 39 term eigenfunction expansion [36], shown as continuous gray curve on the bottom panel of Fig. 4, totally failed to correctly reproduce the UTA and the direct photoionization intensity. In opposite, the most recent calculations by Bautista [29] achieved a very good agreement with the experiment, performing a careful analysis of the important effects to include in the calculations, namely, (1) the one-electron orbital used to represent the target ion must be optimized on the target itself and on the states of the ionizing system as well in order to obtain a good position of the UTA; (2) the parent states  $3p^53d^{N-1}$  must be included to account for the coupling of the  $3p^53d^N$  states with the continuum; (3) unresolved narrow and high resonances, which can create unphysical troughs in the synthetic spectra, must be carefully eliminated. The principal remaining difference between these calculations and the experimental cross section is a shift of 3 eV of the UTA toward high photon energies.

Finally, Fig. 5 shows the results of relativistic *R*-matrix calculations, including inner-shell photoionization processes down to the K shell and, of particular here, the effects of  $3p \rightarrow 3d$  excitations [37]. Only the ground state of each ion is

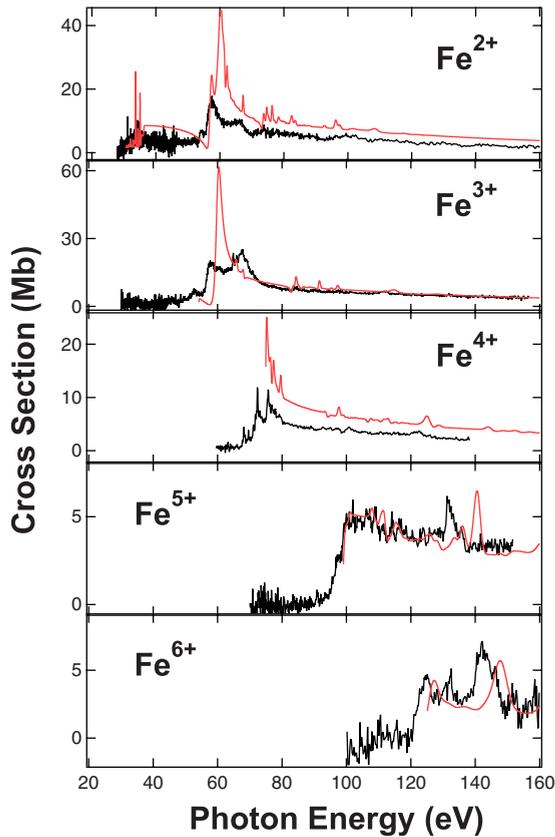


FIG. 5. (Color online) Comparison of the synthetic spectra (gray curves) reconstructed from the photoionization cross sections obtained from the *R*-matrix calculations of Berrington and Ballance [37] with the experimental spectra (black curves).

considered here in the initial state of the process. This restriction is expected to have small effect on the intensity of the direct photoionization cross sections which is independent, within a similar configuration and neglecting electron correlations, of the term of the initial state. In opposite, it will reduce strongly the number of resonances and then the width of the UTA. The calculated cross sections have been convoluted with the Gaussian function of variable FWHM as before. Agreement between these results and the experiment is quite good for  $\text{Fe}^{5+}$  and  $\text{Fe}^{6+}$  ions, as well as for the  $\text{Fe}^{3+}$  direct photoionization process. The position of the UTA is also well reproduced but, as expected, their width is underestimated. There is still a marked difference in the case of  $\text{Fe}^{4+}$  ion, which probably can be accounted for an overestimate of the direct photoionization cross section. Let us note that, for  $\text{Fe}^{2+}$  ion, these calculations predict indeed the interference effect between the resonant and the direct photoionization channels below the UTA as discussed previously but on a too narrow energy range to reproduce correctly the experimental cross section down to the threshold.

### B. Central field approximations

For many practical applications, the use of photoionization cross sections free of any resonant structures is considered as very convenient. Several approaches have been pro-

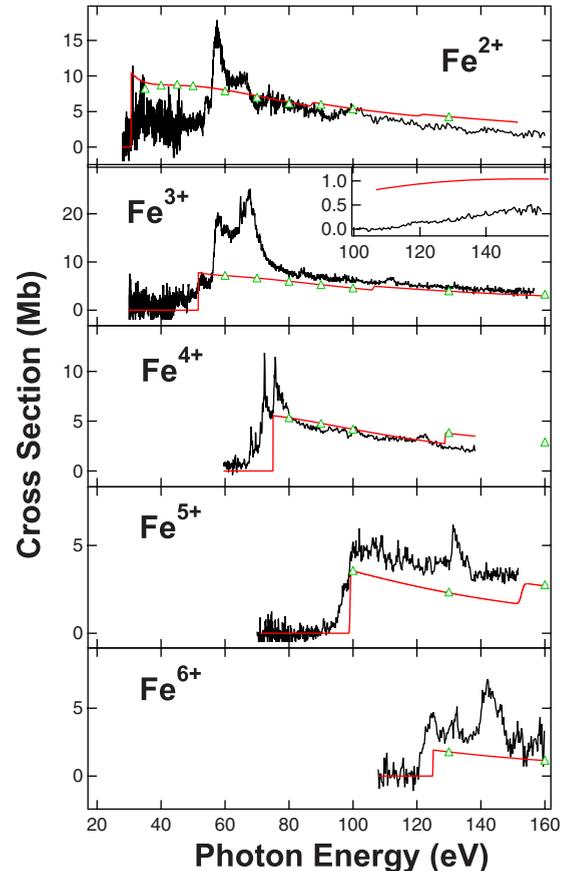


FIG. 6. (Color online) Comparison of the photoionization cross sections calculated in the one-electron approximation (gray curves; Ref. [39]; open triangles: Ref. [40]) with the experimental spectra (black curves).

posed, including direct photoionization cross-section calculations in the central field approximation [39,40] or averaging over the resonances of the Opacity Project cross sections [41,42]. This second set of data being based on the TOPbase data already discussed will not be considered further here. Figure 6 presents the results of the central field calculations, compared to the experimental cross sections. The Hartree-Dirac-Slater (HDS) values, interpolated using an analytical fit [39], are given by the gray curves and the Hartree-Slater values [40] are given by the open triangles. The two calculations differ mainly by the inclusion of relativistic effects, expected not to play an important role for the light ions and the low-energy range considered here. Then it is not a surprise that they give almost similar results. Only ions in the ground configuration have been considered in the initial state of the photoionization process in both calculations. Upon the photoionization cross sections in the  $3d$  subshell, steps are predicted by the calculated cross sections at the aperture of the  $3p \rightarrow \epsilon s, \epsilon d$  channels (and the  $3s \rightarrow \epsilon p$  channel at 121.1 eV for  $\text{Fe}^{3+}$  ion). Except for the first threshold, they are not observed experimentally. Several Rydberg series converge to inner-shell thresholds, blurring the transition between resonant photoionization below threshold and direct photoionization above. Except for the  $\text{Fe}^{2+}$  and  $\text{Fe}^{5+}$  ions, the  $3d$  experimental cross section is well reproduced at

photon energy below the aperture of the  $3p \rightarrow \epsilon l$  channels.

Two processes can contribute to the intensity of the double-ionization cross section: direct double photoionization (shake off) and Auger decay of the  $3p^{-1}$  hole when it is energetically allowed. Usually, the shake off cross sections are weaker by several orders of magnitude than the  $3p$  photoionization cross section, especially at photon energies close to the double-ionization threshold. The experimental double-ionization cross section for  $\text{Fe}^{3+}$  is shown in the inset of Fig. 6, together with the results of the HDS calculations for photoionization in the  $3p$  subshell. The calculated cross section is by far the highest. The calculated threshold for photoionization in the  $3p$  subshell is 106.7 eV, 10 eV below the lowest double-ionization threshold [24]. The weak intensity of the experimental cross section confirms that the Auger decay of the  $3p^{-1}$  hole is not allowed and only the shake off contributes to the signal close to threshold. As the photon energy increases, the Auger decay of  $3p \rightarrow \epsilon l$  satellite channels, involving in addition the simultaneous excitation of one outer electron to an empty orbital, becomes allowed and explains the increase in the experimental double photoionization cross section.

## V. CONCLUSION

Absolute photoionization cross sections of  $\text{Fe}^{2+}$  to  $\text{Fe}^{6+}$  ions have been measured over an extended photon energy range, from the first ionization threshold up to 160 eV. Cross sections for single photoionization, as well as for double ionization in the case of  $\text{Fe}^{3+}$  ion, have been obtained. These measurements were compared with the results of the calculations we performed using the OPAS spectral opacity code, as well as with the results of  $R$ -matrix and one-electron calculations used for the determination of astrophysical plasmas opacity. Our results emphasize the necessity to include the  $3p$  inner-shell excitation to correctly describe in this energy range the opacity of low-temperature plasmas in which iron ions with charge state lower than 5 have a strong contribution. Except for the most recent  $R$ -matrix calculations for  $\text{Fe}^{4+}$  ion, none of the theoretical results gives a satisfactory description on the  $3p \rightarrow 3d$  UTA. Most of the time, the intensity of the UTA is strongly overestimated by the calculations.

To summarize these results, we have reported on Fig. 7 the oscillator strengths determined by integration of the spectra between 20 and 140 eV photon energy as a function of the ion charge state. The experimental values (black points) are compared with the results of OPAS (dashed line), TOPbase [38] (continuous line), Berrington and Ballance [37]  $R$ -matrix (dashed-dotted line), and one-electron [39] (dotted line) calculations. The continuous decreasing of the integrated oscillator strength with increasing charge state can be accounted to both the decrease in the number of electrons in the initial state and the shift of the first ionization threshold toward higher photon energy while less and less electrons become available for screening of the nucleus attractive potential. The reduction by a factor close to 3 observed experi-

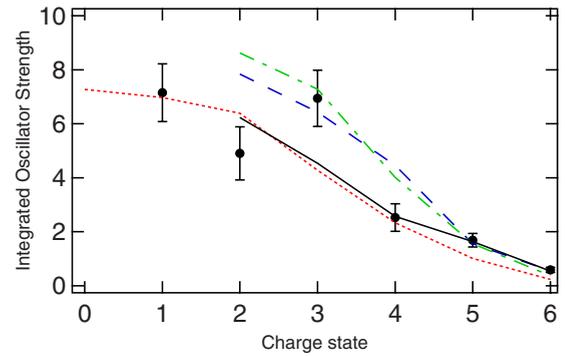


FIG. 7. (Color online) Variation in the oscillator strengths determined by integration of the spectra between 20 and 140 eV photon energy as a function of the ion charge state. The experimental values (black points) are compared to the results of OPAS (dashed line), TOPbase [38] (continuous line), Berrington and Ballance  $R$ -matrix [37] (dashed-dotted line), and one-electron [39] (dotted line) calculations. The experimental value for  $\text{Fe}^+$  is obtained from the data of Ref. [10].

mentally between  $\text{Fe}^{3+}$  and  $\text{Fe}^{4+}$  results from the sliding of the  $3p \rightarrow 3d$  UTA relative to ionization threshold. The UTA overlaps with the threshold in the case of  $\text{Fe}^{4+}$ , making this ion a very stringent test for the models. One unexplained observation is the low value measured for  $\text{Fe}^{2+}$  ions. Theoretical predictions can be divided into two groups. The ones which take into account the  $3p \rightarrow 3d$  transitions (OPAS and Berrington and Ballance [37] calculations) are in agreement with the measurement for  $\text{Fe}^{3+}$  ion but not for  $\text{Fe}^{4+}$  ion. Those which does not account for the  $3p \rightarrow 3d$  transitions (TOPbase [38] and one-electron [39] calculations), expected to be the less accurate, are more in agreement with  $\text{Fe}^{2+}$  and  $\text{Fe}^{4+}$  experimental values. Other theoretical investigations are needed to explain this observation and to achieve a better description of the UTA for the low-charged iron ions. On the experimental side, addition of the contribution of double photoionization, not measured in the present investigation for  $\text{Fe}^{2+}$  ion, will increase the measured oscillator strength for this ion. A small contamination of the tiny  $^{54}\text{Fe}^{2+}$  isotope peak, used as a reference for the determination of the density of the  $\text{Fe}^{2+}$  ionic target, could explain also an underestimate of the  $\text{Fe}^{2+}$  photoionization cross section over the whole photon energy range. Nevertheless, no significant difference is observed for this ion between the theoretical and the experimental cross sections in the high photon energy range. One way to check this possibility would be to repeat the  $\text{Fe}^{2+}$  measurements using pure  $^{54}\text{Fe}$  isotope.

## ACKNOWLEDGMENTS

The authors would like to thank the support of the European Community—Research Infrastructure Action under FP6 Structuring the European Research program (IA-SFS) (Contract No. RII3-CT-2004-506008). They are also grateful to the ISA staff of the Aarhus University for their helpful assistance.

- [1] M. A. Bautista and A. K. Pradhan, *Astrophys. J.* **492**, 650 (1998), and references therein.
- [2] S. R. Becker and K. Butler, *Astron. Astrophys.* **265**, 647 (1992).
- [3] M. Rodríguez and R. H. Rubin, *Astrophys. J.* **626**, 900 (2005).
- [4] K. L. Bell, *Phys. Scr. T* **T100**, 64 (2002).
- [5] T. R. Kallman and P. Palmeri, *Rev. Mod. Phys.* **79**, 79 (2007).
- [6] S. Muto, S. Morita, and The LHD Experimental Group, *J. Plasma Fusion Res.* **3**, S1086 (2008).
- [7] J. E. Bailey *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 265002 (2007).
- [8] S. Johansson *et al.*, *Phys. Scr. T* **T100**, 71 (2002).
- [9] J. B. West, *J. Phys. B* **34**, R45 (2001).
- [10] H. Kjeldsen, *J. Phys. B* **39**, R325 (2006).
- [11] H. Kjeldsen *et al.*, *J. Phys. B* **35**, 3655 (2002).
- [12] J. M. Bizau, C. Blancard, D. Cubaynes, F. Folkmann, D. Kilbane, G. Faussurier, H. Luna, J. L. Lemaire, J. Blicke, and F. J. Wuilleumier, *Phys. Rev. A* **73**, 020707(R) (2006).
- [13] D. J. Botto, J. McEnnan, and R. H. Pratt, *Phys. Rev. A* **18**, 580 (1978).
- [14] R. F. Reilman and S. T. Manson, *Astrophys. J., Suppl.* **40**, 815 (1979).
- [15] D. A. Verner *et al.*, *At. Data Nucl. Data Tables* **55**, 233 (1993).
- [16] M. J. Seaton, *J. Phys. B* **20**, 6363 (1987); The Opacity Project Team, *The Opacity Project* (Institute of Physics, Bristol, 1995), Vol. 1.
- [17] D. G. Hummer *et al.*, *Astron. Astrophys.* **279**, 298 (1993).
- [18] K. A. Berrington and C. Ballance, *J. Phys. B* **34**, 2697 (2001).
- [19] M. Martins *et al.*, *J. Phys. B* **39**, R79 (2006), and references therein.
- [20] J. E. Hansen *et al.*, *J. Phys. B* **40**, 293 (2007).
- [21] H. Kjeldsen *et al.*, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **234**, 349 (2005).
- [22] R. Lang *et al.*, *Rev. Sci. Instrum.* **71**, 651 (2000).
- [23] K. J. R. Rosman and P. D. P. Taylor, *Isotopic Compositions of the Elements*, 1997, available at <http://physics.nist.gov/PhysRefData/Compositions/index.html>
- [24] Yu. Ralchenko, A. E. Kramida, J. Reader, and The NIST ASD Team, *NIST Atomic Spectra Database (Version 3.1.5)*, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD, 2008, <http://physics.nist.gov/asd3>
- [25] H. Feist, M. Feldt, C. Gerth, M. Martins, P. Sladeczek, and P. Zimmermann, *Phys. Rev. A* **53**, 760 (1996).
- [26] J. D. Talman and B. A. Shadwick, *Phys. Rev. A* **14**, 36 (1976).
- [27] J. Bruneau, *J. Phys. B* **17**, 3009 (1984).
- [28] K. A. Berrington and B. Ballance, *J. Phys. B* **34**, L383 (2001).
- [29] M. A. Bautista, *J. Phys. B* **39**, L361 (2006).
- [30] P. M. J. Sawey and K. A. Berrington, *J. Phys. B* **25**, 1451 (1992).
- [31] H. E. Saraph, P. J. Storey, and K. T. Taylor, *J. Phys. B* **25**, 4409 (1992).
- [32] S. N. Nahar, *Phys. Rev. A* **53**, 1545 (1996).
- [33] M. A. Bautista, *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.* **119**, 105 (1996).
- [34] M. A. Bautista and K. A. Pradhan, *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.* **126**, 365 (1997).
- [35] S. N. Nahar, M. A. Bautista, and A. K. Pradhan, *Phys. Rev. A* **58**, 4593 (1998).
- [36] S. N. Nahar and M. A. Bautista, *Astrophys. J., Suppl. Ser.* **120**, 327 (1999).
- [37] K. A. Berrington and C. Ballance, *J. Phys. B* **34**, 2697 (2001).
- [38] W. Cunto, C. Mendoza, F. Ochsenbein, and C. J. Zeippen, *Astron. Astrophys.* **275**, L5 (1993).
- [39] D. A. Verner and D. G. Yakovlev, *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.* **109**, 125 (1995).
- [40] R. F. Reilman and S. T. Manson, *Phys. Rev. A* **18**, 2124 (1978).
- [41] D. A. Verner *et al.*, *Astrophys. J.* **465**, 487 (1996).
- [42] M. A. Bautista, P. Romano, and A. K. Pradhan, *Astrophys. J., Suppl. Ser.* **118**, 259 (1998).
- [43] [http://www.astronomy.ohio-state.edu/~nahar/nahar\\_radiativeatomicdata/index.html](http://www.astronomy.ohio-state.edu/~nahar/nahar_radiativeatomicdata/index.html)