

FORCES D'OSCILLATEUR POUR LES TRANSITIONS 1s- np DE L'O VIII

El-Habib GUEDDA

*Institut des Sciences et Technologie et Laboratoire VTRS, Centre Universitaire d'El-Oued,
39000 El-Oued, Algérie*

E-mail: elh_guedda@yahoo.fr

RÉSUMÉ : Le présent travail se base sur une formulation simple et analytique pour la génération des données atomiques des ions hydrogénéoïdes. Les forces d'oscillateur pour l'oxygène hydrogénéoïde ont été calculées pour les transitions 1s-np. Nos calculs coïncident avec les résultats publiés.

MOTS-CLÉS : données atomiques, ions hydrogénéoïdes, forces d'oscillateur

1. Introduction

Plusieurs problèmes liés à l'étude des plasmas de laboratoire, d'astrophysique et de fusion thermonucléaire contrôlée nécessitent la connaissance au préalable de la structure atomique comme les énergies, longueurs d'onde des différents niveaux, les sections efficaces et les coefficients de taux des processus élémentaires dans les plasmas. Cependant, le calcul direct des ces données devient difficile pour les atomes à plusieurs électrons et aussi pour les grands nombres quantiques. Dans ce cas on fait recours aux programmes et codes de calcul. Malgré le nombre important des codes existant pour le traitement des données atomiques, ils sont tous en compétition pour donner des résultats proches de l'expérimental.

Plusieurs méthodes ont été développées pour le calcul théorique des probabilités de transition et des forces d'oscillateur [1-2]. Ces méthodes sont partiellement ou complètement empiriques. Lorsque les données expérimentales des niveaux d'énergie sont absentes, seuls les méthodes théoriques « ab initio » seront utilisées.

Notre objectif est d'élaborer une formulation simple et analytique pour générer une base de physique atomique pour les hydrogénéoïdes. Notre programme de calcul de structure atomique [3] peut intégrer facilement un autre code avec le format sollicité. Les données obtenues seront utilisées, entre autre, pour le diagnostic des plasmas, l'étude et la modélisation des profils de raies.

Dans le but d'examiner les fonctions d'onde pour les hauts n, nous calculons les forces d'oscillateur des transitions 1s-np de l'O VIII.

2. Définition de la force d'oscillateur

La force d'une raie spectrale est définie comme [4] :

$$S = \left| \langle \gamma J \| \mathbf{P}^{(1)} \| \gamma' J' \rangle \right|^2 \quad (1)$$

Les éléments de matrices sont donnés en fonction du symbole 3j par :

$$\langle \gamma J M | \mathbf{P}_q^{(1)} | \gamma' J' M' \rangle = (-1)^{J-M} \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix} \langle \gamma J \| \mathbf{P}^{(1)} \| \gamma' J' \rangle \quad (2)$$

où :

$$P_q^{(1)} \equiv \sum_{i=1}^N r_q^{(1)}(i) = \sum_{i=1}^N r_i C_q^{(1)}(i) \quad (3)$$

est la $q^{\text{ème}}$ composante du moment dipolaire d'un atome mesurée en unité de ea_0 (a_0 est le rayon de Bohr).

La force d'oscillateur pour une absorption est définie par la relation :

$$f_{ij} = \frac{8\pi^2 mca_0^2 \sigma}{3h(2J+1)} S = \frac{E_j - E_i}{3(2J+1)} S \quad (4)$$

où les énergies sont en unité de Rydberg.

Pour l'émission, la force d'oscillateur est :

$$f_{ji} = -\frac{8\pi^2 mca_0^2 \sigma}{3h(2J'+1)} S = \frac{E_j - E_i}{3(2J'+1)} S \quad (5)$$

f_{ji} se réfère à la probabilité d'émission à partir d'un état spécifique du niveau haut j à tous les $(2J+1)$ états du niveau bas.

La force d'oscillateur en poids statistique gf est :

$$\begin{aligned} gf &= (2J+1)f_{ij} = -(2J'+1)f_{ji} \\ &= 3.0376 \cdot 10^{-6} \sigma S \end{aligned} \quad (6)$$

3. Calcul de la force d'oscillateur

Pour le calcul de gf , il est indispensable de calculer au préalable la force de raie S dans l'équation (1) ou bien sa racine :

$$S_{\gamma\gamma'}^{1/2} = \langle \gamma J \| \mathbf{P}^{(1)} \| \gamma' J' \rangle \quad (7)$$

comme l'opérateur dipolaire électrique $\mathbf{P}^{(1)}$ n'inclus pas les coordonnées de spin, le calcul des éléments de matrice est plus simple dans les bases de couplage LS [5]. Soit :

$$\begin{aligned} D_{LS} &= \langle \dots LSJ \| \mathbf{P}^{(1)} \| \dots L'S'J' \rangle \\ &= \delta_{SS'} D_{Line} \langle \dots LS \| \mathbf{P}^{(1)} \| \dots L'S' \rangle \end{aligned} \quad (8)$$

où le facteur de raie D_{Line} est :

$$D_{line} = (-1)^{L+S+J'+1} [J, J']^{1/2} \left\{ \begin{matrix} L & S & J \\ J' & 1 & L' \end{matrix} \right\} \quad (9)$$

où :

$$[J, J'] = (2J+1)(2J'+1) \quad (10)$$

La racine de la force de raie est donnée pour les atomes et ions hydrogénoïdes par [5] :

$$\begin{aligned}
S^{1/2} \equiv D_{LS} &= \langle nlsj \| \mathbf{r}^{(1)} \| n'l's'j' \rangle \\
&= (-1)^{1+j'+3/2} [j, j']^{1/2} \begin{Bmatrix} 1 & s & j \\ j' & 1 & l' \end{Bmatrix} \langle n \| \mathbf{r}^{(1)} \| n'l' \rangle
\end{aligned} \tag{11}$$

L'élément de matrice réduit $\langle n \| \mathbf{r}^{(1)} \| n'l' \rangle$ peut être calculé par :

$$P_{n'l'n'l'}^{(1)} \equiv \langle n \| \mathbf{r}^{(1)} \| n'l' \rangle = (-1)^{l+l'} [l, l']^{1/2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \int_0^\infty P_{nl}(r) r P_{n'l'}(r) dr \tag{12}$$

qui se simplifie en donnant :

$$P_{ll'}^{(1)} \equiv \langle n \| \mathbf{r}^{(1)} \| n'l' \rangle = \delta_{l', l \pm 1} (-1)^{l+l'} \int_0^\infty P_{nl}(r) r P_{n'l'}(r) dr \tag{13}$$

$l >$ est la valeur la plus grande entre l et l' .

Des valeurs tabulées des intégrales radiales pour l'hydrogène peuvent être trouvées dans les références [6-7]. Pour les ions hydrogénoïdes de charge Z , il suffit de diviser les termes par Z . Pour les ions non hydrogénoïdes où les énergies sont connues les intégrales radiales peuvent être obtenues par l'approximation de Coulomb [8-9] ou bien la méthode de Thomas-Fermi [10]. Dans le cas échéant les valeurs seront calculées à partir des fonctions de Hartree-Fock ou autres.

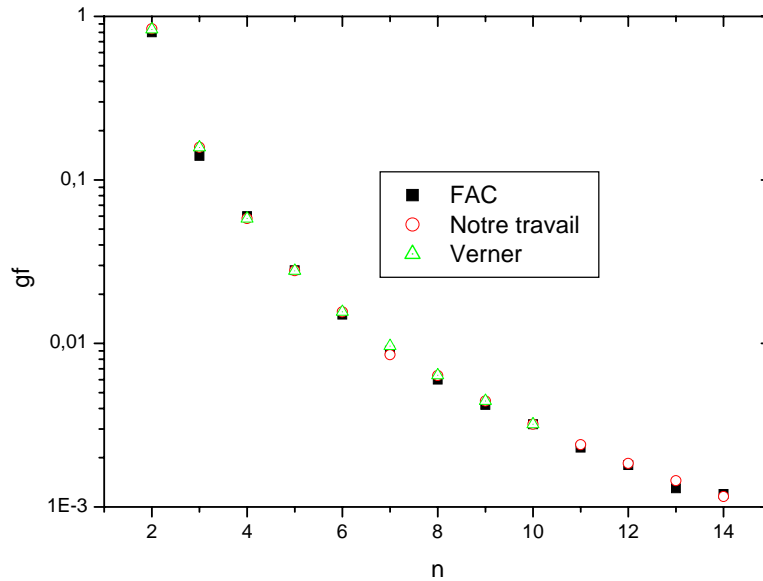
4. Etude des forces d'oscillateur de l'O VIII

Dans le but d'examiner les fonctions d'onde pour les hauts n , nous calculons les forces d'oscillateur des transitions $1s-np$ de l'O VIII jusqu'à $n=14$ par le FAC [11] et notre propre programme [3] et jusqu'à $n=10$ pour Verner et al. [12]. Notons que le calcul FAC correspond exactement à un calcul exact non relativiste utilisant des relations récursives des fonctions hydrogénoïdes [13].

Nous reportons tous ces résultats sur la figure 1. Cette figure montre une bonne concordance entre les différentes méthodes. Ceci montre la validation de nos données pour tous les nombres quantiques utilisés.

5. Conclusion

Nous avons calculé les forces d'oscillateur des transitions $1s-np$ de l'O VIII. Nos résultats se coïncident avec ceux du FAC et Verner et al. Ceci montre la validité de nos calculs jusqu'aux grands nombres quantiques n .

Figure 1 : Les forces d'oscillateur de 1s-np de l'O VIII.

Références

- [1] D. Layzer and R. H. Garstang, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.*, **6**, 449 (1968)
- [2] O. Sinanoglu, *Nucl. Instrum. Methods*, **110**, 193 (1973)
- [3] E. H. Guedda, *Contribution à l'étude des structures atomiques et processus élémentaires dans les plasmas : Applications aux hydrogénoïdes et aux héliumoïdes*, Thèse de Doctorat, Université BM Annaba (2006)
- [4] G. H. Shortley, *Phys. Rev.* **47**, 295 (1935)
- [5] R. D. Cowan, *The Theory of Atomic Structure and Spectra*, University of California Press, USA(1981)
- [6] H. A. Bethe and E. E. Salpeter, *Quantum Mechanics of one-and Two-Electron Systems*, Springer-Verlag, Berlin(1957)
- [7] B. W. Shore and d. H. Menzel, *Principles of Atomic spectra* , John Wiley, NY (1968)
- [8] D. R. Bates and A. Damgaard, *Phil. Trans. Roy. Soc. London A* **242** ,101 (1949)
- [9] G. K. Ortel and L. P. Shomo, *Astrophys. J. Suppl. Ser.*, **1** ,175 (1968)
- [10] J. C. Stewart and M. Rotenberg, *Phys. Rev.*,**140**,1508 (1965)
- [11] M. F. Gu ; *The Flexible Atomic Code ; AIP Conf. Proc.* **730**, 127-136 (2004)
- [12] D. A. Verner, E.M. Verner and G. J. Ferland, *Atomic Data Nucl. Data Tables*, **64** (1996)
- [13] P. J. Storey and D. G. Hummer, *Comp. Phys. Comm.* **66**, 129 (1991)