



UNIVERSITE KASDI MERBAH OUARGLA
FACULTE DES SCIENCES ET SCIENCES DE L'INGENIEUR
DEPARTEMENT DES SCIENCES PHYSIQUES

Mémoire

Présentée par

Nacira BEDIDA

Pour obtenir le diplôme de Magistère

Spécialité : physique

Option : Rayonnement et plasmas

**Reformulation de la théorie du rayonnement dans les
plasmas en partant de l'équation de Dirac**

Soutenance prévue le 30 Avril 2009

Devant le jury composé de :

M. Smaïl CHIHI	M.C	U. Ouargla	Président
M. Fethi KHELFAOUI	Prof	U. Ouargla	Examineur
M. El Habib GUEDDA	M.C	C U. El Oued	Examineur
M. Abdelouahab BENBITOUR	M.A.C.C	U. Ouargla	Invité
M. Mohammed Tayeb MEFTAH	Prof	U. Ouargla	Rapporteur

ملخص:

يندرج هذا العمل ضمن دراسة نظرية الإشعاع في البلازما انطلاقاً من معادلة ديراك. من الواضح أن هذه المعادلة تصح لأيونات أشباه الهيدروجين لأنها لا تحل إلا هذا النوع من الأيونات. من المعلوم أن الإشعاع هو تحويل فوري لدالة الترابط لعزم ثنائي القطب الكهربائي لأيون شبه الهيدروجين أو ذرة الهيدروجين. لقد حسبنا هذه الدالة من أجل خط ليمان ألفا مع اعتبار البنية الدقيقة وذلك باستعمال تكامل المسارات في الحالتين السكونية والحركية. أخيراً، قمنا بتطبيق وتجريب النتائج المتحصل عنها في حالة خط الطيف ليمان ألفا على الأرجون شبيه الهيدروجين.

الكلمات المفتاحية: نظرية الإشعاع - معادلة ديراك - دالة الترابط - تكامل المسارات - خطوط الطيف.

Abstract: This work is concerned with the study of the radiation theory of plasma using Dirac equation. As known, it governed the hydrogen like ions because this equation does not treat exactly only this kind of ions. It is known that the radiation is obtained from the Fourier transform of autocorrelation function of the electric dipole moment of hydrogen-like ion or hydrogen atom. We have calculated this function for the shape of Ly- α with fine structure by the path integral method in the static and the dynamical cases. Finally, we applied and tested our results to obtain the shape of Ly- α of the argon hydrogen-like.

Keys words: Radiation theory – Dirac equation – autocorrelation function – path integral – line shapes.

Résumé : Ce travail a porté sur l'étude de la théorie du rayonnement dans les plasmas en partant de l'équation de Dirac, il est clair que celle-ci est valable que pour les ions hydrogènoïdes puisque l'équation de Dirac ne résout exactement que ce genre d'ions. Il s'avère que le rayonnement est la transformée de Fourier de la fonction d'auto-corrélation du moment dipolaire électrique d'un ion hydrogènoïde ou l'atome d'hydrogène. Nous avons calculé cette fonction pour de la raie Ly- α avec structure fine par la méthode de l'intégrale de chemin dans les cas statique et dynamique. Enfin, nous avons appliqué et testé nos résultats obtenus au cas de profile de la raie Ly- α de l'argon hydrogènoïde.

Mots clés : Théorie du rayonnement - Equation de Dirac - Fonction d'auto-corrélation – intégrale de chemin - profile de raies.

To myself,
Perry H. Disdainful,
the only person worthy of my company.

Contents

List of Figures	iii
List of Tables	iv
0.1 INTRODUCTION GENERALE	1
0.2 Références	6
1 LA THEORIE QUANTIQUE DU RAYONNEMENT	7
1.1 Introduction	7
1.1.1 Onde électromagnétique	7
1.1.2 Photon	8
1.2 Champs électromagnétiques	8
1.2.1 Transformations de jauge	8
1.2.2 Intensité du rayonnement	9
1.3 L'interaction d'un rayonnement avec un système quantique	11
1.3.1 L'opérateur d'interaction (rayonnement-système quantique)	11
1.3.2 La méthode des perturbations	13
1.4 Emission et absorption du rayonnement	16
1.4.1 Absorption	16
1.4.2 Emission	18
1.5 Approximation dipolaire électrique	20
1.6 L'équation de Dirac pour l'électron dans un champ extérieur	22
1.7 Références	25
2 APPLICATION DU FORMALISME DE L'INTEGRALE DE CHEMIN POUR LA RAIE DE LYMAN-α AVEC STRUCTURE FINE	26
2.1 Introduction	26
2.2 Mouvement dans un champ Coulombien	27
2.3 Représentation de la fonction d'auto-corrélation du moment dipolaire électrique	30
2.4 Application du formalisme de l'intégrale de chemin pour le profil de raie Lyman- α avec structure fine	34
2.4.1 Formule du profil de raie Lyman $-\alpha$ avec structure fine	34
2.5 Références	48

3	ELARGISSEMENT ELECTRONIQUE NON RELATIVISTE	49
3.1	Introduction	49
3.2	Les collisions	51
3.3	Paramétrisation de la trajectoire	52
3.4	Section efficace	53
3.5	Elargissement électronique dans le cas non-relativiste	56
3.6	Références	69
4	ELARGISSEMENT ELECTRONIQUE RELATIVISTE	71
4.1	Introduction	71
4.2	Mouvement des électrons relativistes dans le plasma	72
4.3	Elargissement électronique relativiste	75
4.4	Références	84
5	CALCUL DE PROFIL DE LA RAIE DE LYMAN-α AVEC STRUCTURE FINE	85
5.1	Introduction	85
5.2	Le spectre d'un système quantique	86
5.3	Deux approximations limites	91
5.3.1	Temps caractéristiques	91
5.3.2	L'approximation d'impact	92
5.3.3	L'approximation quasi-statique	94
5.4	Calcul de profil de la raie Lyman- α avec structure fine	95
5.5	Références	99
5.6	CONCLUSION ET PERSPECTIVES	100
5.7	APPENDICES	101
5.7.1	Appendice A: Espace de Liouville	101
5.7.2	Appendice B: Intégration angulaire	103
5.8	Références	106

List of Figures

3.1	la collision dans le cas où les particules détectées suivant l'angle φ	55
5.1	Lyman α avec structure fine de l'argon hydrogèneoïde.	98

List of Tables

Acknowledgments

Je remercie vivement mon promoteur : Mohammed Tayeb meftah, professeur à l'université Kasdi Merbah de Ouargla et directeur de laboratoire de recherche (LENREZA) pour sa proposition et sa direction de mes travaux. Ces expressions de remerciements s'adressent également aux messieurs : Benbitour, maître assistant chargé de cours à l'université Kasdi Merbah de Ouargla et Saadallah, professeur au centre universitaire d'El Oued, pour leurs recommandations qui ont significativement contribué à l'avancement de mes travaux, ainsi qu'à monsieur Chihi, maître de conférence à l'université Kasdi Merbah de Ouargla pour ses aides au long de l'année théorique du Magistère et sa acceptation de présidence de jury et monsieur Guedda, maître de conférence au centre universitaire d'El Oued, qui a accepté de participer au jury d'examen de ce mémoire. Je tiens à exprimer ma profonde reconnaissance à monsieur Khelfaoui, professeur à l'université Kasdi Merbah de Ouargla et le responsable du Magistère de rayonnement et plasmas pour l'aide et pour l'encouragement. Je le remercie pour sa participation au jury d'examen de ce mémoire. Je n'oublie remercier mes parents et mon marie et mes ancles pour leur soutien moral inconditionnel et pour leur encouragements tout au long de préparation de ce mémoire.

0.1 INTRODUCTION GENERALE

La physique des plasmas science datant du XX^e siècle, est née de l'étude des décharges dans gaz. Depuis 1920 (c'est en 1923 que les physiciens Langmuir et Tonks ont introduit pour la première fois le terme plasma pour désigner le gaz ionisé contenu dans un type à décharges), cette discipline s'est considérablement développée en raison de son intérêt industriel, et académique (milieux naturels, application industriels, etc...). Intégrant l'essentiel des connaissances de la physique moderne, dans la nature, le plasma constitue le quatrième état de la matière, et fait suite dans l'ordre croissant des températures aux états solides liquide et gazeux. On pense actuellement que le plasma constitue 99% de l'univers.

La physique des plasmas tient donc une place importante dans l'étude des milieux naturels, surtout astrophysiques et des gaz ionisés produits en laboratoire. Sans doute, la complexité de cette matière, quatrième état de la matière, exige pour l'étude, l'introduction de tous les domaines de la physique (mécanique statistique, théorie de collision, équation de transport etc.)

Les plasmas sont caractérisés par leur densité, leur température ionique et leur paramètre de couplage. La physique de plasmas couvre un large domaine de densité électrique allant de 10 particules par cm^3 dans les espaces interstellaires par exemple, à 10^{24} particules par cm^3 dans les métaux et les étoiles et pour des températures comprises entre 10^{20} K (espace interstellaire) et 10^{80} K (intérieur des étoiles, plasma de fusion).

A l'équilibre thermodynamique, le gaz ionisé est constitué d'ions, d'électrons et de neutres (atomes ou molécules) : Les particules chargées (ions, électrons) interagissent par un potentiel Coulombien. Le milieu est alors caractérisé par les densités de chaque espèce,

et une température unique d'ensemble. On peut distinguer alors trois familles de plasma :

- Les plasmas froids, regroupant une large variété de plasmas tels que ceux créés par des décharges électriques dans un gaz, ceux obtenus dans les réacteurs à plasma où le plasma est confiné magnétiquement, ou ceux engendrés par couplage inductif avec un système radiofréquence. La plupart des plasmas froids jouent un rôle essentiel dans l'analyse des plasmas plus chauds.

- Les plasmas thermiques, caractérisés par des températures de fonctionnement supérieures à 300 K (utilisation des décharges d'arc pour la soudure, la découpe, la projection de matière, la dépollution, etc...).

- Les plasmas chauds, correspondants à des températures supérieures à 10^6 K . Ce type de plasmas est pour le moment, un domaine de recherche très actif pour une tentative de produire l'énergie électrique à partir de la fusion contrôlée.

La spectroscopie des plasmas est l'étude du rayonnement émis par un milieu partiellement ou complètement ionisé. En contraste avec la spectroscopie de position, où l'on s'intéresse principalement à la structure atomique d'un atome isolé, le rayonnement émis par un plasma dépend non seulement des propriétés du plasma qui l'entoure. Cette dépendance est une conséquence directe de l'interaction des particules chargées formant le plasma avec l'émetteur. Le spectre des raies répond alors aux multiples interactions microscopiques qui ont accompagné, ou précédé l'émission par un élargissement et un déplacement. Le profil des raies spectrales est une représentation très pertinente de l'émetteur (atome, ion) et de son environnement.

L'effet Stark est l'un des mécanismes d'élargissement de raies spectrales. Cet élar-

gissement intervient quand un atome, une molécule, ou un ion, qui émet la lumière dans un gaz, est perturbé par ses interactions avec les autres constituants du gaz plasmonique, tels que d'autres atomes, molécules, ions, ou électrons. L'étude de ce phénomène est nécessaire pour des observations spectroscopiques précises, et elle peut en outre apporter des informations utiles sur les conditions et les concentrations dans le plasma. L'utilisation de l'élargissement des raies comme outils de diagnostic, est devenu un moyen intéressant pour mesurer les températures de toute gamme, et les densités des espèces formant le gaz de plasma. La théorie qui met en évidence ces effets a suscité beaucoup d'attention ces dernières années. Parmi les approximations les plus utilisées dans ce domaine est celle dite l'approximation de chemin classique. Elle suppose que la dynamique des perturbateurs, atomes, molécules, ions ou électrons qui perturbent l'émetteur, est régi par les lois de la mécanique classique. Généralement dans l'approximation du chemin classique les perturbateurs sont supposés suivre des trajectoires droites. Récemment quelques auteurs ont proposé, dans la même hypothèse du chemin classique, que les perturbateurs suivent des trajectoires hyperboliques.

Deux points de vue, qui sont l'approche collisionnelle et l'approche d'un champ quasi-statique, peuvent être utilisées pour décrire la contribution des perturbateurs chargés sur le profil des raies. La théorie de base des profils de raies [1] repose sur la description de la composante électronique du champ électrique par une approche collisionnelle, et la composante ionique du champ électrique est décrite par une approche en champ quasi-statique. Pour de nombreuses applications, l'élargissement des raies isolées est souhaité. Des calculs de l'élargissement d'une telle raie dans un plasma sont normalement faits en utilisant

l'approximation d'impact pour des électrons, [2] dans sa version semi-classique [3,4,5]. Les modèles théoriques traitent les électrons dans le cadre de l'approximation d'impact ; tandis que les ions sont traités dans le cadre de l'approximation quasi-statique. La spectroscopie plasma est utilisée dans un vaste domaine de densité électronique allons de 10 particules par cm^{-3} (espace interstellaire) jusqu'à 10^{25} particules par cm^{-3} (intérieur des étoiles, fusion par confinement inertiel), pour des températures comprises entre $10^2 K$ et $10^8 K$. Les domaines qui nous intéressent dans le présent travail correspondent à des conditions particulières de plasmas de faible densité et hautes températures. Dans ces conditions, les collisions (électron-ion) sont considérées être binaires.

Le but de notre travail est l'étude de la théorie du rayonnement dans les plasmas en partant de l'équation de Dirac, et une application dans le cas de Lyman- α avec structure fine à l'aide de la formalisme de l'intégrale de chemin.

Dans le premier chapitre, nous commençons par la théorie quantique du rayonnement ainsi qu'un rappel sur l'équation de Dirac pour un électron dans un champ extérieur.

Dans le deuxième chapitre, nous faisons une application du formalisme de l'intégrale de chemin pour le profil de raie de Lyman- α avec structure fine (l'effet de spin de l'électron lié à l'atome) dans le cas statique puis le cas dynamique.

Le troisième chapitre est consacré à la description des collisions, et paramétrisation des trajectoires de mouvement non relativiste. Ensuite nous allons développer des expressions pour l'opérateur de collision électronique dans le cas non relativiste et dans le cadre de l'approximation dipolaire.

Le quatrième chapitre concerne le calcul de l'opérateur de collision électronique

pour l'élargissement Stark des raies isolée dans l'approximation d'impact et dans la théorie semi-classique (dipolaire électrique). Ce calcul tient compte de la théorie relativiste du mouvement classique de l'électron dans le plasma. Nous allons définir les équations paramétriques de mouvement. L'opérateur de collision électronique peut se dégager en négligeant la structure fine.

Dans le cinquième chapitre, nous verrons le formalisme de base pour le calcul de profil de raie Stark dans le cadre de l'approximation d'impact pour les électrons, et de l'approximation quasi-statique pour les ions, après nous allons faire le calcul de profil de raie de Lyman- α avec structure fine pour Ar^{+17} .

0.2 Références

- [1] M. Baranger, "Atomic and Molecular Processes", ed par D. R. Bates, Academic Press, New York (1962).
- [2] P. W. Anderson, Phys Rev.76, 647, (1949).
- [3] H. R. Griem, M. Baranger, A. C. Kolb, et G. Oertel, Phys Rev.125, 177, (1962).
- [4] S. Sahal-Bréchet, Astron. Astrophys. 2, 322, (1969).
- [5] M. Baranger, Phys. Rev. 112, 855, (1958).

Chapter 1

LA THEORIE QUANTIQUE DU RAYONNEMENT

1.1 Introduction

Le rayonnement est un transfert d'énergie sous forme d'ondes ou de particules. Les rayonnements visibles par l'oeil humain, les ondes radio et les rayons x et γ sont des rayonnements électromagnétiques. Du fait de la dualité onde-corpuscule, ces rayonnements peuvent se modéliser de deux manières :

1.1.1 Onde électromagnétique

Le rayonnement est une variation des champs électriques et magnétiques, l'analyse spectrale permet de décomposer cette onde en ondes monochromatiques de longueurs d'ondes λ et fréquences différents ν .

1.1.2 Photon

La mécanique quantique associe à un rayonnement électromagnétique monochromatique, un corpuscule de masse nulle nommé photon dont l'énergie est : $E = \hbar\omega$ où \hbar est la constante de Planck et ω est la pulsation du rayonnement optique, l'impulsion du photon est définie par : $\vec{P} = \hbar\vec{k} = \frac{\hbar\omega}{c}\vec{n}$, où \vec{k} est le vecteur d'onde du rayonnement et \vec{n} est le vecteur unité dans la direction de propagation de l'onde. L'état du photon est défini entièrement par les projections de son impulsion ($\hbar k_x, \hbar k_y, \hbar k_z$) est aussi de sa polarisation \vec{e} .

1.2 Champs électromagnétiques

Les champs électromagnétiques classiques dans le vide sont le champ électrique \vec{E} et le champ magnétique \vec{B} qui satisfont aux équations de Maxwell, \vec{E} et \vec{B} sont des structures générés à partir des potentiels scalaire Φ et vectoriel \vec{A} par :

$$\begin{aligned}\vec{E}(\vec{r}, s) &= -\vec{\nabla}\Phi(\vec{r}, s) - \frac{\partial\vec{A}(\vec{r}, s)}{\partial s} \\ \vec{B}(\vec{r}, s) &= \vec{\nabla} \wedge \vec{A}(\vec{r}, s)\end{aligned}\tag{1.1}$$

1.2.1 Transformations de jauge

Si \vec{E} et \vec{B} ne varient pas dans la transformation :

$$\begin{aligned}
\vec{A} &\longrightarrow \vec{A} + \vec{\nabla}\chi \\
\Phi &\longrightarrow \Phi - \frac{\partial\chi}{\partial s}
\end{aligned}
\tag{1.2}$$

où χ est un champ scalaire, ceci est l'invariance de jauge.

Dans la jauge de Coulomb, on impose :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0 \tag{1.2a}$$

\vec{A} , Φ , \vec{E} et \vec{B} satisfont alors à l'équation de propagation d'onde :

$$\Delta \vec{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial s^2} = 0 \tag{1.3}$$

1.2.2 Intensité du rayonnement

Une onde monochromatique est une solution des équations (1.2a) et (1.3) correspondante par la fréquence angulaire ω , cette onde représente un potentiel vecteur réel \vec{A} où :

$$\vec{A}(\omega, \vec{r}, s) = 2 \vec{A}_0(\omega) \cos\left(\vec{k} \vec{r} - \omega s + \delta\omega\right) \tag{1.4}$$

$$\vec{A}(\omega, \vec{r}, s) = \vec{A}_0(\omega) \left[\exp\left(i\left(\vec{k} \vec{r} - \omega s + \delta\omega\right)\right) + \exp\left(-i\left(\vec{k} \vec{r} - \omega s + \delta\omega\right)\right) \right] \tag{1.5}$$

où $\vec{A}_0(\omega) = A_0(\omega) \vec{e}$, $A_0(\omega)$ est l'amplitude du rayonnement et \vec{e} est le vecteur de polarisation, \vec{k} est le vecteur de propagation, $\delta\omega$ est la phase réelle,

donc les champs électrique et magnétique s'écrivent :

$$\vec{E} = -2\omega A_0(\omega) \vec{e} \sin\left(\vec{k} \vec{r} - \omega s + \delta\omega\right) \quad (1.6)$$

$$\vec{B} = -2A_0(\omega) \left(\vec{k} \wedge \vec{e}\right) \sin\left(\vec{k} \vec{r} - \omega s + \delta\omega\right) \quad (1.7)$$

L'énergie du champ électromagnétique d'un mode de fréquence angulaire ω dans un volume V est portée par $N(\omega)$ photons d'énergie $\hbar\omega$, l'énergie totale du mode ω est $N(\omega) \hbar\omega$ et la densité d'énergie par unité de volume est $\frac{N(\omega)\hbar\omega}{V}$.

D'autre part la densité d'énergie du champ électromagnétique est :

$$\rho(\omega) = \frac{1}{2} \left(\varepsilon_0 \vec{E}^2 + \frac{1}{\mu_0} \vec{B}^2 \right) = 4\varepsilon_0\omega^2 A_0^2(\omega) \sin^2\left(\vec{k} \vec{r} - \omega s + \delta\omega\right) \quad (1.8)$$

la densité d'énergie moyenne pendant une période $T = \frac{2\pi}{\omega}$:

$$\langle \rho(\omega) \rangle = 2\varepsilon_0\omega^2 A_0^2(\omega) \quad (1.9)$$

En comparant (1.9) avec $\frac{N(\omega)\hbar\omega}{V}$, on trouve :

$$\frac{N(\omega) \hbar\omega}{V} = 2\varepsilon_0\omega^2 A_0^2(\omega) \quad (1.10)$$

$$A_0(\omega) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega V}} \sqrt{N(\omega)} \quad (1.10a)$$

Le taux de flux d'énergie à travers une surface unité dans la direction \vec{k} est donnée par l'amplitude du vecteur de poynting $\frac{\vec{E} \wedge \vec{B}}{\mu_0}$, la moyenne dans le temps de ce taux donne

l'intensité du rayonnement :

$$I(\omega) = 2\varepsilon_0\omega^2 c A_0^2(\omega) \quad (1.11)$$

$$= \frac{N(\omega) \hbar\omega}{V} c$$

un pulsation de rayonnement peut être représenté comme une superposition des ondes planes $\vec{A}(\omega, \vec{r}, s)$ de même vecteur d'onde \vec{k} et de même polarisation \vec{e} .

$$\vec{A}(\omega, \vec{r}, s) = \int A_0(\omega) \vec{e} \left[\exp\left(i\left(\vec{k}\vec{r} - \omega s - \delta\omega\right)\right) + \exp\left(-i\left(\vec{k}\vec{r} - \omega s + \delta\omega\right)\right) \right] d\omega \quad (1.12)$$

1.3 L'interaction d'un rayonnement avec un système quantique

1.3.1 L'opérateur d'interaction (rayonnement-système quantique)

L'hamiltonien d'une particule sans spin de charge q_e et de masse m dans un champ électromagnétique s'écrit :

$$H = \frac{1}{2m} \left(\hat{\vec{P}} - q_e \hat{\vec{A}} \right)^2 + q_e \Phi_S \quad (1.13)$$

$\vec{A}(\vec{r}, s)$ est le potentiel vecteur et $\Phi_S(\vec{r}, s)$ le potentiel scalaire du champ électromagnétique.

En utilisant la jauge de Coulomb, un champ électromagnétique peut être exprimé en terme de potentiels qui obéissent à : $\text{div } \vec{A} = 0$, et $\Phi_S = 0$.

Alors l'hamiltonien H_{int} d'un atome dans un champ électromagnétique s'écrit :

$$\hat{H}_{int} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\vec{P}} - q_e \vec{A} \right)^2 + \hat{V} \quad (1.14)$$

où \hat{V} est l'opérateur d'énergie potentielle de l'électron dans le champ du noyau atomique :

$$\hat{H}_{int} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\vec{P}}^2 - q_e \vec{A} \cdot \hat{\vec{P}} - q_e \hat{\vec{P}} \cdot \vec{A} + q_e^2 \vec{A}^2 \right) + \hat{V} \quad (1.15)$$

$$= \underbrace{\frac{\hat{\vec{P}}^2}{2m}}_{H_0} + \hat{V} + \underbrace{\frac{q_e^2}{2m} \vec{A}^2 - \frac{q_e}{2m} \left(\hat{\vec{P}} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \hat{\vec{P}} \right)}_{H'}$$

$$H_{int} = H_0 + H' \quad (1.16)$$

où

$$H' = -\frac{q_e}{2m} \left(\hat{\vec{P}} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \hat{\vec{P}} \right) + \frac{q_e^2}{2m} \vec{A}^2 \quad (1.17)$$

sachant que : $\vec{P} \cdot \vec{A} = \vec{A} \cdot \vec{P} - i\hbar \text{div } \vec{A}$, et puisque $\text{div } \vec{A} = 0$, on a donc :

$$H' = -\frac{q_e}{m} \vec{A} \cdot \hat{\vec{P}} + \frac{q_e^2}{2m} \vec{A}^2$$

On va traiter le cas d'un champ électromagnétique faible, où le terme de A^2 est petit par rapport au terme linéaire de A ,

$$H' = -\frac{q_e}{m} \hat{\vec{A}} \cdot \hat{\vec{P}} \quad (1.17a)$$

cet hamiltonien est responsable sur tout les processus d'absorption et d'émission (spontanée et stimulée) d'un photon par l'atome.

1.3.2 La méthode des perturbations

Soit un système quantique se trouvant initialement dans un état stationnaire Ψ_α d'énergie E_α :

$$\Psi_k(\vec{r}, s) = \varphi_k(\vec{r}) \exp\left(\frac{-iE_k s}{\hbar}\right) \quad (1.18)$$

ou \vec{r} désigne toutes les positions des particules du système.

Si on applique une action extérieure (une perturbation) durant un temps déterminé, le système perturbé sera décrit par la fonction d'onde $\Psi(\vec{r}, s)$:

$$\Psi(\vec{r}, s) = \sum_k c_k(s) \varphi_k(\vec{r}) \exp\left(\frac{-iE_k s}{\hbar}\right) \quad (1.19)$$

$|c_k(s)|^2$ étant la probabilité pour que les mesures d'énergie dans l'état $\Psi(\vec{r}, s)$ donnent une valeur E_k correspondant à l'état stationnaire $\Psi_k(\vec{r}, s)$.

Le système entre les instants 0 et s , évolue conformément à l'équation de Schrödinger

:

$$i\hbar \frac{d}{ds} \Psi_k(\vec{r}, s) = H \Psi_k(\vec{r}, s) \quad (1.20)$$

$$i\hbar \sum_k \frac{d}{dt} c_k(s) \varphi_k(\vec{r}) \exp\left(\frac{-iE_k s}{\hbar}\right) = \sum_k c_k(s) H \varphi_k(\vec{r}) \exp\left(\frac{-iE_k s}{\hbar}\right) \quad (1.21)$$

où

$$H = H_0 + H'$$

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{Ze^2}{4\pi r} - \frac{q_e}{m} \vec{A} \cdot \vec{P} \quad (1.22)$$

si $H' \ll H_0$, c'est à dire H' comme perturbateur par rapport H_0 , donc l'équation (1.21) est résolue de façon approchée à l'aide de la méthode des perturbations.

$$\frac{d}{ds} c_\beta(s) = \frac{1}{i\hbar} \sum_k H'_{\beta k}(s) c_k(s) \exp(i\omega_{\beta k} s) \quad (1.23)$$

où

$$H'_{\beta k}(s) = \langle \varphi_\beta | H' | \varphi_k \rangle$$

$$= \int \varphi_\beta^*(\vec{r}) \left[-\frac{q_e}{m} \vec{A} \cdot \vec{P} \right] \varphi_k(\vec{r}) d\vec{r}$$

$$\text{et } \omega_{\beta k} = \frac{E_\beta - E_k}{\hbar}.$$

On suppose que le système à $s = 0$ est dans un état stationnaire lié d'énergie E_α décrit par la fonction d'onde $\Psi_\alpha(\vec{r}, s)$ et qu'on applique un rayonnement à $s = 0$:

$$c_k(s \leq 0) = \delta_{k\alpha}$$

Au premier ordre de la perturbation $H'(s)$, on a

$$\begin{aligned}
c_{\beta}^{(1)}(s) &= \frac{1}{i\hbar} \int_0^s H'_{\beta\alpha}(s') \exp(i\omega_{\beta\alpha}s') ds' \\
&= -\frac{q_e}{m} \int_0^s \langle \varphi_{\beta} | \vec{A} \cdot \vec{\nabla} | \varphi_{\alpha} \rangle \exp(i\omega_{\beta\alpha}s') ds' \tag{1.24}
\end{aligned}$$

où $\omega_{\beta\alpha} = \frac{E_{\beta} - E_{\alpha}}{\hbar}$ et

$$\langle \varphi_{\beta} | \vec{A} \cdot \vec{\nabla} | \varphi_{\alpha} \rangle = \int \varphi_{\beta}^*(\vec{r}) \vec{A} \cdot \vec{\nabla} \varphi_{\alpha}(\vec{r}) d\vec{r}$$

sachant que

$$\begin{aligned}
\vec{A}(\vec{r}, s) &= \int_{\Delta\omega} A_0(\omega) \vec{e} \left[\exp\left(i\left(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega s + \delta\omega\right)\right) + \exp\left(-i\left(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega s + \delta\omega\right)\right) \right] d\omega \\
c_{\beta}^{(1)}(s) &= -\frac{q_e}{m} \int_{\Delta\omega} d\omega A_0(\omega) \left[\begin{aligned} &e^{i\delta\omega} \langle \varphi_{\beta} | e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \vec{e} \cdot \vec{\nabla} | \varphi_{\alpha} \rangle \int_0^s ds' e^{i(\omega_{\beta\alpha} - \omega)s'} + \\ &+ e^{-i\delta\omega} \langle \varphi_{\beta} | e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \vec{e} \cdot \vec{\nabla} | \varphi_{\alpha} \rangle \int_0^s ds' e^{i(\omega_{\beta\alpha} + \omega)s'} \end{aligned} \right] \tag{1.25}
\end{aligned}$$

- La première intégrale sur s' sera négligeable sauf pour $\omega \simeq \omega_{\beta\alpha}$, c'est à dire :

$E_{\beta} \simeq E_{\alpha} + \hbar\omega$, l'état final de l'atome a une énergie plus grande que l'énergie de l'état initial, un photon d'énergie $\hbar\omega$ a été absorbé du rayonnement.

- La deuxième intégrale sur s' sera négligeable sauf pour $\omega \simeq -\omega_{\beta\alpha}$, c'est à dire :

$E_{\beta} \simeq E_{\alpha} - \hbar\omega$, dans ce cas l'état initial, un photon d'énergie $\hbar\omega$ est émis.

Probabilité de transition

La probabilité de transition de l'état initial φ_k à l'état final φ_{β} est donnée par le module de (1.24) de $c_{\beta}^{(1)}(s)$:

$$P_{\alpha\beta}(s) = \left| c_{\beta}^{(1)}(s) \right|^2 \quad (1.26)$$

$$P_{\alpha\beta}(s) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t H'_{\beta\alpha}(s') \exp(i\omega_{\beta\alpha}s') ds' \right|^2 \quad (1.27)$$

Taux de transition

Le taux de transition $W_{\alpha\beta}$ par unité de temps est obtenu en dérivant $P_{\alpha\beta}(s)$ par rapport à s :

$$W_{\alpha\beta} = \frac{dP_{\alpha\beta}(s)}{ds} \quad (1.28)$$

$$W_{\alpha\beta} = \frac{d}{ds} \left(\frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^s H'_{\beta\alpha}(s') \exp(-i\omega_{\beta\alpha}s') ds' \right|^2 \right) \quad (1.29)$$

1.4 Emission et absorption du rayonnement

1.4.1 Absorption

Dans la relation (1.25), la première intégrale sur s' exprime que l'atome absorbe un photon d'énergie $\hbar\omega$, la probabilité de transition par unité de temps est réduite au premier terme de la somme à droite :

$$\left| c_{\beta}^{(1)}(s) \right|^2 = 2 \int_{\Delta\omega} d\omega \left[\frac{q_e A_0(\omega)}{m} \right]^2 |M_{\beta\alpha}(\omega)|^2 F(s, \omega - \omega_{\beta\alpha}) \quad (1.30)$$

où on définit l'élément de matrice $M_{\beta\alpha}(\omega)$ par :

$$\begin{aligned}
M_{\beta\alpha}(\omega) &= \left\langle \varphi_\beta \left| e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{\varepsilon}\cdot\vec{\nabla} \right| \varphi_\alpha \right\rangle \\
&= \int \varphi_\beta^*(\vec{r}') e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'} \vec{\varepsilon}\cdot\vec{\nabla} \varphi_\alpha(\vec{r}') d\vec{r}'
\end{aligned} \tag{1.31}$$

On définit la fonction $F(s, \bar{\omega})$ par

$$F(s, \bar{\omega}) = \frac{1 - \cos \bar{\omega} s}{\bar{\omega}^2},$$

$$\bar{\omega} = \omega - \omega_{\beta\alpha}$$

Pour des temps longs s la fonction $F(s, \bar{\omega})$ a une valeur maximale lorsque $\bar{\omega} = 0$, c'est à dire $\omega = \omega_{\beta\alpha}$.

On suppose que $A_0^2(\omega)$ et $|M_{\beta\alpha}(\omega)|^2$ varient lentement, intégrons sur tout l'espace de pulsation pour obtenir :

$$\left| c_\beta^{(1)}(s) \right|^2 = 2 \left[\frac{q_e A_0(\omega_{\beta\alpha})}{m} \right]^2 |M_{\beta\alpha}(\omega_{\beta\alpha})|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{\omega} F(s, \bar{\omega}) \tag{1.32}$$

$$= 2\pi \left[\frac{q_e A_0(\omega_{\beta\alpha})}{m} \right]^2 |M_{\beta\alpha}(\omega_{\beta\alpha})|^2 s \tag{1.32-a}$$

La probabilité $\left| c_\beta^{(1)}(s) \right|^2$ augmente linéairement avec le temps et on peut définir un taux de transition d'absorption $W_{\alpha\beta}^{abs}$ par :

$$\begin{aligned}
W_{\beta\alpha}^{abs} &= \frac{d}{dt} \left| c_\beta^{(1)}(s) \right|^2 \\
&= 2\pi \left[\frac{q_e A_0(\omega_{\beta\alpha})}{m} \right]^2 |M_{\beta\alpha}(\omega_{\beta\alpha})|^2
\end{aligned}$$

$$W_{\beta\alpha}^{abs} = \frac{4\pi^2}{m^2 c} \left(\frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{I(\omega_{\beta\alpha})}{\omega_{\beta\alpha}} |M_{\beta\alpha}(\omega_{\beta\alpha})|^2 \quad (1.35)$$

où

$$I(\omega_{\beta\alpha}) = 2\epsilon_0 c \omega_{\beta\alpha}^2 A_0^2(\omega_{\beta\alpha}) \quad (1.36)$$

$I(\omega)$ est l'intensité de rayonnement par unité de ω .

1.4.2 Emission

Emission stimulée

La deuxième terme de la relation (1.25) exprime que l'atome émet un photon d'énergie $\hbar\omega$.

De la même façon la probabilité de transition par unité de temps, est réduite au deuxième terme (1.25) de la somme à gauche :

$$\left| c_{\beta}^{(1)}(s) \right|^2 = 2\pi \left[\frac{q_e A_0(\omega_{\beta\alpha})}{m} \right]^2 |M_{\alpha\beta}(\omega_{\beta\alpha})|^2 s \quad (1.37)$$

comme précédemment pour l'absorption, le taux de transition par l'émission stimulée $W_{\alpha\beta}^{st}$ est :

$$W_{\alpha\beta}^{st} = \frac{4\pi^2}{m^2 c} \left(\frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{I(\omega_{\beta\alpha})}{\omega_{\beta\alpha}} |M_{\alpha\beta}(\omega_{\beta\alpha})|^2 \quad (1.38)$$

où

$$\begin{aligned} M_{\alpha\beta} &= \left\langle \varphi_{\alpha} \left| e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{\epsilon}\cdot\vec{\nabla} \right| \varphi_{\beta} \right\rangle \\ &= \int \varphi_{\alpha}^*(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{\epsilon}\cdot\vec{\nabla} \varphi_{\beta}(\vec{r}) d\vec{r} \end{aligned} \quad (1.39)$$

on trouve que : $\overline{M}_{\alpha\beta} = -M_{\beta\alpha}^*$ et que : $W_{\alpha\beta}^{st} = W_{\beta\alpha}^{abs}$

Emission spontanée

Dans la théorie de l'électrodynamique quantique, le potentiel vecteur de l'absorption d'un photon à partir d'un état de N photons est [1] :

$$\vec{A}_1 = \vec{e} \left[\frac{N(\omega) \hbar}{2\varepsilon_0 \omega V} \right]^{1/2} \exp \left(i \left(\vec{k} \vec{r} - \omega s + \delta\omega \right) \right) \quad (1.40)$$

Le taux de transition pour l'absorption est :

$$W_{\beta\alpha}^{abs} = \frac{4\pi^2}{m^2} \left(\frac{q_e^2}{4\pi\varepsilon_0} \right) \frac{N(\omega_{\beta\alpha}) \hbar}{V\omega_{\beta\alpha}} |M_{\beta\alpha}|^2 \delta(\omega - \omega_{\beta\alpha}) \quad (1.41)$$

c'est la même expression obtenue pour l'absorption, la partie du potentiel vecteur décrivant la création d'un photon, en ajoutant un seul photon à un état de N photons est :

$$\vec{A}_2 = \vec{e} \left[\frac{(N(\omega) + 1) \hbar}{2\varepsilon_0 \omega V} \right]^{1/2} \exp \left(i \left(\vec{k} \vec{r} - \omega s + \delta\omega \right) \right) \quad (1.42)$$

le taux de transition d'émission est :

$$W_{\beta\alpha} = \frac{4\pi^2}{m^2} \left(\frac{q_e^2}{4\pi\varepsilon_0} \right) \frac{(N(\omega) + 1) \hbar}{V\omega_{\beta\alpha}} |M_{\beta\alpha}|^2 \delta(\omega - \omega_{\beta\alpha}) \quad (1.43)$$

En l'absence du champ extérieur, on a $N = 0$ et le taux de transition pour l'émission spontanée d'un photon, $W_{\alpha\beta}^{sp}$ est :

$$W_{\alpha\beta}^{sp} = \frac{4\pi^2}{m^2} \left(\frac{q_e^2}{4\pi\varepsilon_0} \right) \frac{\hbar}{V\omega_{\beta\alpha}} |M_{\beta\alpha}|^2 \delta(\omega - \omega_{\beta\alpha}) \quad (1.44)$$

1.5 Approximation dipolaire électrique

Le rayonnement optique comprend les rayonnements dont les longueurs d'onde sont comprises approximativement entre 10^{-2} et 10^2 microns, quant aux dimensions géométriques des atomes, elles sont de l'ordre 10^{-4} et 10^{-3} microns.

Il en résulte que les longueurs d'onde λ du domaine considéré satisfont à la condition : $\lambda \gg a$ où a est la dimension du système rayonnant. Cette condition permet de simplifier considérablement les éléments de matrice $M_{\beta\alpha}$.

On a $kr = \frac{2\pi}{\lambda}r \ll 1$, puisque $r \leq a$ et $\lambda \gg a$, donc on peut écrire :

$$\exp(\pm i \vec{k} \cdot \vec{r}') \approx 1 \quad (1.45)$$

en calculant les éléments de matrice de la probabilité de transition :

$$\begin{aligned} M_{\beta\alpha} &= \vec{e} \cdot \langle \varphi_\beta | \vec{\nabla} | \varphi_\alpha \rangle \\ &= \vec{e} \cdot \frac{i}{\hbar} \langle \varphi_\beta | \vec{P} | \varphi_\alpha \rangle \\ &= \vec{e} \cdot \frac{im}{\hbar} \langle \varphi_\beta | \vec{r}' | \varphi_\alpha \rangle \end{aligned} \quad (1.46)$$

$$\text{où } \vec{P} = m \frac{d\vec{r}}{ds} = -i\hbar \vec{\nabla}$$

On applique l'équation de mouvement de Heisenberg

$$\frac{d\hat{A}}{ds} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial s} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{H}] \quad (1.47)$$

si \vec{r} ne dépend pas explicitement de s , et on remplace \hat{H} par \hat{H}_0 à la relation (1.47), on obtient

$$\vec{r} = \frac{1}{i\hbar} [\vec{r}, \hat{H}_0] \quad (1.48)$$

donc

$$M_{\beta\alpha} = \vec{e} \cdot \frac{im}{\hbar} \langle \varphi_\beta | \vec{r} \cdot \hat{H}_0 - \hat{H}_0 \cdot \vec{r} | \varphi_\alpha \rangle \quad (1.49)$$

où

$$\dot{r}_{\beta\alpha} = i\omega_{\beta\alpha} r_{\beta\alpha} \quad (1.50)$$

Dans ce cas, on peut écrire

$$\vec{P}_{\beta\alpha} = \frac{im\omega_{\beta\alpha}}{q} \vec{D}_{\beta\alpha} \quad (1.51)$$

où $\vec{D}_{\beta\alpha}$ est le module du moment dipolaire électrique de l'électron, on définit le moment dipolaire par : $\vec{D} = -q_e \vec{r}$ et $\vec{D}_{\beta\alpha} = -q_e \vec{r}_{\beta\alpha}$.

Le taux de transition pour l'absorption d'un photon est

$$W_{\beta\alpha}^{abs} = \frac{4\pi^2}{m^2 c} \left(\frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{I(\omega_{\beta\alpha})}{\omega_{\beta\alpha}} |M_{\beta\alpha}|^2 \quad (1.52)$$

où

$$M_{\beta\alpha} = -\frac{m\omega_{\beta\alpha}}{\hbar} \vec{e} \cdot \vec{r}_{\beta\alpha} \quad (1.53)$$

On peut écrire (1.52)

$$W_{\beta\alpha}^{abs} = \frac{4\pi^2}{c\hbar^2} \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) \omega_{\beta\alpha} I(\omega_{\beta\alpha}) \left| \vec{e} \cdot \vec{D}_{\beta\alpha} \right|^2 \quad (1.54)$$

$\vec{e} \cdot \vec{D}_{\beta\alpha}$ est la composante du moment dipolaire électrique sur la direction \vec{e} entre les états β et α .

Les probabilités du processus à un seul photon sont déterminées par les éléments de matrice du moment dipolaire électrique de l'électron.

C'est la raison pour laquelle cette approximation est dite dipolaire électrique, et que les transitions dans le système rayonnant calculées avec cette approximation sont appelées transitions dipolaires électriques

1.6 L'équation de Dirac pour l'électron dans un champ extérieur

Nous rappelons ici par l'équation de Dirac pour l'électron dans un champ extérieur. Dans la théorie relativiste, la fonction d'onde prend quatre composantes par le symbole Ψ (de composantes Ψ_i , $i = 1, 2, 3, 4$) on a,

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix}$$

la représentation standard de la fonction d'onde est :

$$\Psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \quad (1.55)$$

l'équation de Dirac peut s'écrire sous une forme résolue par rapport à la dérivée par rapport au temps :

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial s} = H \Psi \quad 1.56$$

H étant l'hamiltonien de la particule où

$$H = \vec{\alpha} \vec{p} + \beta m \quad (1.57)$$

avec la notation partout en usage pour les matrices figurant ici :

$$\begin{aligned} \vec{\alpha} &= \gamma^0 \vec{\gamma} \\ \beta &= \gamma^0 \end{aligned} \quad (1.58)$$

notons que :

$$\begin{aligned} \alpha_i \alpha_k + \alpha_k \alpha_i &= 2\delta_{ik} \\ \beta \vec{\alpha} + \vec{\alpha} \beta &= \vec{0} \\ \beta^2 &= 1 \end{aligned} \quad (1.59)$$

c'est-à-dire que toutes les matrices $\vec{\alpha}$ et β anticommulent, et que leur carrés sont égaux à 1, elles sont toutes hermitiques en représentation spinorielle :

$$\begin{aligned}\vec{\alpha} &= \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & -\vec{\sigma} \end{pmatrix} \\ \beta &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\end{aligned}\tag{1.60}$$

l'équation de Dirac pour l'électron dans un champ extérieur :

$$\left[\vec{\alpha} \left(\vec{p} - e\vec{A} \right) + \beta m + e\Phi \right] \Psi = 0\tag{1.61}$$

où

$$H = \left[\vec{\alpha} \left(\vec{p} - e\vec{A} \right) + \beta m + e\Phi \right]\tag{1.62}$$

\vec{A} étant le potentiel vecteur, Φ est le potentiel scalaire. L'invariance de l'équation de Dirac par transformation de jauge des potentiels du champ électromagnétique s'exprime dans le fait qu'elle conserve sa forme, en même temps que la transformation :

$$A \longrightarrow A + ip\theta$$

θ étant une fonction arbitraire. On soumet la fonction d'onde à la transformation

:

$$\Psi \longrightarrow \Psi e^{ie\theta}$$

dans le chapitre suivant, nous établirons les fonctions propres de l'équation de Dirac pour l'électron dans un champ Coulombien.

1.7 Références

- [1] B.H Brasden et C J Joachain, "Physic of atoms and molecules", Longman (1996)
- [2] K. Touati, "Analyse spectroscopique des plasmas en présence d'un champ magnétique au plasma bord des tokamaks", thèse de Doctorat, université de Provence, France (2003).
- [3] C. Tannoudji, B.Diu et F.Laloë, " Mécanique quantique", tome 2, Hermann, Paris (1973).
- [4] L.Landau et E.Lifchitz, "Théorie quantique relativiste", première partie, ed MIR, Moscou (1972).

Chapter 2

APPLICATION DU FORMALISME DE L'INTEGRALE DE CHEMIN POUR LA RAIE DE LYMAN- α AVEC STRUCTURE FINE

2.1 Introduction

Dans ce chapitre nous allons faire un bref rappel sur les fonctions propres, et les valeurs propres de l'équation de Dirac pour l'électron dans un champ extérieur (Coulombien), ensuite nous ferons une application de ce formalisme à l'élargissement de la raie

Lyman- α d'un hydrogéoïde avec structure fine dans le cas statique puis le cas dynamique.

2.2 Mouvement dans un champ Coulombien

On considère un électron dans un champ Coulombien, la fonction d'onde des états stationnaires sous la forme :

$$\Psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(r) \Omega_{jlm_j} \\ (-1)^{\frac{1+l+l'}{2}} g(r) \Omega_{j'l'm_j} \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

où $l = j \pm \frac{1}{2}$, $l' = 2j - l$

Ω_{jlm_j} et $\Omega_{j'l'm_j}$ qui constituent sa partie angulaire sont des spineurs tridimensionnels, de composantes données par les formules [1]:

$$\begin{aligned} \Omega_{l+\frac{1}{2},l,m_j} &= \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{j+m_j}{2j}} Y_l^{m_j-\frac{1}{2}} \\ \sqrt{\frac{j-m_j}{2j}} Y_l^{m_j+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \\ \Omega_{l-\frac{1}{2},l,m_j} &= \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{j-m_j+1}{2j}} Y_l^{m_j-\frac{1}{2}} \\ \sqrt{\frac{j+m_j+1}{2j}} Y_l^{m_j+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.2)$$

où $Y_l^{m_j-\frac{1}{2}}$ et $Y_l^{m_j+\frac{1}{2}}$ les fonctions sphériques

nous appellerons les Ω_{jlm_j} spineurs sphériques et $f(r)$, $g(r)$ les fonctions radiales, l'équation de Dirac en représentation standard donne le système d'équation pour φ et χ :

$$\begin{aligned} (\epsilon - m - U(r)) \varphi &= \vec{\sigma} \vec{p} \chi \\ (\epsilon + m - U(r)) \chi &= \vec{\sigma} \vec{p} \varphi \end{aligned} \quad (2.3)$$

$U(r) = -\frac{Ze^2}{r}$ étant l'énergie potentielle de l'électron dans le champ Coulombien (champ attractif). pour passer aux unités relativistes, nous remplaçons e^2 par le nombre sans dimensions α , donc $U(r) = -\frac{Z\alpha}{r}$.

Le calcul du résultat de la substitution des expressions (2.1) dans (2.3) se réduit au calcul des seconds membres de ces équations.

Exprimant le spineur sphérique $\Omega_{j'l'm_j}$ d'après Ω_{jlm_j} conformément à

$$\Omega_{j'l'm_j} = i^{l-l'} \left(\vec{\sigma} \cdot \frac{\vec{r}'}{r} \right) \Omega_{jlm_j} \quad (2.4)$$

nous écrivons

$$(\vec{\sigma} \vec{p}) \chi = -i (\vec{\sigma} \vec{p}) (\vec{\sigma} \vec{r}') \frac{g}{r} \Omega_{jlm_j} \quad (2.5)$$

En transformant à présent le produit $(\vec{\sigma} \vec{p}) (\vec{\sigma} \vec{r}')$ au moyen de la formule :

$$(\vec{\sigma} \vec{a}) (\vec{\sigma} \vec{b}) = \vec{a} \vec{b} + i \vec{\sigma} (\vec{a} \wedge \vec{b}) \quad (2.6)$$

on trouve après développement des opérations vectorielles

$$(\vec{\sigma} \vec{p}) \chi = - \left(g'(r) + \frac{1-x}{r} g(r) \right) \Omega_{jlm_j} \quad (2.7)$$

où

$$\begin{aligned} x &= -(j+1/2) = -(l+1) \text{ pour } j = l+1/2, \\ &= +(j+1/2) = l \text{ pour } j = l-1/2 \end{aligned} \quad (2.8)$$

le nombre x parcourt toutes les valeurs entières sauf 0.

Lorsqu'on substitue cette expression dans la première des équations (2.3), le spineur sphérique Ω_{jlm_j} dans les deux membres des équations se réduisent, on obtient finalement le système suivant pour les fonctions radiales :

$$\begin{aligned} (rf(r))' + \frac{x}{r}(rf(r)) - \frac{Z\alpha}{r}rg(r) &= 0, \\ (rg(r))' - \frac{x}{r}(rg(r)) + \frac{Z\alpha}{r}rf(r) &= 0 \end{aligned} \quad (2.9)$$

où $U(r) = -\frac{Z\alpha}{r}$

Les solutions des fonctions $f(r)$ et $g(r)$ pour le spectre discret prennent la forme suivante [1]:

$$\begin{aligned} f(r) &= +\sqrt{m+\epsilon} \exp(-\eta/2)\eta^{\gamma-1}(Q_1 + Q_2), \\ g(r) &= -\sqrt{m-\epsilon} \exp(-\eta/2)\eta^{\gamma-1}(Q_1 - Q_2), \end{aligned} \quad (2.10)$$

où ont été introduites les notations

$$\eta = 2\lambda r, \quad \lambda = \sqrt{m^2 - \epsilon^2}, \quad \gamma = \sqrt{x^2 - Z^2\alpha^2} \quad (2.11)$$

Les solutions des Q_1 et Q_2 pour $\eta = 0$ dépendent des fonctions hypergéométriques $F(\alpha, \beta, z)$ sont :

$$Q_1 = AF\left(\gamma - \frac{Z\alpha\epsilon}{\lambda}, 2\gamma + 1, \eta\right), \quad Q_2 = BF\left(\gamma + 1 - \frac{Z\alpha\epsilon}{\lambda}, 2\gamma + 1, \eta\right) \quad (2.12)$$

où A, B sont constantes, l'expression des niveaux d'énergie discrets est :

$$\epsilon = m \left(1 + \frac{(Z\alpha)^2}{\left(\sqrt{x^2 - (Z\alpha)^2} + n_r \right)^2} \right)^{-1/2} \quad (2.13)$$

le nombre quantique n_r prend les valeurs suivantes :

$$\begin{aligned} n_r &= 0, 1, 2, \dots \text{pour } x < 0 \\ &= 1, 2, 3, \dots \text{pour } x > 0 \end{aligned} \quad (2.14)$$

donc ϵ dépend du nombre quantique n_r et le moment total j .

2.3 Représentation de la fonction d'auto-corrélation du moment dipolaire électrique

On considère que le système quantique est formé d'un émetteur radiatif et d'un "bain thermique" de perturbateurs (ions et électrons), c'est à dire un plasma.

Pour simplifier, en traitant les perturbateurs dans l'approximation du chemin classique, on suppose que chaque perturbateur peut être localisé et suivi sur une trajectoire, par contre, l'émetteur est traité quantiquement.

L'hamiltonien total du système est :

$$H = H_{0D} + H_B + V \quad (2.15)$$

où H_{0D} est l'hamiltonien de Dirac de l'émetteur, H_B est l'hamiltonien du bain de perturbateurs, et V est le potentiel d'interaction (émetteur+bain) :

$$V = -\vec{d} \cdot \vec{E} \quad (2.16)$$

la fonction d'autocorrélation $C(s)$ du moment dipolaire électrique s'écrit comme :

$$C(s) = \langle \overrightarrow{d(0)} \overrightarrow{d(s)} \rangle \quad (2.17)$$

$$= Tr \rho \overrightarrow{d(0)} \overrightarrow{d(s)} \quad (2.18)$$

où ρ , est l'opérateur densité du système global à $s = 0$ et $d(s) = T(s)^* d(0) T(s)$ est le moment dipolaire en représentation de Heisenberg, et $T(s)$ est l'opérateur d'évolution de l'émetteur obéissant à l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{dT(s)}{ds} = [H_{0D} + V] T(s) \quad (2.19)$$

Alors la forme de $C(s)$ devient:

$$C(s) = Tr \left[\rho \overrightarrow{d}(0) T(s)^* \overrightarrow{d}(0) T(s) \right] \quad (2.20)$$

Si on suppose qu'il n'existe qu'un couplage faible entre l'émetteur et son environnement à $t = 0$, on peut factoriser la matrice densité :

$$\rho = \rho_E \circ \rho_B \quad (2.21)$$

où ρ_E et ρ_B sont les matrice densités relatives à l'émetteur et au bain de perturbateurs. Cette factorisation permet de calculer la trace dans (2.20) en deux étapes :

$$C(s) = Tr_E \left[\rho_E Tr_B \left(\vec{d}T^*(s) \vec{d}T(s) \rho_B \right) \right] \quad (2.22)$$

On peut remplacer la trace sur les états des perturbateurs par une moyenne statistique, symbolisée $\{\dots\}_{moy}$ dans l'espace des phases des perturbateurs (approximation du chemin classique)

$$C(s) = Tr_E \left[\rho_E \{ \vec{d}T^*(s) \vec{d}T(s) \}_{moy} \right] \quad (2.23)$$

dans (2.23) la trace est une somme sur les états de système isolé (émetteur) :

$$C(s) = \sum_k \left\langle k \left| \rho_E \{ \vec{d}T^*(s) \vec{d}T(s) \}_{moy} \right| k \right\rangle \quad (2.24)$$

nous introduisons la relation de fermeture des états du système isolé

$$\sum_{\alpha} |\alpha\rangle \langle \alpha| = 1 \quad (2.25)$$

La fonction d'autocorrélation du moment dipolaire devient :

$$C(s) = \sum_{k\alpha\beta\beta'\alpha'} \langle k | \rho_E | \alpha \rangle \{ \langle \alpha | \vec{d} | \beta \rangle \langle \beta | T_b^*(s) | \beta' \rangle \langle \beta' | \vec{d} | \alpha' \rangle \langle \alpha' | T_b(s) | k \rangle \}_{moy} \quad (2.26)$$

$$C(s) = \sum_{k\alpha\beta\beta'\alpha'} \rho_k \delta_{\alpha k} \vec{d}_{\alpha\beta} \{ \langle \beta' | T_b(s) | \beta \rangle^* \langle \alpha' | T_a(s) | k \rangle \}_{moy} \vec{d}_{\alpha'\beta'}^* \quad (2.27)$$

donc,

$$C(s) = \sum_{\alpha\beta\beta'\alpha'} \rho_{\alpha} \vec{d}_{\alpha\beta} \{ \langle \beta' | T_b(s) | \beta \rangle^* \langle \alpha' | T_a(s) | \alpha \rangle \}_{moy} \vec{d}_{\alpha'\beta'}^* \quad (2.28)$$

dans le cas du plasma chauds $\rho_\alpha \simeq 1$:

$$C(s) = \sum_{\alpha\beta\beta'\alpha'} \vec{d}_{\alpha\beta} \{ \langle \beta' | T_b(s) | \beta \rangle^* \langle \alpha' | T_a(s) | \alpha \rangle \}_{moy} \vec{d}_{\alpha'\beta'}^* \quad (2.29)$$

la somme est effectuée sur tous les états α, α' ..et β, β' ...des niveaux respectivement supérieurs et inférieurs. T_a, T_b font évoluer respectivement supérieurs et inférieurs.

En utilisant simultanément les relations de fermeture de l'espace de configuration

:

$$\begin{aligned} \int |x\rangle \langle x| &= 1 \\ \int |y\rangle \langle y| &= 1 \end{aligned} \quad (2.30)$$

On peut écrire les éléments de matrice de l'opérateur d'évolution des états inférieurs et supérieurs sous la forme,

$$\langle \beta' | T_b(s) | \beta \rangle = \int \int \langle \beta' | x' \rangle \langle x' | T_b(s) | x \rangle \langle x | \beta \rangle dx dx' \quad (2.31)$$

$$\langle \alpha' | T_a(s) | \alpha \rangle = \int \int \langle \alpha' | y' \rangle \langle y' | T_a(s) | y \rangle \langle y | \alpha \rangle dy dy'$$

Les produits scalaires qui apparaissent dans l'intégrale peuvent s'écrire :

$$\langle \alpha | y \rangle = \varphi_\alpha(y) \quad (2.32)$$

On peut alors exprimer la fonction de corrélation du moment dipolaire comme :

$$\begin{aligned}
C(s) = & \sum_{\alpha\beta\beta'\alpha'} \vec{d}_{\alpha'\beta'}^* \vec{d}_{\alpha\beta} \int \int \varphi_{\alpha'}(y') \varphi_{\alpha}^*(y) \{ \langle y' | T_a(s) | y \rangle \}_{moy} dy dy' \\
& \int \int \varphi_{\beta'}(x') \varphi_{\beta}^*(x) \{ \langle x | T_b(s) | x' \rangle \}_{moy} dx dx'
\end{aligned} \tag{2.33}$$

On peut écrire l'élément de matrice de l'opérateur d'évolution comme :

$$\langle \alpha' | T_a(s) | \alpha \rangle = \int \int dy dy' \varphi_{\alpha'}(y') \varphi_{\alpha}^*(y) K(y, s, y', 0) \tag{2.34}$$

où $K(y, s, y', 0)$ est le propagateur de Feynman relatif à l'opérateur d'évolution $T_a(s)$, $\varphi_{\alpha'}(y')$ et $\varphi_{\alpha}^*(y)$ sont les états propres de H_E , y et y' sont des vecteurs d'espace à trois dimensions.

2.4 Application du formalisme de l'intégrale de chemin pour le profil de raie Lyman- α avec structure fine

2.4.1 Formule du profil de raie Lyman $-\alpha$ avec structure fine

Dans le cas statique, les ions perturbateurs sont traités par l'approximation quasi-statique (qui sera défini dans le chapitre 4), cette approximation est souvent valable pour les ions perturbateurs, et est d'autant plus valable que les ions se déplacent lentement, c'est-à-dire grande masses et basses températures.

Soit \vec{E} le champ électrique créé par l'ensemble des ions et indépendant de s , dans l'approximation dipolaire électrique l'énergie d'interaction émetteur-perturbateurs est : $-\vec{d} \cdot \vec{E}$. Ce traitement est effectué en l'absence du champ magnétique externe, le champ

magnétique interne est négligé devant le champ électrique $B = \frac{E}{c} \ll 1$. Nous pouvons écrire la fonction de corrélation du moment dipolaire comme :

$$C(s) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \varepsilon_\beta s\right) \cdot \sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} \vec{d}_{\alpha\beta} \{ \langle \alpha | T_a(s, 0) | \alpha' \rangle^* \}_{moy} \vec{d}_{\alpha'\beta'}^* \quad (2.35)$$

où $\vec{d}_{\alpha\beta}$ et T_a sont respectivement l'élément de matrice dipolaire et d'évolution de l'émetteur et le symbole $\{...\}_{moy}$ signifie qu'on doit prendre une moyenne statistique sur les perturbateurs, $|\dots\rangle$ est la notation de Dirac. La somme est effectuée sur tous les états $\alpha, \alpha' \dots$ et $\beta, \beta' \dots$ des niveaux respectivement supérieurs et inférieurs. ε_β est l'énergie des niveaux inférieurs de l'émetteur. On suppose que les états inférieurs β, β' dans le cas de Lyman- α ne sont pas perturbés.

Introduisons la relation de fermeture de l'espace de configuration des états supérieurs sous la forme :

$$\int |\vec{y}\rangle \langle \vec{y}'| d\vec{y} = 1 \quad (2.36)$$

On peut écrire les éléments de matrice de l'opérateur d'évolution des états supérieurs sous la forme :

$$\langle \alpha | T_a(s, 0) | \alpha' \rangle = \int \int \langle \alpha | y \rangle \langle y | T_a(s, 0) | y' \rangle \langle y' | \alpha' \rangle dy dy' \quad (2.37)$$

Les produits scalaires qui apparaissent dans l'intégrale peuvent s'écrire :

$$\langle \alpha | y \rangle = \varphi_\alpha(y) \quad (2.38)$$

On peut alors exprimer la fonction de corrélation du moment dipolaire comme :

$$C(s) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} s \varepsilon_\beta\right) \cdot \sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} \vec{d}_{\alpha'\beta}^* \vec{d}_{\alpha\beta} \int \int \varphi_\alpha(y) \varphi_{\alpha'}^*(y') \{ \langle y | T_a(s, 0) | y' \rangle \}_{\text{moy}} dy dy' \quad (2.39)$$

La fonction d'auto-corrélation du dipôle pour Lyman- α sans structure fine [2,3], en omettant la notation *moy* dans la moyenne d'ensemble notée seulement {...}:

$$\begin{aligned} C(s) &= \frac{1}{3} \langle 21 | d^1 | 10 \rangle^2 \{ \langle 210 | T | 210 \rangle + 2 \langle 211 | T | 211 \rangle \} \\ &= \frac{1}{3} |\langle 21 | d^1 | 10 \rangle|^2 \exp(\Phi_e s) \{ C_0(s) + 2C_1(s) \} \end{aligned} \quad (2.40)$$

où Φ_e représente l'opérateur de collisions électroniques.

Maintenant, on retrouve la fonction d'auto-corrélation du dipôle pour la série Lyman- n avec structure fine.

Les éléments de matrice $\langle y | T_a(s, 0) | y' \rangle$ de l'opérateur d'évolution dans la base $\{|y\rangle\}$ sont l'une des expressions du propagateur de Feynman $K(y, s; y', 0)$

$$\langle y | T_a(s, 0) | y' \rangle = K(y, s; y', 0)$$

$$K(y, s; y', 0) = \int_{y(0)=y'}^{y(s)=y} D[\vec{y}(s)] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^s \left(L_{0D} + e \vec{y} \cdot \vec{E}(s) \right) d\tau \right\} \quad (2.41)$$

Il est possible d'écrire le propagateur $K(y, s; s', 0)$ sous la forme [3,4,5] :

$$K(y, s; y', 0) = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^k \frac{1}{k!} \int_0^s d\tau_1 \dots \int_0^s d\tau_k \int d\vec{y}_1 \dots \int d\vec{y}_k \left(\vec{E}_1 \vec{y}_1\right) \dots \left(\vec{E}_k \vec{y}_k\right) \times$$

$$\prod_{j=0}^k K_0(\vec{y}_{j+1}, \tau_{j+1}; \vec{y}_j, \tau_j) \quad (2.42)$$

où $\vec{y}_{j+1} = \vec{y}$ et $\vec{y}_0 = \vec{y}'$

$K_0(y, s; y', 0)$ est le propagateur initial :

$$K_0(y, s; y', 0) = \int_{y(0)=y'}^{y(s)=y} D[\vec{y}(s)] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^s L_{0D} d\tau \right\} \quad (2.43)$$

Le développement du propagateur $K_0(y, s; y', 0)$ sur la base des fonctions propres

:

$$K_0(y, s; y', 0) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{j=\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} \varphi_{nj}(y) \varphi_{nj}^*(y') \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \epsilon_{nj} s \right) \quad (2.44)$$

$$\varphi_{nj}(y) = \Psi_{jlm_j}(r, \theta, \varphi) \quad (2.45)$$

les fonctions propres de l'Hamiltonien de Dirac avec un champ Coulombien [1]:

$$\varphi_{nj}(y) = \begin{pmatrix} f(r) \Omega_{jlm_j} \\ (-1)^{\frac{1+l+l'}{2}} g(r) \Omega_{jl'm_j} \end{pmatrix} \quad (2.46)$$

où $l = j \pm \frac{1}{2}$, $l' = 2j - l$ et ϵ_{nj} est l'énergie des niveaux dans le cas de structure

fine.

En remplaçant K_0 par son expression (2.44) dans (2.42), on obtient

$$\begin{aligned}
K(y, s; y', 0) = & \sum_{\alpha_1 \dots \alpha_{k+1}} \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^k \frac{1}{k!} \int_0^s d\tau_1 \dots \int_0^s d\tau_k \int d\vec{y}_1 \dots \int d\vec{y}_k \left(\vec{E}_1 \vec{y}_1\right) \dots \left(\vec{E}_k \vec{y}_k\right) \\
& \varphi_{\alpha_{k+1}}^*(\vec{y}) \varphi_{\alpha_{k+1}}(\vec{y}_k) \exp \frac{i}{\hbar} \epsilon_{\alpha_{k+1}} (s - \tau_k) \cdot \varphi_{\alpha_k}(\vec{y}) \varphi_{\alpha_{k-1}}^*(\vec{y}_{k-1}) \\
& \exp \frac{i}{\hbar} \epsilon_{\alpha_k} (\tau_k - \tau_{k-1}) \dots \varphi_{\alpha_2}(\vec{y}_2) \varphi_{\alpha_2}^*(\vec{y}_1) \exp \frac{i}{\hbar} \epsilon_{\alpha_2} (\tau_2 - \tau_1) \\
& \cdot \varphi_{\alpha_1}(\vec{y}_1) \varphi_{\alpha_1}^*(\vec{y}') \exp \frac{i}{\hbar} \epsilon_{\alpha_1} (\tau_1 - 0)
\end{aligned} \tag{2.47}$$

où ϵ_α l'énergie des niveaux supérieurs de l'émetteur, l'équation (2.47) est le résultat général donné par le formalisme de l'intégrale de chemin pour le propagateur qui apparaît dans la fonction de corrélation du moment dipolaire. En utilisant la représentation n, j, m_j , la fonction d'auto-corrélation du dipôle dans le cas de la série de Lyman- α avec la structure fine s'écrit :

$$C(s) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} s \epsilon_{1\frac{1}{2}}\right) \sum_{jj'm_j m_{j'}} \left[\begin{array}{c} \sum_m \langle njm_j | \vec{d} | 1\frac{1}{2}m \rangle \langle nj'm_{j'} | \vec{d} | 1\frac{1}{2}m \rangle^* \\ \cdot \{ \langle njm_j | T | nj'm_{j'} \rangle \} \end{array} \right] \tag{2.48}$$

il est avantageux d'écrire le produit des éléments de matrice du moment dipolaire en utilisant les composantes standards :

$$\begin{aligned}
r_0 &= z \\
r_1^1 &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(x + iy) \\
r_{-1}^1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(x - iy)
\end{aligned} \tag{2.49}$$

où $\vec{r} = \frac{\vec{d}}{(-e)}$.

On peut utiliser le théorème de Wigner-Eckart [6] pour calculer les éléments de matrice dipolaire :

$$\begin{aligned}
\sum_m \left\langle njm_j \left| \vec{d} \right| 1\frac{1}{2}m \right\rangle \left\langle nj'm_{j'} \left| \vec{d} \right| 1\frac{1}{2}m \right\rangle^* &= \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \frac{1}{\sqrt{2j'+1}} \left\langle nj \left| d_1 \right| 1\frac{1}{2} \right\rangle \left\langle nj' \left| d_1 \right| 1\frac{1}{2} \right\rangle^* \\
&\cdot \sum_{q=-1}^{+1} \sum_{m=-\frac{1}{2}}^{+\frac{1}{2}} \left\langle \frac{1}{2}1mq \left| jm_j \right\rangle \left\langle \frac{1}{2}1mq \left| j'm_{j'} \right\rangle \right. \\
&= \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \frac{1}{\sqrt{2j'+1}} \left\langle nj \left| d^1 \right| 1\frac{1}{2} \right\rangle \left\langle nj' \left| d^1 \right| 1\frac{1}{2} \right\rangle \delta jj' \delta m_j m_{j'} \quad (2.50)
\end{aligned}$$

Tout ceci nous permet d'écrire la fonction d'auto-corrélation du moment dipolaire pour une raie quelconque de Lyman - n :

$$C(s) = \sum_{jm_j} \frac{\exp\left(-\frac{i}{\hbar} s \varepsilon_{1\frac{1}{2}}\right)}{2j+1} \left| \left\langle nj \left| d^1 \right| 1\frac{1}{2} \right\rangle \right|^2 \{ \langle njm_j | T | nj'm_{j'} \rangle \} \quad (2.51)$$

On reprend la fonction d'auto-corrélation du moment dipolaire pour une raie de Lyman- α avec structure fine :

$$C(s) = \sum_{jm_j} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} s \varepsilon_{1\frac{1}{2}}\right) \left[\begin{aligned} &\frac{1}{4} \left| \left\langle 2\frac{3}{2} \left| d^1 \right| 1\frac{1}{2} \right\rangle \right|^2 \exp(\Phi_e^1 s) \sum_{m_j=-\frac{3}{2}}^{+\frac{3}{2}} \{ \langle 2\frac{3}{2}m_j | T | 2\frac{3}{2}m_j \rangle \} + \\ &+ \frac{1}{2} \left| \left\langle 2\frac{1}{2} \left| d^1 \right| 1\frac{1}{2} \right\rangle \right|^2 \exp(\Phi_e^2 s) \sum_{m_j=-\frac{1}{2}}^{+\frac{1}{2}} \{ \langle 2\frac{1}{2}m_j | T | 2\frac{1}{2}m_j \rangle \} \end{aligned} \right] \quad (2.52)$$

$$\begin{aligned}
C(s) &= \sum_{jm_j} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} s \varepsilon_{1\frac{1}{2}}\right) \left(\left[\frac{1}{4} \left| \left\langle 2\frac{3}{2} \left| d^1 \right| 1\frac{1}{2} \right\rangle \right|^2 \exp(\Phi_e^1 s) \right]^* \right. \\
&\cdot \left\{ \left\langle 2\frac{3}{2}\frac{3}{2} \left| T \right| 2\frac{3}{2}\frac{3}{2} \right\rangle + \left\langle 2\frac{3}{2}\frac{1}{2} \left| T \right| 2\frac{3}{2}\frac{1}{2} \right\rangle + \left\langle 2\frac{3}{2}\frac{-1}{2} \left| T \right| 2\frac{3}{2}\frac{-1}{2} \right\rangle + \left\langle 2\frac{3}{2}\frac{-3}{2} \left| T \right| 2\frac{3}{2}\frac{-3}{2} \right\rangle \right\} + \\
&+ \left[\frac{1}{2} \left| \left\langle 2\frac{1}{2} \left| d^1 \right| 1\frac{1}{2} \right\rangle \right|^2 \exp(\Phi_e^2 s) \right] \left\{ \left\langle 2\frac{1}{2}\frac{1}{2} \left| T \right| 2\frac{1}{2}\frac{1}{2} \right\rangle + \left\langle 2\frac{1}{2}\frac{-1}{2} \left| T \right| 2\frac{1}{2}\frac{-1}{2} \right\rangle \right\} \quad (2.53)
\end{aligned}$$

où Φ_e^1 et Φ_e^2 sont les opérateurs de collisions électroniques.

Calculons d'abord $\langle 2\frac{3}{2}\frac{3}{2} | T | 2\frac{3}{2}\frac{3}{2} \rangle$:

On pose $C_1(s) = \langle 2\frac{3}{2}\frac{3}{2} | T | 2\frac{3}{2}\frac{3}{2} \rangle$, et en remplaçant le propagateur K par son expression (2.47) et en intégrant sur y et y' , on obtient après avoir utilisé l'orthogonalité des fonctions d'onde :

$$\begin{aligned}
C_1(s) = & \sum_{\alpha_2=1, \alpha_3 \dots \alpha_k=1} \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^k \frac{1}{k!} \int_0^s d\tau_1 \dots \int_0^s d\tau_k \int d\vec{y}_1 \\
& \dots \int d\vec{y}_k \left(\vec{E}_1 \vec{y}_1\right) \dots \left(\vec{E}_k \vec{y}_k\right) \\
& \varphi_{2\frac{3}{2}\frac{3}{2}}^* (\vec{y}_k) \varphi_{\alpha_k} (\vec{y}_k) \dots \varphi_{\alpha_2} (\vec{y}_1) \varphi_{2\frac{3}{2}\frac{3}{2}}^* (\vec{y}_1) \cdot \\
& \exp \left[\begin{aligned} & \frac{i}{\hbar} \epsilon_{2\frac{3}{2}} (s - \tau_k) + \frac{i}{\hbar} \epsilon_{\alpha_k} (\tau_k - \tau_{k-1}) \\ & + \frac{i}{\hbar} \epsilon_{\alpha_k} (\tau_2 - \tau_1) + \frac{i}{\hbar} \epsilon_{\alpha_k} (\tau_1 - 0) \end{aligned} \right] \quad (2.54)
\end{aligned}$$

ou encore :

$$\begin{aligned}
C_1(s) = & \sum_{\alpha_2=1, \alpha_3 \dots \alpha_k=1} \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^k \frac{1}{k!} \int_0^s d\tau_1 \dots \int_0^s d\tau_k \int d\vec{y}_1 \\
& \dots \int d\vec{y}_k \left(\vec{E}_1 \vec{y}_1\right) \dots \left(\vec{E}_k \vec{y}_k\right) \\
& \varphi_{2\frac{3}{2}\frac{3}{2}}^* (\vec{y}_k) \varphi_{\alpha_k} (\vec{y}_k) \dots \varphi_{\alpha_2} (\vec{y}_1) \varphi_{2\frac{3}{2}\frac{3}{2}}^* (\vec{y}_1) \cdot \\
& \exp \left[\frac{i}{\hbar} \epsilon_{2\frac{3}{2}} (s - 0) \right] \quad (2.55)
\end{aligned}$$

Dans la suite nous appliquons les règles des sélections

$$\Delta j = \pm 1 \text{ et } \Delta m_j = 0, \pm 1$$

et les propriétés des fonction sphériques :

$$\begin{aligned}
\int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \left(Y_l^{m'}(\theta, \varphi) \right)^* \cos \theta Y_l^m(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi &= \\
&= \sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}} \\
\text{si } l' &= l+1 \text{ et } m' = m, \\
&= \sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}} \\
\text{si } l' &= l-1 \text{ et } m' = m, \tag{2.56}
\end{aligned}$$

l'intégrale est nulle dans les autres cas.

Puisque les Ω_{jlm_j} dépendent avec les fonctions sphériques [1] :

$$\begin{aligned}
\Omega_{l+\frac{1}{2}, l, m_j} &= \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{j+m_j}{2j}} Y_l^{m_j-\frac{1}{2}} \\ \sqrt{\frac{j-m_j}{2j}} Y_l^{m_j+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \\
\Omega_{l-\frac{1}{2}, l, m_j} &= \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{j-m_j+1}{2j}} Y_l^{m_j-\frac{1}{2}} \\ \sqrt{\frac{j+m_j+1}{2j}} Y_l^{m_j+\frac{1}{2}} \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{2.57}$$

Nous allons omettre le facteur de phase $\exp \left[\frac{i}{\hbar} \epsilon_{2\frac{3}{2}} (s-0) \right]$ dans tout le calcul, et nous le ferons à nouveau apparaître dans le résultat final.

Calculons (2.55) terme à terme pour les différents ordres de k :

Cas $k = 0$

$$C_1^{(0)} \equiv C_1^{k=0} = 1 \tag{2.58}$$

Cas $k = 1$

$$\begin{aligned}
C_1^{(1)}(s) &= \frac{i}{\hbar} \int_0^s d\tau_1 \left[\vec{E} \left(\int d\vec{y}_1 \varphi_{2\frac{3}{2}\frac{3}{2}}(\vec{y}_1) \vec{y}_1 \varphi_{2\frac{3}{2}\frac{3}{2}}^*(\vec{y}_1) \right) \right] \\
&= \frac{i}{\hbar} \int_0^s d\tau_1 \left[\vec{E} \left(\begin{aligned} &\int_0^\infty r^3 f f'^* dr \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \Omega_{\frac{3}{2}1\frac{3}{2}}(\vec{y}_1) \cos \theta \Omega_{\frac{3}{2}1\frac{3}{2}}^* \sin \theta d\theta d\varphi + \\ &\int_0^\infty r^3 g g'^* dr \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \Omega_{\frac{3}{2}2\frac{3}{2}}^*(\vec{y}_1) \cos \theta \Omega_{\frac{3}{2}2\frac{3}{2}} \sin \theta d\theta d\varphi \end{aligned} \right) \right] = 0
\end{aligned} \tag{2.59}$$

Cas $k = 2$

$$\begin{aligned}
C_1^{(2)}(s) &= \frac{1}{2} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_0^s d\tau_1 \int_0^s d\tau_2 \left[\sum_{\alpha_2=1}^\infty \vec{E} \left(\int d\vec{y}_2 \varphi_{2\frac{3}{2}\frac{3}{2}}(\vec{y}_2) \vec{y}_2 \varphi_{\alpha_2}^*(\vec{y}_2) \right) \right] \\
&\quad \left[\vec{E} \left(\int d\vec{y}_1 \varphi_{\alpha_2}^*(\vec{y}_1) \vec{y}_1 \varphi_{2\frac{3}{2}\frac{3}{2}}(\vec{y}_1) \right) \right]
\end{aligned} \tag{2.60}$$

On néglige le couplage avec les autres niveaux autre que $\alpha_2 = 2$ c'est-à-dire les états $(\varphi_{2\frac{3}{2}\frac{3}{2}}, \varphi_{2\frac{3}{2}\frac{1}{2}}, \varphi_{2\frac{3}{2}\frac{-1}{2}}, \varphi_{2\frac{3}{2}\frac{-3}{2}}, \varphi_{2\frac{1}{2}\frac{1}{2}}, \varphi_{2\frac{1}{2}\frac{-1}{2}})$, mais l'intégrale

$$\left[\vec{E} \int d\vec{y}_2 \varphi_{2\frac{3}{2}\frac{3}{2}}(\vec{y}_2) \vec{y}_2 \varphi_{2jm_j}^*(\vec{y}_2) \right] \left[\vec{E} \int d\vec{y}_1 \varphi_{2jm_j}^*(\vec{y}_1) \vec{y}_1 \varphi_{2\frac{3}{2}\frac{3}{2}}(\vec{y}_1) \right] = 0$$

selon la relation (2.56), donc

$$C_1(s) = \left\langle 2\frac{3}{2}\frac{3}{2} \left| T \right| 2\frac{3}{2}\frac{3}{2} \right\rangle = 1 \tag{2.61}$$

la même résultat pour

$$\left\langle 2\frac{3}{2}\frac{-3}{2} \left| T \right| 2\frac{3}{2}\frac{-3}{2} \right\rangle = 1 \tag{2.62}$$

Puisque:

$$\left[\vec{E} \int d\vec{y}_2 \varphi_{2\frac{3}{2}\frac{-3}{2}}(\vec{y}_2) \vec{y}_2 \varphi_{2jm_j}^*(\vec{y}_2) \right] \left[\vec{E} \int d\vec{y}_1 \varphi_{2jm_j}(\vec{y}_1) \vec{y}_1 \varphi_{2\frac{3}{2}\frac{-3}{2}}^*(\vec{y}_1) \right] = 0 \tag{2.63}$$

Calculons maintenant $\langle 2\frac{3}{2}\frac{1}{2} \left| T \right| 2\frac{3}{2}\frac{1}{2} \rangle$:

$$\begin{aligned}
C_2(s) &= \left\langle 2\frac{3}{2}\frac{1}{2} \middle| T \middle| 2\frac{3}{2}\frac{1}{2} \right\rangle \\
&= \int \int dy dy' \varphi_{2\frac{3}{2}\frac{1}{2}}(y) \varphi_{2\frac{3}{2}\frac{1}{2}}^*(y') [K_0(y, s; y', 0)]
\end{aligned} \tag{2.64}$$

en remplaçant le propagateur K par son expression (2.47) et en intégrant sur y et y' , on obtient:

$$\begin{aligned}
C_2(s) &= \sum_{\alpha_2=1, \alpha_3 \dots \alpha_k=1} \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^k \frac{1}{k!} \int_0^s d\tau_1 \dots \int_0^s d\tau_k \int d\vec{y}_1 \dots \\
&\dots \int d\vec{y}_k \left(\vec{E}_1 \vec{y}_1\right) \dots \left(\vec{E}_k \vec{y}_k\right) \\
&\varphi_{2\frac{3}{2}\frac{1}{2}}^*(\vec{y}_k) \varphi_{\alpha_k}(\vec{y}_k) \dots \varphi_{\alpha_2}(\vec{y}_1) \varphi_{2\frac{3}{2}\frac{1}{2}}^*(\vec{y}_1) \exp\left[\frac{i}{\hbar} \epsilon_{2\frac{3}{2}}(s-0)\right]
\end{aligned} \tag{2.65}$$

de même que précédemment, nous allons omettre le facteur de phase en énergie, et nous le remettrons en fin du calcul.

Le même raisonnement pour le calcul de $C_1(s)$ qui conduit à:

Cas $k = 0$

$$C_2^{(0)} = 1 \tag{2.66}$$

Cas $k = 1$

$$C_2^{(1)}(s) = \frac{i}{\hbar} \int_0^s d\tau_1 \left[\vec{E} \left(\int d\vec{y}_1 \varphi_{2\frac{3}{2}\frac{1}{2}}(\vec{y}_1) \vec{y}_1 \varphi_{2\frac{3}{2}\frac{1}{2}}^*(\vec{y}_1) \right) \right] = 0 \tag{2.67}$$

Cas $k = 2$

$$\begin{aligned}
C_2^{(2)}(s) &= \sum_{\alpha_2=1}^{\infty} \frac{1}{2!} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^s d\tau_1 \int_0^s d\tau_2 \left[\vec{E} \left(\int d\vec{y}_2 \varphi_{2\frac{3}{2}\frac{1}{2}}(\vec{y}_2) \vec{y}_2 \varphi_{\alpha_2}^*(\vec{y}_2) \right) \right] \\
&\left[\vec{E} \left(\int d\vec{y}_1 \varphi_{\alpha_2}(\vec{y}_1) \vec{y}_1 \varphi_{2\frac{3}{2}\frac{1}{2}}^*(\vec{y}_1) \right) \right]
\end{aligned} \tag{2.68}$$

on néglige le couplage avec les autres niveaux autre que $\alpha_2 = 2$ c'est-à-dire les états $(\varphi_{2\frac{3}{2}\frac{3}{2}}, \varphi_{2\frac{3}{2}\frac{1}{2}}, \varphi_{2\frac{3}{2}\frac{-1}{2}}, \varphi_{2\frac{3}{2}\frac{-3}{2}}, \varphi_{2\frac{1}{2}\frac{1}{2}}, \varphi_{2\frac{1}{2}\frac{-1}{2}})$

Les intégrales précédentes sont nulles, sauf l'intégrale avec l'état $\varphi_{2\frac{1}{2}\frac{1}{2}}$:

$$\begin{aligned} & \left[\int d\vec{y}_2 \varphi_{2\frac{3}{2}\frac{1}{2}}(\vec{y}_2) \vec{y}_2 \varphi_{2\frac{1}{2}\frac{1}{2}}^*(\vec{y}_2) \right] \left[\int d\vec{y}_1 \varphi_{2\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(\vec{y}_1) \vec{y}_1 \varphi_{2\frac{3}{2}\frac{1}{2}}^*(\vec{y}_1) \right] \\ &= A_{+\frac{1}{2}} A_{+\frac{1}{2}}^+ = D_+^2 \end{aligned} \quad (2.69)$$

donc

$$\begin{aligned} C_2^{(2)}(s) &= \frac{1}{2!} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \left[(Es A_{+\frac{1}{2}}) \cdot (Es A_{+\frac{1}{2}}^+) \right] \\ &= \frac{1}{2!} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \left[(Es)^2 D_+^2 \right] \end{aligned} \quad (2.70)$$

En suivant de proche en proche, on montre que les termes d'ordre n impair sont nuls et que seuls les termes d'ordre pairs contribuent dans le calcul de la fonction de corrélation du moment dipolaire. C'est aussi que par exemple les termes d'ordre $n = 4$ et $n = 6$ sont respectivement égaux à :

$$\begin{aligned} C_2^{(4)}(s) &= \sum_{\alpha_2=1}^{\infty} \frac{1}{4!} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^4 \int_0^s d\tau_1 \int_0^s d\tau_2 \int_0^s d\tau_3 \int_0^s d\tau_4 \left[\vec{E} \int d\vec{y}_4 \varphi_{2\frac{3}{2}\frac{1}{2}}(\vec{y}_4) \vec{y}_4 \varphi_{2\frac{1}{2}\frac{1}{2}}^*(\vec{y}_4) \right] \\ & \quad \sum_{\alpha_3=1}^{\infty} \left[\vec{E} \int d\vec{y}_3 \varphi_{2\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(\vec{y}_3) \vec{y}_3 \varphi_{\alpha_3}^*(\vec{y}_3) \right] \left[\vec{E} \int d\vec{y}_2 \varphi_{\alpha_3}(\vec{y}_2) \vec{y}_2 \varphi_{2\frac{1}{2}\frac{1}{2}}^*(\vec{y}_2) \right] \\ & \quad \left[\vec{E} \int d\vec{y}_1 \varphi_{2\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(\vec{y}_1) \vec{y}_1 \varphi_{2\frac{3}{2}\frac{1}{2}}^*(\vec{y}_1) \right] \end{aligned} \quad (2.71)$$

la somme dans l'équation (2.69) porte seulement l'état du niveau supérieur $\varphi_{2\frac{1}{2}\frac{1}{2}}$,

$$C_2^{(4)}(s) = \frac{1}{4!} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^4 [(Es)^4 D_+^4] \quad (2.72)$$

Pour l'ordre $n = 6$, le résultat est

$$C_2^{(6)}(s) = \frac{1}{6!} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^6 [(Es)^6 D_+^6] \quad (2.73)$$

on peut écrire : $h(s) = (Es)^2 \Rightarrow Es = \sqrt{h(s)}$

En sommant les différents termes, le résultat est

$$\begin{aligned} C_2(s) &= 1 + \frac{1}{2!} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 [D_+^2 h(s)] + \frac{1}{4!} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^4 [D_+^4 h^2(s)] \\ &\quad + \frac{1}{6!} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^6 [D_+^6 h^3(s)] + \dots + \frac{1}{n!} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^n [D_+^n h^{n-2}(s)] \\ &= \cos \left(\frac{D_+}{\hbar} \sqrt{h(s)} \right) \end{aligned} \quad (2.74)$$

nous calculons $\langle 2\frac{3}{2} \frac{-1}{2} | T | 2\frac{3}{2} \frac{-1}{2} \rangle$ dans l'équation (2.53) par même manière, on

trouve :

$$\left\langle 2\frac{3}{2} \frac{-1}{2} \middle| T \middle| 2\frac{3}{2} \frac{-1}{2} \right\rangle = \cos \left(\frac{D_-}{\hbar} \sqrt{h(s)} \right) \quad (2.75)$$

où

$$D_-^2 = \left[\int d\vec{y}_2 \varphi_{2\frac{3}{2} \frac{-1}{2}}(\vec{y}_2) \vec{y}_2 \varphi_{2\frac{3}{2} \frac{-1}{2}}^*(\vec{y}_2) \right] \left[\int d\vec{y}_1 \varphi_{2\frac{3}{2} \frac{-1}{2}}(\vec{y}_1) \vec{y}_1 \varphi_{2\frac{3}{2} \frac{-1}{2}}^*(\vec{y}_1) \right]$$

avec la même manière pour calculer la deuxième partie dans l'équation (2.53) on

obtient :

$$\begin{aligned} \left\langle 2\frac{1}{2}\frac{1}{2} \left| T \right| 2\frac{1}{2}\frac{1}{2} \right\rangle &= \cos\left(\frac{D_+}{\hbar}\sqrt{h(s)}\right) \text{ et,} \\ \left\langle 2\frac{1}{2}\frac{-1}{2} \left| T \right| 2\frac{1}{2}\frac{-1}{2} \right\rangle &= \cos\left(\frac{D_-}{\hbar}\sqrt{h(s)}\right) \end{aligned} \quad (2.76)$$

Regroupant maintenant les équations (2.61), (2.62), (2.74), (2.75) et (2.76) dans (2.53), nous obtenons la fonction du corrélation du moment dipolaire électrique (après avoir remis le facteur de phase en énergie $\epsilon_{2\frac{3}{2}}$ du niveau $2P_{\frac{3}{2}}$ pour le premier partie en énergie $\epsilon_{2\frac{1}{2}}$ du niveau $2P_{\frac{1}{2}}$ pour la deuxième partie) :

$$\begin{aligned} C(s) &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}s\epsilon_{1\frac{1}{2}}\right) \left[\begin{aligned} &\frac{1}{4} \left| \left\langle 2\frac{3}{2} \left| d^1 \right| 1\frac{1}{2} \right\rangle \right|^2 \exp\left(\Phi_e^1 s + \frac{i}{\hbar}\epsilon_{2\frac{3}{2}}s\right) \left\{ \begin{aligned} &2 + \cos\left(\frac{D_+}{\hbar}\sqrt{h(s)}\right) \\ &+ \cos\left(\frac{D_-}{\hbar}\sqrt{h(s)}\right) \end{aligned} \right\} \\ &+ \frac{1}{2} \left| \left\langle 2\frac{1}{2} \left| d^1 \right| 1\frac{1}{2} \right\rangle \right|^2 \exp\left(\Phi_e^2 s + \frac{i}{\hbar}\epsilon_{2\frac{1}{2}}s\right) \left\{ \begin{aligned} &\cos\left(\frac{D_+}{\hbar}\sqrt{h(s)}\right) \\ &+ \cos\left(\frac{D_-}{\hbar}\sqrt{h(s)}\right) \end{aligned} \right\} \end{aligned} \right] \\ &= \frac{1}{4} \left| \left\langle 2\frac{3}{2} \left| d^1 \right| 1\frac{1}{2} \right\rangle \right|^2 \exp\left(\Phi_e^1 s + \frac{i}{\hbar}\Delta\epsilon_1 s\right) \left\{ 2 + \cos\left(\frac{D_+}{\hbar}\sqrt{h(s)}\right) + \cos\left(\frac{D_-}{\hbar}\sqrt{h(s)}\right) \right\} \\ &\quad + \frac{1}{2} \left| \left\langle 2\frac{1}{2} \left| d^1 \right| 1\frac{1}{2} \right\rangle \right|^2 \exp\left(\Phi_e^2 s + \frac{i}{\hbar}\Delta\epsilon_2 s\right) \left\{ \cos\left(\frac{D_+}{\hbar}\sqrt{h(s)}\right) + \cos\left(\frac{D_-}{\hbar}\sqrt{h(s)}\right) \right\} \end{aligned} \quad (2.77)$$

où $\Delta\epsilon_1 = \epsilon_{2\frac{3}{2}} - \epsilon_{1\frac{1}{2}}$ et $\Delta\epsilon_2 = \epsilon_{2\frac{1}{2}} - \epsilon_{1\frac{1}{2}}$

Dans le cas dynamique, nous considérons que le champ électrique crée par les ions en mouvement dépend de s , et les électrons (perturbateurs électroniques) sont traités par l'approximation d'impact.

Après les même calculs que précédemment, on trouve la fonction d'auto-corrélation du moment dipolaire dans ce cas sous la forme :

$$\begin{aligned}
C(s) &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}s\epsilon_{1\frac{1}{2}}\right) \left[\begin{array}{l} \frac{1}{4} |\langle 2\frac{3}{2} | d^1 | 1\frac{1}{2} \rangle|^2 \exp\left(\Phi_e^1 s + \frac{i}{\hbar}\epsilon_{2\frac{3}{2}} s\right) \cdot \\ \left\{ 2 + \cos\left(\frac{D_+}{\hbar}\sqrt{h(s)}\right) + \cos\left(\frac{D_-}{\hbar}\sqrt{h(s)}\right) \right\} \\ + \frac{1}{2} |\langle 2\frac{1}{2} | d^1 | 1\frac{1}{2} \rangle|^2 \exp\left(\Phi_e^2 s + \frac{i}{\hbar}\epsilon_{2\frac{1}{2}} s\right) \\ \left\{ \cos\left(\frac{D_+}{\hbar}\sqrt{h(s)}\right) + \cos\left(\frac{D_-}{\hbar}\sqrt{h(s)}\right) \right\} \end{array} \right] \\
&= \frac{1}{4} \left| \left\langle 2\frac{3}{2} \middle| d^1 \middle| 1\frac{1}{2} \right\rangle \right|^2 \exp\left(\Phi_e^1 s + \frac{i}{\hbar} \Delta \epsilon_1 s\right) \cdot \left\{ 2 + \cos\left(\frac{D_+}{\hbar}\sqrt{h(s)}\right) + \cos\left(\frac{D_-}{\hbar}\sqrt{h(s)}\right) \right\} \\
&\quad + \frac{1}{2} \left| \left\langle 2\frac{1}{2} \middle| d^1 \middle| 1\frac{1}{2} \right\rangle \right|^2 \exp\left(\Phi_e^2 s + \frac{i}{\hbar} \Delta \epsilon_2 s\right) \left\{ \cos\left(\frac{D_+}{\hbar}\sqrt{h(s)}\right) + \cos\left(\frac{D_-}{\hbar}\sqrt{h(s)}\right) \right\}
\end{aligned} \tag{2.78}$$

avec

$$h(s) = \int_0^s ds \int_0^s ds' \vec{E}(s) \vec{E}(s') \tag{2.79}$$

A ce stade, nous avons calculé la fonction d'auto-corrélation du moment dipolaire électrique pour la raie de Lyman- α avec structure fine (l'effet de spin de l'électron lié à l'atome) dans les deux cas statique et dynamique, nous ferons le calcul de profil de raie au cinquième chapitre.

2.5 Références

- [1] L. Landau et E. Lifchitz, "Théorie quantique relativiste", première partie, MIR, Moscou (1972).
- [2] Stamm R, Talin B, Pollocck EL, Iglesias CA, Phys Rev A 1986, 34, 4144.
- [3] M. T. Meftah, "Contribution au formalisme de l'élargissement de raies dans les plasmas : Application au diagnostic de la raie de Pashen α de $He II$ ", thèse de Doctorat, Université de Provence, France (1996).
- [4] Chihi Is, Meftah M T, Kleinert H, J Plasma Phys (2004), 71(5) : 553.
- [5] Feynman R, Hibbs AR, "Quantum mechanics and path integrals ", New York : Mc Graw-Hill (1965).
- [6] A. Messiah, "Mécanique quantique", Tome 2, Dunod, Paris (1995).

Chapter 3

ELARGISSEMENT

ELECTRONIQUE NON

RELATIVISTE

3.1 Introduction

Depuis les années soixante l'étude théorique du profil des raies spectrales dans l'approximation des impacts a fait l'objet d'un grand nombre de recherches. la théorie classique et adiabatique de Lindholm [1], a été généralisée. Baranger dans 1958 [2,3], reprenant un article d'Anderson [4], a développé le formalisme quantique de base dans le cas des collisions inélastiques, ce qui a montré qu'on peut représenter la largeur et le déplacement de la raie émise entre les niveaux α et β à partir des éléments diagonaux $S_{\alpha\alpha}$ et $S_{\beta\beta}$, de la matrice de diffusion émetteur-perturbateurs. Pour les raies isolées, Baranger a montré que

la largeur s'exprime sous forme d'une somme de sections efficaces de collisions. Griem et al [5,6,7] ont fait avancer la théorie appliquée aux raies dégénérées. le calcul de l'opérateur de collisions électroniques pour ces raies isolées, a fait un grand pas lorsque Griem, Baranger, Kolb et Oertel (G, B, K,O) [8] et Sahal-Bréchet [9] ont utilisé avec succès les résultats théoriques de Baranger [3], en adoptant l'approximation semi-classique. Cependant les premiers auteurs n'ont tenu compte l'interaction dipolaire et n'ont pas distingué les atomes neutres des ions où les trajectoires étaient rectilignes. Les seconds ont de plus tenu compte de la trajectoire hyperbolique de l'électron perturbant l'ion émetteur, et ont montré que cet effet est très important aux faibles énergies, et que cela entraîne un accroissement remarquable de l'opérateur de collision. Ils ont montré aussi que la contribution du terme quadripolaire des collisions élastiques peut représenté jusqu'à de 25% de la largeur totale.

Des expériences tests ont été effectuées nouvellement par Glenzer et al [10], Perez et al [11] et Blagojevic et al [12], ont montré un désaccord avec la théorie proposé par (G, B, K,O), ces expériences ont porté sur les raies isolées pour $\Delta n = 0$ d'ions lithiomoïdes, qui sont très peu sensibles à l'élargissement Stark ionique [13, 14], c'est des bons candidats pour tester l'élargissement électronique.

Dans ce chapitre nous allons établir l'expression de l'opérateur de collisions électroniques dans le cas non relativiste.

Nous allons établir l'équation paramétrisation de la trajectoire non relativiste de mouvement, Ensuite nous allons développer des expressions pour l'opérateur de collisions électroniques dans le cadre de l'approximation dipolaire. Nous proposerons une nouvelle méthode qui permet des calculs rapides, tout en respectant l'unitarité de la matrice de

diffusion S . Cette dernière sera prise en compte par des paramètres d'impact minimum et maximum.

3.2 Les collisions

Dans le plasmas et le gaz, on peut considérer que toutes les particules du gaz interagissent entre elles par des forces dépendant de leurs positions, lorsque deux ou plusieurs particules se rapprochent accidentellement à des distances assez faibles pour que les énergies d'interaction, deviennent comparables aux énergies cinétiques, on dit qu'il y a un collision. Subséquemment les particules entrées en collision auront des trajectoires courbes, aussi longtemps qu'elles resteront à courte distance les unes des autres. Après la collision, elles reprendront des trajectoires quasi rectilignes. Compte tenu de la nature complexe des particules qu'on rencontre dans un gaz on est amené à distinguer deux types de collisions :

- Les collisions élastiques dans lesquelles les deux, trois,..particules en jeu ne changent pas les états d'énergie interne, mais il y a seulement une simple déviation de la trajectoire des particules, avec un transfert moyen d'énergie cinétique, et un échange de quantité de mouvement.

- Les collisions inélastiques qui sont au contraire celles dans lesquelles il y a changement d'état interne d'au moins une des particules (excitation, désexcitation), et même éventuellement de création ou de destruction de particules (ionisation, recombinaison, excitation, dissociation...).

3.3 Paramétrisation de la trajectoire

Nous avons utilisé la paramétrisation de Burgess [15] pour le cas attractif l'atome rayonnant est supposé immobile, le paramètre d'impact du perturbateur est ρ , Z_p est sa charge, m_p la masse réduite, v est la vitesse relative, $E = \frac{1}{2}m_p v^2$ est son énergie, $I_H = \frac{m_e e^4}{2\hbar^2}$ est le potentiel d'ionisation de l'hydrogène et $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$ est le rayon de la première orbite de Bohr.

La trajectoire est rectiligne si l'atome rayonnant est neutre, sinon c'est une hyperbole d'excentricité ε et demi-grand axe ρ_0 :

$$\rho_0 = \frac{Z_p Z}{m_p v^2} \quad (3.1)$$

Z est la charge de l'ion rayonnant.

L'excentricité est reliée à l'angle de déflexion θ et au paramètre d'impact par les relations suivantes :

$$\varepsilon = \frac{1}{\sin(\frac{\theta}{2})} = \sqrt{1 + \frac{\rho^2}{\rho_0^2}} \quad (3.2)$$

la formule de la trajectoire peut s'écrire sous la forme [16] :

$$\frac{\rho^2}{r\rho_0} = 1 + \varepsilon \cos(\theta) \quad (3.3)$$

L'équation (3.3) est l'équation d'une section conique ayant son foyer à l'origine des coordonnées.

pour un champ d'attraction, il y a trois possibilités pour les valeurs de l'excentricité

ε :

- $\varepsilon < 1$, lorsque $E < 0$ c'est-à-dire que le mouvement est fini, donc l'orbite est une ellipse.

- pour $E = 0 \Rightarrow \varepsilon = 1$, la trajectoire est une parabole

- lorsque $E > 0$, le mouvement est infini, $\varepsilon > 1$ donc la trajectoire est une hyperbole qui contourne le centre du champ (foyer), les expressions des coordonnées du perturbateur dans le cas attractif [15]:

$$x = \rho_0 (\varepsilon - \cosh(u)) \quad (3.4)$$

$$y = \rho_0 \sqrt{\varepsilon^2 - 1} \sinh(u)$$

$$r = \rho_0 (\varepsilon \cosh(u) - 1)$$

et le temps :

$$t = \frac{\rho}{v} (\varepsilon \sinh(u) - u) \quad (3.5)$$

$\rho(\varepsilon - 1)$ est la distance de plus courte approche.

3.4 Section efficace

Considérons deux jets monocinétiques de particules $P(i)$ et $Q(i)$ se croisant dans l'espace où i et j sans leurs états internes d'énergie. Soit n_1, n_2 leurs densités numériques et \vec{v}_1, \vec{v}_2 leurs vitesses dirigées. Les deux faisceaux définissent dans l'espace une zone de collision de volume dV . Afin de simplifier la description physique de la collision, nous supposons que chaque jet est monocinétique c'est-à-dire les particules ont toutes la même

vitesse dirigée et que les densités, n_1 et n_2 sont suffisamment faibles pour pouvoir négliger les interactions au sein d'un même faisceau. On note d^3N le nombre de particules détectées qui est proportionnel à chacune des variables suivantes : dV , n_1, n_2 , et dt la durée de l'interaction, aussi la vitesse relative:

$$g = |\vec{v}_1 - \vec{v}_2| \quad (3.6)$$

et l'angle solide d'observation $d\Omega$ qui s'écrit [17] :

$$d\Omega = \frac{dS_D}{r_D^2} = \sin(\varphi) d\varphi d\theta \quad (3.7)$$

avec dS_D la surface d'entrée du détecteur à une distance r_D de la région dV, θ et φ les angles de détection. On peut introduire un facteur de proportionnalité appelé section efficace différentielle et notée $\sigma(g, \theta, \varphi)$:

$$\sigma(g, \theta, \varphi) = \frac{d^3N}{n_1 n_2 g dt dV d\Omega} \quad (3.8)$$

Cette quantité a la dimension d'une surface et dépend de g , ainsi que θ, φ les angles de détection. On peut utiliser le théorème du mouvement relatif en remplaçant le système des deux jets monocinétiques croisés par un faisceau de particules $P(i)$, de surface S_1 , densité n_1 , vitesse g , traversant un gaz de particules $Q(j)$ immobiles, l'expression (3.8) s'écrit encore :

$$\sigma(g, \theta, \varphi) = \frac{d^3N}{dN_1 dN_2 d\Omega} S_1 \quad (3.9)$$

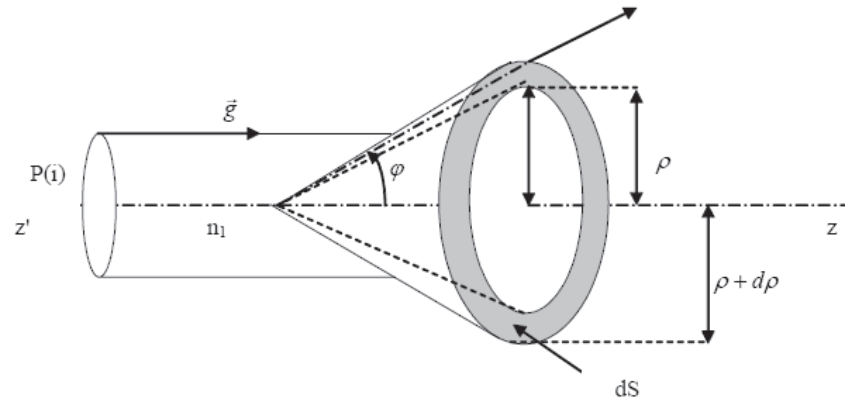


Figure 3.1: la collision dans le cas où les particules détectées suivant l'angle φ

où dN_1 et dN_2 sont les particules se trouvant dans le volume dV pendant le temps dt . On peut encore déterminer ce nombre en notant que les particules détectées suivant l'angle φ sont celles traversant la couronne de surface $dS = 2\pi\rho d\rho$ où ρ représente le paramètre d'impact (figure3-1)

En tenant compte de cette nouvelle approche, la section efficace différentielle peut s'écrire :

$$\sigma(g, \theta) = \frac{P_{ijkl}(g, \rho)\rho d\rho}{\sin(\varphi) d\varphi} \quad (3.10)$$

$P_{ij,kl}(g, \rho)$ représente la probabilité de transition entre états internes i, j et k, l . Pour les collisions élastiques $P_{ij,kl}(g, \rho) = 1$.

3.5 Elargissement électronique dans le cas non-relativiste

La fonction d'autocorrélation du moment dipolaire s'écrit sous la forme suivante :

$$C(s) = \sum_{\alpha\beta\beta'\alpha'} \rho_{\alpha} \vec{d}_{\alpha\beta} \{ \langle \beta' | T_b(s) | \beta \rangle^* \langle \alpha' | T_a(s) | \alpha \rangle \}_{\text{moy}} \vec{d}_{\alpha'\beta'}^* \quad (3.11)$$

En supposant que les états initiaux de l'émetteur qui contribuent à une raie spectrale sont également probables, on peut omettre la matrice densité dans l'équation (3.11). Nous allons calculer l'effet de la composante électronique en utilisant l'approximation d'impact, qui suppose que le temps de collision est très petit devant le temps d'intérêt. On utilise pour ce calcul la représentation d'interaction de l'opérateur d'évolution :

$$U(s, 0) = \exp\left(\frac{iH_E s}{\hbar}\right) T(s, 0) \quad (3.12)$$

H_E représente l'Hamiltonien de l'émetteur non perturbé $U(s, 0)$ doit satisfaire à son tour à l'équation de Schrödinger, c'est -à-dire avec le potentiel V_{cl} donné par la formule (2.16) :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dU(s)}{ds} &= \exp\left(\frac{iH_E s}{\hbar}\right) V_{cl} \exp\left(-\frac{iH_E s}{\hbar}\right) U(s) \\ &= V_I(s) U(s) \end{aligned} \quad (3.13)$$

avec:

$$V_I(s) = \exp\left(\frac{iH_E s}{\hbar}\right) V_{cl} \exp\left(-\frac{iH_E s}{\hbar}\right) \quad (3.14)$$

la solution de l'équation (3.13) peut être écrite sous forme itérative :

$$U(s) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^s V'(s_1) ds_1 + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^s V'(s_1) ds_1 \int_0^{s_1} V'(s_2) ds_2 + \dots \quad (3.15)$$

La fonction d'auto-corrélation s'écrit dans l'espace de Liouville sous la forme (Annexe A),

$$C(s) = \exp \left[\frac{i}{\hbar} (E_\alpha - E_\beta) s \right] \left[\vec{d}_{\alpha\beta} \left\langle \left\langle \alpha\beta \left| \{U_b(s)U_a^*(s)\}_{moy} \right| \alpha'\beta' \right\rangle \right\rangle \vec{d}_{\alpha\beta}^* \right] \quad (3.16)$$

Pour calculer la moyenne, on considère son changement dans un intervalle de temps Δs La variation de la quantité concernée :

$$\begin{aligned} & \Delta \{U_b(s, 0) U_a^*(s, 0)\}_{moy} \quad (3.17) \\ &= \{U_b(s + \Delta s, 0) U_a^*(s + \Delta s, 0) - U_b(s, 0) U_a^*(s, 0)\} \\ &= \{[U_b(s + \Delta s, s) U_a^*(s + \Delta s, s) - 1] U_b(s, 0) U_a^*(s, 0)\} \end{aligned}$$

on a omis dans le terme de droite la notation "moy" qui dans la suite sera implicite pour le symbole $\{\dots\}$.

Pour évaluer la quantité se trouvant entre les crochets dans l'équation (3.17) utilisons :

$$\begin{aligned}
U(s + \Delta s, s) - 1 &= \frac{i}{\hbar} \int_s^{s+\Delta s} V'(s'_1) ds'_1 + \\
&\left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_s^{s+\Delta s} V'(s'_1) ds'_1 \int_s^{s'_1} V'(s'_2) ds'_2 + \dots
\end{aligned} \tag{3.18}$$

En utilisant le changement de variables $s_1 = s'_1 - s$ et $s_2 = s'_2 - s$ et la définition (3.13) de $V'(s)$, on aboutit à :

$$\{U(s + \Delta s)\} = \left\{ 1 - \exp\left(+\frac{iH_E s}{\hbar}\right) \left[\begin{array}{l} \frac{i}{\hbar} \int_0^{\Delta s} V'(s_1) ds_1 - \\ \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^{\Delta s} V'(s_1) ds_1 \cdot \\ \int_0^{\Delta s_1} V'(s_2) ds_2 + \dots \end{array} \right] \cdot \exp\left(-\frac{iH_E s}{\hbar}\right) \right\} \tag{3.19}$$

Si on choisit l'intervalle de temps suffisamment grand pour que dans le produit de facteurs de l'équation (3.17) les deux termes soient statistiquement indépendants, on peut remplacer cette équation aux différences par une équation différentielle

$$\begin{aligned}
\frac{d}{ds} \{U_b(s, 0) U_a^*(s, 0)\} &= \exp\left(\frac{i(H_b - H_a) s}{\hbar}\right) \Phi_{ab} \\
&\exp\left(-\frac{i(H_b - H_a) s}{\hbar}\right) \{U_b(s, 0) U_a^*(s, 0)\}
\end{aligned} \tag{3.20}$$

où H_a et H_b sont les projections de H_E sur les sous espaces supérieur et inférieur de la transition. Φ_{ab} est l'opérateur de collisions électroniques, indépendant du temps et du microchamp ionique. En comparant l'équation (3.17) et (3.20), et employant l'équation (3.19) et son conjugué complexe, il vient :

$$(\Delta s) \Phi_{ab} = \left\{ \begin{array}{l} -\frac{i}{\hbar} \int_0^{\Delta s} [V'_b(s_1) - V'^*_a(s_1)] ds_1 + \\ \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^{\Delta s} V'_b(s_1) ds_1 \int_0^{s_1} V'_b(s_2) ds_2 \\ + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^{\Delta s} V'^*_a(s_1) ds_1 \int_0^{s_1} V'^*_a(s_2) ds_2 \\ - \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^{\Delta s} V'_b(s_1) ds_1 \int_0^{\Delta s_1} V'^*_a(s_2) ds_2 \end{array} \right\} \quad (3.21)$$

Dans cette expression Δs a été choisi plus grand que le temps de collision, mais beaucoup plus court que le temps de variation caractéristique de U . On peut en tirer deux conséquences. Puisque les collisions individuelles sont indépendantes, la moyenne dans l'équation (3.21) se réduit à un produit par le nombre de collisions se produisant pendant le temps Δs [8]. Ce nombre de collisions avec un paramètre d'impact ρ et vitesse v s'écrit sous la forme :

$$N_e \Delta s v dv f(v) 2\pi \rho d\rho \quad (3.22)$$

où N_e est la densité électronique.

Si les collisions complètes dans l'intervalle de temps envisagé, la deuxième conséquence découle du choix d'un temps de collision très court qui permet de poser $s = -\infty$ et $s + \Delta s = +\infty$ sans changer sensiblement l'intégrale dans l'expression (3.18).

Cette hypothèse permet d'écrire l'opérateur de collision sous la forme suivante :

$$\Phi_{ab} = N_e \int_0^\infty v f(v) dv \int_0^\infty 2\pi \rho d\rho. \quad (3.23)$$

$$\left[\begin{array}{l} -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^\infty [V'_b(s_1) - V'_a(s_1)] ds_1 + \\ \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{-\infty}^\infty V'_b(s_1) ds_1 \int_{-\infty}^{s_1} V'_b(s_2) ds_2 \\ + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^{\Delta s} V'_a(s_1) ds_1 \int_0^{s_1} V'_a(s_2) ds_2 \\ - \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^{\Delta s} V'_b(s_1) ds_1 \int_0^{\Delta s_1} V'_a(s_2) ds_2 \end{array} \right]_{ang}$$

où $[\dots]_{ang}$ est la moyenne portée sur les angles entre $\vec{\rho}$, \vec{v} et le dipôle de l'émetteur,

$U(+\infty, -\infty)$ peut être écrit sous une autre forme :

$$U(+\infty, -\infty) = \exp\left(+\frac{iH_E s}{\hbar}\right) S \exp\left(-\frac{iH_E s}{\hbar}\right) \quad (3.24)$$

où S représente la matrice de diffusion. Avec l'hypothèse de collisions complètes,

la solution appropriée de l'équation intégral-différentielle (3.20) est :

$$\{U_b(s, 0) U_a^*(s, 0)\} = \exp\left(\frac{i(H_b - H_a) s}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{i(H_b - H_a) s}{\hbar} + \Phi_{abs}\right) \quad (3.25)$$

avec l'expression précédente la fonction d'auto-corrélation du moment dipolaire électrique devient :

$$C(s) = \vec{d}_{\alpha\beta} \left\langle \left\langle \alpha\beta \left| \exp\left(-\frac{i(H_b - H_a) s}{\hbar} + \Phi_{abs}\right) \right| \alpha' \beta' \right\rangle \right\rangle \vec{d}_{\alpha'\beta'}^* \quad (3.26)$$

En effectuant la transformée de Fourier, on obtient l'expression suivante pour le profil de raie :

$$F(\omega) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \left\{ \vec{d}_{\alpha\beta} \left\langle \left\langle \alpha\beta \left| \exp \left(i\omega - \frac{i(H_b - H_a)s}{\hbar} + \Phi_{ab}s \right)^{-1} \right| \alpha'\beta' \right\rangle \right\rangle \vec{d}_{\alpha'\beta'}^* \right\} \quad (3.27)$$

Cette formule est valide toutes les fois que Δs peut être choisi comme indiqué ci-dessus, si la longueur d'onde de Broglie des perturbateurs est beaucoup plus petite que les paramètres appropriés d'impact, et si les énergies cinétiques des perturbateurs sont grandes comparées à $\hbar \Delta \omega$ qui correspond à la largeur de raie. Il faut noter que l'hypothèse de collisions complètes (qui est implicite dans l'approximation d'impact) est valable au centre de la raie. Cependant dans les ailes de raies le temps de collisions peut devenir appréciable relativement au temps d'intérêt qui est de l'ordre de $\frac{1}{\Delta \omega}$.

En tenant compte de la propriété suivante :

$$\begin{aligned} \langle \langle \alpha\beta | V_a^*(s_1) V_a^*(s_2) | \alpha'\beta' \rangle \rangle &= \langle \alpha | V_a^*(s_1) | \alpha_J \rangle \langle \alpha_J | V_a^*(s_2) | \alpha' \rangle \delta_{\beta\beta'} \quad (3.28) \\ &= \langle \alpha' | V_a'(s_2) | \alpha_J \rangle \langle \alpha_J | V_a'(s_1) | \alpha \rangle \delta_{\beta\beta'} \end{aligned}$$

On peut écrire les éléments de matrice de l'opérateur de collision de la façon suivante [18] :

$$\begin{aligned} \langle \langle \alpha\beta | \Phi_{ab} | \alpha'\beta' \rangle \rangle &= -\frac{N_e}{\hbar^2} \int v f(v) d\vec{v} \int \rho \delta_{0, \vec{\rho} \cdot \vec{v}} d\vec{\rho} \cdot \\ &\left[\int_{-\infty}^{\infty} ds_1 \int_{-\infty}^{s_1} ds_2 \left(\langle \alpha' | V'(s_2) | \alpha_J \rangle \langle \alpha_J | V'(s_1) | \alpha \rangle \delta_{\beta\beta'} + \right. \right. \\ &\quad \left. \langle \beta | V'(s_1) | \beta_J \rangle \langle \beta_J | V'(s_2) | \beta' \rangle \delta_{\alpha\alpha'} \right) \\ &\quad \left. - \int_{-\infty}^{\infty} ds_1 \int_{-\infty}^{\infty} ds \langle \beta | V'(s_1) | \beta' \rangle \langle \alpha' | V'(s_2) | \alpha \rangle \right]_{ang} \quad (3.29) \end{aligned}$$

où $\delta_{0, \vec{\rho} \cdot \vec{v}}$ assure que le vecteur du paramètre d'impact $\vec{\rho}$, et le vecteur de la vitesse \vec{v} sont perpendiculaires. $V'(s)$ est la représentation d'interaction de $V_d(s)$. Notons que le résultat de l'intégration du terme en $\frac{i}{\hbar}$ représenté dans l'équation (3.23) est nul, d'autre part, il suffit de calculer par exemple le premier terme, puisque les trois termes de l'équation précédente ont la même forme, on peut définir la quantité Φ_d :

$$\Phi_d = -\frac{N_e}{\hbar^2} \int v f(v) d\vec{v} \int \rho \delta_{0, \vec{\rho} \cdot \vec{v}} d\vec{\rho} \cdot \left[\int_{-\infty}^{\infty} ds_1 \int_{-\infty}^{s_1} ds_2 (\langle \alpha' | V'(s_2) | \alpha_J \rangle \langle \alpha_J | V'(s_1) | \alpha \rangle \delta_{\beta\beta'}) \right]_{ang} \quad (3.30)$$

Les éléments de matrice figurant dans l'équation précédente sont donnés par :

$$\langle \alpha_J | V'(s_1) | \alpha \rangle = er_{\alpha'' \alpha, m} \cdot E_m(s_1) \exp(i s_1 \omega_{\alpha \alpha''}) \quad (3.31)$$

$$\langle \alpha' | V'(s_2) | \alpha_J \rangle = er_{\alpha' \alpha'', m'} \cdot E_{m'}(s_2) \exp(i s_2 \omega_{\alpha'' \alpha'}) \quad (3.32)$$

où er est l'opérateur moment dipolaire de l'émetteur, $\omega_{\alpha \alpha'}$ est la fréquence de Bohr pour la différence d'énergie des états α , α' , et m , m' traduisent les produits scalaires entre \vec{r} et le micro-champ électrique \vec{E} .

En introduisant les équations (3.31) et (3.32) dans l'expression de Φ_d , nous obtenons l'expression de Φ_d :

$$\begin{aligned} \Phi_d(\omega_{\alpha\alpha''}, \omega_{\alpha''\alpha'}) &= -\frac{2\pi N_e e^2}{3\hbar^2} \int_0^\infty v f(v) dv \int_{\rho_{\min}}^{\rho_{\max}} \rho d\rho \\ &\int_{-\infty}^\infty ds_1 \int_{-\infty}^{s_1} ds_2 \exp(i s_1 \omega_{\alpha\alpha''} + i s_2 \omega_{\alpha''\alpha'}) \left[\vec{E}(s_1) \vec{E}(s_2) \right]_{ang} \end{aligned} \quad (3.33)$$

D'après la formule (3.33) il est clair qu'on peut déduire le second terme de l'équation (3.29) qui est identique à mais le troisième $\Phi_d(\omega_{\alpha\alpha''}, \omega_{\alpha''\alpha'})$ terme de l'équation (3.29) mène à un terme légèrement différent Φ_{int} qui s'écrit :

$$\begin{aligned} \Phi_{int}(\omega_{\alpha\alpha'}, \omega_{\beta'\beta}) &= -\frac{2\pi N_e e^2}{3\hbar^2} \int_0^\infty v f(v) dv \int_{\rho_{\min}}^{\rho_{\max}} \rho d\rho \\ &\int_{-\infty}^\infty ds_1 \int_{-\infty}^{s_1} ds_2 \exp(i s_1 \omega_{\alpha\alpha'} + i s_2 \omega_{\beta'\beta}) \left[\vec{E}(s_1) \vec{E}(s_2) \right]_{ang} \end{aligned} \quad (3.34)$$

ρ_{\min} et ρ_{\max} sont les limites d'intégration sur le paramètre d'impact. On peut écrire chaque élément de matrice de l'opérateur de collision en fonction du terme direct Φ_d et le terme d'interférence Φ_{int} c'est -à- dire :

$$\begin{aligned} \langle\langle \alpha\beta | \Phi_{ab} | \alpha'\beta' \rangle\rangle &= \sum_{\alpha''} \vec{r}_{\alpha\alpha''} \vec{r}_{\alpha''\alpha'} \Phi_d(\omega_{\alpha\alpha''}, \omega_{\alpha''\alpha'}) \\ &+ \sum_{\beta''} \vec{r}_{\beta'\beta''} \vec{r}_{\beta''\beta} \Phi_d(\omega_{\beta'\beta''}, \omega_{\beta''\beta}) \\ &- \vec{r}_{\alpha\alpha'} \vec{r}_{\beta'\beta} \Phi_{int}(\omega_{\alpha\alpha'}, \omega_{\beta'\beta}) \end{aligned} \quad (3.35)$$

De cette façon l'évaluation de la contribution de l'opérateur de collision électronique à l'élargissement Stark se ramène à celle de Φ_d (terme direct) et Φ_{int} (terme d'interférence). L'évaluation de Φ_d a été faite dans le cas des émetteurs ioniques, dans la

limite de non-écranage, usant des chemins hyperboliques pour les électrons perturbateurs par Sahal - Bréchet [19], et étendant les résultats d'Alder et al [20] pour une interaction répulsive au cas attractif, N.Feautrier [21] a ramené les expressions de Φ_d , Φ_{int} aux intégrales sur les vitesses. Les meilleures évaluations ont été données par Poquérusse [22], ensuite par Sahal-Bréchet et Dimitrijevic [23]. Dans l'annexe B, nous présentons l'intégration angulaire de l'expression de Φ_d , dans le cas d'un émetteur ionique la trajectoire est une hyperbole d'excentricité ε et de demi-grand axe ρ_0 . On trouve que le terme d'interférence pour les raies isolées $\Phi_{int}(\omega_1 = -\omega_2)$ s'écrit comme [19] :

$$\begin{aligned} \Phi_{int}(\zeta, -\zeta) = & -\frac{2\pi N_e e^4}{3\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} \int_0^\infty \frac{f(v)}{v} dv \int_{\rho_{\min}}^{\rho_{\max}} \frac{\rho}{\rho_0^2} d\rho. \\ & \int_{-\infty}^\infty du_1 \exp(i\zeta [\varepsilon \sinh(u_1) - u_1]) \cdot \int_{-\infty}^\infty du_2 \exp(-i\zeta [\varepsilon \sinh(u_2) - u_2]) \\ & \times \frac{(\varepsilon - \cosh(u_1))(\varepsilon - \cosh(u_2)) + (\varepsilon^2 - 1) \sinh(u_1) \sinh(u_2)}{(\varepsilon \cosh(u_1) - 1)^2 (\varepsilon \cosh(u_2) - 1)^2} \end{aligned} \quad (3.36)$$

où ζ le paramètre d'inélasticité $\zeta = \frac{\omega_1 \rho_0}{v}$.

D'après la relation (3.2), on peut passer de l'intégration sur ρ à l'intégration sur ε , et remplacer la fonction de distribution de Maxwell de la vitesse

$$f(v) = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi K_B T} \right)^{3/2} v^2 \exp\left(\frac{-mv^2}{2K_B T} \right)$$

On obtient:

$$\begin{aligned} \Phi_{int}(\zeta, -\zeta) &= -\frac{2\pi N_e e^4}{3\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{m}{2\pi K_B T} \right)^{3/2} \int_0^\infty v dv. \\ &\exp\left(\frac{-mv^2}{2K_B T e}\right) \int_{\epsilon_{\min}(v)}^{\epsilon_{\max}(v)} \frac{d\epsilon}{\epsilon} \cdot \left[\begin{array}{l} G_1(\zeta, \epsilon) G_1(-\zeta, \epsilon) + \\ \frac{\epsilon^2 - 1}{\epsilon^2} G_2(\zeta, \epsilon) G_2(-\zeta, \epsilon) \end{array} \right] \end{aligned} \quad (3.37)$$

où les deux fonction $G_1(\zeta, \epsilon)$, $G_2(\zeta, \epsilon)$ sont [24] :

$$\begin{aligned} G_1(\zeta, \epsilon) &= \int_{-\infty}^{\infty} du \frac{\left(1 - \frac{\cosh(u)}{\epsilon}\right) \exp(i\zeta [\epsilon \sinh(u) - u])}{(\cosh(u) - \frac{1}{\epsilon})^2} \\ &= 2|\zeta|\epsilon \exp\left(\frac{|\zeta|\pi}{2}\right) \frac{dK_{i\zeta}(|\zeta|\epsilon)}{d(|\zeta|\epsilon)} \end{aligned} \quad (3.38)$$

$$\begin{aligned} G_2(\zeta, \epsilon) &= \int_{-\infty}^{\infty} du \sinh(u) \frac{\exp(i\zeta [\epsilon \sinh(u) - u])}{(\cosh(u) - \frac{1}{\epsilon})^2} \\ &= 2i\zeta\epsilon \exp\left(\frac{|\zeta|\pi}{2}\right) K_{i\zeta}(|\zeta|\epsilon) \end{aligned} \quad (3.39)$$

où K est la fonction de Bessel modifiée d'argument imaginaire.

En injectant (3.38) et (3.39) dans (3.37), l'intégration sur ϵ donne l'expression du terme Φ_{int} sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \Phi_{int}(\zeta, -\zeta) &= -\frac{8\pi N_e e^4}{3\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{m}{2\pi K_B T_e} \right)^{3/2} \int_0^\infty dv v \\ &e\left(-\frac{mv^2}{2K_B T_e}\right) |\zeta| \exp(\pi|\zeta|) \times \left[\begin{array}{l} \epsilon_{\max} K_{i\zeta}(|\zeta|\epsilon_{\max}) K'_{i\zeta}(|\zeta|\epsilon_{\max}) \\ -\epsilon_{\min} K_{i\zeta}(|\zeta|\epsilon_{\min}) K'_{i\zeta}(|\zeta|\epsilon_{\min}) \end{array} \right] \end{aligned} \quad (3.40)$$

Pour les raies isolées le terme direct est égal à :

$$\operatorname{Re} \Phi_d = \frac{1}{2} \operatorname{Re} \Phi_{int} \quad (3.41)$$

d'où :

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} (\Phi_d (\zeta, -\zeta)) &= -\frac{4\pi N_e e^4}{3\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{m}{2\pi K_B T_e} \right)^{3/2} \operatorname{Re} \left(\int_0^\infty dvv. \right. \\ &\quad \left. e^{\left(-\frac{mv^2}{2K_B T_e}\right)} |\zeta| \exp(\pi |\zeta|) \times \begin{bmatrix} \varepsilon_{\max} K_{i\zeta} (|\zeta| \varepsilon_{\max}) K'_{i\zeta} (|\zeta| \varepsilon_{\max}) \\ -\varepsilon_{\min} K_{i\zeta} (|\zeta| \varepsilon_{\min}) K'_{i\zeta} (|\zeta| \varepsilon_{\min}) \end{bmatrix} \right) \end{aligned} \quad (3.42)$$

Pour $\omega_1 = 0$ et d'après l'expression (3.37) il vient :

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \Phi_d (0) &= -\frac{8\pi N_e e^4}{3\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{m}{2\pi K_B T_e} \right)^{3/2} \operatorname{Re} \left(\int_0^\infty dvv. \right. \\ &\quad \left. \exp\left(-\frac{mv^2}{2K_B T_e}\right) \ln\left(\frac{\varepsilon_{\max}}{\varepsilon_{\min}}\right) \right) \end{aligned} \quad (3.43)$$

Le plus difficile, généralement est le choix de ρ_{max} , on devrait normalement employer la longueur de Debye λ_D , puisque pour la plus grande distance de champ de Coulomb produit par un électron est protégé par d'autres électrons. Une analyse plus soignée rapporte une coupure équivalente à $\rho_{max} = 1.1\lambda_D$ [6,7]. D'autre part, S. Alexiou exprime la valeur $\rho_{max} = 0.68\lambda_D$ [13]. On peut aussi choisir $\rho_{max} = \lambda_D$. Le paramètre d'impact minimum ρ_{min} est généralement déterminé en imposant le maintien de l'unitarité de la matrice de diffusion S . C'est la condition de validité de la théorie de perturbation au second ordre exprimé dans l'équation (3.29). En employant la condition [25] :

$$\frac{1}{\hbar^2} \left\{ \sum_{\alpha'} \int_{-\infty}^{\infty} V'_{\alpha\alpha'}(s_1) ds_1 \int_{-\infty}^{s_1} V'_{\alpha'\alpha}(s_2) ds_2 + \sum_{\beta'} \int_{-\infty}^{\infty} V'_{\beta\beta'}(s_1) ds_1 \int_{-\infty}^{s_1} V'_{\beta'\beta}(s_2) ds_2 \right\} \leq u \quad (3.44)$$

où $\{...\}$ signifie une moyenne angulaire, u est un nombre inférieur ou égal à 1, la condition $u = 1$ est suffisant pour préserver l'unitarité, mais pour garder le paramètre de petit développement, la valeur $u = 0.5$ est employée par Sahal-Bréchet [19].

En utilisant la fonction $A(\zeta, \varepsilon)$ calculée par Sahal-Bréchet [19] pour laquelle des expressions analytiques ont été récemment données par Alexiou et Maron [14]. Spécifiquement, pour les raies isolées, ceci signifie résoudre l'équation [26] :

$$\left\{ \sum_{\alpha'} \frac{r_{\alpha\alpha'}^2}{2J_{\alpha} + 1} A[\zeta(v, \omega_{\alpha\alpha'}), \varepsilon(\rho_{\min}(v), v)] + \sum_{\beta'} \frac{r_{\beta\beta'}^2}{2J_{\beta} + 1} A[\zeta(v, \omega_{\beta\beta'}), \varepsilon(\rho_{\min}(v), v)] \right\} = \left(\sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\hbar Z_{em} \varepsilon(\rho_{\min}(v), v)}{mv} \right)^2 \quad (3.45)$$

avec :

$$A(\zeta, \varepsilon) = \zeta^2 e^{\pi\zeta} \left[|\varepsilon K'_{i\zeta}(\zeta\varepsilon)|^2 + (\varepsilon^2 - 1) |K_{i\zeta}(\zeta\varepsilon)|^2 \right]. \quad (3.46)$$

Ainsi, on espère que la théorie de perturbation est valable pour $\rho > \rho_{\min}(v)$ et que cette région donne la contribution dominante, de sorte qu'on peut négliger $\rho < \rho_{\min}(v)$ la contribution forte. Le problème posé dans la littérature sur la théorie d'impact est la détermination de ρ_{\min} . L'attraction Coulombienne de l'électron perturbateur par le noyau fournit une coupure automatique à la borne inférieure des paramètres d'impact. Ceci est

dû au renversement du champ électrique ressenti par l'émetteur chargé lors du passage d'un électron sur une trajectoire hyperbolique (les directrices font un angle très fermé). L'effet du champ à l'ordre le plus bas est fortement réduit et l'unitarité de la matrice S est maintenue, ce qui semble autoriser une valeur nulle de ρ_{min} [27]. On peut utiliser une estimation plus grossière qui consiste à introduire le rayon de Weisskopf ρ_W de la transition qui est défini en écrivant la condition de maintien de l'unitarité d'un élément typique de la matrice $(S(\rho) - 1)$:

$$\{ \langle \alpha | S(\rho_W) - 1 | \alpha \rangle \} \approx 1 \quad (3.47)$$

Ce qui donne pour le rayon de Weisskopf :

$$\rho_W \approx \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{\hbar (n_a^2 - n_b^2)}{m (Z + 1) v} \quad (3.48)$$

D'autre part, une condition invoquée et généralement plus restrictive, et que ρ_{min} doit rester plus grand que l'extension de la fonction d'onde de l'émetteur. En regroupant cette dernière condition avec la condition (3.47) il vient.:

$$\rho_{min} = \max \left[(n_a^2 - n_b^2) \frac{a_0}{Z + 1}, \frac{\hbar (n_a^2 - n_b^2)}{m (Z + 1) v} \right] \quad (3.49)$$

où a_0 est le rayon de Bohr.

3.6 Références

- [1] E. Lindholm, Ark. MAT. Astron. Fysik 28B, 3(1941)
- [2] M. Baranger, Phys. Rev. 111, 481 (1958).
- [3] M. Baranger, Phys. Rev. 112, 855 (1958).
- [4] P. W. Anderson, Phys. Rev. 76, 647 (1949).
- [5] H. R. Griem, A. Kolb, et Y. Shen, Phys. Rev. 116, (1959).
- [6] H.R. Griem ;" Plasma Spectroscopy ", McGraw-Hill, New York (1964) ;
- [7] H. R. Griem,"Spectral line broadening by plasmas ", Academic Press.
Inc. New York (1974).
- [8] H. R. Griem, M. Baranger, A.C. Kolb, et G. Oertel, Phys.Rev. 125,
177 (1962).
- [9] S. Sahal-Bréchet, Astron. Astrophys. 2, 322 (1969).
- [10] S. Glenzer, N. I. Uzelac, et H. J. Kunze, Phys. Rev. A45,
8795 (1992).
- [11] C. Perez et al, Phys. Rev. E47, 756 (1993).
- [12] B. Blagojevic et al., Phys. Rev. E50, 2986 (1994).
- [13] S. Alexiou, Phys.Rev. A49, 106 (1994).
- [14] S. Alexiou, J.Q.S.R.T. 53, 109 (1995).
- [15] A. Burgess, "Proceedings of the Symposuim on atomic collision processes in
plasma", Culham Laboratory (1964).
- [16] I. P. Shkarofsky, T. w. Johnston, M. P. Bachynski ,"The particle kinetics
of plasmas", Addison-Wesley Publishing Company, Inc, Montreal.

- Canada (1966).
- [17] B.Held, "physique des plasmas froids", ed. Masson, Paris (1994).
- [18] H. R. Griem, K. Y. Shen, Rev. Mod. Phys. 122, 1490 (1961).
- [19] S. Sahal-Bréchet, Astron. Astrophys. 1, 91 (1969).
- [20] K. Alder, A. Bohr, T. Huss, B. Mottelson, et A. Winther, Rev. Mod Phys. 28, 432 (1956).
- [21] N. Feautrier, Ann. d'Astron. 31, 305 (1968).
- [22] A. Poquérusse, Phys.Lett. 59A, 438 (1977).
- [23] M. S. Dimitrijevic et S. Sahal-Bréchet, J.Q.S.R.T. 48, 349 (1990).
- [24] A. Poquérusse, et S. Alexiou, Pergamon.61, 209(1999).
- [25] A. Poquérusse, S. Alexiou, et E.Leboucher-Dalimier, Pergamon.56, 797 (1996).
- [26] A. Poquérusse, et S. Alexiou, Pergamon.62, 389(1999).
- [27] M.T. Meftah , "Contribution au formalisme de l'élargissement de raies dans les plasma : Application au diagnostic de la raie de Paschen α de *He II*", thèse de doctorat, université de Provence, France (1996).

Chapter 4

ELARGISSEMENT

ELECTRONIQUE RELATIVISTE

4.1 Introduction

Nous allons établir l'expression de l'opérateur de collision électronique en tenant compte du mouvement relativiste des électrons libres dans le plasma. Les calculs sont développés dans le cadre de la théorie semi-classique où l'interaction mise en jeu entre l'ion émetteur et l'environnement électronique est de type dipolaire. L'effet moyen de cet environnement est calculé selon la distribution de Maxwell des vitesses des électrons libres. Comme le calcul de l'expression de l'opérateur de collision électronique est trop compliqué, nous nous sommes limités pour son calcul à l'approximation d'ordre zéro de l'excentricité relativiste, et ce pour toute la valeur de la séparation d'énergie ω . Par contre, nous avons pu calculer l'opérateur de collision, en négligeant la structure fine de l'émetteur c'est-à-dire

pour $\omega = 0$ sans faire d'approximation sur le calcul de l'excentricité relativiste.

4.2 Mouvement des électrons relativistes dans le plasma

Pour traiter classiquement la collision électron-ion, on considère un électron se déplaçant dans le champ d'un ion hydrogénoïde dont la masse est supposée si grande qu'on la prend pour comme immobile. pour un plasma entièrement ionisé et de faible densité, l'effet de tout le plasma sur la collision électron-ion est négligé, de plus la force intervenant dans cette collision soit une force Coulombienne. On suppose que toutes les interactions électron-électron et électron-atome sont négligées. Ce traitement est effectué en l'absence du champ magnétique externe, le champ magnétique interne est négligé devant le champ électrique $B = \frac{E}{c} \ll 1$.

La formule de la trajectoire du mouvement relativiste d'une particule dans un champ d'attraction de Coulomb [1]:

$$\mu c^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{r^{*2} + r^{*2} \varphi^{*2}}{c^2}}} - 1 \right) + W(r^*) = E^* = \mu c^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v_0^2}{c^2}}} - 1 \right) \quad (4.1)$$

où

$$W(r^*) = -\frac{\alpha}{r^*} \quad (4.2)$$

$W(r^*)$ représente le champ électrostatique de Coulomb dans lequel $\alpha > 0$, c'est-à-dire un champ d'attraction central, où :

$$\alpha = \frac{(Z - 1) e^2}{4\pi\epsilon_0} \quad (4.3)$$

où μ est la masse réduite au repos, v_0 la vitesse initiale, et ρ le paramètre d'impact non relativiste, E^* est l'énergie relativiste totale, et M^* le moment cinétique relativiste, avec (r^*, φ^*) sont des coordonnées polaires planes, et $(^*)$ est consacré au mouvement relativiste.

Si $E^* \geq 0$ le mouvement de la particule est infini (état de diffusion), l'intégration élémentaire sur φ^* s'écrit :

$$\varphi^* = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{\alpha^2}{M^{*2}c^2}}} \arccos \left(\frac{1 + \frac{E^*}{\mu c^2} + \frac{\alpha}{\mu c^2 r^*} - \frac{1 + \frac{E^*}{\mu c^2}}{1 - \frac{\alpha^2}{M^{*2}c^2}}}{\sqrt{\left[\left(\frac{1 + \frac{E^*}{\mu c^2}}{1 - \frac{\alpha^2}{M^{*2}c^2}} \right)^2 - 1 \right] \left(\frac{\alpha^2}{M^{*2}c^2 - \alpha^2} \right)}} \right) \quad (4.4)$$

On introduit les notations (dans ce qui suit, $v_0 = v$) :

$$\varepsilon^* = \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \sqrt{\frac{\rho^2}{\rho_0^2} \frac{1}{\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^2} + 1} = \sqrt{\frac{\rho^{*2}}{\rho_0^{*2}} + 1} \quad (4.5)$$

où ρ et ρ_0 sont respectivement le paramètre d'impact non relativiste et le demi-axe de l'hyperbole non relativiste qui est décrite par [2] :

$$\rho_0 = \frac{Z_{per} Z_{em} e^2}{4\pi\epsilon_0 m v^2} = \frac{(Z - 1) e^2}{4\pi\epsilon_0 m v^2} \quad (4.6)$$

où $Z = Z_{em} + 1$ est le nombre spectroscopique de charge de l'ion rayonnant ($Z = 1$ pour l'espèce neutre, $Z = 2$ pour des espèces séparément ionisées). La signification de ρ_0 est que c'est le paramètre d'impact pour une énergie d'électron donné pour laquelle la déviation est 90° . Donc ρ_0 marque la division entre déviations faibles, $\rho \gg \rho_0$ ou collisions distantes,

et déviations fortes, $\rho \ll \rho_0$ ou collisions proches [3]. L'excentricité relativiste ε^* est reliée au paramètre d'impact relativiste ρ^* par la relation (4.5).

On peut donner la formule du paramètre d'impact relativiste ρ^* en fonction de ρ et ρ_0 :

$$\rho^* = \sqrt{\rho^2 + \rho_0^2 \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)} \quad (4.7)$$

ρ_0^* est le demi-axe de l'hyperbole relativiste qui est donné par :

$$\rho_0^* = \rho_0 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \quad (4.8)$$

La formule de la trajectoire peut être écrite sous la forme :

$$\frac{\rho^{*2}}{r^* \rho_0^*} = 1 + \varepsilon^* \cos(\varphi^*) \quad (4.9)$$

Cette trajectoire varie peu par rapport au trajectoire non relativiste (3.3), c'est une pseudo-hyperbole ayant son foyer à l'origine des coordonnées polaires, et son excentricité relativiste ε^* , et son paramètre d'impact relativiste ρ^* . Si c tend vers ∞ l'équation de la trajectoire relativiste tend vers l'équation (3.3). On considère un système des coordonnées cartésiennes (O, X^*, Y^*) , on peut définir le mouvement relativiste à partir des équations paramétriques de X^*, Y^*, r^* et t^* :

$$r^* = \rho_0^* (\varepsilon^* \cosh(u) - 1) \quad (4.10)$$

$$t^* = T^* (\varepsilon^{**} \sinh(u) - u) \quad (4.11)$$

avec:

$$h = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (4.12)$$

et:

$$T^* = \frac{\rho_0 \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{3/2}}{v} \quad (4.13)$$

La formule de X^* est :

$$X^* = \rho_0^* (\varepsilon^* - \cosh(u)) \quad (4.14)$$

Le variable Y^* se déduit à son tour à partir de $Y^* = \sqrt{r^{*2} - X^{*2}}$:

$$Y^* = \rho_0^* \sqrt{\varepsilon^{*2} - 1} \sinh(u) \quad (4.15)$$

Le paramètre x prend toutes les valeurs comprises entre $-\infty$ et ∞ .

4.3 Elargissement électronique relativiste

L'élargissement Stark tend à être important seulement pour des raies provenant des transitions dipolaires électriques permises. Dans ce cas on peut considérer l'élargissement Stark électronique relativiste dans l'approximation dipolaire. Presque tous les calculs de l'opérateur de collision électronique Φ se basent dans l'approximation de chemin classique pour les électrons perturbateurs sur l'approximation d'impact. Sous les mêmes approximations, on peut calculer l'expression de l'opérateur de collision électronique dans le cas

relativiste Φ^* à partir des équations (3.33), (3.35). Le profil de raie est donné alors par la formule généralisée (3.27) [4] :

Pour calculer l'opérateur de collisions électroniques relativistes Φ_{ab}^* nous commençons avec l'expression générale [5] :

$$\begin{aligned} \langle\langle \alpha\beta | \Phi_{ab}^* | \alpha'\beta' \rangle\rangle &= \sum_{\alpha^j} \vec{r}_{\alpha\alpha^j} \vec{r}_{\alpha^j\alpha'} \Phi_d^*(\omega_{\alpha\alpha^j}, \omega_{\alpha^j\alpha'}) \\ &+ \sum_{\beta^j} \vec{r}_{\beta^j\beta} \vec{r}_{\beta^j\beta'} \Phi_d^*(\omega_{\beta^j\beta}, \omega_{\beta^j\beta'}) \\ &- \vec{r}_{\alpha\alpha'} \vec{r}_{\beta\beta'} \Phi_{int}^*(\omega_{\alpha\alpha'}, \omega_{\beta\beta'}) \end{aligned} \quad (4.16)$$

où \vec{r}_{ab} est l'éléments de matrice de l'opérateur position de l'électron.

Nous notons que la critique valide de la théorie d'impact d'après D.Voslamber [5] n'est pas généralement applicable pour tout couple ω_1, ω_2 . Bien sûr, pour les raies isolées $\omega_1 = -\omega_2$ la critique précitée ne se pose pas, et la théorie d'impact est valide. On peut évaluer Φ_d^* dans le cas des raies isolées pour un émetteur ionique, avec des chemins hyperboliques pour les électrons libres. Ce traitement peut s'effectuer à l'aide du résultat obtenu sous les mêmes conditions dans le cas non relativiste [6 -10].

On défini le paramètre d'inélasticité relativiste ζ_i^* qui peut s'écrire en fonction de ω_i :

$$\zeta_i^* = \omega_i T^* = \zeta_i \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{3/2} \quad (4.17)$$

où ζ_i le paramètre d'inélasticité que l'on peut définir comme une mesure de la différence d'énergie des états entre lesquels s'effectuent des transitions collisionnelles (structure fine).

Les variables ζ^* et ε^* sont indépendantes alors :

$$dt_i^* = T^* (h^2 \varepsilon^* \cosh(u) - 1) du_i \quad (4.18)$$

où $i = 1, 2$

On peut définir le terme direct Φ_d^* en fonction de ζ^* :

$$\begin{aligned} \Phi_d^*(\zeta_1^*, \zeta_2^*) &= -\frac{2\pi N_e e^4}{3\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{\mu}{K_B T_e}\right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{v \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right) dv}{\rho_0^2} \exp\left(-\frac{\mu v^2}{2K_B T_e}\right) dv \int_{\rho_{\min}}^{\rho_{\max}} \rho d\rho \\ &\quad \int_{-\infty}^\infty (\varepsilon^{**} \cosh(u_1) - 1) \int_{-\infty}^{u_1} (\varepsilon^{**} \cosh(u_2) - 1) \\ &\quad \exp[i\zeta_1^* (\varepsilon^{**} \sinh(u_1) - u_1) + i\zeta_2^* (\varepsilon^{**} \sinh(u_2) - u_2)] du_1 du_2. \\ &\quad \frac{(\varepsilon^* - \cosh(u_1)) (\varepsilon^* - \cosh(u_2)) + (\varepsilon^{*2} - 1) \sinh(u_1) \sinh(u_2)}{(\varepsilon^* \cosh(u_1) - 1)^3 (\varepsilon^* \cosh(u_2) - 1)^3} \end{aligned} \quad (4.19)$$

où ε^{**} donné par :

$$\varepsilon^{**} = h^2 \varepsilon^* \quad (4.20)$$

ζ^* est une mesure de la différence d'énergie des états entre lesquels s'effectuent des transitions collisionnelles dans le cas des mouvements relativistes. Dans le cas d'une raie isolée $\zeta_1^* = -\zeta_2^* = \zeta^*$. le terme direct dans notre cas devrait se réduire à $\frac{1}{2}$ de notre terme d'interférence pour la raie isolée [11] :

$$\text{Re } \Phi_{int}^*(\zeta^*, -\zeta^*) = 2 \text{Re } \Phi_d^*(\zeta^*, -\zeta^*) \quad (4.21)$$

d'où, nous obtenons :

$$\Phi_{int}^* (\zeta^*, -\zeta^*) = -\frac{2\pi N_e e^4}{3\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{\mu}{K_B T_e} \right)^{3/2} \cdot \int_0^\infty \frac{v \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right) dv}{\rho_0^2} \exp\left(-\frac{\mu v^2}{2K_B T_e}\right) dv \int_{\rho_{\min}}^{\rho_{\max}} \frac{\rho d\rho}{\epsilon^{*2}} \cdot \left[G_1^* (\zeta^*, \epsilon^*) G_1^* (-\zeta^*, \epsilon^*) + \frac{(\epsilon^{*2} - 1)}{\epsilon^{*2}} G_2^* (\zeta^*, \epsilon^*) G_2^* (-\zeta^*, \epsilon^*) \right] \quad (4.22)$$

avec,

$$G_1^* (\zeta^*, \epsilon^*) = \int_{-\infty}^{\infty} du \frac{\left(h^2 \cosh(u) - \frac{1}{\epsilon^*}\right) \left(1 - \frac{\cosh(u)}{\epsilon^*}\right) \exp(i\zeta^* [\epsilon^{**} \sinh(u) - u])}{\left(\cosh(u) - \frac{1}{\epsilon^*}\right)^3} \quad (4.23)$$

$$G_2^* (\zeta^*, \epsilon^*) = \int_{-\infty}^{\infty} du \left(h^2 \cosh(u) - \frac{1}{\epsilon^*}\right) \sinh(u) \frac{\exp(i\zeta^* [\epsilon^{**} \sinh(u) - u])}{\left(\cosh(u) - \frac{1}{\epsilon^*}\right)^3} \quad (4.24)$$

On déduit les propriétés de symétrie des fonctions $G_1^* (\zeta^*, \epsilon^*)$, $G_2^* (\zeta^*, \epsilon^*)$:

$$G_1^* (-\zeta^*, \epsilon^*) = G_1^* (\zeta^*, \epsilon^*) \quad (4.25)$$

$$G_2^* (-\zeta^*, \epsilon^*) = -G_2^* (\zeta^*, \epsilon^*) \quad (4.26)$$

D'après (4.5) on peut effectuer un changement de variable ρ par le variable ϵ^* , de la façon suivante :

$$\rho d\rho = \rho_0^2 \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right) \epsilon^* d\epsilon^* \quad (4.27)$$

En injectant les équations (4.25), (4.26) et (4.27), dans l'expression (4.22), on peut définir Φ_{int}^* :

$$\begin{aligned} \Phi_{int}^*(\zeta^*, -\zeta^*) &= -\frac{2\pi N_e e^4}{3\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{\mu}{K_B T_e}\right)^{3/2} \\ &\int_0^\infty v \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^2 dv \exp\left(-\frac{\mu v^2}{2K_B T_e}\right) dv \int_{\epsilon_{min}^*}^{\epsilon_{max}^*} \frac{d\epsilon^*}{\epsilon^*} \\ &\left[G_1^{*2}(\zeta^*, \epsilon^*) - \frac{(\epsilon^{*2} - 1)}{\epsilon^{*2}} G_2^{*2}(\zeta^*, \epsilon^*) \right] \end{aligned} \quad (4.28)$$

Comme le calcul des deux fonctions $G_1^*(\zeta^*, \epsilon^*)$, $G_2^*(\zeta^*, \epsilon^*)$ est trop compliqué on va prendre l'approximation d'ordre zéro suivante :

$$h^2 = \frac{1}{1 - \frac{v^2}{c^2}} \simeq 1 \quad (4.29)$$

cela signifie que :

$$\epsilon^{**} \simeq \epsilon^* \quad (4.30)$$

alors les expressions (4.23) et (4.24) deviennent :

$$G_1^*(\zeta^*, \epsilon^*) = 2|\zeta^*| \epsilon^* \exp\left(\frac{|\zeta^*| \pi}{2}\right) \frac{dK_{i|\zeta^*|}(|\zeta^*| \epsilon^*)}{d(|\zeta^*| \epsilon^*)} \quad (4.31)$$

$$G_2^*(\zeta^*, \epsilon^*) = 2i|\zeta^*| \epsilon^* \exp\left(\frac{|\zeta^*| \pi}{2}\right) K_{i|\zeta^*|}(|\zeta^*| \epsilon^*) \quad (4.32)$$

où $K_{i|\zeta^*|}(|\zeta^*| \epsilon^*)$ et $\frac{dK_{i|\zeta^*|}(|\zeta^*| \epsilon^*)}{d(|\zeta^*| \epsilon^*)}$ sont des fonctions de Bessel modifiées d'argument imaginaire. Avec un changement de variable $\beta = |\zeta^*| \epsilon^*$ on peut calculer l'intégrale sur ϵ^* , il vient :

$$\int_{\epsilon_{min}^*}^{\epsilon_{max}^*} \frac{d\epsilon^*}{\epsilon^*} \cdot \left[G_1^{*2}(\zeta^*, \epsilon^*) - \frac{(\epsilon^{*2} - 1)}{\epsilon^{*2}} G_2^{*2}(\zeta^*, \epsilon^*) \right] \quad (4.33)$$

$$\begin{aligned}
&= 4e^{|\zeta^*|\pi} \int_{\varepsilon_{\min}^*}^{\varepsilon_{\max}^*} d\beta \left[\beta \left(\frac{dK_{i|\zeta^*}(\beta)}{d(\beta)} \right)^2 + \frac{\beta^2 - |\zeta^*|^2}{\beta} K_{i|\zeta^*}^2(\beta) \right] \\
&= 4|\zeta^*| e^{|\zeta^*|\pi} \left[\varepsilon_{\min}^* \frac{dK_{i|\zeta^*}(|\zeta^*|\varepsilon_{\min}^*)}{d(|\zeta^*|\varepsilon_{\min}^*)} K_{i|\zeta^*}(|\zeta^*|\varepsilon_{\min}^*) \right]_{\varepsilon_{\min}^*}^{\varepsilon_{\max}^*}
\end{aligned}$$

En injectant le résultat de l'intégrale sur ε^* dans l'expression (4.28), on obtient la formule générale du terme d'interférence relativiste pour les raies isolées :

$$\begin{aligned}
\Phi_{int}^*(\zeta^*, -\zeta^*) &= -\frac{8\pi N_e e^4}{3\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{\mu}{K_B T_e} \right)^{3/2} \int_0^\infty v \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right)^2 dv \\
&\quad \exp \left(|\zeta^*| \pi - \frac{\mu v^2}{2K_B T_e} \right) \times |\zeta^*| (\varepsilon_{\max}^* K'_{i|\zeta^*}(|\zeta^*|\varepsilon_{\max}^*) K_{i|\zeta^*}(|\zeta^*|\varepsilon_{\max}^*) \\
&\quad - \varepsilon_{\min}^* K'_{i|\zeta^*}(|\zeta^*|\varepsilon_{\min}^*) K_{i|\zeta^*}(|\zeta^*|\varepsilon_{\min}^*)) \tag{4.34}
\end{aligned}$$

et:

$$\begin{aligned}
\text{Re } \Phi_d^*(\zeta^*, -\zeta^*) &= -\frac{4\pi N_e e^4}{3\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{\mu}{K_B T_e} \right)^{3/2} \text{Re} \int_0^\infty v \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right)^2 dv \\
&\quad \exp \left(|\zeta^*| \pi - \frac{\mu v^2}{2K_B T_e} \right) \times |\zeta^*| (\varepsilon_{\max}^* K'_{i|\zeta^*}(|\zeta^*|\varepsilon_{\max}^*) K_{i|\zeta^*}(|\zeta^*|\varepsilon_{\max}^*) \\
&\quad - \varepsilon_{\min}^* K'_{i|\zeta^*}(|\zeta^*|\varepsilon_{\min}^*) K_{i|\zeta^*}(|\zeta^*|\varepsilon_{\min}^*)) \tag{4.35}
\end{aligned}$$

La détermination des paramètres d'impacts minimal et maximal ρ_{min} , ρ_{max} est basée sur les mêmes hypothèses utilisées dans le cas non relativiste. On prend. $\rho_{max} = \lambda_D$ (λ_D la longueur de Debye).

D'après la formule (4.5) il est clair que pour éviter le cas où les trajectoires du mouvement relativiste sont elliptiques, il faut que la condition sur le paramètre d'impact ρ soit vérifiée :

$$\varepsilon^* = \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \sqrt{\frac{\rho^2}{\rho_0^2} \frac{1}{\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^2} + 1} \geq 1 \quad (4.36)$$

d'où:

$$\rho \geq \rho_0 \frac{v}{c} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \quad (4.37)$$

En tenant compte des conditions du maintien de l'unitarité de la matrice de diffusion S , l'extension de la fonction d'onde de l'émetteur [12], et la condition (4.37) on obtient :

$$\rho_{\min}(v) = \max \left[(n_a^2 - n_b^2) \frac{a_0}{Z}, \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{\hbar (n_a^2 - n_b^2)}{mZv}, \rho_0 \frac{v}{c} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \right] \quad (4.38)$$

où n_a, n_b les nombres quantiques principaux des niveaux supérieurs et inférieurs respectivement, a_0 le rayon de Bohr, et Z est le nombre spectroscopique de charge de l'ion émetteur.

On remarque que dans le cas non relativiste, et pour toutes les valeurs de v et ρ , la trajectoire du mouvement est hyperbolique. La condition pour éviter la contribution des trajectoires elliptiques est $v_2 > 0$, aussi $\rho_2 > 0$. Ces deux conditions sont toujours vérifiées .

En négligeant la contribution de la structure fine, c'est à dire $\omega = 0$ et en retenant la formule exacte de h (4.12), (4.13) et (4.14) deviennent :

$$G_1^*(0, \varepsilon^*) = \int_{-\infty}^{\infty} du \frac{(h^2 \cosh(u) - \frac{1}{\varepsilon^*}) \left(1 - \frac{\cosh(u)}{\varepsilon^*}\right)}{\left(\cosh(u) - \frac{1}{\varepsilon^*}\right)^3}$$

$$G_2^*(0, \varepsilon^*) = \int_{-\infty}^{\infty} du \frac{(h^2 \cosh(u) - \frac{1}{\varepsilon^*}) \sinh(u)}{\left(\cosh(u) - \frac{1}{\varepsilon^*}\right)^3} = 0$$

On introduit les expressions des $G_1^*(0, \varepsilon^*)$, $G_2^*(0, \varepsilon^*)$ dans (4.28), et en intégrant sur ε^* , l'expression de $\Phi_d^*(0)$ peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} 2 \operatorname{Re} \Phi_d^*(0) &= \operatorname{Re} \Phi_{int}^*(0) = \\ &= -\frac{2\pi N_e e^4}{3\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{\mu}{K_B T_e}\right)^{3/2} \operatorname{Re} \left(\int_0^{\infty} v \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^2 dv \right. \\ &\quad \exp\left(-\frac{\mu v^2}{2K_B T_e}\right) \left(4h^4 \ln\left(\frac{\varepsilon_{\max}^*}{\varepsilon_{\min}^*}\right) - \right. \\ &\quad \frac{(h^2 - 1)^2}{4(\varepsilon_{\max}^{*2} - 1)} - \frac{\varepsilon_{\max}^{*4} (h^2 - 1)^2}{(\varepsilon_{\max}^{*2} - 1)^2} \arctan^2 \sqrt{\frac{\varepsilon_{\max}^* + 1}{\varepsilon_{\max}^* - 1}} \\ &\quad \left. + \arctan \sqrt{\frac{\varepsilon_{\max}^* + 1}{\varepsilon_{\max}^* - 1}} \left(\frac{6 - 7\varepsilon_{\max}^{*2}}{(\varepsilon_{\max}^{*2} - 1)^{3/2}} (h^2 - 1)^2 - \frac{8(h^2 - 1)}{\sqrt{\varepsilon_{\max}^{*2} - 1}} \right) \right) \\ &\quad - 4h^4 \ln\left(\frac{\varepsilon_{\min}^*}{\varepsilon_{\min}^*}\right) + \frac{(h^2 - 1)^2}{4(\varepsilon_{\min}^{*2} - 1)} + \frac{\varepsilon_{\min}^{*4} (h^2 - 1)^2}{(\varepsilon_{\min}^{*2} - 1)^2} \times \\ &\quad \arctan^2 \sqrt{\frac{\varepsilon_{\min}^* + 1}{\varepsilon_{\min}^* - 1}} - \\ &\quad \left. \arctan \sqrt{\frac{\varepsilon_{\min}^* + 1}{\varepsilon_{\min}^* - 1}} \left(\frac{6 - 7\varepsilon_{\min}^{*2}}{(\varepsilon_{\min}^{*2} - 1)^{3/2}} (h^2 - 1)^2 - \frac{8(h^2 - 1)}{\sqrt{\varepsilon_{\min}^{*2} - 1}} \right) \right) \end{aligned} \quad (4.39)$$

où h est donnée par l'expression (3.61), ε_{\min}^* , ε_{\max}^* sont décrits d'après (3.54)

par :

$$\varepsilon_{\max}^* = \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \sqrt{\frac{\rho_{\max}^2}{\rho_0^2} \frac{1}{\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^2} + 1} \quad (4.40)$$

$$\varepsilon_{\min}^* = \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \sqrt{\frac{\rho_{\min}^2}{\rho_0^2} \frac{1}{\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^2} + 1} \quad (4.41)$$

Quand nous prenons la limite $c \rightarrow \infty$ le terme d'interférence relativiste $\Phi_{int}^*(0)$ tend vers le terme du cas non relativiste $\Phi_{int}(0)$ défini par l'expression (3.43).

4.4 Références

- [1] V. Ougarov, "théorie de la relativité restreinte", ed MIR, Moscou (1969).
- [2] A. Poquérusse, S. Alexiou, et E. Klodzh, Pergamon. 56, 153 (1996).
- [3] I. P. Shkarofsky, T. W. Johnston, M. P. Bachynski, "The particle kinetics of plasmas", Addison-Wesley Publishing Company, Inc, Montreal. Canada (1966).
- [4] S. Glenzer, N. I. Uzelac, et H. J. Kunze, Phys. Rev. A45, 8795 (1992).
- [5] C. Perez et al, Phys. Rev. E47, 756 (1993).
- [6] S. Sahal-Bréchet, Astron. Astrophys. 1, 91 (1969).
- [7] K. Alder, A. Bohr, T. Huss, B. Mottelson, et A. Winther, Rev. Mod. Phys. 28, 432(1956).
- [8] N. Feautrier, Ann. d'Astron. 31, 305 (1968).
- [9] A. Poquerusse, Phys.Lett. 59A, 438 (1977).
- [10] M. S. Dimitrijevic et S. Sahal-Bréchet, J.Q.S.R.T. 48, 349 (1990).
- [11] S. Alexiou, Phys. Rev. A49, 106 (1994).
- [12] A. Poquérusse, S. Alexiou, et E. Leboucher-Dalimier, Pergamon. 56, 797 (1996).

Chapter 5

CALCUL DE PROFIL DE LA RAIE DE LYMAN- α AVEC STRUCTURE FINE

5.1 Introduction

Les théories modernes décrivant l'élargissement Stark ont pour origine les travaux de Baranger [1,2], immédiatement suivis de ceux de Kolb et Griem [3] où les électrons sont traités dans le cadre du premier point de vue par une théorie dite d'impact, et les ions dans le cadre du second point de vue par une théorie quasi-statique (les ions, particules lourdes, sont considérés comme immobiles, créant un microchamp statique qui agit au niveau de la structure atomique de l'émetteur). Après des généralités sur le spectre d'un système quantique, nous allons rappeler par les approximations limites quasi-statique et impact,

ensuite nous ferons le calcul de profil de la raie de Lyman- α avec structure fine.

5.2 Le spectre d'un système quantique

On suppose que l'action des perturbateurs neutres est négligée, il reste deux agents principaux de perturbations : les ions et les électrons, ces deux types de particules interagissent avec l'atome par l'interaction de Coulomb. L'interaction dans l'approximation dipolaire est de la forme :

$$V = -\vec{d} \cdot \vec{E}(s) \quad (5.1)$$

où \vec{d} est l'opérateur moment dipolaire, et $\vec{E}(s)$ est le champ électrique créé par les perturbateurs au centre de l'atome à l'instant s .

Dans le cas où l'émetteur est un ion, on rajoute le terme d'ordre zéro (le potentiel de Coulomb $\frac{ZZ_P e^2}{r}$ avec, Z et Z_P sont les nombres de charge respectifs de l'émetteur et du perturbateur, r et la distance entre le perturbateur et le centre de l'ion).

Pour un atome rayonnant dans un gaz des particules perturbatrices (électrons, ions, atomes neutres ou molécules), la puissance totale rayonnée lors d'une transition dipolaire électrique d'un état initial $|\alpha\rangle$ et d'énergie E_α à un état final $|\beta\rangle$ et d'énergie E_β

$$P_{\alpha \rightarrow \beta} = \frac{4\omega_{\alpha\beta}^4}{3c^3} \left| \langle \alpha | \vec{d} | \beta \rangle \right|^2 \quad (5.2)$$

où $\omega_{\alpha\beta} = (E_\alpha - E_\beta)/\hbar$ est la fréquence émise, \vec{d} est le moment dipolaire du système complet.

Pour obtenir le spectre complet, on doit sommer sur tous les états finaux possibles et faire une moyenne sur les états initiaux.

La puissance rayonnée par unité de fréquence $P(\omega)$, est donnée par :

$$P(\omega) = \frac{4\omega^4}{3c^3} I(\omega) \quad (5.3)$$

où le profil de raie $I(\omega)$ est défini par

$$I(\omega) = \sum_{\alpha\beta} \left| \langle \alpha | \vec{d} | \beta \rangle \right|^2 \delta(\omega - \omega_{\alpha\beta}) \rho_{\alpha} \quad (5.4)$$

Le passage à la transformée de Fourier (de O à $+\infty$) nous permet d'introduire une fonction du temps $C(s)$:

$$\begin{aligned} C(s) &= \int_0^{+\infty} \exp(-i\omega s) I(\omega) d\omega \\ &= \sum_{\alpha\beta} \left| \langle \alpha | \vec{d} | \beta \rangle \right|^2 \exp(-i\omega_{\alpha\beta} s) \rho_{\alpha} \end{aligned} \quad (5.5)$$

La propriété $C(-s) = [C(s)]^*$ de la symétrie par renversement du temps permet d'écrire à partir de la transformation de Fourier inverse de $C(s)$:

$$I(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Re} \int_0^{+\infty} \exp(i\omega s) C(s) ds \quad (5.6)$$

où Re signifie partie réelle.

Le calcul de $I(\omega)$ se ramène donc au calcul de $C(s)$ l'équation (2.5) donne :

$$C(s) = \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | \vec{d} | \beta \rangle \exp\left(\frac{iE_{\beta}s}{\hbar}\right) \langle \alpha | \vec{d} | \beta \rangle \exp\left(\frac{iE_{\alpha}s}{\hbar}\right) \rho_{\alpha} \quad (5.7)$$

ce qui s'écrit encore, en introduisant l'opérateur d'évolution du système total $T(s) = \exp\left(\frac{-iHs}{\hbar}\right)$ avec $T(0) = 1$ est l'opérateur identité.

et H est l'hamiltonien de système complet (émetteur +perturbateur), la fonction $C(s)$ peut se mettre sous la forme d'une trace sur les états du système quantique :

$$C(s) = Tr \left[\vec{d}T^*(s) \vec{d}T(s) \rho \right] \quad (5.8)$$

ceci peut encore s'écrire :

$$C(s) = Tr \left[\vec{d}(0) \vec{d}(s) \rho \right] \quad (5.9)$$

où $\vec{d}(s) = T^*(s) \vec{d}(0) T(s)$ est le moment dipolaire en représentation de Heisenberg.

On suppose que le système complet, formé par l'émetteur et l'ensemble des perturbateurs, est à l'équilibre à la température T_e , la matrice densité de ce système s'écrit dans le cas d'un ensemble canonique :

$$\rho = \exp\left(-\frac{H}{K_B T_e}\right) \quad (5.10)$$

Si on suppose qu'il n'existe qu'un faible couplage entre l'émetteur et le système des perturbateurs $\left(\frac{V_{EB}}{K_B T_e} \ll \left(\frac{H_E + H_B}{K_B T_e}\right)\right)$, la matrice densité à l'instant initial peut être factorisée $\rho_E \circ \rho_B$ (ρ_E et ρ_B sont les matrices densités relatives à l'émetteur et au bain de perturbateurs) [4]. La condition $\hbar\omega \ll K_B T_e$ est équivalente à la condition de l'approximation de couplage faible.

D'après la factorisation, on peut calculer la trace dans l'équation (5.8) successivement sur chaque sous-système :

$$C(s) = Tr_E \left[\rho_E Tr_B \left(\vec{d}T^*(s) \vec{d}T(s) \rho_B \right) \right] \quad (5.11)$$

où les traces Tr_E et Tr_B ne portent respectivement que sur les états de l'émetteur et du bain de perturbateurs.

La fonction d'autocorrélation du dipôle peut être calculée de façon purement quantique, mais dans la plupart des cas, on peut décrire le problème par l'approximation du chemin classique qui consiste à attribuer à chaque perturbateur une localisation ponctuelle et une trajectoire classique. Ces différentes hypothèses permettent d'écrire la fonction d'autocorrélation du dipôle sous la forme :

$$C(s) = Tr_E \left[\rho_E \left\{ \vec{d}T^*(s) \vec{d}T(s) \right\}_{moy} \right] \quad (5.12)$$

où Tr_E la trace sur les états de l'émetteur, $\{\dots\}_{moy}$ signifie que l'on prend une moyenne d'ensemble classique dans l'espace des phases des perturbateurs, et $T(s)$ l'opérateur d'évolution agissant sur les fonctions d'onde de l'émetteur seulement, obéissant à l'équation de Schrödinger:

$$i \hbar \frac{dT(s)}{ds} = [H_E + V_{cl}(s)] T(s) \quad (5.13)$$

avec $V_{cl}(s)$ l'énergie d'interaction (5.1) en considérant que le champ $\vec{E}(s)$ est classique.

Si on considère que l'interaction n'induit que des transitions au sein du même sous-groupe de niveaux, seuls les éléments de matrice de l'opérateur T du même sous-groupe existent dans l'expression de la fonction d'auto-corrélation du moment dipolaire,

alors $C(s)$ s'écrit d'après l'équation (5.12) comme :

$$C(s) = \sum_{\alpha\beta\beta'\alpha'} \rho_\alpha \left\{ \vec{d}_{\alpha\beta} \langle \beta | T_b(s) | \beta' \rangle \vec{d}_{\beta'\alpha'} \langle \alpha' | T_a(s) | \alpha \rangle \right\}_{moy} \quad (5.14)$$

où ρ_α est un élément diagonal de la matrice densité de l'émetteur seul.

La fonction d'auto-corrélation s'écrit dans l'espace de Liouville sous la forme (Annexe A) :

$$C(s) = \left\langle \left\langle \vec{d}^* \left| \{U_l(s)\}_{moy} \right| \vec{d} \right\rangle \right\rangle \quad (5.15)$$

où $\{U_l(s)\}$ représente la moyenne sur les états du bain de l'opérateur d'évolution $U_l(s)$ du système, et $|\vec{d}\rangle$ l'opérateur moment dipolaire électrique radiatif définit dans l'espace de Liouville [5].

Pour un état, l'opérateur d'évolution $U_l(s)$ dans l'espace de Liouville est une solution du système différentiel suivant :

$$\begin{aligned} U_l(s=0) &= 1 \\ \frac{dU_l}{ds} &= -iL(s)U_l \end{aligned} \quad (5.16)$$

avec $L(s)$ l'opérateur de Liouville défini dans l'espace de Liouville qui résulte d'un produit tensoriel de l'espace de Hilbert H et de son dual H^d .

$$L = \frac{1}{\hbar} \left(H \otimes 1^d - 1 \otimes H^d \right) \quad (5.17)$$

L'opérateur de Liouville est donné par :

$$L_l(s) = L_0 + l(s) \quad (5.18)$$

où $l(s)$ est un opérateur dépendant du temps, qui représente l'interaction ion émetteur-bain, et L_0 l'opérateur de Liouville de l'émetteur isolé.

Le micro-champ électrique agissant sur l'émetteur est à l'origine de la partie interactive $l(s)$, il se sépare à son tour en deux composantes:

$$\vec{E}(s) = \vec{E}_i(s) + \vec{E}_e(s) \quad (5.19)$$

avec $\vec{E}_i(s)$ le champ de la composante ionique, et $\vec{E}_e(s)$ le champ de la composante électronique. Donc, on peut faire la moyenne sur $U(s)$ en deux étapes, sur les électrons et sur les ions. Les temps caractéristiques du mouvement de ces deux types de particules sont très différents. Ce qui permet d'appliquer deux approximations pour simplifier le calcul de $U(s)$.

5.3 Deux approximations limites

5.3.1 Temps caractéristiques

Temps d'intérêt atomique

Le temps d'intérêt d'un processus d'élargissement est une conséquence directe de la forme en transformée de Fourier du profil de raie.

On voit que si τ est une notion relative à un point du profil, puisqu'il varie entre un intervalle de temps très grand au centre de la raie jusqu'à un intervalle aussi petit que l'on veut, lorsque on se déplace suffisamment loin dans l'aile de la raie .

$$S_i = \frac{1}{|\Delta\omega|} \quad (5.20)$$

$$\Delta\omega = \omega - \omega_0$$

où ω_0 est le centre du raie

Temps de collision

Dans le cas collisions binaires, le temps de collision τ_c est défini comme le rapport entre le paramètre d'impact de la collision b et la vitesse thermique la plus probable du perturbateur $v = \sqrt{2k_B T/m}$.

Cette notion n'aura de sens que si nous avons des plasmas cinétiques avec des collisions binaires, pour des plasmas plus denses au lieu d'utiliser le temps de collision nous pouvons utiliser pour τ_c les temps de corrélation des fonction de corrélation du microchamp électrique du plasma. Les temps de corrélation représentent mieux les effets collectifs des perturbateurs.

Si le temps d'intérêt est bien plus grand ou bien plus petit que le temps de collision, le calcul de $C(s)$ se simplifie énormément. Deux approximations limites sont possibles : l'approximation d'impact et l'approximation quasi-statique.

5.3.2 L'approximation d'impact

L'importance de l'approximation d'impact est due au fait qu'elle est presque toujours valable pour traiter les perturbateurs électroniques.

Soit un électron de vitesse v , de paramètre d'impact b , entrant en collision avec

un atome excité constitué d'un électron sur une orbite de nombre quantique principal n et d'un coeur de charge Ze .

Un élément dipolaire caractéristique de la matrice de transition est de l'ordre de $\frac{en^2a_0}{Z}$ et donc l'énergie d'interaction V_{EB} est de l'ordre de $\frac{e^2n^2a_0}{Zb^2}$, pour que l'approximation d'impact soit valable, le produit de l'énergie d'interaction par le temps de collision doit être petit devant \hbar :

$$\frac{e^2n^2a_0}{Zb^2}, \frac{b}{v} \ll \hbar \quad (5.21)$$

ce qui peut s'écrire en élevant au cube :

$$\frac{v^3b^3Z^3}{e^6n^6a_0^6} \gg 1, \frac{b}{v} \ll \hbar \quad (5.22)$$

Une estimation du paramètre d'impact moyen b est donnée par la distance moyenne entre les particules r_e qui est donnée par l'expression :

$$\frac{4}{3}\pi r_e^3 = N_e^{-1} \quad (5.23)$$

v est donné par $\sqrt{k_B T/m}$.

on a :

$$\frac{AZ^3}{r^6} \gg 1 \quad (5.24)$$

avec

$$A = \frac{2(2\pi m K_B T)^{3/2}}{N_e \hbar^3} \quad (5.25)$$

A est le nombre d'états quantiques accessibles pour chaque électron. A étant toujours très grand, la condition précédente est en général satisfaite y compris pour les valeurs élevées du nombre quantique principal n .

5.3.3 L'approximation quasi-statique

Si les particules se déplacent suffisamment lentement, les fréquences caractérisant la dépendance en temps du champ électrique $E(s)$ au voisinage de l'émetteur pendant l'interaction sont beaucoup plus petites que le déplacement Stark résultant :

$$\Delta\omega_{if} = \omega_{if}(E) - \omega_{if}(0) \quad (5.26)$$

Si on a la condition $\left| \frac{E^0(s)}{E(s)} \right| \ll \langle \Delta\omega_{if}(E) \rangle$.

Alors l'erreur commise en négligeant le mouvement relatif des perturbateurs est faible. On considère donc le microchamp créé par l'ensemble des perturbateurs dans une configuration donnée, et le profil de raie est la moyenne sur toutes les configurations de perturbateurs des profils calculés pour chaque configuration.

L'approximation quasi-statique est retenue, il est nécessaire de connaître la distribution du champ électrique, cette approximation a été largement appliquée à la composante ionique des plasmas. Si $I(\omega, E)$ est le profil de raie pour un champ E fixé, on obtient le profil final en moyennant sur la distribution du microchamp $W(E)$:

$$I(\omega) = \int_0^\infty I(\omega, E)W(E)dE \quad (5.27)$$

5.4 Calcul de profil de la raie Lyman- α avec structure fine

On reprend la formule (2.78) qui donne la fonction d'auto-corrélation du moment dipolaire électrique pour la raie Lyman- α avec structure fine [6] :

$$\begin{aligned}
 C(s) = & \frac{1}{4} \left| \left\langle 2\frac{3}{2} \left| d^1 \right| 1\frac{1}{2} \right\rangle \right|^2 \exp \left(\Phi_e^1 s + \frac{i}{\hbar} \Delta \epsilon_1 s \right) \left\{ 2 + \cos \left(\frac{D_+}{\hbar} \sqrt{h(s)} \right) + \cos \left(\frac{D_-}{\hbar} \sqrt{h(s)} \right) \right\} \\
 & + \frac{1}{2} \left| \left\langle 2\frac{1}{2} \left| d^1 \right| 1\frac{1}{2} \right\rangle \right|^2 \exp \left(\Phi_e^2 s + \frac{i}{\hbar} \Delta \epsilon_2 s \right) \left\{ \cos \left(\frac{D_+}{\hbar} \sqrt{h(s)} \right) + \cos \left(\frac{D_-}{\hbar} \sqrt{h(s)} \right) \right\}
 \end{aligned} \tag{5.1}$$

En considérant le cas d'un champ statique orienté selon l'axe ($z'oz$),

$$\begin{aligned}
 C(s) = & \frac{1}{4} \left| \left\langle 2\frac{3}{2} \left| d^1 \right| 1\frac{1}{2} \right\rangle \right|^2 \exp \left(\Phi_e^1 s + \frac{i}{\hbar} \Delta \epsilon_1 s \right) \left\{ 2 + \cos \left(\frac{D_+ E s}{\hbar} \right) + \cos \left(\frac{D_- E s}{\hbar} \right) \right\} \\
 & + \frac{1}{2} \left| \left\langle 2\frac{1}{2} \left| d^1 \right| 1\frac{1}{2} \right\rangle \right|^2 \exp \left(\Phi_e^2 s + \frac{i}{\hbar} \Delta \epsilon_2 s \right) \left\{ \cos \left(\frac{D_+ E s}{\hbar} \right) + \cos \left(\frac{D_- E s}{\hbar} \right) \right\}
 \end{aligned} \tag{5.2}$$

Si la distribution du champ est Gaussienne, la moyenne statistique de la fonction d'auto-corrélation du moment dipolaire électrique devient :

$$\begin{aligned}
 C(s) = & \frac{1}{4} \left| \left\langle 2\frac{3}{2} \left| d^1 \right| 1\frac{1}{2} \right\rangle \right|^2 \exp \left(\Phi_e^1 s + \frac{i}{\hbar} \Delta \epsilon_1 s \right) \times \\
 & \int_0^\infty dEW(E) \left[2 + \cos \left(\frac{D_+ E s}{\hbar} \right) + \cos \left(\frac{D_- E s}{\hbar} \right) \right] + \\
 & + \frac{1}{2} \left| \left\langle 2\frac{1}{2} \left| d^1 \right| 1\frac{1}{2} \right\rangle \right|^2 \exp \left(\Phi_e^2 s + \frac{i}{\hbar} \Delta \epsilon_2 s \right) \times \\
 & \int_0^\infty dEW(E) \left[\cos \left(\frac{D_+ E s}{\hbar} \right) + \cos \left(\frac{D_- E s}{\hbar} \right) \right]
 \end{aligned} \tag{5.28}$$

où:

$$W(E) = \frac{1}{Q} E^2 \exp\left(-\frac{E^2}{\chi^2}\right) \quad (5.29)$$

$$\begin{aligned} C(s) = & \frac{1}{4} \left| \left\langle 2\frac{3}{2} \left| d^1 \right| 1\frac{1}{2} \right\rangle \right|^2 \exp\left(\Phi_e^1 s + \frac{i}{\hbar} \Delta \epsilon_1 s\right) \times \\ & \left[2 + \frac{1}{Q} \int_0^\infty E^2 \left(\cos\left(\frac{D_+ E s}{\hbar}\right) + \cos\left(\frac{D_- E s}{\hbar}\right) \right) \exp\left(-\frac{E^2}{\chi^2}\right) dE \right] \\ & + \frac{1}{2} \left| \left\langle 2\frac{1}{2} \left| d^1 \right| 1\frac{1}{2} \right\rangle \right|^2 \exp\left(\Phi_e^2 s + \frac{i}{\hbar} \Delta \epsilon_2 s\right) \times \\ & \left[\frac{1}{Q} \int_0^\infty E^2 \left(\cos\left(\frac{D_+ E s}{\hbar}\right) + \cos\left(\frac{D_- E s}{\hbar}\right) \right) \exp\left(-\frac{E^2}{\chi^2}\right) dE \right] \quad (5.30) \end{aligned}$$

où χ est le paramètre de dimension du champ électrique ($\chi^2 = \frac{2}{3} \langle E^2 \rangle$), et Q est

le facteur de normalisation de la distribution du champ :

$$Q = \int_0^\infty E^2 \exp\left(-\frac{E^2}{\chi^2}\right) dE = \frac{\sqrt{\pi}}{4} \chi^3 \quad (5.31)$$

après le calcul de les deux intégrales précédents, on obtient :

$$\frac{1}{Q} \int_0^\infty E^2 \cos\left(\frac{D_+ E s}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{E^2}{\chi^2}\right) dE = \left[1 - \frac{D_+^2 s^2 \chi^2}{2\hbar^2} \right] \exp\left(-\frac{D_+^2 s^2 \chi^2}{4\hbar^2}\right) \quad (5.32)$$

et

$$\frac{1}{Q} \int_0^\infty E^2 \cos\left(\frac{D_- E s}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{E^2}{\chi^2}\right) dE = \left[1 - \frac{D_-^2 s^2 \chi^2}{2\hbar^2} \right] \exp\left(-\frac{D_-^2 s^2 \chi^2}{4\hbar^2}\right) \quad (5.32a)$$

finalement, l'expression de la fonction d'auto-corrélation du dipôle s'écrit :

$$\begin{aligned}
C(s) = & \frac{1}{4} \left| \left\langle 2\frac{3}{2} \left| d^1 \left| 1\frac{1}{2} \right\rangle \right\rangle \right|^2 \times \exp \left(\Phi_e^1 s + \frac{i}{\hbar} \Delta \epsilon_1 s \right) \left[\begin{aligned} & 2 + \left(1 - \frac{D_+^2 \langle E^2 \rangle s^2}{3\hbar^2} \right) \exp \left(-\frac{D_+^2 \langle E^2 \rangle s^2}{6\hbar^2} \right) \\ & + \left(1 - \frac{D_-^2 \langle E^2 \rangle s^2}{3\hbar^2} \right) \exp \left(-\frac{D_-^2 \langle E^2 \rangle s^2}{6\hbar^2} \right) \end{aligned} \right] \\
& + \frac{1}{2} \left| \left\langle 2\frac{1}{2} \left| d^1 \left| 1\frac{1}{2} \right\rangle \right\rangle \right|^2 \exp \left(\Phi_e^2 s + \frac{i}{\hbar} \Delta \epsilon_2 s \right) \times \left[\begin{aligned} & \left(1 - \frac{D_+^2 \langle E^2 \rangle s^2}{3\hbar^2} \right) \exp \left(-\frac{D_+^2 \langle E^2 \rangle s^2}{6\hbar^2} \right) \\ & + \left(1 - \frac{D_-^2 \langle E^2 \rangle s^2}{3\hbar^2} \right) \exp \left(-\frac{D_-^2 \langle E^2 \rangle s^2}{6\hbar^2} \right) \end{aligned} \right]
\end{aligned} \tag{5.33}$$

L'intensité de raie est donnée par :

$$I(\omega) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \int_0^{\infty} \exp(i\omega s) C(s) ds \tag{5.34}$$

En utilisant l'équation (5.33) et (5.34), on obtient :

$$\begin{aligned}
I(\omega) = & \frac{1}{4\pi} \left| \left\langle 2\frac{3}{2} \left| d^1 \left| 1\frac{1}{2} \right\rangle \right\rangle \right|^2 \int_0^{\infty} \cos \left(\left(\omega - \frac{\Delta \epsilon_1}{\hbar} \right) s \right) \exp(\Phi_e^1 s) \times \\
& \left[2 + \left(1 - \frac{D_+^2 \langle E^2 \rangle s^2}{3\hbar^2} \right) \exp \left(-\frac{D_+^2 \langle E^2 \rangle s^2}{6\hbar^2} \right) + \left(1 - \frac{D_-^2 \langle E^2 \rangle s^2}{3\hbar^2} \right) \exp \left(-\frac{D_-^2 \langle E^2 \rangle s^2}{6\hbar^2} \right) \right] ds \\
& + \frac{1}{2\pi} \left| \left\langle 2\frac{1}{2} \left| d^1 \left| 1\frac{1}{2} \right\rangle \right\rangle \right|^2 \times \int_0^{\infty} \cos \left(\left(\omega - \frac{\Delta \epsilon_2}{\hbar} \right) s \right) \exp(\Phi_e^2 s) \\
& \left[\left(1 - \frac{D_+^2 \langle E^2 \rangle s^2}{3\hbar^2} \right) \exp \left(-\frac{D_+^2 \langle E^2 \rangle s^2}{6\hbar^2} \right) + \left(1 - \frac{D_-^2 \langle E^2 \rangle s^2}{3\hbar^2} \right) \exp \left(-\frac{D_-^2 \langle E^2 \rangle s^2}{6\hbar^2} \right) \right] ds
\end{aligned} \tag{5.35}$$

Le profil présenté dans la figure (5.1) : c'est la raie Lyman α avec structure fine de l'argon hydrogèneoïde pour une densité $N_e = 1.5 \times 10^{23} \text{cm}^{-3}$ et une température $T = 10^7$ K.

5.5 Références

- [1] M. Baranger, Phys. Rev. 111, 481 (1958).
- [2] M. Baranger, Phys. Rev. 111, 494 (1958).
- [3] H. R. Griem, A. Kolb. et Y. shen. Phys. Rev. 116, 4 (1959)
- [4] H. R. Griem," Spectral line broadening in plasmas ", Academic Press Inc.
New York (1974).
- [5] F. Khelfaoui,"Modèle de profils Stark d'ions multichargés dans
les plasma chauds ", thèse de Doctorat, université de Provence, France (1991).
- [6] N. Bedida, D. Boland, M T. Meftah et R. Stamm,"Path integral formalism
for the spectral line shape in plasmas : Lyman- α with fine structure",
19^{ème} ICSLS, Valladolid, Espagne (Juin 2008).

5.6 CONCLUSION ET PERSPECTIVES

Dans ce mémoire, nous avons reformulé la théorie du rayonnement dans les plasmas à partir de l'équation de Dirac en terme de l'intégrale de chemin de Feynman. Il est clair que cette équation se laisse résoudre exactement seulement pour les ions hydrogenoides.

Dans le premier chapitre, nous avons présenté l'interaction d'un atome avec un champ électromagnétique extérieur en utilisant l'équation de Dirac. Nous nous sommes intéressés en particulier à l'interaction d'un atome hydrogénoïde avec le champ électrique créé par les charges électriques d'un plasma.

Dans le second chapitre, nous avons calculé la fonction d'auto-corrélation du moment dipolaire électrique pour la raie Lyman alpha avec structure fine dans les deux cas : statique et dynamique par la méthode de l'intégrale de chemin.

Le troisième chapitre est une vue d'ensemble sur les modèles des opérateurs de collisions électroniques existants. Nous avons consacré le quatrième chapitre à élaborer un modèle d'opérateur de collision électronique en tenant compte des effets relativistes.

Le cinquième chapitre est consacré à montrer l'effet de spin d'électron lié à l'ion hydrogénoïde (structure fine) sur le profil de raies de Lyman alpha de Ar^{+17} .

Une extension d'application la méthode de l'intégrale de chemin aux autres types de raies plus compliquées comme Lyman bêta et Balmer alpha est laissée en perspective dans un futur travail.

5.7 APPENDICES

5.7.1 Appendice A: Espace de Liouville

L'espace de Liouville L est construit à partir de l'espace de Hilbert H comme le produit tensoriel de H par son dual H^d :

$$L = H \otimes H^d \quad (\text{A.1})$$

Ainsi, un vecteur de base de cet espace noté $|\alpha\beta\rangle$, est le dyade $|\alpha\rangle\langle\beta|$.

Construite à partir d'une base complète de H .

Le produit scalaire dans l'espace de Liouville est donné par :

$$\langle\langle\alpha\beta|\alpha'\beta'\rangle\rangle = \langle\alpha|\alpha'\rangle\langle\beta|\beta'\rangle^* \quad (\text{A.2})$$

où le produit scalaire dans H est noté avec des vecteurs bra $\langle\alpha|$ et ket $|\beta\rangle$.

Un opérateur A de l'espace de Hilbert devient un vecteur $|A\rangle$ dans l'espace L comme suit :

$$|A\rangle = \sum_{\alpha,\beta} \langle\alpha|\beta\rangle \quad (\text{A.3})$$

On peut définir, dans cet espace L , la trace d'un opérateur A comme suit :

$$Tr\{A\} = \sum_f \langle\langle ff|A\rangle\rangle \quad (\text{A.4})$$

La trace d'un produit d'opérateurs A par B est alors :

$$Tr \{A, B\} = \sum_f \langle\langle B^+ | A \rangle\rangle \quad (\text{A.5})$$

à partir d'un opérateur A de l'espace de Hilbert, on définit un super-opérateur de l'espace de Liouville par :

$$A = \frac{1}{\hbar} (AI^+ - IA^+)$$

où I est l'opérateur identité.

5.7.2 Appendice B: Intégration angulaire

Étudions la dérivation du terme d'interférence qui est construit à partir du troisième terme que nous noterons I de (3.30) :

$$I = -\frac{N_e}{\hbar^2} \int v f(v) d\vec{v} \int \rho \delta_{0, \vec{\rho} \cdot \vec{v}} d\vec{\rho}. \quad (\text{B.1})$$

$$\left[\int_{-\infty}^{\infty} ds_1 \int_{-\infty}^{\infty} ds_2 \langle \alpha' | V'(s_2) | \alpha \rangle \langle \alpha | V'(s_1) | \alpha \rangle \delta_{\beta\beta'} \right]_{ang}$$

En injectant la formule de V' , il vient :

$$I = -\frac{2\pi N_e e^2}{\hbar^2} \int_0^{\infty} v f(v) dv \int_{\rho_{\min}}^{\rho_{\max}} \rho d\rho. \quad (\text{B.2})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} ds_1 \int_{-\infty}^{\infty} ds_2 \exp\left(i s_1 \omega_{\beta\beta'} + i s_2 \omega_{\alpha\alpha'}\right) \left[\langle \beta | \vec{d} \cdot \vec{E}(s_1) | \beta' \rangle \langle \alpha' | \vec{d} \cdot \vec{E}(s_2) | \alpha \rangle \right]_{ang}$$

où:

$$f(v) = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi K_B T} \right)^{3/2} v^2 \exp\left(\frac{-mv^2}{2K_B T} \right) \quad (\text{B.3})$$

et

$$\omega_{\beta\beta'} = \frac{H_\beta - H_{\beta'}}{\hbar} \quad (\text{B.4})$$

$$\vec{d} = -e \vec{r} \quad (\text{B.5})$$

et

$$\vec{E}_i(s_i) = -e \frac{\vec{R}_i(s_i)}{R^3(s_i)} \quad (\text{B.6})$$

En introduisant ces notations, on peut écrire l'éq (B.2) sous la forme :

$$I = -\frac{8\pi N_e e^4}{3\hbar^2} \left(\frac{m}{2\pi K_B T} \right)^{3/2} \int_0^\infty v^3 \exp\left(\frac{-mv^2}{2K_B T e}\right) dv. \quad (\text{B.7})$$

$$\int \rho d\rho \sum_{\mu\nu} r_{\beta\beta'}^\mu r_{\alpha\alpha'}^\nu \int_{-\infty}^\infty ds_1 \int_{-\infty}^\infty ds_2 \exp\left(i\omega_{\beta\beta'} s_1 + i\omega_{\alpha'\alpha} s_2\right) \cdot$$

$$\left[\frac{\vec{R}^\mu(s_1) \vec{R}^\nu(s_2)}{R^3(s_1) R^3(s_2)} \right]_{ang}$$

Calculons maintenant la moyenne angulaire figurant dans (B.7) :

$$\left[\frac{\vec{R}^\mu(s_1) \vec{R}^\nu(s_2)}{R^3(s_1) R^3(s_2)} \right]_{ang} = \int_0^{2\pi} \frac{d\psi}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi^*}{2\pi} \int_0^\pi \frac{\sin(\theta) d\theta}{2} \left[\frac{\vec{R}^\mu(s_1) \vec{R}^\nu(s_2)}{R^3(s_1) R^3(s_2)} \right] \quad (\text{B.8})$$

où les angles d'intégration sont les angles d'Euler qui permettent de se placer dans le référentiel lié au plan de la collision. En effet $\vec{R}(s_1)$ s'obtient par une transformation d'Euler appliquée au vecteur position de l'émetteur dans le plan de la collision, c'est à dire :

$$\vec{R}(s_i) = A \begin{pmatrix} X_i(s_i) \\ Y_i(s_i) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.9})$$

La matrice d'Euler est donnée par :

$$A = \begin{pmatrix} (\cos \psi \cos \varphi - \cos \theta \sin \varphi \sin \psi) & (\cos \psi \sin \varphi + \cos \theta \cos \varphi \sin \psi) & \sin \psi \sin \theta \\ (-\sin \psi \cos \varphi - \cos \theta \sin \varphi \cos \psi) & (-\sin \psi \sin \varphi + \cos \theta \cos \varphi \cos \psi) & \cos \psi \sin \theta \\ \sin \varphi \sin \theta & -\sin \theta \cos \varphi & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (\text{B.10})$$

On peut écrire le vecteur position du perturbateur comme :

$$\vec{R}(s_i) = \begin{pmatrix} (\cos \psi \cos \varphi - \cos \theta \sin \varphi \sin \psi) X_i(s_i) + (\cos \psi \sin \varphi + \cos \theta \cos \varphi \sin \psi) Y_i(s_i) \\ -(\sin \psi \cos \varphi + \cos \theta \sin \varphi \cos \psi) X_i(s_i) + (-\sin \psi \sin \varphi + \cos \theta \cos \varphi \cos \psi) Y_i(s_i) \\ \sin \varphi \sin \theta X_i(s_i) - \sin \theta \cos \varphi Y_i(s_i) \end{pmatrix} \quad (\text{B.11})$$

En effectuant les moyennes angulaires, les termes croisés (du type xy) s'annulent, ce qui donne :

$$\left[\frac{\vec{R}^\mu(s_1) \vec{R}^\nu(s_2)}{R^3(s_1) R^3(s_2)} \right]_{ang} = \frac{\delta_{\mu\nu} [X(s_1) X(s_2) + Y(s_1) Y(s_2)]}{3 R^3(s_1) R^3(s_2)} \quad (\text{B.12})$$

En remplaçant l'équation (B.12) dans (B.7) et faisant la somme sur μ et ν dans, on obtient [1]:

$$\begin{aligned} I &= -\frac{8\pi N_e e^4}{3\hbar^2} \left(\frac{m}{2\pi K_B T} \right)^{3/2} \int_0^\infty v^3 \exp\left(\frac{-mv^2}{2K_B T e}\right) dv. \\ &\int \rho d\rho \vec{r}_{\beta\beta'} \vec{r}_{\alpha\alpha'} \int_{-\infty}^\infty ds_1 \int_{-\infty}^\infty ds_2 \exp\left(i\omega_{\beta\beta'} s_1 + i\omega_{\alpha'\alpha} s_2\right) \\ &\frac{\delta_{\mu\nu} [X(s_1) X(s_2) + Y(s_1) Y(s_2)]}{3 R^3(s_1) R^3(s_2)} \\ &= \vec{r}_{\beta\beta'} \vec{r}_{\alpha\alpha'} \Phi_{int}(\omega_{\alpha\alpha'}, \omega_{\beta'\beta}) \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

ce qui donne bien la formule (3.34).

5.8 Références

- [1] D. Beorcker, C. Iglesias, et J. Dufty, Phys. Rev. A,36, 2254 (1987).
- [2] R. Zwanzig, Phys. Rev.124, 983 (1961).