

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique

Université El-Hadj Lakhder - BATNA -

T H È S E

Présentée au Département des Sciences de la matière

Faculté des Sciences

pour obtenir le diplôme de

DOCTORAT EN SCIENCES EN PHYSIQUE

Option : PHYSIQUE THEORIQUE DES PLASMAS

Par MOSBAH DIFALLAH

Thème

PHASE DE BERRY ET SPECTROSCOPIE DES PLASMAS

soutenue le 03 /07/2012

Membres du jury :

Président : SAID TOBECHE Pr. U. Batna

Examineurs :

ABDELHAMID BENHAYA Pr. U. Batna

MUSTAPHA MAAMACHE Pr. U. Sétif

SACI MESSAADI Pr. U. Batna

ROLAND STAMM Pr. U. Aix-Marseille

Rapporteur : MOHAMMED TAYEB MEFTAHA Pr. U. Ouargla

Remerciements

Ce travail a été réalisé sous la direction du Professeur Mohammed Tayeb Meftah du Laboratoire de Rayonnement et Plasmas et Physique des Surfaces dirigé par le Professeur Fethi Khelfaoui de l'université Kasdi Merbah Ouargla. Toute ma gratitude et ma reconnaissance vont à Mr le Professeur Mohammed Tayeb Meftah pour m'avoir proposé ce sujet de thèse et d'avoir dirigé et suivi de plus près ce travail. Je voudrais remercier Mr le Professeur Roland Stamm et lui témoigner ma profonde reconnaissance, pour avoir accepté de m'accueillir au sein du laboratoire de Physique des Interactions Ioniques et Moléculaires à l'université Aix- Marseille, pour une collaboration de thèse, mes vifs remerciements lui vont pour sa gentillesse et sa disponibilité pendant mon séjour au laboratoire. Je remercie le professeur Saïd Tobeche de m'avoir honoré en acceptant de présider le jury. Je voudrais, aussi, remercier tous les membres du jury : Pr. Benhaya Abdelhamid, Pr. Roland Stamm, Pr. Mustapha Maamache, et Pr. Saci Messaadi avec ma plus grande reconnaissance pour l'intérêt qu'ils ont porté à ce travail. Je remercie vivement tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à l'élaboration de cette thèse, même par un petit sourire d'encouragement. Mes remerciements s'adressent à toute la famille et tous mes amis.

Table des matières

0.1	Introduction générale	5
1	Théorie générale des profils de raies	8
1.1	Introduction	8
1.2	Causes d'élargissement d'un profil de raies	8
1.3	La théorie quantique du rayonnement	9
1.3.1	Introduction	9
1.3.2	Transition quantique	10
1.3.3	La méthode des perturbations : application au calcul des probabilités des transitions	11
1.3.4	L'opérateur d'interaction d'un rayonnement avec un système quantique	14
1.3.5	Emission et absorption du rayonnement	16
1.3.6	Transition dipolaire électrique	16
1.4	Le profil de raie	18
1.5	Formalisme d'élargissement Stark	20
1.5.1	Paramètres importants dans l'élargissement Stark	21
1.5.2	Approximation d'impact	22
1.5.3	Approximation quasi statique	23
1.5.4	Le profil de raie	23
1.6	Conclusion	25
2	Théorème adiabatique et phase géométrique	27
2.1	Introduction	27
2.2	Atome soumis à un champ électrique oscillant	27
2.3	Une particule de spin 1/2 dans un champ magnétique oscillant	30
2.4	Théorème adiabatique	32
2.5	La phase géométrique	35
2.6	Conclusion	37
3	L'effet adiabatique d'un champ électrique oscillant sur les profils des raies dans un plasma	39
3.1	Introduction	39

3.2	Résultats fondamentaux du théorème adiabatique	39
3.3	La fonction d'auto-corrélation dipolaire	43
3.4	Application à la raie Lyman alpha	45
3.4.1	Etat $n = 1$:	45
3.4.2	Etat $n = 2$:	45
3.5	Profil de raie	47
3.6	Conclusion	55
4	Intégrale de chemin et rayonnement des plasmas	57
4.1	Introduction	57
4.2	Construction physique de l'intégrale de chemin	57
4.2.1	Amplitude de probabilité	57
4.2.2	Postulats de Feynman	58
4.2.3	Intégrale de chemin et formule de Trotter	60
4.2.3.1	Opérateur d'évolution	60
4.3	Utilisation du concept avec des exemples	62
4.3.1	La particule libre	62
4.3.2	L'oscillateur harmonique	62
4.4	Technique de la déviation par rapport au chemin classique	65
4.5	L'approche perturbative dans le formalisme de l'intégrale de chemin	66
4.6	Calcul de la fonction d'auto-corrélation du moment dipolaire par la méthode de l'intégrale de chemins	68
4.6.1	Cas d'impact	75
4.6.2	Cas statique	77
4.7	Conclusion	78
4.8	Conclusion générale	80

0.1 Introduction générale

Le théorème adiabatique est un concept important en mécanique quantique. Sa forme originale [1] est énoncée en 1928 par Max Born et Vladimir Fock de la manière suivante : Un système physique est maintenu dans son état propre instantané si la perturbation qui agit sur lui est suffisamment lente, et s'il y a un intervalle significatif entre la valeur propre et le reste du spectre du hamiltonien. Dans la référence [2], M. V. Berry a vu qu'il existe une phase acquise par les états propres instantanés après une évolution cyclique dans l'espace des paramètres classiques. Cette phase dite de Berry est une phase quantique qui se manifeste dans l'étude des systèmes quantiques en évolution adiabatique à travers des paramètres classiques qui évoluent beaucoup plus lentement que le temps propre quantique, c'est à dire le temps caractéristique d'une transition entre deux états [3, 4]. L'idée est que le système quantique a toujours le temps pour s'adapter aux changements environnementaux, et passe par une succession d'équilibre instantané (et donc états propres instantanés). L'hypothèse adiabatique suppose que la variation de perturbation est suffisamment lente par rapport au temps caractéristique, pour un petit nombre de vecteurs propres instantanés impliqués dans la description du système. Cela se produit par exemple dans le problème que nous étudions : l'interaction d'une molécule ou un atome avec le rayonnement dans un plasma soumis à une perturbation externe dépendante du temps). Dans cette thèse nous allons exposer de façon détaillée ce théorème important, puis l'exploiter pour en tirer les conséquences sur les profils de raies dans un plasma. En gardant le concept de ce théorème [3, 4], la fonction d'onde décrivant l'émetteur et son environnement (représentée par le champ électrique dépendant du temps en plus du microchamp électrique de plasma) est égale à une superposition des états propres instantanés. Dans son analyse originale, Berry a considéré un système quantique de spectre d'énergie discret et non dégénéré dont la dynamique est décrite par un ensemble des paramètres classiques $\vec{F}(t)$, qui varient lentement sur l'échelle de temps du système quantique. Il a montré que si $\vec{F}(t)$ varie adiabatiquement à travers d'un cycle dans l'espace des paramètres classiques, et le système quantique était initialement dans un état propre $|E(0)\rangle$ du hamiltonien $H(0)$, le système quantique retournera à son état initial $|E(0)\rangle$ à la fin du cycle avec un facteur de phase supplémentaire $\exp(i\gamma)$. Le nouveau élément ici est que la phase γ contient une contribution γ_B dont l'origine est profondément géométrique [5, 6]. γ_B est appelé la phase de Berry. Récemment, le théorème adiabatique a été étendu pour le cas dégénéré, et pour les perturbations non cycliques [7]. Quelques années après la découverte de Berry, J. Moody [8] a suggéré que la phase de Berry devrait être observable en résonance magnétique nucléaire. Par ailleurs, il est affirmé que la phase de Berry peut produire une décomposition dans les niveaux d'énergie du spin résonant qui altère les fréquences des résonances observées. Cette décomposition a été observée dans la suite par Suter [9]. La phase de Berry a été observée aussi dans un grand nombre d'expériences. D'autre part, Matveev et Musakhanov [10, 11] ont montré que la phase de Berry peut contribuer dans le spectre optique des atomes placés dans un champ électrique variant

lentement (adiabatique). Ils ont démontré qu'il existe une décomposition due à la rotation du champ pas très différente de la décomposition Stark. Dans la théorie du rayonnement dans les plasmas, peu des travaux ont été réalisés en appliquant l'approximation adiabatique (AA). Par exemple, Van Regemorter et Sahal-Bréchet [12] ont étudié les collisions électroniques dans le cadre de (AA). Griem [13] a appliqué dans le même contexte cette approximation dans le calcul de l'opérateur de l'évolution. De même, V. S. Lisitsa [14] a discuté cette approche pour différentes situations de plasma, mais dans tous ces travaux la phase de Berry n'était pas prise en compte. Notons aussi que d'autres travaux [15, 16, 17] ont été concentrés sur l'étude des profils des raies dans les plasmas placés dans un champ électrique oscillant, c-à-d que la condition de l'adiabaticité n'a pas été mentionnée. Cela implique que ces changements ne peuvent pas être comparés aux changements apportés par l'approximation adiabatique.

Dans notre travail, nous considérons cette phase, en plus de la phase dynamique de la fonction d'onde pour étudier l'élargissement des profils des raies. Dans le premier chapitre, nous allons poser le formalisme général des profils de raies. Nous avons consacré le deuxième chapitre au calcul de la phase géométrique à l'aide de deux exemples : atome soumis à un champ électrique oscillant, et une particule de spin $1/2$ placée dans un champ magnétique oscillant, ensuite nous avons présenté un exposé détaillé du théorème adiabatique en dérivant la phase géométrique. Dans le troisième chapitre, nous rappelons de certaines bases du théorème adiabatique en soulignant le rôle de la phase Berry dans la théorie du rayonnement dans les plasmas, et nous montrons aussi que la fonction d'auto-corrélation dipolaire (FACD) est affectée par cette phase. Nous avons appliqué les résultats précédents pour calculer FACD de la raie Lyman-alpha en montrant une décomposition supplémentaire des états du système non perturbé. Dans le troisième chapitre, on va prendre une moyenne sur le micro-champ électrique de toutes les composantes ioniques du plasma. Nous avons calculé l'expression de la raie Lyman-alpha sans structure fine en montrant l'importance de la phase Berry. Ceci est fait pour différentes valeurs ε_0 du champ électrique extérieur, différentes fréquences ω_0 , et différentes densités du plasma. Nous avons montré, lorsque ω_0 (la fréquence d'un champ électrique non-résonnant de plasma agissant sur l'atome) tend vers zéro, la phase (la décomposition de Berry) disparaît, et quand ω_0 augmente (en restant dans le domaine de validité de AA), cette phase contribue à l'élargissement de la raie (l'apparence de la décomposition de Berry). Nous avons conclu ce chapitre par quelques remarques.

Dans le dernier chapitre, nous avons appliqué l'approche de l'intégrale de chemins dans la théorie du rayonnement des plasmas. Cette méthode est introduite récemment dans ce domaine par [18] pour valider les résultats reconnus concernant les profils de raies dans un plasma. Ces travaux ont été fait dans l'approximation statique et dynamique. Dans cette thèse, nous avons calculé également la fonction d'auto-corrélation du dipôle électrique par la méthode de l'intégrale de chemin, puis nous avons discuté les différentes approximations.

Bibliographie

- [1] M. Born et V. Fock, Z. Phys 51, 165 (1928).
- [2] M V. Berry, Proc. R. Soc. Lond. 45 A392 (1984).
- [3] D. Bohm, Quantum Theory (Dover Publications, Inc., N.Y 1989)
- [4] P. W. Milonni and S. Singh, Advances in Atomic, Molecular and Optical Physics Vol.28, Chapter 2.
- [5] A. Shapere and F. Wilczek, Geometric Phases in Physics (World Scientific, New Jersey) 1989
- [6] M. Maamache, Thèse de Doctorat. Université de Nice (1993).
- [7] C. M. Simon, Phys. Rev. Lett. 51, 2167(1983)
- [8] G. Rigolin and G. Ortiz, Phys. Rev. Lett. 104, 170406(2010)
- [9] J. Moody, A. Shapere and F. Wilczek, Phys. Rev. Lett. 56, 893(1986)
- [10] D. Suter, D. C. Chingas, R. A. Harris and A. Pines, Mol. Phys. 61, 1327(1987)
- [11] C. M. Matveev, D. V. Maskhanov, J. Phys. B. 24, 2305(1991)
- [12] C. M. Matveev, D. V. Maskhanov, Phys. Lett. A. 135, 209(1991)
- [13] J. A.Regemorter and F. Sahal-Brechot, Ann. d'Astr. 27, 739(1964)
- [14] H. R. Griem, Principles of Plasma Spectroscopy. Cambridge Univ. Press (1997).
- [15] V. S. Lisitsa, Atoms in plasmas, Springer Series on Atomic, Optical and plasma physics (1994).
- [16] V. P. Gavrilenko et al, Phys. Rev. A 73 013203(2006)
- [17] E. A. Oks, St. Boddeker and H.-J. Kunze , Phys. Rev. A 44 Num.12, 8338 (1991)
- [18] M T. Meftah, Thèse de Doctorat, Université de Provence (1996).

Chapitre 1

Théorie générale des profils de raies

1.1 Introduction

La naissance de la physique quantique date depuis plus d'un siècle et sa description des phénomènes physiques, qui a transformé notre vision du monde, n'est toujours pas remise en cause. Ses prédictions ont toujours été confirmées par l'expérience avec une précision impressionnante. Aujourd'hui les concepts associés à la physique quantique sont utilisés de manière quotidienne par de nombreux physiciens et chimistes, qui sans être des spécialistes de physique quantique doivent en maîtriser quelques ingrédients de base : espace des états, niveaux d'énergie, transition entre états.

L'étude de l'interaction d'atomes ou de molécules avec des champs électromagnétiques, nécessite le développement de nouveaux outils de modélisation rendant compte de la dynamique quantique et la physique atomique de ces systèmes. Le rayonnement émis par système atomique, moléculaire ou ionique porte la marque des diverses perturbations qui agissent sur le système. Ces perturbations se traduisent par un élargissement, un déplacement ou par une levée de dégénérescence des niveaux.

1.2 Causes d'élargissement d'un profil de raies

Une raie observée en absorption ou en émission présente un certain profil qui donne la répartition de l'intensité autour de la fréquence centrale. Nous allons d'abord étudier les différentes causes d'élargissement d'une raie spectrale. Une raie peut être élargie par :

Effet Doppler :

Dans un gaz, que ce soit pour un rayonnement absorbé ou émis, la fréquence à laquelle se produit la transition dépend de la vitesse de l'atome ou de la molécule par rapport au détecteur. La distribution des vitesses provoque un élargissement de la raie. L'effet Doppler est en général le mécanisme dominant à basse densité, et dans tous les cas pour des températures élevées.

Effet des collisions :

Lorsque des collisions se produisent entre des atomes ou des molécules dans un gaz ou un plasma, il y a des échanges d'énergie qui conduisent à étaler leurs niveaux d'énergie. Le nombre de collisions par seconde dépend de la pression du gaz : cet effet est appelé élargissement de pression. Ainsi l'observation expérimentale de l'élargissement naturel d'une raie suppose que la pression du gaz soit faible. En changeant la pression et en observant l'effet produit sur la largeur de la raie, nous pouvons obtenir des informations sur les collisions qui peuvent se produire au sein du milieu étudié.

Effet Stark :

La présence d'un micro-champ électrique extérieur ou du micro-champ créé par les particules chargées du milieu environnant la particule émettrice, provoque un élargissement dit « Stark ». Le micro-champ peut avoir toutes les directions et prendre toutes les valeurs possibles, autour d'une certaine valeur moyenne, suivant la répartition des particules chargées dans le système, à chaque instant. L'effet Stark pour une transition donnée, dépend essentiellement de la densité et de la température.

Effet Zeeman :

En présence d'un champ magnétique, il existe une énergie d'interaction avec les moments cinétiques de l'atome (mouvement du noyau et des électrons). Cette perturbation permet de lever la dégénérescence des niveaux d'énergie, et peut se traduire par une perturbation du profil observé. Pour modéliser les raies, il faut prendre en compte toutes les causes d'élargissement énoncées précédemment. Nous rappelons aussi que nous ne considérerons ici que l'étude du profil d'une raie formée en milieu optiquement mince (lorsque la raie prend naissance dans un milieu optiquement épais sa forme est influencée par les absorptions et émissions successives du rayonnement qui ont lieu avant que le photon ne s'échappe du milieu). Nous introduisons dans la suite la notion de fonction d'auto-corrélation du dipôle, en nous basant sur la théorie quantique du rayonnement.

1.3 La théorie quantique du rayonnement

1.3.1 Introduction

Dans l'étude du rayonnement plusieurs phénomènes optiques (l'interférence et la polarisation) ne peuvent pas être expliqués dans le cadre des concepts utilisant les rayons et les faisceaux lumineux : c'est au 19^{ème} siècle que les physiciens ont élaboré une approche où le rayonnement est considéré sous forme d'onde électromagnétique.

La notion de rayonnement optique comprend le rayonnement ultraviolet dont les longueurs d'onde vont approximativement de 0.01 à 0.4 microns, le rayonnement visible dont

les longueurs d'onde sont comprises entre 0.4 et 0.75 microns, et le rayonnement infrarouge dont les longueurs d'ondes s'étendent de 0.75 à 10^2 microns.

L'étude la plus réaliste des phénomènes optiques est fondée sur la théorie quantique dans laquelle on retient à la fois le caractère ondulatoire et corpusculaire de la lumière. Le rayonnement est formé d'un flux de particules élémentaires : les photons. Ces particules élémentaires ne portent pas de charge électrique et ne possèdent pas une masse propre. L'énergie du photon est définie par :

$$E = \hbar\omega \quad (1.3.1)$$

où \hbar : est la constante de Planck et ω la pulsation du rayonnement optique.

L'impulsion du photon est définie par :

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} = \hbar \cdot \frac{\omega}{c} \vec{n} \quad (1.3.2)$$

où \vec{k} : est le vecteur d'onde du rayonnement, \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 ($\hbar k_x$, $\hbar k_y$, $\hbar k_z$) ainsi que celles de sa polarisation $\vec{\epsilon}$.

1.3.2 Transition quantique

Pour passer à une description qualitative plus complète, il est nécessaire d'avoir recours à la théorie quantique des perturbations non stationnaires qui est le point de départ de l'étude des probabilités des transitions quantiques.

Soit un système quantique se trouvant au départ dans un état stationnaire ψ_α d'énergie E_α :

$$\psi_\alpha(\vec{r}, t) = \varphi_\alpha(\vec{r}) \exp(-iE_\alpha t/\hbar) \quad (1.3.3)$$

où \vec{r} désigne l'ensemble des coordonnées spatiales du système.

On fait subir à ce système une action extérieure quelconque (une perturbation) durant un temps déterminé. Le système perturbé sera décrit par la fonction d'onde $\phi_\alpha(\vec{r}, t)$.

Lorsque la perturbation est supprimée, la structure initiale des niveaux énergétiques se rétablit. Pourtant, si le système se trouvait auparavant à l'état stationnaire, il peut en principe occuper maintenant un autre état stationnaire β (transition $\alpha \rightarrow \beta$).

En utilisant le principe de superposition des états, l'état perturbé peut être représenté par :

$$\phi_\alpha(\vec{r}, t) = \sum_k a_{\alpha k}(t) \psi_k(\vec{r}, t) \quad (1.3.4)$$

$|a_{\alpha k}|^2$ étant la probabilité pour que les mesures de l'énergie dans l'état ϕ_α donnent

une valeur E_k correspondant à l'état stationnaire ψ_k .

La probabilité pour que le système qui était initialement dans l'état α , se retrouve dans l'état β lorsque la perturbation a pris fin (la probabilité de transition), est donnée par l'expression suivante :

$$W_{\alpha\beta} = | a_{\alpha\beta}(\tau) |^2 \quad (1.3.5)$$

où τ est la durée d'action de la perturbation.

Les fonctions du temps $a_{\alpha k}(t)$ satisfont l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \sum_k \frac{da_{\alpha k}}{dt} \psi_k = \sum_k a_{\alpha k} H' \psi_k \quad (1.3.6)$$

où H' est l'Hamiltonien de perturbation.

Après multiplication des membres de cette équation par ψ_β^* , et intégration sur les coordonnées spatiales, on trouve :

$$\frac{da_{\alpha\beta}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \sum_k a_{\alpha k} \langle \beta | H' | k \rangle \exp(i\omega_{\beta k} t) \quad (1.3.7)$$

où $\omega_{\beta k} = (E_\beta - E_k)/\hbar$.

1.3.3 La méthode des perturbations : application au calcul des probabilités des transitions

Si la perturbation est suffisamment faible, le système d'équations est résolu de façon approchée à l'aide de la méthode des perturbations. La petitesse de la perturbation permet de représenter la fonction ϕ_n sous la forme :

$$\phi_n = \psi_n + \vartheta \quad (1.3.8)$$

où ϑ est une contribution relativement petite à la fonction initiale non perturbée ψ_n .

Conformément à cette forme, représentons les fonctions $a_{\alpha k}(t)$ intervenant dans la superposition (1.3.4) sous la forme :

$$a_{nk}(t) = \delta_{nk} + \left[a_{nk}^{(1)}(t) + a_{nk}^{(2)}(t) + \dots \right] \quad (1.3.9)$$

où on peut écrire que :

$$\vartheta = \sum_k \left[a_{nk}^{(1)} + a_{nk}^{(2)} + \dots \right] \psi_k(x, t)$$

Selon la relation (1.3.9), la quantité ϑ se divise à son tour en contributions de différents ordres de petitesse : les $a_{\alpha k}^{(1)}$ présentent le même ordre de petitesse que celui de la

perturbation H' ; les $a_{\alpha k}^{(2)}$ sont quadratiques en perturbation, etc.

A partir des équations (1.3.7) et (1.3.9) on obtient en conservant seulement les termes du premier ordre :

$$\frac{da_{\alpha\beta}^{(1)}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \langle \beta | H' | \alpha \rangle \exp(i\omega_{\alpha\beta}t) \quad (1.3.10)$$

C'est l'expression approchée des fonctions $a_{\alpha\beta}$ obtenue au premier ordre de la méthode des perturbations.

Si $\langle \beta | H' | \alpha \rangle = 0$, on utilise l'expression approchée au deuxième ordre de la méthode des perturbations. En conservant les termes du deuxième ordre on obtient :

$$\frac{da_{\alpha\beta}^{(2)}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \sum_k a_{\alpha k}^{(1)} \langle \beta | H' | k \rangle \exp(i\omega_{\beta k}t) \quad (1.3.11)$$

Donc au premier ordre de la méthode des perturbations, en partant de (1.3.10), on trouve pour la probabilité de transition :

$$W_{\alpha\beta}^{(1)} = |a_{\alpha\beta}^{(1)}(\tau)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^\tau \langle \beta | H'(t) | \alpha \rangle \exp(i\omega_{\beta\alpha}t) dt \right|^2 \quad (1.3.12)$$

et au deuxième ordre :

$$W_{\alpha\beta}^{(2)} = |a_{\alpha\beta}^{(2)}(\tau)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \sum_k \int_0^\tau a_{\alpha k}^{(1)} \langle \beta | H'(t) | k \rangle \exp(i\omega_{\beta k}t) dt \right|^2 \quad (1.3.13)$$

où la somme sur k est étendue aux états intermédiaires virtuels.

La probabilité $W_{\alpha\beta}^{(2)}$ est utilisée dans les cas où $W_{\alpha\beta}^{(1)} = 0$ ou, autrement dit, lorsque à l'approximation du premier ordre, la transition est interdite.

Prenons un exemple d'une perturbation harmonique appliquée entre les temps 0 et τ . Traitons d'abord le cas important de la perturbation harmonique appliquée entre le temps $t = 0$ et le temps $t = \tau$:

$$H'(t) = \begin{cases} 0 & \text{pour } t < 0 \text{ et } t > \tau, \\ h(e^{-i\omega t} + e^{i\omega t}) & \text{pour } 0 < t < \tau. \end{cases} \quad (1.3.14)$$

où l'opérateur h est indépendant du temps.

Au premier ordre de la méthode des perturbations, en introduisant (1.3.14) dans (1.3.13), on obtient :

$$W_{\alpha\beta}^{(1)} = |a_{\alpha\beta}^{(1)}(\tau)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |\langle \alpha | h | \beta \rangle|^2 \times \left| \frac{e^{i(\omega_{\alpha\beta}-\omega)\tau} - 1}{\omega_{\alpha\beta} - \omega} + \frac{e^{i(\omega_{\alpha\beta}+\omega)\tau} - 1}{\omega_{\alpha\beta} + \omega} \right|^2 \quad (1.3.15)$$

On trouve que la probabilité de transition est maximale lorsque $\omega \approx \omega_{\alpha\beta}$ ($E_\alpha = E_\beta + \hbar\omega$) et lorsque $\omega \approx -\omega_{\alpha\beta}$ ($E_\alpha = E_\beta - \hbar\omega$). Dans le premier cas, le système passe à des niveaux plus élevés et dans le second cas à des niveaux plus bas. Dans le cas du rayonnement optique, le premier terme correspond à l'absorption et le second à l'émission

stimulée de la lumière. Dans le cas de l'absorption, considérons la probabilité de transition par unité de temps. Dès lors, la relation (1.3.15) est réduite au premier terme de la somme à droite :

$$W_{\alpha\beta}^{(1)} = \left| a_{\alpha\beta}^{(1)}(\tau) \right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |\langle \alpha | h | \beta \rangle|^2 \times \left| \frac{e^{i(\omega_{\alpha\beta}-\omega)\tau} - 1}{\omega_{\alpha\beta} - \omega} \right|^2 = \frac{\pi\tau}{\hbar^2} |\langle \alpha | h | \beta \rangle|^2 f(\sigma, \tau) \quad (1.3.16)$$

dans laquelle :

$$f(\sigma, \tau) = \sin^2(\sigma\tau)/\pi\sigma^2\tau, \quad (1.3.17)$$

avec $\sigma = (\omega_{\alpha\beta} - \omega)/2$.

La fonction $f(\sigma, \tau)$ est non nulle seulement dans le voisinage de $\sigma = 0$, dans les limites d'une région dont les dimensions sont approximativement égales à τ^{-1} ($\Delta\sigma \approx 1/\tau$). Cela signifie que l'énergie des états finaux vers lesquels la transition est probable sous l'action de la perturbation harmonique considérée, se trouve indéterminée et que $\Delta E_\beta \approx \hbar\Delta\sigma$.

En d'autres termes, au bout du temps τ d'action de la perturbation harmonique, le système qui se trouvait initialement au niveau E_α peut se trouver avec une probabilité significative dans l'un des états d'énergie :

$$E_\beta = E_\alpha + \hbar\omega + dE_\beta \approx E_\alpha + \hbar\omega + \hbar/\tau \quad (1.3.18)$$

A la limite $\tau \rightarrow \infty$, on a pour la fonction $f(\sigma, \tau)$:

$$\sin^2(\sigma\tau)/\pi\sigma^2\tau \rightarrow \delta(\sigma) \quad (1.3.19)$$

où $\delta(\sigma)$ est la fonction delta de Dirac. Dans la suite, on pourra utiliser cette limite des temps grands, car les temps d'intérêt pour l'observation des profils spectraux sont beaucoup plus grands que la période des ondes électromagnétiques optique qui est de l'ordre de 10^{-15} sec. Dans ces cas, nous obtenons pour la probabilité de transition vers l'état d'énergie E_α l'expression suivante :

$$W_{\alpha\beta}^{(1)} = \frac{\pi\tau}{\hbar^2} |\langle \alpha | h | \beta \rangle|^2 \delta(\sigma) = \frac{\pi\tau}{\hbar} |\langle \alpha | h | \beta \rangle|^2 \delta(E_\alpha - E_\beta - \hbar\omega) \quad (1.3.20)$$

Le taux de transition $w_{\alpha\beta}$ par unité de temps est obtenu en dérivant $W_{\alpha\beta}$ par rapport à τ :

$$w_{\alpha\beta} = \frac{dW_{\alpha\beta}(\tau)}{d\tau} \quad (1.3.21)$$

On trouve alors que ce terme s'écrit :

$$w_{\alpha\beta}^{(1)} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \alpha | h | \beta \rangle|^2 \delta(E_\alpha - E_\beta - \hbar\omega) \quad (1.3.22)$$

1.3.4 L'opérateur d'interaction d'un rayonnement avec un système quantique

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

$$H_e = \frac{1}{2m}(\vec{P} - q_e \vec{A})^2 + q_e \phi_s \quad (1.3.23)$$

$\vec{A}(\vec{r}, t)$ est le potentiel vecteur et $\phi_s(\vec{r}, t)$ 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 $div \vec{A}' = 0$ et $\phi'_s = 0$.

L'Hamiltonien H_{int} d'un atome dans un champ électromagnétique peut donc s'écrire :

$$H_{int} = \frac{1}{2m}(\vec{P} - q_e \vec{A}')^2 + V \quad (1.3.24)$$

où V est l'opérateur d'énergie potentielle de l'électron dans le champ du noyau atomique.

Représentons l'Hamiltonien H_{int} sous la forme suivante :

$$H_{int} = H_0 + H' \quad (1.3.25)$$

où H' est le hamiltonien d'interaction jouant le rôle de perturbation, et $H_0 = \frac{p^2}{2m} + V(r)$ le hamiltonien de l'atome isolé. En utilisant les relations (1.3.23), (1.3.22) et (1.3.25), on trouve :

$$H' = -\frac{q_e}{2mc}(\vec{P} \vec{A}' + \vec{A}' \vec{P}) + \frac{q_e^2}{2mc^2} A'^2 \quad (1.3.26)$$

Sachant que $\vec{A}' \vec{P} = \vec{P} \vec{A}' + i\hbar div \vec{A}'$, et puisque $div \vec{A}' = 0$, on a donc :

$$H' = -\frac{q_e}{mc} \vec{P} \vec{A}' + \frac{q_e^2}{2mc^2} A'^2 \quad (1.3.27)$$

Cet Hamiltonien est responsable de tous les processus d'absorption et d'émission (spontanée et stimulée) de photons par l'atome. Dans la suite, on se trouvera dans les cas de champs électromagnétiques faibles pour lesquels le terme en A'^2 est petit devant le terme en $\vec{A}' \vec{P}$.

Si on applique la théorie des perturbations dépendantes du temps au terme d'interaction $H' = -\frac{q_e}{mc} \vec{P} \vec{A}'$ avec :

$$\vec{A}' = \vec{A}(\vec{r}) \exp(i\omega t) + \vec{A}^+(\vec{r}) \exp(-i\omega t) \quad (1.3.28)$$

On voit qu'on peut utiliser les résultats donnés par l'équation (1.3.22).

On trouve alors pour le taux d'absorption d'un atome dans le champ électromagnétique l'expression :

$$w_{\alpha\beta}^{(1)} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \left\langle \alpha \left| \frac{-q_e}{mc} \vec{P} \cdot \vec{A}(\vec{r}') \right| \beta \right\rangle \right|^2 \delta(E_\alpha - E_\beta - \hbar\omega) \quad (1.3.29)$$

Le vecteur $\vec{A}(\vec{r}')$ est donné par l'expression suivante [1] :

$$\vec{A}(\vec{r}') = \sqrt{2\pi c^2 \hbar} \frac{\vec{\varepsilon}}{\sqrt{\Lambda\omega}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}') \quad (1.3.30)$$

dans laquelle $\vec{\varepsilon}$ est le vecteur unitaire de polarisation, le vecteur \vec{r}' est l'opérateur rayon vecteur de l'électron, et Λ est le volume dans lequel on considère l'interaction avec le champ électromagnétique.

En utilisant l'expression de $\vec{A}(\vec{r}')$ on trouve :

$$w_{\alpha\beta}^{(1)} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \left\langle \alpha \left| \frac{-q_e}{mc} \sqrt{\frac{2\pi c^2}{\Lambda\omega}} \vec{\varepsilon} \cdot \vec{P} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}') \right| \beta \right\rangle \right|^2 \delta(E_\alpha - E_\beta - \hbar\omega) \quad (1.3.31)$$

Introduisons la fonction $\varphi(E)$ qui représente la densité des états finaux. La quantité $\varphi(E)dE$ exprime le nombre d'états du microsysteme dont l'énergie se situe dans l'intervalle $[E \text{ à } E + dE]$. La probabilité de transition de l'état d'énergie E_β à un état où l'énergie est comprise entre E_α et $E_\alpha + dE_\alpha$ peut être représentée sous la forme :

$$dw_{\alpha\beta}^{(1)} = w_{\alpha\beta}^{(1)} \varphi(E_\alpha) dE_\alpha \quad (1.3.32)$$

En introduisant (1.3.31) dans (1.3.32), on obtient :

$$dw_{\alpha\beta}^{(1)} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \left\langle \alpha \left| \frac{-q_e}{mc} \sqrt{\frac{2\pi c^2}{\Lambda\omega}} \vec{\varepsilon} \cdot \vec{P} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}') \right| \beta \right\rangle \right|^2 \delta(E_\alpha - E_\beta - \hbar\omega) \varphi(E_\alpha) dE_\alpha \quad (1.3.33)$$

La relation (1.3.18) peut être appliquée ici mais à condition que φ soit la densité non pas des états finaux mais des états initiaux du système. En supposant que le rayonnement possède une polarisation déterminée et se propage dans les limites d'un angle solide $d\Omega$, et en utilisant la notation $d\varphi = \varphi(E_\alpha) dE_\alpha$, on peut écrire [2] :

$$d\varphi = \frac{\Lambda\omega^2}{\pi^2 c^3 \hbar} \frac{d\Omega}{8\pi} \quad (1.3.34)$$

En portant (1.3.34) dans (1.3.33) on trouve pour la probabilité d'absorption à un seul photon l'expression suivante :

$$dw_{\alpha\beta}^{(1)} = \frac{q_e^2 \omega}{2\pi c^3 m^2 \hbar} \sum_{i=1}^2 \left| \left\langle \alpha \left| \vec{\varepsilon}_i \cdot \vec{P} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}') \right| \beta \right\rangle \right|^2 \delta(E_\alpha - E_\beta - \hbar\omega) d\Omega \quad (1.3.35)$$

Cette expression représente la probabilité, par unité de temps, d'un processus dans

lequel l'électron lié absorbe un photon caractérisé par l'énergie $\hbar\omega$, le vecteur d'onde \vec{k} et le vecteur de polarisation $\vec{\varepsilon}_1$. La somme correspond aux deux possibilités indépendantes de polarisation transversale du photon.

1.3.5 Emission et absorption du rayonnement

Soit $I_{\vec{k}\vec{\varepsilon}}(\omega)d\omega d\Omega$ l'intensité d'un rayonnement polarisé incident par intervalle de pulsation $d\omega$, et par intervalle d'angle solide $d\Omega$. Dans cet intervalle le nombre de modes des oscillations est $\frac{k^2}{(2\pi)^2}dk.d\Omega$, dont chacun comporte $N_{\vec{k}\vec{\varepsilon}}$ photons de polarisation donnée.

En multipliant ce nombre par $N_{\vec{k}\vec{\varepsilon}}$, et en divisant le résultat obtenu par le volume V , on obtient le nombre de photons par unité de volume du rayonnement incident :

$$d^2N = N_{\vec{k}\vec{\varepsilon}} \frac{\omega^2}{(2\pi c)^3} d\omega.d\Omega \quad (1.3.36)$$

En multipliant par $\hbar\omega$, on trouve la densité d'énergie du rayonnement. La multiplication ultérieure par c donne l'expression pour la densité de flux lumineux, c'est-à-dire pour l'intensité du rayonnement incident :

$$I_{\vec{k}\vec{\varepsilon}}(\omega)d\omega d\Omega = c\hbar\omega \frac{N_{\vec{k}\vec{\varepsilon}}\omega^2}{(2\pi c)^3} d\omega.d\Omega \quad (1.3.37)$$

Ainsi l'intensité du rayonnement incident par unité d'angle solide et par unité d'intervalle de pulsation a pour expression :

$$I_{\vec{k}\vec{\varepsilon}}(\omega) = \frac{N_{\vec{k}\vec{\varepsilon}}\hbar\omega^3}{(2\pi)^3 c^2} \quad (1.3.38)$$

Soit $d w^{(spontanée)}$, la probabilité d'émission spontanée d'un photon de polarisation $\vec{\varepsilon}$ dans l'angle solide $d\Omega$. Les probabilités des différents processus radiatifs sont reliées entre elles par les relations suivantes [3] :

$$d w^{(stimulée)} = d w^{(absorption)} = d w^{(spontanée)} \frac{8\pi^3 c^2}{\hbar\omega^3} I_{\vec{k}\vec{\varepsilon}} \quad (1.3.39)$$

1.3.6 Transition dipolaire électrique

On a été indiqué dans l'introduction que le domaine du 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 de 10^{-4} à 10^{-3} microns. Il en résulte que toutes les longueurs d'onde du domaine considéré satisfont à la condition :

$$\lambda \gg a \quad (1.3.40)$$

où a est la dimension du système rayonnant.

Cette condition permet de simplifier considérablement les éléments de matrice de la probabilité de transition. Puisque $r \leq a$, on peut poser $kr \ll 1$, et écrire :

$$\exp(\pm i \vec{k} \cdot \vec{r}') \approx 1 \quad (1.3.41)$$

Dans ce cas on peut montrer que :

$$\vec{p}_{\alpha\beta}(t) = -i \frac{m\omega}{q_e} (\vec{d}_{\alpha\beta}) \quad (1.3.42)$$

Utilisons la formule de la fonction d'onde dépendante du temps donnée dans l'expression (1.3.3) :

$$\int \psi_{\beta}^*(\vec{r}', t) \vec{r}' \cdot \psi_{\alpha}(\vec{r}', t) dV = \exp[i(E_{\beta} - E_{\alpha})t/\hbar] \int \psi_{\beta}^*(\vec{r}') \vec{r}' \cdot \psi_{\alpha}(\vec{r}') dV \quad (1.3.43)$$

ou encore :

$$\vec{r}_{\alpha\beta}(t) = \int \psi_{\beta}^*(\vec{r}', t) r \psi_{\alpha}(\vec{r}', t) dV = \exp(i\omega_{\alpha\beta}t) (\vec{r}_{\alpha\beta}) \quad (1.3.44)$$

On trouve par analogie :

$$\vec{p}_{\alpha\beta}(t) = \exp(i\omega_{\alpha\beta}t) (\vec{p}_{\alpha\beta}) \quad (1.3.45)$$

En utilisant la relation entre r et p on trouve :

$$\frac{d\vec{r}_{\alpha\beta}}{dt} = -i\omega_{\alpha\beta} \vec{r}_{\alpha\beta} \quad (1.3.46)$$

ou encore

$$\frac{d\vec{r}_{\alpha\beta}}{dt} = -\frac{i\omega}{q_e} \vec{d}_{\alpha\beta} \quad (1.3.47)$$

où d est le module du moment dipolaire électrique de l'électron.

En introduisant (1.3.44) et (1.3.45) dans cette dernière égalité on trouve :

$$i\omega \exp(i\omega t) (\vec{r}_{\alpha\beta}) = \exp(i\omega t) (\vec{p}_{\alpha\beta}) / m \quad (1.3.48)$$

Le résultat (1.3.42) découle immédiatement de cette dernière expression si l'on tient compte du fait que :

$$\vec{d} = -q_e \vec{r}' \quad \text{et} \quad (\vec{d}_{\alpha\beta}) = -q_e (\vec{r}_{\alpha\beta}) \quad (1.3.49)$$

Dans cette approximation dipolaire, on obtient donc la probabilité de transition par unité de temps ($\alpha \rightarrow \beta$) avec émission d'un photon, où la somme correspond aux deux possibilités indépendantes de polarisation transversale du photon, on obtient donc :

$$dw_{\alpha\beta}^{(1)} = \frac{\omega^3}{2\pi\hbar c^3} \sum_{i=1}^2 \left| \langle \alpha | \vec{\varepsilon}_i \cdot \vec{d} | \beta \rangle \right|^2 \delta(\omega - \omega_{\alpha\beta}) d\Omega \quad (1.3.50)$$

Les probabilités de 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 du système rayonnant calculées avec cette approximation sont appelées transitions dipolaires électriques.

1.4 Le profil de raie

En partant de la probabilité de rayonnement dipolaire d'une particule émettrice dans le cas de l'émission spontanée, et en multipliant cette dernière par l'énergie par photon $\hbar\omega$, on obtient la puissance totale rayonnée lors d'une transition dipolaire électrique d'un état initial $|\alpha\rangle$ à un état final $|\beta\rangle$. En prenant la somme sur tous les états initiaux et finaux pondérés par leurs probabilités d'occupation ρ_α , nous obtenons l'expression suivante [4] :

$$P(\omega) = \frac{\omega^4}{2\pi c^3} \sum_{\alpha,\beta} \sum_{i=1}^2 \rho_\alpha \delta(\omega - \omega_{\alpha\beta}) \left| \langle \beta | \vec{\varepsilon}_i \cdot \vec{d} | \alpha \rangle \right|^2 \quad (1.4.1)$$

où $\omega_{\alpha\beta}$ est la pulsation de la transition radiative entre les états respectivement d'énergie E_α et E_β .

\vec{d} est l'opérateur du moment dipolaire total du système (émetteur- perturbateur), tandis que $\vec{\varepsilon}_i$ représente la polarisation du champ perturbateur.

Après avoir posé :

$$P(\omega) = \frac{\omega^4}{2\pi c^3} I(\omega) \quad (1.4.2)$$

on définit ainsi la fonction $I(\omega)$ qui est appelée le profil de raie normalisé.

Le passage à la transformée de Fourier nous permet d'introduire une fonction du temps $C(t)$:

$$C(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-i\omega t) I(\omega) d\omega \quad (1.4.3)$$

$$= \sum_{\alpha,\beta} \sum_{i=1}^2 \rho_\alpha \exp(-i\omega_{\alpha\beta} t) \left| \langle \beta | \vec{\varepsilon}_i \cdot \vec{d} | \alpha \rangle \right|^2 \quad (1.4.4)$$

La propriété $C(-t) = [C(t)]^*$ de la symétrie par renversement du temps permet d'écrire, le profil de raie $I(\omega)$ comme la transformation de Fourier inverse de $C(t)$:

$$I(\omega) = \pi^{-1} \Re \int_0^{+\infty} \exp(+i\omega t) C(t) dt \quad (1.4.5)$$

où \Re désigne la partie réelle d'un nombre complexe.

En tenant compte de l'expression de $\omega_{\alpha\beta}$, la fonction $C(t)$ peut s'écrire de la manière suivante :

$$C(t) = \sum_{\alpha,\beta} \sum_{i=1}^2 \rho_\alpha e^{-i\omega_{\alpha\beta} t} \left| \langle \beta | \vec{\varepsilon}_i \cdot \vec{d} | \alpha \rangle \right|^2 \quad (1.4.6)$$

$$= \sum_{\alpha, \beta} \sum_{i=1}^2 \rho_{\alpha} e^{-iE_{\alpha}t/\hbar} e^{iE_{\beta}t/\hbar} \langle \beta | \vec{\varepsilon}_i \cdot \vec{d} | \alpha \rangle \langle \alpha | \vec{\varepsilon}_i \cdot \vec{d} | \beta \rangle \quad (1.4.7)$$

Si on introduit l'opérateur d'évolution du système :

$$T(t) = e^{-iHt/\hbar} \quad (1.4.8)$$

où H est l'Hamiltonien du système complet (émetteur, perturbateur), la fonction $C(t)$ peut se mettre sous la forme d'une trace sur les états du système quantique [5] :

$$C(t) = \sum_{i=1}^2 Tr \left\{ \vec{\varepsilon}_i \cdot \vec{d} \cdot T^*(t) \vec{\varepsilon}_i \cdot \vec{d} \cdot T(t) \rho \right\} \quad (1.4.9)$$

que nous pouvons définir comme la fonction d'auto-corrélation du moment dipolaire électrique .

En passant à la notation de Heisenberg :

$$\vec{d}(t) = T^*(t) \vec{d} T(t), \quad (1.4.10)$$

il vient :

$$C_{dd}(t) = \sum_{i=1}^2 Tr \left\{ \vec{\varepsilon}_i \cdot \vec{d}(0) \vec{\varepsilon}_i \cdot \vec{d}(t) \rho \right\} \quad (1.4.11)$$

Nous faisons l'hypothèse du chaos initial qui signifie que le système ne garde aucune mémoire des interactions précédant l'instant initial. Cette hypothèse est justifiée tant que l'énergie d'interaction $\hbar\omega$ est petite devant kT [6]. Dans la suite on va considérer des raies spectrales associées à une énergie de transition beaucoup plus petit que kT , et l'hypothèse du chaos initial va nous permettre de factoriser la matrice densité de notre système en un produit de deux matrices densités :

$$\rho = \rho_E \rho_B \quad (1.4.12)$$

où ρ_E et ρ_B sont les matrices densité relatives à l'émetteur et au bain de perturbateurs.

Cette factorisation permet de calculer la trace dans l'équation (1.4.9) successivement sur chaque sous-système :

$$C(t) = \sum_{i=1}^2 Tr_E \left\{ \vec{\varepsilon}_i \cdot \vec{d} T_E^*(t) \vec{\varepsilon}_i \cdot \vec{d} T_E(t) \rho_E \right\} \quad (1.4.13)$$

On peut cependant remplacer la trace sur les états des perturbateurs par une moyenne statistique, symbolisée par $\{\dots\}_{moy}$ dans l'espace des phases des perturbateurs :

$$C(t) = \sum_{i=1}^2 Tr_E \left\{ \left\{ \vec{\varepsilon}_i \cdot \vec{d} T_E^*(t) \vec{\varepsilon}_i \cdot \vec{d} T_E(t) \right\}_{moy} \rho_E \right\} \quad (1.4.14)$$

Tr_E est la trace sur les états de l'émetteur .

$T_E(t)$ est l'opérateur d'évolution de l'émetteur obéissant à l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{dT_E(t)}{dt} = [H_0 + H'(t)] T_E(t) \quad (1.4.15)$$

où H_0 est l'hamiltonien non perturbé et $H'(t)$ est la perturbation appliquée sur l'émetteur qui évalue conformément à l'équation de Schrödinger.

Définition d'un système quantique

Dans les notations de l'atome double, nous considérons que les transitions radiatives se font entre deux groupes de niveaux d'énergie de l'émetteur qui sont répartis en un groupe de niveaux supérieur, noté «a» , formé des états $\alpha, \alpha', \alpha'', \dots$, et un groupe de niveaux inférieurs, noté «b», formé des états $\beta, \beta', \beta'', \dots$. Les groupes «a» et «b» sont tels que la séparation en énergie entre deux états d'un même groupe est très petite devant celle des deux groupes de niveaux : $E_{\alpha\alpha'} \ll E_{\beta\alpha}$ et $E_{\beta\beta'} \ll E_{\beta\alpha}$. Une transition radiative de l'atome se fait entre un niveau de groupe «a» et un niveau de groupe «b».

A cette transition, correspond l'élément dipolaire radiatif $\langle \alpha | \vec{\epsilon} \cdot \vec{r} | \beta \rangle$ connectant un état $|\alpha\rangle$ du groupe supérieur «a» à un état $|\beta\rangle$ du groupe inférieur «b». Quant aux éléments dipolaires $\langle \alpha | \vec{\epsilon} \cdot \vec{r} | \alpha' \rangle$ et $\langle \beta | \vec{\epsilon} \cdot \vec{r} | \beta' \rangle$, ils couplent respectivement les états à l'intérieur du même groupe de niveaux «a» et les états à l'intérieur du même groupe de niveaux «b» : ils sont appelés les couplages dipolaires ou couplages Stark.

Si l'énergie $E_{\alpha\alpha'} \ll E_{\beta\alpha}$ et $E_{\beta\beta'} \ll E_{\beta\alpha}$ alors l'amplitude de transition entre les niveaux α et β peut être négligées : c'est l'approximation de non-extinction (no quenching). Avec cette approximation, les éléments de matrice non nuls de l'opérateur d'évolution de l'émetteur, $T_E(t)$, sont ceux appartenant à un même groupe de niveaux.

1.5 Formalisme d'élargissement Stark

La description du formalisme de profil de raies d'émission d'un émetteur plongé dans un plasma est tout à fait générale, par le fait que l'intensité du spectre de raies est donné par la transformée de Fourier de la fonction d'auto-corrélation du dipôle. Le calcul de cette fonction nécessite la connaissance de l'opérateur d'évolution de l'émetteur correspond à l'équation d'évolution (1.4.15).

Une solution rigoureuse de cette équation est loin d'être atteinte à cause du terme $H'(t)$, la solution qui semble la plus évidente est de la résoudre perturbativement ou numériquement.

1.5.1 Paramètres importants dans l'élargissement Stark

Le champ électrique au niveau de l'émetteur, dû aux particules chargées, obéit à un processus stochastique très complexe. Des progrès dans le traitement de l'élargissement Stark passent en particulier par une bonne connaissance des propriétés du micro-champ au niveau de l'émetteur.

L'opérateur d'interaction $H'(t) = -\vec{d} \cdot \vec{F}(t)$ défini dans l'espace de Liouville à partir de \vec{d} . En effet, le micro-champ électrique peut être séparé en une composante ionique $\vec{F}_i(t)$ et une composante électronique $\vec{F}_e(t)$:

$$\vec{F}(t) = \vec{F}_e(t) + \vec{F}_i(t) \quad (1.5.1)$$

A cause de la différence de leurs masses, les temps caractéristiques du mouvement de ces deux types de particules sont très différents. Il est d'usage de traiter séparément les perturbations électroniques et ioniques, par deux approximations différentes, ce qui simplifiera le calcul des profils de raies.

La perturbation électronique du micro-champ correspond à des intervalles de temps courts, caractérisant le mouvement des électrons. La perturbation ionique correspond à des intervalles de temps longs, caractérisant le mouvement des ions. Les électrons qui sont responsables, à cause de leur forte mobilité, à des variations de la phase du train d'onde émis, sont traités dans l'approximation d'impact. Tandis que les ions, plus lourds donc plus lents, qui génèrent des champs électriques pouvant être considérés constants pendant le processus d'émission, sont souvent traités dans l'approximation quasi statique.

Il est utile, avant d'utiliser les deux approximations pour la suite de l'étude, d'introduire quelques paramètres importants dans les formalismes d'élargissement de raies.

Temps d'intérêt atomique

Le temps d'intérêt d'un processus d'élargissement est une conséquence directe de la forme du profil de raie. Le temps d'intérêt $\Delta t_i = 1/|\Delta\omega|$; ($\Delta\omega = \omega - \omega_0$ où ω_0 est le centre de la raie) est l'intervalle de temps pendant lequel il est utile de connaître de façon détaillée le déroulement des processus d'interaction entre l'émetteur et les perturbateurs. On voit que Δt_i 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, lorsqu'on se déplace suffisamment loin du centre dans l'aile de la raie.

Temps caractéristique associé à une perturbation

Dans le cas de collisions binaires, le temps caractéristique associé à la perturbation correspond au temps de collision $\tau_c = b/v$, 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 les plasmas plus denses, au lieu d'utiliser le temps de collision nous devons utiliser les temps de corrélation des fonctions de corrélation du micro-champ électrique du plasma qui représentent mieux les effets collectifs des perturbateurs.

Nous allons maintenant voir plus en détails les deux approximations évoquées précédemment.

1.5.2 Approximation d'impact

Cette approximation est utilisée lorsque les collisions sont essentiellement binaires, et dans la limite où le temps de collisions τ_c est très court comparé au temps d'intérêt Δt_i . Elle suppose que les collisions sont en moyenne faibles, de telle sorte qu'il faut beaucoup de collisions faibles, ou une seule collision forte pour que la lumière perde la mémoire de sa phase initiale. Les collisions fortes sont traitées selon le modèle de Lorentz : une telle collision, considérée comme instantanée, interrompt complètement le train d'onde de lumière. En général, la perturbation dominante est due à l'effet cumulatif de nombreuses collisions faibles.

Soient v , m_e et b la vitesse, la masse et le paramètre d'impact d'une collision d'un électron entrant en collision avec un atome excité constitué d'un cœur de charge Z et d'un électron sur une orbite de nombre quantique principal n . Un élément dipolaire caractéristique de la matrice de transition est de l'ordre de $q_e \cdot n^2 \cdot \frac{a_0}{Z}$ (a_0 est le rayon de Bohr) et donc l'énergie d'interaction est de l'ordre de $q_e^2 \cdot n^2 \cdot \frac{a_0}{Z \cdot b^2}$. 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 :

$$\left(q_e^2 \cdot n^2 \cdot \frac{a_0}{Z \cdot b^2} \right) \left(\frac{b}{v} \right) \ll \hbar \quad (1.5.2)$$

ou encore :

$$b \gg b_w \quad (1.5.3)$$

où $b_w = n^2 \hbar / (Z m_e v)$ est le rayon dit de Weisskopf. Une estimation du paramètre d'impact moyen b est donnée par la distance moyenne entre particules r_0 qui est donnée par l'expression :

$$\frac{4}{3} \cdot \pi \cdot r_0^3 \cdot N_e = 1 \quad (1.5.4)$$

La vitesse v est estimée par la vitesse thermique :

$$v = \sqrt{\frac{2k_B T}{m_e}} \quad (1.5.5)$$

La relation (1.5.3) permet d'écrire :

$$\frac{AZ^3}{n^6} \gg 1 \quad (1.5.6)$$

avec $A = \frac{2(2\pi mk_B T)^{3/2}}{N_e h^3}$ qui représente 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 .

On peut représenter l'effet des électrons perturbateurs par un opérateur phénoménologique de collisions électroniques [6, 7], qui peut être calculé par une méthode de relaxation.

1.5.3 Approximation quasi statique

Si les temps de collision sont très longs comparés au temps d'intérêt, alors on peut ignorer complètement le mouvement des perturbateurs, et utiliser une approximation quasi statique. L'atome ressent donc un champ électrique constant pendant l'émission du rayonnement. Le profil de raie s'obtient ensuite en moyennant sur toutes les configurations possibles du champ électrique.

1.5.4 Le profil de raie

Pour l'effet Stark et en absence du champ magnétique, le plasma est un milieu libre, donc isotrope. Il suffit donc de considérer un axe de perturbation donné supposons Oz , et de prendre la moyenne sur l'angle entre \vec{d} et \vec{e} . Dans cette hypothèse l'équation (1.4.1) s'écrit :

$$P(\omega) = \frac{\omega^4}{2\pi c^3} \cdot \frac{1}{3} \sum_{\alpha, \beta} \rho_\alpha \delta(\omega - \omega_{\alpha\beta}) \left| \langle \beta | \vec{d} | \alpha \rangle \right|^2. \quad (1.5.7)$$

En insérant la distribution de Dirac

$$\delta(\omega - \omega_{\alpha\beta}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[\iota(\omega - \omega_{\alpha\beta})t] dt, \quad (1.5.8)$$

on obtient

$$P(\omega) = \frac{\omega^4}{2\pi c^3} \cdot \frac{1}{3} \sum_{\alpha, \beta} \rho_\alpha \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \langle \beta | \vec{d} | \alpha \rangle \right|^2 \exp[\iota(\omega - \omega_{\alpha\beta})t] dt \quad (1.5.9)$$

$$= \frac{\omega^4}{2\pi c^3} \int_{-\infty}^{+\infty} C(t) \exp(\iota\omega t) dt \quad (1.5.10)$$

où $C(t)$ la fonction d'auto-corrélation du moment dipolaire électrique, et ρ_α est la matrice densité relative aux niveaux $\{\alpha\}$. Celle-ci est égale à $\rho_\alpha = \exp(-E_\alpha/kT)$. Si on suppose que tous les états $|\alpha\rangle$ sont également peuplés ($\exp(-E_1/kT) \sim \exp(-E_2/kT) \sim \exp(-E_\alpha/kT)$ etc...), la matrice densité se factorise et on peut poser $\rho_\alpha = \rho_0$. Ceci laisse

à considerer la fonction d'auto-corrélation dipolaire comme :

$$C(t) = \frac{1}{3} \sum_{\alpha\beta} \rho_{\alpha} \exp(-\omega_{\alpha\beta}t) \left| \langle \beta | \vec{d} | \alpha \rangle \right|^2. \quad (1.5.11)$$

On définit le profil, ou l'intensité de la puissance rayonnée par :

$$I(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Re} \int_0^{\infty} \exp(i\omega t) C(t) dt. \quad (1.5.12)$$

Donc la fonction d'auto-corrélation dipolaire joue le rôle majeur dans tout calcul de puissance rayonnée. Avant d'entamer les différentes approximations couramment utilisées au calcul de $C(t)$, aménageons son écriture

$$\begin{aligned} C(t) &= \frac{1}{3} \sum_{\alpha\beta} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (E_{\alpha} - E_{\beta})t \right] \left| \langle \beta | \vec{d} | \alpha \rangle \right|^2 \\ &= \frac{1}{3} \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | \vec{d} | \beta \rangle \exp \left[-\frac{i}{\hbar} E_{\alpha}t \right] \langle \beta | \vec{d} | \alpha \rangle \exp \left[\frac{i}{\hbar} E_{\beta}t \right] \\ &= \frac{1}{3} \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | \vec{d} | \beta \rangle \langle \beta | \exp \left[-\frac{i}{\hbar} Ht \right] \vec{d} \exp \left[\frac{i}{\hbar} Ht \right] | \alpha \rangle \\ &= \frac{1}{3} \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | \vec{d} | \beta \rangle \langle \beta | \vec{d}(t) | \alpha \rangle \\ &= \frac{1}{3} \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | \vec{d} \vec{d}(t) | \alpha \rangle \\ &= \frac{1}{3} \text{Tr} \left(\vec{d} \vec{d}(t) \right). \end{aligned} \quad (1.5.13)$$

Ici on voit apparaître l'opérateur hamiltonien H du système émetteur du rayonnement en interaction avec le plasma et le moment dipolaire $\vec{d}(t)$ en représentation de Heisenberg.

Dans l'approximation dipolaire, H s'écrit comme :

$$H = H_0 + \vec{d} \cdot \vec{F}(t) \quad (1.5.14)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{Ze^2}{r} + \vec{d} \cdot \vec{F}(t) \quad (1.5.15)$$

où $\vec{F}(t)$ est le champ électrique du plasma créée par les ions et les électrons vu sur l'émetteur. Dans l'approximation quasi-statique celui-ci est pris constant durant le processus du rayonnement pour la composante ionique. Pour la composante due aux électrons, elle est représentée par un opérateur d'impact dans le hamiltonien :

$$H = H_0 + i\hat{\phi}_e + \vec{d} \cdot \vec{F}(t) \quad (1.5.16)$$

on voit que les électrons jouent un rôle d'amortissement et donc ils vont contribuer

à l'élargissement de la puissance émise. Dans ce cas le hamiltonien est indépendant du temps et le calcul de la fonction d'auto-corrélation dipolaire ne présente aucune difficulté.

1.6 Conclusion

Le profil de raie est donné par la transformée de Fourier de la fonction d'auto-corrélation du dipôle. Le calcul de cette fonction se ramène à celui de l'opérateur d'évolution moyen $U(t)$ qui tient compte de l'effet moyen de tous les perturbateurs du plasma. La détermination de cet opérateur nécessite la résolution de l'équation stochastique. Dans le cas où cette équation fait intervenir la perturbation dipolaire électrique, on peut traiter séparément l'action des électrons et des ions. La comparaison entre le temps de corrélation de l'interaction et l'intervalle de temps d'intérêt du processus d'élargissement permet de définir deux domaines extrêmes dans lesquels il est possible d'obtenir une solution approchée de l'équation stochastique. Si $\tau_c \gg \Delta t_i$: alors les micro-champs sont constants, et on adopte l'approximation quasi statique. Si $\tau_c \ll \Delta t_i$: alors on décrit l'interaction en termes de collisions instantanées, c'est-à-dire que l'on adopte l'approximation d'impact. Ces deux approximations sont à la base des modèles et permettent de calculer les profils de raies élargies par l'effet Stark.

Bibliographie

- [1] B. H. Bransden et C. J. Joachain, "Physics of Atoms and Molecules" Longman (1996).
- [2] L. Tarassov, "Bases Physiques de l'électroniques quantique", Mir ed. Moscow (1979).
- [3] L. Landau, E. Lifchitz "Electrodynamique Quantique" 'Physique Quantique' Tome 4, Mir ed. Moscow (1989).
- [4] H. R. Griem, "Spectral line Broadening by Plasmas", Academic Press, New York and London (1974).
- [5] A. Calisti, R. Stamm, B. Talin, Phys Rev. 38, 4883 (1983).
- [6] M. Baranger, "Atomic and Molecular Processes", Academic Press, New York, (1962).
- [7] H. R. Griem, "Plasmas Spectroscopy ", Mc Graw-Hill, New York, (1964).

Chapitre 2

Théorème adiabatique et phase géométrique

2.1 Introduction

Soit un système quantique soumis à un champ électrique ou magnétique qui change sa direction dans le temps, en revenant après un certain temps à sa direction initiale. On s'attend que si le système était à l'instant $t = 0$ décrit par une fonction propre $\psi(0)$, après un temps t quand le champ revient à sa direction initiale, la fonction d'onde $\psi(t)$ sera donnée par

$$\psi(t) = \psi(0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E(t') dt'\right) \quad (2.1.1)$$

où $E(t)$ est l'énergie du système en fonction du temps.

En fait, la fonction d'onde diffère de celle dans l'équation (2.1.1) (même dans la limite adiabatique, quand la direction du champ varie lentement) par un facteur de phase $\exp(i\alpha)$ où α est la phase géométrique ou la phase de Berry [1].

2.2 Atome soumis à un champ électrique oscillant

On considère un atome dans l'état $l = 1$ placé dans un champ électrique $\vec{F}(t)$ qui tourne autour de l'axe Oz . Bien que le contour exact, et l'évolution en temps de la pointe du vecteur du champ électrique ne sont pas importants, pour simplifier le calcul, on suppose que [2]

$$\vec{F}(t) = F_0 (\sin\theta \cos\omega t \hat{x} + \sin\theta \sin\omega t \hat{y} + \cos\theta \hat{z}) \quad (2.2.1)$$

et que ce champ tourne lentement (c.-à-d., $\omega \ll \Delta/\hbar$, où Δ est l'énergie de la décomposition des sous-niveaux de Zeeman dû à l'effet Stark).

Selon la méthode employée par [3], il est commode d'introduire les états de base instantanés qui correspondent aux sous-niveaux de Zeeman ($m = 0, \pm 1$) avec l'axe de

quantification le long du champ électrique \vec{F} . Ces états peuvent être obtenus en faisant tourner les états correspondants autour de l'axe de quantification choisi le long de Oz .

On peut écrire la matrice de rotation pour les angles d'Euler $(\omega t, \theta, 0)$:

$$D(\omega t, \theta, 0) = D(\omega t, 0, 0) \cdot D(0, \theta, 0) \quad (2.2.2)$$

où

$$D(\omega t, 0, 0) = \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\omega t} \end{pmatrix}$$

et

$$D(0, \theta, 0) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 + \cos \theta) & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta & \frac{1}{2}(1 - \cos \theta) \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta & \cos \theta & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta \\ \frac{1}{2}(1 - \cos \theta) & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta & \frac{1}{2}(1 + \cos \theta) \end{pmatrix}$$

qu'on remplace dans (2.2.2) pour trouver la matrice de rotation

$$D(\omega t, \theta, 0) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 + \cos \theta) e^{-i\omega t} & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{i\omega t} & \frac{1}{2}(1 - \cos \theta) e^{-i\omega t} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta & \cos \theta & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta \\ \frac{1}{2}(1 - \cos \theta) e^{i\omega t} & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{i\omega t} & \frac{1}{2}(1 + \cos \theta) e^{i\omega t} \end{pmatrix} \quad (2.2.3)$$

Dans l'équation (2.2.3), les indices de matrice correspondent aux composantes m dans l'ordre décroissant. Les trois états de bases instantanés sont donc

$$\psi_1(t) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 + \cos \theta) e^{i\omega t} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta \\ \frac{1}{2}(1 - \cos \theta) e^{-i\omega t} \end{pmatrix} \quad (2.2.4)$$

$$\psi_0(t) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{i\omega t} \\ \cos \theta \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{-i\omega t} \end{pmatrix} \quad (2.2.5)$$

$$\psi_{-1}(t) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 - \cos \theta) e^{i\omega t} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta \\ \frac{1}{2}(1 + \cos \theta) e^{-i\omega t} \end{pmatrix} \quad (2.2.6)$$

Pour la base instantanée [équations (2.2.4-2.2.6)], on écrit de l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi_n}{\partial t} = E_n \psi_n(t) , \quad (2.2.7)$$

où E_n est l'énergie des états. Les états sont décomposés par effet Stark quadratique,

et pour simplifier le calcul, nous choisissons le zéro de l'énergie telle que

$$E_{\pm 1} = 0, \quad (2.2.8)$$

$$E_0 = -\Delta. \quad (2.2.9)$$

Toute fonction d'onde arbitraire $\psi(t)$ peut être décomposée en fonction des états de la base instantanée

$$\psi(t) = \sum_n c_n(t) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \psi_n(t) \quad (2.2.10)$$

où $c_n(t)$ sont des coefficients dépendants du temps qui décrivent la projection. Nous avons explicitement séparé le facteur de phase $e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}$ résultant de l'évolution de la base des états à partir de l'équation de Schrödinger (2.2.7).

En prenant la dérivée temporelle de l'expression (2.2.10) pour $\psi(t)$, on trouve

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \sum_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \left(\frac{\partial c_n}{\partial t} \psi_n(t) - \frac{iE_n}{\hbar} c_n(t) \psi_n(t) + c_n(t) \frac{\partial \psi_n}{\partial t} \right) \quad (2.2.11)$$

Nous pouvons également déterminer la dérivée temporelle de $\psi(t)$ de l'équation (2.2.10)

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \sum_n c_n(t) E_n \psi_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \quad (2.2.12)$$

En combinant les expressions (2.2.11) et (2.2.12), nous arrivons à l'équation suivante

$$\sum_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \left(\frac{\partial c_n}{\partial t} \psi_n(t) + c_n(t) \frac{\partial \psi_n}{\partial t} \right) = 0 \quad (2.2.13)$$

On multiplie ensuite à gauche l'équation (2.2.13) par $\psi_m^+(t)$ en utilisant le fait que $\psi_m^+(t) \psi_n(t) = \delta_{mn}$, où δ_{mn} est le symbole de Kronecker, on trouve :

$$\frac{\partial c_m}{\partial t} = \sum_n e^{-\frac{i(E_n - E_m)t}{\hbar}} c_n(t) \psi_m^+(t) \frac{\partial \psi_n}{\partial t} \quad (2.2.14)$$

Puisque nous nous intéressons au cas d'un champ électrique qui tourne lentement, le terme d'oscillation dans l'équation (2.2.14) peut être ignoré, donc nous aurons seulement besoin de considérer les états dégénérés. Maintenant nous utilisons la forme explicite des fonctions d'onde de la base instantanée [équations (2.2.4-2.2.6)] pour évaluer les quantités $\psi_m^+(t) \dot{\psi}_n(t)$:

$$\psi_1^+ \dot{\psi}_1 = \frac{i\omega}{4} (1 + \cos \theta)^2 - \frac{i\omega}{4} (1 - \cos \theta)^2 = i\omega \cos \theta \quad (2.2.15)$$

$$\psi_1^+ \dot{\psi}_{-1} = \frac{i\omega}{4} (1 - \cos^2 \theta) - \frac{i\omega}{4} (1 - \cos^2 \theta) = 0 \quad (2.2.16)$$

$$\psi_{-1}^+ \dot{\psi}_1 = \frac{i\omega}{4} (1 - \cos^2 \theta) - \frac{i\omega}{4} (1 - \cos^2 \theta) = 0 \quad (2.2.17)$$

$$\psi_0^+ \dot{\psi}_0 = \frac{i\omega}{4} \sin^2 \theta - \frac{i\omega}{4} \sin^2 \theta = 0 \quad (2.2.18)$$

$$\psi_{-1}^+ \dot{\psi}_{-1} = \frac{i\omega}{4} (1 - \cos \theta)^2 - \frac{i\omega}{4} (1 + \cos \theta)^2 = -i\omega \cos \theta \quad (2.2.19)$$

En employant les résultats [équations (2.2.15-2.2.19)] dans l'équation (2.2.14), nous obtenons

$$\frac{\partial c_{\pm 1}}{\partial t} = \mp i\omega \cos \theta c_{\pm 1}(t) \quad (2.2.20)$$

ce qui donne :

$$c_{\pm 1}(t) = c_{\pm 1}(0) \exp(\mp i\omega t \cos \theta) \quad (2.2.21)$$

De l'équation (2.2.21), nous voyons du fait que $\omega t = 2\pi$, les coefficients $c_{\pm 1}(t)$ diffèrent de $c_{\pm 1}(0)$ par un facteur de phase géométrique :

$$c_{\pm 1}(2\pi/\omega) = c_{\pm 1}(0) \exp(\mp i2\pi \cos \theta) = c_{\pm 1}(0) \exp[\mp i2\pi (\cos \theta - 1)] \quad (2.2.22)$$

$$c_{\pm 1}(2\pi/\omega) = c_{\pm 1}(0) \exp[\mp i\Omega] \quad (2.2.23)$$

où Ω est l'angle solide sous-tendu par le vecteur du champ électrique. Nous allons voir dans le deuxième exemple que ce résultat est identique celui du champ magnétique qui varie lentement.

2.3 Une particule de spin 1/2 dans un champ magnétique oscillant

On considère une particule de spin $\frac{1}{2}$ placée dans un champ magnétique ayant la forme suivante [4]

$$\vec{B} = B_0 \vec{e}_z + B_1 (\vec{e}_x \cos \omega t - \vec{e}_y \sin \omega t) \quad (2.3.1)$$

Le hamiltonien total du système s'écrit

$$H(t) = -\frac{1}{2} \hbar \omega_0 \sigma_z - \frac{1}{2} \hbar \omega_1 (\sigma_x \cos \omega t - \sigma_y \sin \omega t) \quad (2.3.2)$$

où $\omega_1 = \gamma B_0$, $\omega_0 = \gamma B_1$ sont respectivement la fréquence de Larmor et de Rabi avec γ est le facteur gyromagnétique, σ_x , σ_y et σ_z sont les matrices de Pauli.

On distingue un vecteur d'état du spin $|\psi(t)\rangle$ dans le référentiel du laboratoire et $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ le vecteur d'état dans le référentiel tournant $Oxyz$ autour de l'axe Oz avec une vitesse angulaire ω ,

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = \exp(-i\omega t \sigma_z / 2) |\psi(t)\rangle \quad (2.3.3)$$

Il est facile de montrer que cet hamiltonien qui régit l'évolution du référentiel tournant

est indépendant du temps se transforme en

$$\tilde{H} = \frac{1}{2}\hbar\delta\sigma_z - \frac{1}{2}\hbar\omega_1\sigma_x \quad (2.3.4)$$

où $\delta = \omega - \omega_0$ est le désaccord.

Exprimons maintenant l'évolution temporelle de $|\psi(t)\rangle$ par

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-i\tilde{H}t/\hbar\right) |\psi(0)\rangle \quad (2.3.5)$$

et remplaçons (2.3.5) dans l'équation (2.3.3)

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = \exp(-i\omega t\sigma_z/2) \exp\left(-i\tilde{H}t/\hbar\right) |\psi(0)\rangle \quad (2.3.6)$$

Supposons qu'à l'instant t , le champ magnétique est dirigé suivant une direction $\hat{n}(t)$ repérée par un angle polaire θ et un angle azimutal qui dépend du temps, $\phi(t) = -\omega t$. La valeur absolue de \vec{B} est indépendante du temps

$$\gamma B = \gamma\sqrt{B_0^2 + B_1^2} = \bar{\omega} \quad (2.3.7)$$

avec

$$\bar{\omega} = \sqrt{\omega_0^2 + \omega_1^2} \quad (2.3.8)$$

L'angle polaire θ qui vérifie :

$$\omega_0 = \bar{\omega} \cos \theta \quad \omega_1 = \bar{\omega} \sin \theta \quad (2.3.9)$$

À un instant donné, les vecteurs propres du hamiltonien $H(t)$ dépendent de $\phi(t)$

$$|\psi_+(\phi(t))\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi(t)} \end{pmatrix} \quad |\psi_-(\phi(t))\rangle = \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta}{2} \\ -\cos \frac{\theta}{2} e^{i\phi(t)} \end{pmatrix} \quad (2.3.10)$$

Les vecteurs propres $|\psi_{\pm}(\phi(t))\rangle \equiv |\psi_{\pm}(t)\rangle$ correspondent aux valeurs propres de l'énergie $E_{\pm}(\phi(t)) = \mp\hbar\bar{\omega}/2$ d'un spin 1/2 dans un champ magnétique \vec{B} orienté suivant la direction \hat{n} et aussi que $\gamma B = \bar{\omega}$. Ces valeurs propres sont indépendantes du temps.

Supposons qu'au temps $t = 0$ le spin soit dans l'état $|\psi_-\rangle : |\psi(0)\rangle = |\psi_-(0)\rangle$. On obtient $|\psi(t)\rangle$ dans la base $|\pm\rangle$ des états propres de σ_z en combinant (2.3.6). Exprimant $|\pm\rangle$ en fonction de $|\psi_{\pm}(t)\rangle$

$$\begin{aligned} |+\rangle &= \cos \frac{\theta}{2} |\psi_+(t)\rangle + \sin \frac{\theta}{2} |\psi_-(t)\rangle \\ |-\rangle &= \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi(t)} |\psi_+(t)\rangle - \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\phi(t)} |\psi_-(t)\rangle \end{aligned} \quad (2.3.11)$$

On peut écrire $|\psi(t)\rangle$ en fonction de $|\psi_{\pm}(t)\rangle$ avec $\Omega = \sqrt{\omega_1^2 + \delta^2}$

$$e^{i\phi(t)/2} |\psi(t)\rangle = -i\frac{\omega}{\Omega} \sin \frac{\Omega t}{2} \sin \theta |\psi_+(t)\rangle + \left[\cos \frac{\Omega t}{2} + \frac{i}{\Omega} (\omega \cos \theta - \bar{\omega}) \sin \frac{\Omega t}{2} \right] |\psi_-(t)\rangle \quad (2.3.12)$$

Quand $\omega/\Omega \sim 1$, le spin oscille entre les états $|\psi_+(t)\rangle$ et $|\psi_-(t)\rangle$ (nous nous intéressons aux oscillations de Rabi entre les états $|+\rangle$ et $|-\rangle$), mais lorsque $\omega/\Omega \ll 1$, la probabilité de le trouver dans l'état $|\psi_+(t)\rangle$ est proportionnel à $(\omega/\Omega)^2$. Ceci donne un exemple du théorème adiabatique : si le hamiltonien varie lentement en fonction du temps, le spin reste dans l'état propre instantané $|\psi_-(t)\rangle$ de $H(t)$. En d'autres termes, le spin suit adiabatiquement le mouvement du champ \vec{B} .

Examinons de plus près le cas intéressant où $\omega \ll \Omega$, qui correspond à une précession de Larmor très rapide par rapport au temps caractéristique d'évolution de \vec{B} , en écrivant

$$\Omega = \sqrt{\omega_1^2 + \delta^2} = \sqrt{\bar{\omega}^2 + \omega^2 - 2\omega\bar{\omega}\cos\theta} \simeq \bar{\omega} - \omega \cos \theta$$

Dans ces conditions

$$|\psi(t)\rangle \simeq e^{-i\Omega t/2} e^{i\omega t/2} |\psi_-(t)\rangle = e^{-i\bar{\omega}t/2} e^{i\omega(1+\cos\theta)t/2} |\psi_-(t)\rangle \quad (2.3.13)$$

Le facteur $\exp(-i\bar{\omega}t/2)$ est un facteur trivial qui correspond tout simplement à l'évolution temporelle régie par la valeur $E_- = \hbar\bar{\omega}/2$ de l'énergie de $|\psi_- \rangle$, et le second facteur de phase est $\exp[i\bar{\gamma}(t)]$, avec

$$\bar{\gamma}(t) = \frac{\omega t}{2} (1 + \cos \theta) \quad (2.3.14)$$

Après un tour complet, $t = 2\pi/\omega$, ce facteur de phase est $\exp(i\gamma)$, où γ est la phase de Berry

$$\gamma = \pi (1 + \cos \theta) \quad (2.3.15)$$

Le point remarquable est que la phase γ ne dépend pas de ω , pourvu que la condition de validité de l'approximation adiabatique, $\omega/\Omega \ll 1$, soit satisfaite. Pour cette raison la phase de Berry est aussi appelée phase géométrique. On peut généraliser ce résultat et montrer que (2.3.15) reste valable même si ω dépend du temps, à condition que $\dot{\omega}/\omega^2 \ll 1$, c'est-à-dire si $\omega(t)$ ne varie pas trop vite. Cependant on ne peut plus écrire dans ce cas une solution exacte, car le hamiltonien \hat{H} (2.3.4) dépend alors du temps par l'intermédiaire de $\delta(t)$. Une autre observation est que γ dans (2.3.15) est le demi-angle solide sous lequel est vu le circuit tracé par l'extrémité de \vec{B} .

2.4 Théorème adiabatique

Nous allons généraliser les résultats des sections précédentes en montrant d'abord le théorème adiabatique. Soit un hamiltonien dépendant du temps $H(t)$, ou plus précisément un hamiltonien fonction de paramètres dépendants du temps notés collectivement $R(t)$.

Nous allons montrer que si l'évolution temporelle de $R(t)$ est suffisamment lente, et si le système est initialement dans l'état propre $|\varphi_m(t=0)\rangle$ de $H(t=0)$,

$$H(t=0)|\varphi_m(t=0)\rangle = E_m|\varphi_m(t=0)\rangle \quad (2.4.1)$$

alors il se trouve au temps t dans l'état $|\varphi_m(t)\rangle$ vecteur propre instantané de $H(t)$

$$H(t)|\varphi_m(t)\rangle = E_m|\varphi_m(t)\rangle \quad (2.4.2)$$

qui se déduit continûment de $|\varphi_m(t=0)\rangle$. Afin de simplifier la décomposition, nous supposons que le spectre de $H(t)$ est discret et non dégénéré, de sorte que l'ensemble forme $\{|\varphi_m(t)\rangle\}$ une base de l'espace de Hilbert des états, et qu'il n'y a aucun croisement de niveaux quand t varie [5]. Les fréquences caractéristiques sont les fréquences de Bohr $\omega_{km} = \frac{E_k(t) - E_m(t)}{\hbar}$, et ces fréquences ne sont jamais nulles d'après l'hypothèse : elles sont toutes plus grandes que ω_{min} . Si le temps caractéristique d'évolution de $R(t)$ est t_{car} , nous verrons que la condition de validité du théorème adiabatique est

$$t_{car}^{-1} \sim \frac{\dot{R}}{R} \ll \omega_{min} \quad (2.4.3)$$

avec $\dot{R}/R = \omega$ et $\omega_{min} = \bar{\omega}$. Les solutions $|\varphi(t)\rangle$ de l'équation de Schrödinger dépendant du temps vérifient :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\varphi(t)\rangle = H(t) |\varphi(t)\rangle \quad (2.4.4)$$

et nous pouvons décomposer $|\varphi(t)\rangle$ dans la base $\{|\varphi_n(t)\rangle\}$

$$|\varphi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) \exp[-i\alpha_n(t)] |\varphi_n(t)\rangle \quad (2.4.5)$$

Le facteur de phase $\exp[-i\alpha_n(t)]$ est appelé facteur de phase dynamique : il généralise le facteur $\exp[-iE_n t/\hbar]$ du cas indépendant du temps et $\exp(-i\bar{\omega}t/2)$.

$$\alpha_n(t) = \frac{1}{\hbar} \int_0^t E(t') dt' \quad (2.4.6)$$

La substitution de (2.4.5-2.4.6) dans l'équation de Schrödinger (2.4.4) jointe à (2.4.2), conduit à

$$\sum_n \left(\dot{c}_n \exp[-i\alpha_n] |\varphi_n(t)\rangle + c_n \exp[-i\alpha_n] \left| \dot{\varphi}_n(t) \right\rangle \right) = 0$$

Multiplions cette équation à gauche par le bra $\langle \varphi_k(t) |$; compte tenu de $\langle \varphi_k(t) | \varphi_n(t) \rangle = \delta_{nk}$, nous obtenons

$$\dot{c}_k = -\sum_n c_n \exp[-i(\alpha_n - \alpha_k)] \langle \varphi_k | \dot{\varphi}_n \rangle \quad (2.4.7)$$

Utilisons ensuite la dérivée par rapport au temps de (2.4.2)

$$\dot{H} |\varphi_n\rangle + H |\dot{\varphi}_n\rangle = \dot{E}_n |\varphi_n\rangle + E_n |\dot{\varphi}_n\rangle$$

soit

$$\langle \varphi_k | \dot{\varphi}_n \rangle (E_n - E_k) = \langle \varphi_k | \dot{H} | \varphi_n \rangle$$

pour en déduire un résultat exact donnant \dot{c}_k sous la forme

$$\dot{c}_k = -c_k \langle \varphi_k | \dot{\varphi}_k \rangle + \sum_{n \neq k} c_n \exp[-i(\alpha_n - \alpha_k)] \frac{\langle \varphi_k | \dot{H} | \varphi_n \rangle}{E_k - E_n} \quad (2.4.8)$$

Nous supposons maintenant que le système est au temps $t = 0$ dans l'état $|\varphi_m(t = 0)\rangle$. Si l'approximation adiabatique est acceptable, nous devons avoir $|c_m(t)| \simeq 1$ et $|c_n(t)| \ll 1$ pour $n \neq m$. De (2.4.8) on déduit alors ($k \neq m$)

$$\dot{c}_k = \frac{c_m(t)}{\hbar} \exp[-i(\alpha_m(t) - \alpha_k(t))] \frac{\langle \varphi_k(t) | \dot{H}(t) | \varphi_m(t) \rangle}{\omega_{km}(t)} \quad (2.4.9)$$

Afin d'étudier la limite à grand temps de $c_k(t)$, nous posons $t = sT$, $0 \leq s \leq 1$, ce qui permet de transformer (2.4.9) en

$$\frac{d}{ds} c_k(s) = F(s) \exp \left[iT \int_0^s ds' \omega_{km}(s') \right] = F(s) \exp [iT \Omega_{km}(s)] \quad (2.4.10)$$

où

$$F(s) = \frac{c_m(s)}{\hbar} \frac{\langle \varphi_k | \dot{H}(s) | \varphi_m \rangle}{\omega_{km}(s)} \quad \Omega_{km}(s) = \int_0^s ds' \omega_{km}(s')$$

Intégrons l'équation différentielle (2.4.10) avec la condition initiale $c_k(0) = 0$, $k \neq m$

$$c_k(s) = \int_0^s ds' F(s') \exp [iT \Omega_{km}(s')] \quad (2.4.11)$$

Compte tenu de la condition de non-croisement des niveaux, $\Omega_{km}(s)$ est une fonction uniforme de s et la phase dans (2.4.11) n'est jamais stationnaire. Comme $F(s)$ est une fonction continue, l'intégrale tend vers zéro pour $T \rightarrow \infty$. Pour le voir explicitement,

intégrons (2.4.11) par parties

$$c_k(s) = \frac{1}{iT} \left[\frac{F(s')}{\omega_{km}(s')} \Big|_0^s - \int_0^s \exp[iT\Omega_{km}(s')] \frac{d}{ds'} \left(\frac{F(s')}{\omega_{km}(s')} \right) ds' \right]$$

Comme $d[F(s)/\omega_{km}(s)]$ est une fonction continue de s , le terme en facteur de $1/iT$ reste fini pour $T \rightarrow \infty$ et $c_k(s)$ tend vers zéro comme $1/T$. Pour évaluer les corrections à l'approximation adiabatique, on calcule perturbativement la probabilité pour que le système passe de l'état initial $|\varphi_m\rangle$ à un autre état $|\varphi_k\rangle$. La probabilité de transition est

$$p_{m \rightarrow k}(t) = \left| \int_0^t \lambda_{km}(t') e^{i\Omega_{km}(t')} dt' \right|^2 \quad (2.4.12)$$

où

$$\lambda_{km}(t) = \langle \varphi_k(t) | \dot{\varphi}_m(t) \rangle \quad (2.4.13)$$

$\lambda_{km}(t)$ est une quantité caractéristique de la « vitesse de rotation » des vecteurs propres de $H(t)$ dans l'espace de Hilbert : c'est la composante suivant $|\varphi_k(t)\rangle$ de la vitesse du vecteur $|\varphi_m(t)\rangle$. Cette vitesse est de l'ordre de \dot{R}/R et nous en déduisons l'estimation

$$p_{m \rightarrow k}(t) \sim \left(\frac{\dot{R}}{R} \right)^2 \frac{1}{\omega_{km}^2} \quad (2.4.14)$$

2.5 La phase géométrique

Si l'approximation adiabatique est valable, l'équation (2.4.7) se réduit à une équation différentielle pour $c_m(t)$

$$\dot{c}_m(t) = -c_m(t) \langle \varphi_m | \dot{\varphi}_m \rangle \quad (2.5.1)$$

Il est facile de montrer que $\langle \varphi_m | \dot{\varphi}_m \rangle$ est un nombre imaginaire pur : en effet, de $\langle \varphi_m | \varphi_m \rangle = 1$ on tire

$$0 = \langle \dot{\varphi}_m | \varphi_m \rangle + \langle \varphi_m | \dot{\varphi}_m \rangle = \langle \varphi_m | \dot{\varphi}_m \rangle^* + \langle \varphi_m | \dot{\varphi}_m \rangle \quad (2.5.2)$$

et on peut poser

$$c_m(t) = c_m(0) e^{i\gamma_m(t)},$$

avec $\dot{\gamma}_m(t)$ réel

$$\dot{\gamma}_m(t) = i \langle \varphi_m(R(t)) | \dot{\varphi}_m(R(t)) \rangle = -Im \langle \varphi_m(R(t)) | \dot{\varphi}_m(R(t)) \rangle \quad (2.5.3)$$

où nous avons fait intervenir de façon explicite les paramètres $R(t)$; $\gamma_m(t)$ va être à

l'origine de la phase de Berry, et nous allons montrer que cette phase ne peut pas être éliminée par une redéfinition $|\varphi_m\rangle \rightarrow \exp(i\chi)|\varphi_m\rangle$ du vecteur d'état. Le vecteur d'état au temps t s'écrit alors

$$e^{i\gamma_m(t)} e^{-i\alpha_m(t)} |\varphi_m(R(t))\rangle \quad (2.5.4)$$

À première vue, cette équation est surprenante, car la phase de $|\varphi_m(R(t))\rangle$ est à priori arbitraire, et en extraire le facteur $\exp(i\gamma_m(t))$ ne semble pas physiquement pertinent. Toutefois, nous allons voir que cette phase fournit l'occasion des effets physiques si on fait varier les paramètres le long d'un contour fermé C dans l'espace des paramètres. En premier lieu nous pouvons récrire (2.5.3) sous la forme

$$\dot{\gamma}_m(t) = i \langle \varphi_m(R(t)) | \nabla_R \varphi_m(R(t)) \rangle \cdot \dot{R}(t) = A_m(t) \cdot \frac{dR}{dt} \quad (2.5.5)$$

où ∇_R est le gradient dans l'espace des paramètres et (2.5.5) définit le vecteur A_m . Pour fixer les idées, on peut prendre le cas particulier où $R(t)$ est un vecteur $\vec{R}(t)$ de \mathbb{R}^3 : le gradient est alors le gradient ordinaire $\vec{\nabla}$. Si $R(t)$ décrit un contour fermé C , $R(T) = R(0)$, la variation de la phase sera

$$\gamma_m(T) - \gamma_m(0) = \oint_C \dot{\gamma}_m(t) dt = i \oint_C \langle \varphi_m(R) | \nabla_R \varphi_m(R) \rangle \cdot dR \quad (2.5.6)$$

Cette phase est la phase de Berry, ou géométrique : elle dépend seulement du contour C , c'est-à-dire du chemin suivi dans l'espace des paramètres, et non de la vitesse à laquelle il est parcouru. Elle est aussi indépendante du choix de phase fait pour $|\varphi_m\rangle$. Pour le voir, limitons-nous au cas où R est un vecteur \vec{R} de \mathbb{R}^3 ; d'après le théorème de Stokes

$$\begin{aligned} \oint_C \langle \varphi_m(\vec{R}) | \vec{\nabla}_R \varphi_m(\vec{R}) \rangle \cdot d\vec{R} &= \iint_{S(C)} [\vec{\nabla} \times \langle \varphi_m(\vec{R}) | \vec{\nabla} \varphi_m(\vec{R}) \rangle] \cdot d\vec{S} \\ &= \iint_{S(C)} (\vec{\nabla} \times A_m) \cdot d\vec{S} \end{aligned} \quad (2.5.7)$$

où $S(C)$ est une surface s'appuyant sur le contour C . Si l'on effectue un changement de phase sur $|\varphi_m(\vec{R})\rangle$

$$|\varphi_m(\vec{R})\rangle \rightarrow e^{i\chi(\vec{R})} |\varphi_m(\vec{R})\rangle$$

alors

$$\langle \varphi_m | \vec{\nabla} \varphi_m \rangle \rightarrow \langle \varphi_m | \vec{\nabla} \varphi_m \rangle + i \nabla \chi$$

Comme $\nabla \times (\vec{\nabla} \chi) = 0$, la phase χ ne contribue pas au résultat (2.5.6).

2.6 Conclusion

Après avoir présenté le formalisme de base nécessaire des notions générales sur les profils des raies, nous avons dégagé la phase de Berry à partir du théorème adiabatique en l'illustrant par deux exemples : atome soumis à un champ électrique oscillant et une particule de spin $1/2$ dans un champ magnétique oscillant . Le premier exemple nous servira au prochain chapitre, moyennant les effets perturbatifs du plasma, de calculer le profil de raies relatif à la transition Lyman- α .

Bibliographie

- [1] M. V. Berry. Proc. R. Soc. Lond. A 392, 45 (1984).
- [2] D. Budker, Atomic Physics : An exploration through problems and solutions. Oxford Univ. Press (2008).
- [3] E D. Commins, American Journal of Physics, 59(12), 1077-80 (1991).
- [4] M. Le Bellac "Physique quantique" 2^{ème}ed. EDP sciences. Paris (2007).
- [5] A. Messiah "Quantum Mechanics" Vol II, 8th ed. North Holand. Amsterdan, pp 744-755, (1976).

Chapitre 3

L'effet adiabatique d'un champ électrique oscillant sur les profils des raies dans un plasma

3.1 Introduction

L'objectif de ce chapitre est de voir l'effet adiabatique d'un champ électrique externe oscillant sur les profils des raies dans un plasma. Nous exposons certaines bases du théorème adiabatique en soulignant le rôle de la phase Berry. Nous considérons cette phase, en plus de la phase dynamique de la fonction d'onde pour étudier l'effet sur les profils des raies. Nous avons trouvé l'expression de l'opérateur d'évolution dans l'approximation adiabatique, ce qui mène à écrire la fonction d'auto-corrélation dipolaire (FACD). Nous avons appliqué les résultats précédents sur la raie Lyman-alpha en montrant qu'il existe une décomposition supplémentaire des états du système non perturbé. En moyennant les micro-champs électriques dûs au plasma, on obtient le profil de raie Lyman alpha sans structure fine.

3.2 Résultats fondamentaux du théorème adiabatique

On considère l'interaction d'un ion hydrogénoïde avec un champ électrique $\vec{f}_l(t)$ non résonant, et tournant dans le plan xOy où $\vec{f}_l(t) = f_{ol} \cos(\omega_0 t) \vec{i} + f_{ol} \sin(\omega_0 t) \vec{j}$. Ce champ est une superposition d'un champ laser externe propageant suivant l'axe Oz avec une fréquence ω_0^i , et un champ électrique interne du plasma $\vec{f}_{xy}(t)$ tournant dans le plan xOy avec une fréquence ω_0^p de façon que $\omega_0 = \omega_0^i + \langle \omega_0^p \rangle$ (\vec{f} est la composante z). Le champ électrique $\vec{e}(t)$ tourne adiabatiquement et forme avec le champ électrique \vec{f} le champ électrique total $\vec{F}(t)$ (voir la géométrie du champ électrique $\vec{F}(t)$ sur la figure 3.2.1). Cette situation peut exister dans les plasmas, et a été étudiée analytiquement par [1], et par [2, 3, 4] dans l'approche de Floquet-Liouville en présence d'un champ électrique oscillant. La dynamique quantique du système non perturbé est alors décrite

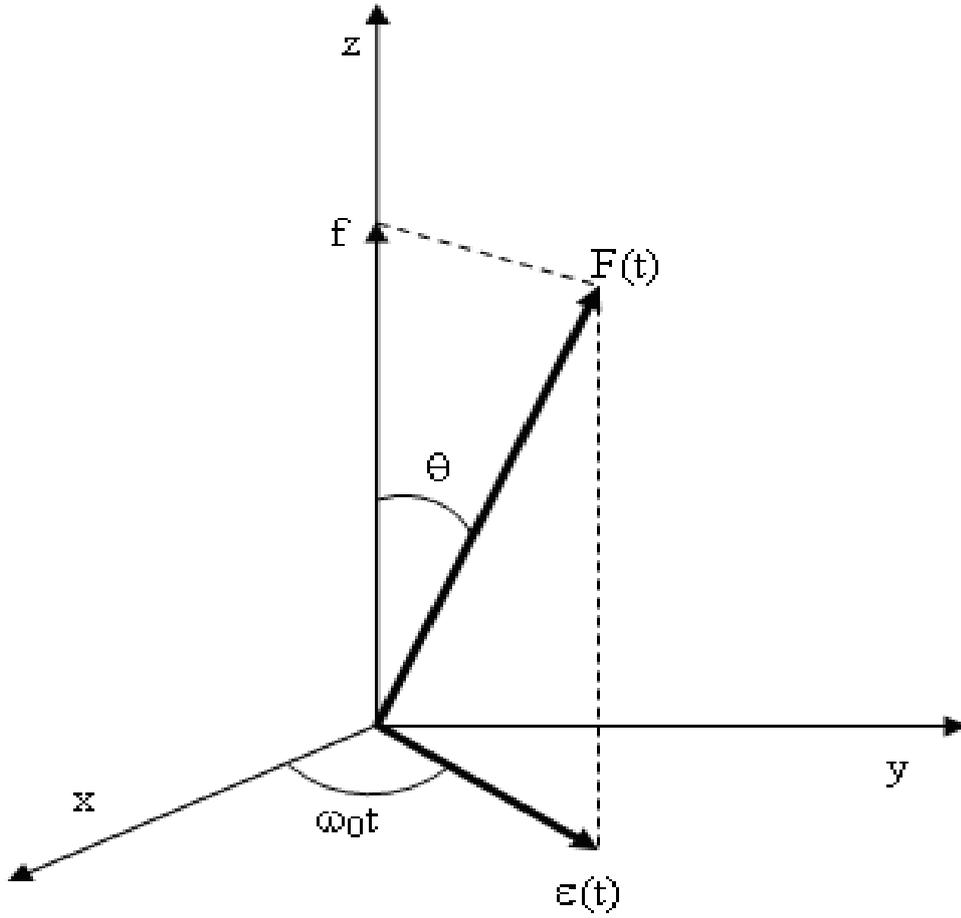


FIGURE 3.2.1 – Géométrie du champ électrique tournant

par le hamiltonien $H_0(F(0)) = H_0 + \vec{d} \cdot \vec{F}(0)$ avec les valeurs propres et les vecteurs propres associés $(E_n(F(0)), |n, F(0)\rangle)$. Le système est donc perturbé par un champ électrique total : $\vec{F}(t) = \vec{f}_i(t) + \vec{f}$ qui tourne adiabatiquement. Rappelons tout d'abord la condition de l'adiabaticité : $\omega_0 \ll 3Zea\bar{f}/\hbar$ (où Z est le nombre de charge, a est le rayon de Bohr et \vec{f} est le champ de Holtmark). La dynamique du système perturbé est décrite par un nouveau hamiltonien $H(t) = H(F(t))$.

Reférons à [5], on peut calculer la fonction d'onde $|\psi(t)\rangle$ du système perturbé par le champ électrique externe $\vec{\varepsilon}(t)$.

Il est évident que l'élément de la matrice de l'opérateur d'évolution du système initial (avant l'application de $\vec{\varepsilon}(t)$) est donné par

$$V_{nn'} = \langle n, F(0) | \exp(itH_0/\hbar) | n', F(0) \rangle = \delta_{nn'} \exp(itE_{n'}(F(0))/\hbar) \quad (3.2.1)$$

mais nous avons besoin l'élément de la matrice de l'opérateur d'évolution $\langle n, F(t) | U | n', F(t) \rangle$

du système perturbé par le champ électrique externe $\vec{\mathcal{E}}(t)$. Nous pouvons calculer cet élément en considérant que $|\psi(t)\rangle$ l'état du système perturbé est régi par l'équation de Schrödinger,

$$i\hbar(\partial/\partial t)|\psi(t)\rangle = H(F(t))|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle \quad (3.2.2)$$

où $U(t)$ est l'opérateur d'évolution, les vecteurs et les valeurs propres instantanés sont donnés par

$$H(F(t))|n, F(t)\rangle = E_n(F(t))|n, F(t)\rangle \quad (3.2.3)$$

avec la relation instantanée de complétude

$$\langle n, F(t) | n', F(t) \rangle = \delta_{n'n} \quad (3.2.4)$$

et la condition initiale

$$H_0|n, F(0)\rangle = H(F(0))|n, F(0)\rangle = E_n(F(0))|n, F(0)\rangle \quad (3.2.5)$$

nous pouvons étendre la solution de (3.2.2) à la base $\{|n, F(t)\rangle\}_{n=1\dots}$ tel que

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) \left(\exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau E_n(F(\tau)) \right] \right) |n, F(t)\rangle \quad (3.2.6)$$

où les coefficients $a_n(t)$ doivent être déterminés par la substitution de l'expression (3.2.6) à (3.2.2), on trouve

$$\sum_n \left(\exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau E_n(F(\tau)) \right] \right) \left(\frac{da_n(t)}{dt} + a_n(t) \frac{\partial}{\partial t} \right) |n, F(t)\rangle = 0. \quad (3.2.7)$$

Multiplions à gauche (3.2.7) par

$$\langle m, F(t) | \left(\exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau E_m(F(\tau)) \right] \right)$$

cela conduit à

$$\begin{aligned} \frac{da_m(t)}{dt} &= - \sum_n a_n(t) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau E_n(F(\tau)) + \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau E_m(F(\tau)) \right] \cdot \\ &\quad \cdot \left\langle m, F(t) \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| n, F(t) \right\rangle \\ &= -a_m(t) \left\langle m, F(t) \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| m, F(t) \right\rangle \end{aligned}$$

$$-\sum_{n \neq m} a_n(t) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau E_n(F(\tau)) + \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau E_m(F(\tau)) \right] \left\langle m, F(t) \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| n, F(t) \right\rangle \quad (3.2.8)$$

Arrivée à cette étape tous les calculs sont exacts. L'approximation adiabatique stipule que $\langle m, F(t) \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| n, F(t) \rangle = 0$ pour toute $n \neq m$, et transforme (3.2.8) en :

$$\frac{da_m(t)}{dt} = -a_m(t) \left\langle m, F(t) \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| m, F(t) \right\rangle \quad (3.2.9)$$

alors

$$a_m(t) = \exp \left[-\int_0^t \left\langle m, F(\tau) \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| m, F(\tau) \right\rangle d\tau \right] \quad (3.2.10)$$

L'utilisation de la relation d'orthogonalité (3.2.4), et la dérivation en temps des deux membres donne

$$Re \left[\left\langle m, F(\tau) \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| m, F(\tau) \right\rangle \right] = 0 \quad (3.2.11)$$

c'est-à-dire que la quantité $\langle m, F(\tau) \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| m, F(\tau) \rangle$ dans (3.2.10) est imaginaire. Alors nous pouvons poser

$$a_m(t) = \exp(i\gamma_B^m(t)) \quad (3.2.12)$$

où

$$\gamma_B^m(t) = i \int_0^t \left\langle m, F(\tau) \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| m, F(\tau) \right\rangle d\tau \quad (3.2.13)$$

est la phase de Berry qui est réel. Donc dans l'approximation adiabatique, la solution de l'équation de Schrödinger (3.2.6) peut être écrite sous cette forme

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \exp \left[i\gamma_B^n - \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau E_n(F(\tau)) \right] |n, F(t)\rangle = U(t) |\psi(0)\rangle. \quad (3.2.14)$$

Au temps $t = 0$, cette équation devient

$$|\psi(0)\rangle = |n, F(0)\rangle = U^+(t) |\psi(t)\rangle \quad (3.2.15)$$

où nous avons introduit l'opérateur d'évolution $U(t)$. Remplaçons $|\psi(t)\rangle$ par son expression (3.2.14), nous obtenons

$$|\psi(0)\rangle = \exp \left[i\gamma_B^n - \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau E_n(F(\tau)) \right] U^+(t) |n, F(t)\rangle \quad (3.2.16)$$

où également :

$$|n, F(0)\rangle = \exp \left[i\gamma_B^n - \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau E_n(F(\tau)) \right] U^+(t) |n, F(t)\rangle \quad (3.2.17)$$

et

$$|n, F(t)\rangle = \exp \left[-i\gamma_B^n + \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau E_n(F(\tau)) \right] U(t) |n, F(0)\rangle \quad (3.2.18)$$

Multiplions l'expression (3.2.17) à gauche par $\langle n', F(t) |$, et en utilisant $\langle n', F(t) | n, F(t) \rangle = \delta_{nn'}$, nous pouvons écrire :

$$\langle n', F(t) | U(t) | n, F(t) \rangle = \delta_{n'n} \exp \left[i\gamma_B^n - \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau E_n(F(\tau)) \right] \quad (3.2.19)$$

C'est l'expression de l'opérateur d'évolution dans l'approximation adiabatique. On va utiliser cette expression dans les prochaines sections en commençant par la fonction d'auto-corrélation du dipole électrique.

3.3 La fonction d'auto-corrélation dipolaire

Maintenant nous pouvons écrire la fonction d'auto-corrélation dipolaire dans l'approximation adiabatique (AA). Rappelons tout d'abord que cette fonction est fondamentale d'où dérive l'intensité du rayonnement $I(\omega)$:

$$I(\omega) = \frac{1}{\pi} \Re \int_0^\infty \{C_{dd}(t)\}_{\text{perturbateurs}} \exp(-i\omega t) dt \quad (3.3.1)$$

où $\{C_{dd}(t)\}_{\text{perturbations}}$ est la fonction d'auto-corrélation du moment dipolaire électrique de l'émetteur moyennée sur tous les perturbateurs :

$$\begin{aligned} C_{dd}(t) &= Tr \left[\vec{d}(t) \vec{d}(0) \right] = \sum_{\alpha} \langle \alpha, F(0) | \vec{d}(t) \vec{d}(0) | \alpha, F(0) \rangle \\ &= \sum_{\alpha} \langle \alpha, F(0) | U^+(t) \vec{d}(0) U(t) \vec{d}(0) | \alpha, F(0) \rangle \\ &= \sum_{\alpha\beta\beta'} \langle \alpha, F(0) | U^+(t) \vec{d}(0) | \beta', F(t) \rangle \langle \beta', F(t) | U(t) | \beta, F(0) \rangle \\ &\quad \cdot \langle \beta, F(0) | \vec{d}(0) | \alpha, F(0) \rangle \end{aligned} \quad (3.3.2)$$

où $U(t)$ est l'opérateur d'évolution et \vec{d} est le moment dipolaire dans la représentation

de Heisenberg dans le repère mobile. Notons aussi que α et $\beta\beta'$ sont respectivement les états supérieurs et inférieurs. En utilisant les formules (3.2.19) et (3.2.17), nous trouvons

$$C_{dd}(t) = \sum_{\alpha\beta\beta'} \delta_{\beta\beta'} \langle \alpha, F(t) | \vec{d}^{\uparrow}(0) | \beta', F(t) \rangle \langle \beta', F(0) | \vec{d}^{\uparrow}(0) | \alpha, F(0) \rangle \\ \cdot \exp \left[-i\gamma_{\alpha}^B(t) + \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau E_{\alpha}(F(\tau)) \right] \cdot \exp \left[i\gamma_{\beta}^B(t) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau E_{\beta}(F(\tau)) \right]$$

qu'on peut l'écrire

$$C_{dd}(t) = \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha, F(t) | d(0) | \beta, F(t) \rangle \langle \beta, F(0) | d(0) | \alpha, F(0) \rangle \cdot \\ \cdot \exp i(\gamma_{\beta}(t) - \gamma_{\alpha}(t))$$

où $\gamma_{\alpha}(t) = \gamma_{\alpha}^B(t) - \frac{1}{\hbar} \int_0^t d\tau E_{\alpha}(F(\tau))$ et $\gamma_{\beta}(t) = \gamma_{\beta}^B(t) - \frac{1}{\hbar} \int_0^t d\tau E_{\beta}(F(\tau))$

Comme les états $|\alpha, F(t)\rangle$, $|\beta, F(0)\rangle$ et \vec{d}^{\uparrow} sont des quantités dans le repère mobile, on a donc

$$\langle \alpha, F(t) | \vec{d}^{\uparrow}(0) | \beta, F(t) \rangle = \langle \alpha, F(0) | \vec{d}^{\uparrow}(0) | \beta, F(0) \rangle \\ = \langle \beta, F(0) | \vec{d}^{\uparrow}(0) | \alpha, F(0) \rangle^* \quad (3.3.3)$$

et

$$C_{dd}(t) = \sum_{\alpha\beta} | \langle \alpha, F(t) | \vec{d}^{\uparrow}(0) | \beta, F(t) \rangle |^2 \exp i(\gamma^{\alpha}(t) - \gamma^{\beta}(t)). \quad (3.3.4)$$

En appliquant le changement du référentiel de R' à $R : |\alpha(lm), F(0)\rangle = R(0, \theta, 0) |\alpha(lm')\rangle$, $R(0, \theta, 0)$ est l'opérateur de rotation, la fonction d'auto-corrélation dipolaire $C_{dd}(t)$ se transforme en :

$$C_{dd}(t) = \sum_{\alpha\beta} \sum_{m, m'=0, \pm 1} |d_{mm'}^1(\theta) \langle \alpha | d_{m'}(0) | \beta \rangle|^2 \cdot \exp i(\gamma^{\alpha}(t) - \gamma^{\beta}(t)) \quad (3.3.5)$$

où $d_{mm'}^1(\theta)$ sont les fonctions de Wigner et

$$d_{\pm} = Zer_{\pm} = \mp Z \cdot \sqrt{(1/2)} (x \pm iy); \quad d_0 = Zer_0 = Ze_z \quad (3.3.6)$$

sont les composantes de moment dipôle électrique avec $r_{\pm,0}$ sont les opérateurs de position exprimés dans la base sphérique, et

$$\gamma^{\alpha, \beta}(t) = \gamma_B^{\alpha, \beta}(t) + \gamma_D^{\alpha, \beta}(t). \quad (3.3.7)$$

$\gamma_B^{\alpha,\beta}(t)$ et $\gamma_D^{\alpha,\beta}(t)$ sont respectivement les phases géométriques (Berry) et dynamiques relatives à les états α et β

$$\gamma_D^{\alpha,\beta}(t) = \frac{1}{\hbar} \int_0^t d\tau E_{\alpha,\beta}(F(\tau)) \quad (3.3.8)$$

$$\gamma_B^{\alpha,\beta}(t) = -m\Omega_B(t) = -m \cdot (1 - \cos\theta) \omega_0 t \quad (3.3.9)$$

où ω_0 est la fréquence du champ électrique tournant $\vec{\mathcal{E}}(t)$.

3.4 Application à la raie Lyman alpha

Premièrement, nous devons calculer $\gamma^B(t)$ et $\gamma^D(t)$ pour les états inférieurs α et les états supérieures β , correspondants respectivement aux nombres quantiques principaux $n = 1$ et $n = 2$.

3.4.1 Etat $n = 1$:

En considérant le nombre quantique $n = 1$, seulement l'état $|\alpha\rangle = |1, 0, 0\rangle$ avec l'énergie correspondante $E_1^{100} (-13,6Z^2 eV)$ contribue pour évaluer $\gamma_D^{100}(t)$ et $\gamma_B^{100}(t)$:

$$\gamma_D^{100}(t) = ((E_1^{100})/\hbar) t \quad (3.4.1)$$

et

$$\gamma_B^{100}(t) = -0 \cdot \Omega_B(t) = 0. \quad (3.4.2)$$

3.4.2 Etat $n = 2$:

Nous avons quatre états, deux sont dégénérés $|\beta_0^1\rangle$ et $|\beta_0^2\rangle$ (ont la même énergie $E_2^{\beta_0^{1,2}} = ((E_1^{100})/4)eV$) et deux états $|\beta_1\rangle$ et $|\beta_2\rangle$ sont non dégénérés (décomposés par le champ électrique statique, l'effet Stark linéaire, $E_2^{\beta_1,2} = (E_1^{100}/4) \pm 3Zef$)

$$|\beta\rangle = \begin{cases} |\beta_0^1\rangle = |2, 1, -1\rangle \\ |\beta_0^2\rangle = |2, 1, 1\rangle \\ |\beta_1\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}(|2, 1, 0\rangle - |2, 0, 0\rangle) \\ |\beta_2\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}(|2, 1, 0\rangle + |2, 0, 0\rangle) \end{cases} \quad (3.4.3)$$

donc

$$\gamma_D^{\beta_0^{1,2}}(t) = E_1^{100} t / (4\hbar) \quad (3.4.4)$$

et

$$\gamma_B^{\beta_0^{1,2}}(t) = \pm \Omega_B(t) \quad (3.4.5)$$

pour les états non dégénérés, nous avons :

$$E_2^{\beta_{1,2}} = (E_1^{100}/4) \pm 3Zea f \quad (3.4.6)$$

donc

$$\gamma_D^{\beta_{1,2}}(t) = ((E_1^{100}) / (4\hbar)) t \pm ((3Zea f) / \hbar) t \quad (3.4.7)$$

et

$$\gamma_B^{\beta_{1,2}}(t) = -0.\Omega_B(t) = 0 \quad (3.4.8)$$

Alors nous pouvons résumer, et écrire la fonction d'auto-corrélation dipolaire $C_{dd}(t)$ telle que

$$\begin{aligned} C_{dd}(t) = & \frac{1}{2} | d_{00}^1(\theta) \langle 100 | d_0(0) [|2, 1, 0\rangle - |2, 0, 0\rangle] |^2 \exp i (\gamma^{100}(t) - \gamma^{\beta_1}(t)) \\ & + \frac{1}{2} | d_{00}^1(\theta) \langle 100 | d_0(0) [|2, 1, 0\rangle + |2, 0, 0\rangle] |^2 \exp i (\gamma^{100}(t) - \gamma^{\beta_2}(t)) \\ & + | d_{0-1}^1(\theta) \langle 100 | d_0(0) | 2, 1, 1\rangle |^2 \exp i (\gamma^{100}(t) - \gamma^{211}(t)) \\ & + | d_{01}^1(\theta) \langle 100 | d_+(0) | 2, 1, -1\rangle |^2 \exp i (\gamma^{100}(t) - \gamma^{21-1}(t)) \end{aligned} \quad (3.4.9)$$

où

$$\begin{aligned} \langle 1, 0, 0 | d_0 | 2, 1, 0\rangle &= Ze\sqrt{1/3}R_{21}^{10}; \quad \langle 1, 0, 0 | d_0 | 2, 0, 0\rangle = 0 \\ \langle 1, 0, 0 | d_- | 2, 1, -1\rangle &= 0; \quad \langle 1, 0, 0 | d_- | 2, 1, 1\rangle = Ze\sqrt{2/3}R_{21}^{10} \\ \langle 1, 0, 0 | d_+ | 2, 1, -1\rangle &= -Ze\sqrt{2/3}R_{21}^{10}; \quad \langle 1, 0, 0 | d_+ | 2, 1, 1\rangle = 0 \end{aligned} \quad (3.4.10)$$

sont les éléments de matrice du moment dipôle et $d_{ab}^1(\theta)$ sont les fonctions de Wigner,

$$d_{00}^1(\theta) = \cos \theta \quad d_{0-1}^1(\theta) = -d_{01}^1(\theta) = \left(\sqrt{2}/2\right) \sin \theta \quad (3.4.11)$$

et R_{21}^{10} sont les intégrales radiales de l'atome hydrogènoïde.

Après quelques manipulations algébriques simples, la fonction d'auto-corrélation dipolaire $C_{dd}(t)$ devient :

$$\begin{aligned} C_{dd}(t) = & \frac{Z^2 e^2}{3} | R_{21}^{10} |^2 \left[\frac{\cos^2 \theta}{2} \exp i (\gamma^{100}(t) - \gamma^{\beta_1}(t)) + \frac{\cos^2 \theta}{2} \exp i (\gamma^{100}(t) - \gamma^{\beta_2}(t)) \right. \\ & \left. + \sin^2 \theta \exp i (\gamma^{100}(t) - \gamma^{21-1}(t)) + \sin^2 \theta \exp i (\gamma^{100}(t) - \gamma^{211}(t)) \right] \end{aligned}$$

En remplaçant les phases dynamique et de Berry par leurs expressions, nous obtenons

[6-7] :

$$\begin{aligned}
C_{dd}(t) &= \frac{Z^2 e^2 |R_{21}^{10}|^2}{3} e^{-10.2Z^2 t/\hbar} \left[\cos^2 \theta \cdot \cos \left(\frac{3Ze a f t}{\hbar} \right) + 2 \sin^2 \theta \cos \Omega_B(t) \right] \\
&= \frac{1}{3} | \langle 10 | d | 21 \rangle |^2 e^{-10.2Z^2 t/\hbar} \left[\cos^2 \theta \cos \left(\frac{3Ze a f t}{\hbar} \right) + 2 \sin^2 \theta \cos \Omega_B(t) \right] \quad (3.4.12)
\end{aligned}$$

où

$$\Omega_B(t) = (1 - \cos \theta) \omega_0 t, \quad (3.4.13)$$

$$\cos \theta = \frac{f}{\sqrt{f^2 + \varepsilon_0^2}}, \quad \sin \theta = \frac{\varepsilon_0}{\sqrt{f^2 + \varepsilon_0^2}} \quad (3.4.14)$$

Nous observons de (3.4.12) que la fonction d'auto-corrélation de dipôle électrique est une somme de deux termes : le premier vient de l'effet Stark tandis que le deuxième est semblable à l'effet Zeeman. Ce dernier effet est nouveau puisque il vient de l'application du théorème adiabatique sur l'interaction d'un émetteur dans un plasma avec le champ électrique tournant adiabatiquement. Sur la figure.3.4.1, nous représentons schématiquement les décompositions de Stark et de Berry. A la fin, en utilisant (3.4.14), nous trouvons l'expression finale de $C_{dd}(t)$:

$$\begin{aligned}
C_{dd}(t) &= (1/3) | \langle 10 | d | 21 \rangle |^2 e^{-10.2Z^2 t/\hbar} \cdot \left[\frac{f^2}{f^2 + \varepsilon_0^2} \cos \left(\frac{3eZ a f t}{\hbar} \right) \right. \\
&\quad \left. + \left(\frac{2\varepsilon_0^2}{f^2 + \varepsilon_0^2} \right) \cos \left(1 - \frac{f}{\sqrt{f^2 + \varepsilon_0^2}} \right) \omega_0 t \right] \quad (3.4.15)
\end{aligned}$$

3.5 Profil de raie

Nous avons calculé la fonction d'auto-corrélation dipolaire pour un atome soumis à champ électrique tournant $\vec{F}(t) = \vec{f} + \vec{\varepsilon}(t)$. Maintenant nous appliquons le résultat précédent (3.4.15) dans un plasma. Chaque atome immergé dans le plasma est perturbé par un champ électrique dû aux ions du plasma, et un champ laser externe. La composante z de $\vec{F}(t)$ est \vec{f} et $\vec{\varepsilon}(t)$ est la composante dans le plan xOy ($\vec{f} \perp \vec{\varepsilon}(t)$) qui tourne autour de l'axe Oz avec une fréquence ω_0 . La fonction d'auto-corrélation du moment dipolaire électrique relative au plasma est donc obtenue en faisant la moyenne sur le champ électrique \vec{f} du plasma. Premièrement, pour des raisons de simplicité, on définit une quantité adimensionnelle

$$\begin{aligned}
\overline{C_{dd}}(t) &= C_{dd}(t) / | \langle 10 | d | 21 \rangle |^2 \\
&= \frac{1}{3} e^{-10.2Z^2 t/\hbar} \left[\frac{f^2}{f^2 + \varepsilon_0^2} \cos \left(\frac{3eZ a f t}{\hbar} \right) + \left(\frac{2\varepsilon_0^2}{f^2 + \varepsilon_0^2} \right) \cos \left(1 - \frac{f}{\sqrt{f^2 + \varepsilon_0^2}} \right) \omega_0 t \right]_{pert}. \quad (3.5.1)
\end{aligned}$$

où $[\dots]_{pert}$ désigne que nous devons faire une moyenne statistique sur les perturbateurs

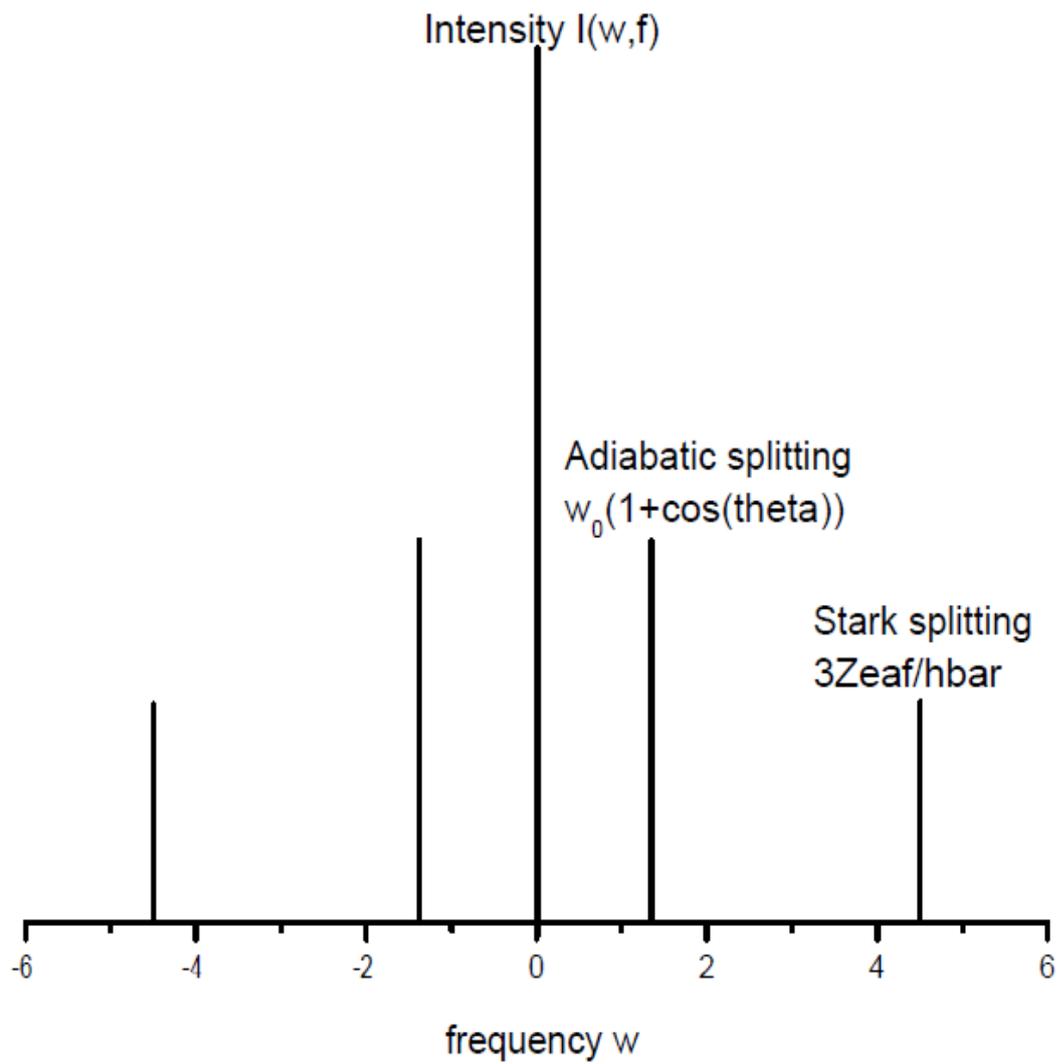


FIGURE 3.4.1 – Comparaison de la décomposition de Stark avec la décomposition de Berry (Adiabatique) sur un seul atome

c'est à dire $(\vec{f}, \varepsilon_0, \omega_0)$, mais dans ce travail on se contente de prendre la moyenne sur \vec{f}

$$\begin{aligned} \overline{C_{dd}}(t) = & \frac{1}{3} \left[\frac{f^2}{2(f^2 + \varepsilon_0^2)} \left(e^{it.(3Zea f/\hbar - 10.2Z^2/\hbar)} + e^{-it.(3Zea f/\hbar + 10.2Z^2/\hbar)} \right) + \right. \\ & \left. \left(\frac{\varepsilon_0^2}{f^2 + \varepsilon_0^2} \right) \left(e^{it(\omega_0 - (\frac{\omega_0 f}{\sqrt{f^2 + \varepsilon_0^2}} - 10.2Z^2/\hbar))} + e^{-it(\omega_0 - ((\frac{\omega_0 f}{\sqrt{f^2 + \varepsilon_0^2}}) + 10.2Z^2/\hbar))} \right) \right]_{pert} . \end{aligned} \quad (3.5.2)$$

Maintenant, nous représentons l'effet des collisions électroniques par l'insertion de l'amplitude de l'opérateur de collision Φ_e dans la formule de l'intensité :

$$I(\omega) = \frac{1}{\pi} Re \int_0^{+\infty} \overline{C_{dd}}(t) \exp(i\omega t) dt \equiv [I(\omega, f, \varepsilon_0)]_{pert} . \quad (3.5.3)$$

où

$$\begin{aligned} I(\omega, f, \varepsilon_0) = & \left(\frac{1}{3\pi} \right) \left(\frac{f^2}{2(f^2 + \varepsilon_0^2)} \left(\frac{\Phi_e}{\Phi_e^2 + (\omega + 3Zea f/\hbar - 10.2Z^2/\hbar)^2} + \right. \right. \\ & \left. \frac{\Phi_e}{\Phi_e^2 + (\omega - 3Zea f/\hbar - 10.2Z^2/\hbar)^2} \right) + \frac{\varepsilon_0^2}{f^2 + \varepsilon_0^2} \\ & \left(\frac{\Phi_e}{\Phi_e^2 + (\omega + \omega_0 - \omega_0 f/\sqrt{(f^2 + \varepsilon_0^2)} - 10.2Z^2/\hbar)^2} + \right. \\ & \left. \left. \frac{\Phi_e}{\Phi_e^2 + (\omega - \omega_0 + \omega_0 f/\sqrt{(f^2 + \varepsilon_0^2)} - 10.2Z^2/\hbar)^2} \right) \right) \end{aligned} \quad (3.5.4)$$

et $\overline{\Phi_e}$ est donné par [8] :

$$\begin{aligned} \overline{\Phi_e} = \langle nlm | \Phi_e | n'l'm' \rangle = & -\frac{9n^2}{4Z^2} (n^2 - l^2 - l - 1) \times \delta_{l'm'm'} \frac{4\pi}{3} \left[\frac{2m_e}{\pi KT} \right]^{\frac{1}{2}} * \\ & n_e \left[\frac{\hbar}{m_e} \right]^2 \times \left[C_n + \frac{1}{2} \int_y^\infty \frac{\exp(-x)}{x} dx \right] \end{aligned} \quad (3.5.5)$$

où n est le nombre quantique principal du niveau supérieure (ici $n = 2$) et C_n : est une estimation de l'effet de collision forte. Dans le travail actuel, nous utilisons la formule de Griem [8], l'équation (3.5.5), dans laquelle $C_2 = 1,5$ et

$$y \cong \left(\frac{\hbar n^2}{2} \right)^2 \cdot \frac{\omega_{pe}^2 + \Delta\omega_s^2}{E_H KT} \quad (3.5.6)$$

$\omega_{pe}^2 = \frac{4\pi e^2 n_e}{m_e}$: est le carré de la fréquence du plasma, $\Delta\omega_s \cong 5n^2 a_0 \frac{e}{\hbar} F_0$ où a_0 : est le rayon de Bohr, $F_0 = \frac{e}{r_e^2}$.

Dans cette étape, nous avons besoin de la statistique de micro-champ électrique \vec{f} . Cela est accomplie par l'utilisation de la dynamique moléculaire pour calculer l'intensité du rayonnement :

$$\begin{aligned}
I(\omega) &= \int_0^\infty W(f) df \cdot I(\omega, f) \\
I(\omega) &= \left(\frac{\Phi_e}{3\pi}\right) \cdot \int_0^\infty \frac{f^2 \cdot W(f) df}{2(f^2 + \varepsilon_0^2)} \\
&\cdot \left(\frac{1}{\Phi_e^2 + \left(\omega + \frac{3Zea\bar{f}}{h} - \frac{10.2Z^2}{h}\right)^2} + \frac{1}{\Phi_e^2 + \left(\omega - \frac{3Zea\bar{f}}{h} - \frac{10.2Z^2}{h}\right)^2} \right) \\
&+ \left(\frac{\Phi_e}{3\pi}\right) \int_0^\infty \frac{\varepsilon_0^2 W(f) df}{(f^2 + \varepsilon_0^2)} \\
&\cdot \left(\frac{1}{\Phi_e^2 + \left(\omega + \omega_0 - \frac{\omega_0 f}{\sqrt{f^2 + \varepsilon_0^2}} - \frac{10.2Z^2}{h}\right)^2} + \frac{1}{\Phi_e^2 + \left(\omega - \omega_0 + \frac{\omega_0 f}{\sqrt{f^2 + \varepsilon_0^2}} - \frac{10.2Z^2}{h}\right)^2} \right) \quad (3.5.7)
\end{aligned}$$

Pour être plus explicite, l'évaluation numérique des intégrales dans la dernière expression donne l'intensité de raie Lyman alpha. Nous avons présenté ici quelques profils de raies pour différentes fréquences ω_0 , différentes valeurs du champ électrique tournant ε_0 (notée par eps dans les figures), et pour différentes densités à une température fixée (10^5 °K) (voir les figures 3.5.1-3.5.4). Pour des raisons de simplicité, nous avons pris en compte l'opérateur de collision donné par [6], et nous avons négligé l'effet Doppler et la structure fine dans tous les calculs.

Quand la fréquence ω_0 diminue en respectant la condition de l'adiabaticité, nous voyons que la raie se décompose (voir la figure 3.3). Notons aussi que cette condition dépend de la densité, lorsque la densité n_e est élevée, le domaine de la fréquence ω_0 où la condition de l'adiabaticité est satisfaite sera également important. On peut facilement le voir à partir de la condition $\omega_0 \ll 3Zea\bar{f}/h$, puisque \bar{f} est proportionnel à la densité. Par exemple, nous voyons dans la figure 3.5.2, lorsque la densité est élevée (10^{18}cm^{-3}), l'approximation adiabatique reste valable même pour $\omega_0 = 0.01\omega_p$, qui n'est pas vrai pour la densité 10^{14}cm^{-3} (voir figure 3.5.1). Pour affaiblir l'approximation adiabatique pour le cas de la densité 10^{18}cm^{-3} , il est nécessaire que la fréquence d'oscillation du champ extérieur est de l'ordre de la fréquence du plasma ($\omega_0 = 0.4\omega_p$) (voir figure 3.5.3). Pour ω_0 fixée, nous voyons aussi à partir de la figure 3.5.3, quand les densités augmentent, l'approximation adiabatique devient plus évidente et valable.

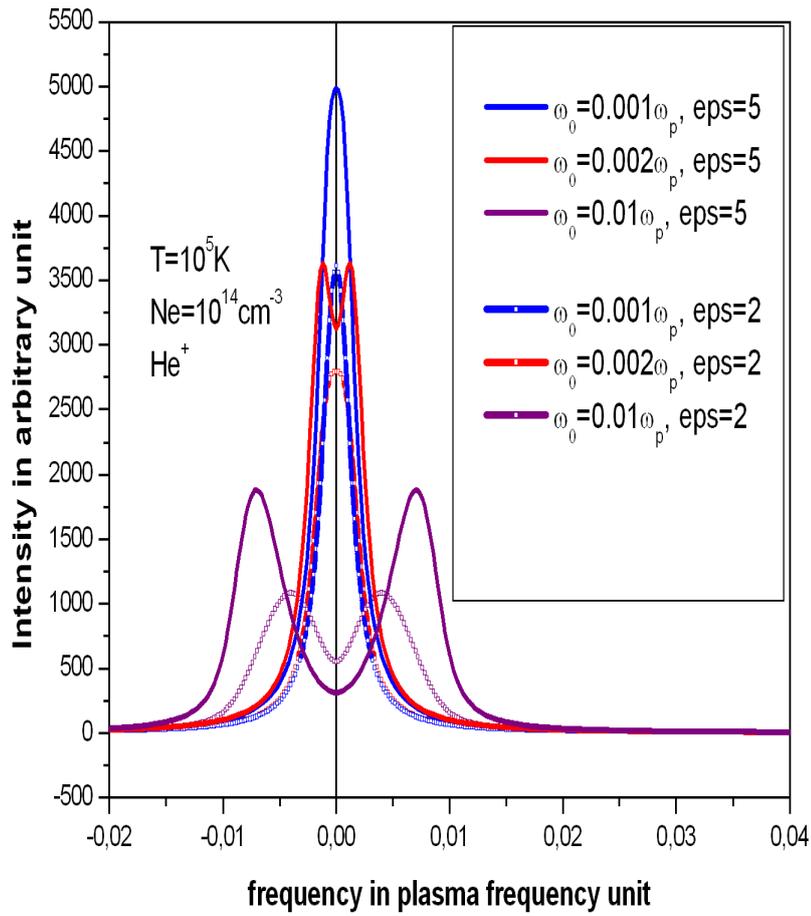


FIGURE 3.5.1 – Les raies Lyman alpha de He^+ en présence d'un champ électrique tournant avec différentes valeurs de ϵ_0 et différentes fréquences ω_0 à la température $10^5 \text{ }^\circ K$ et $n_e = 10^{18} cm^{-3}$

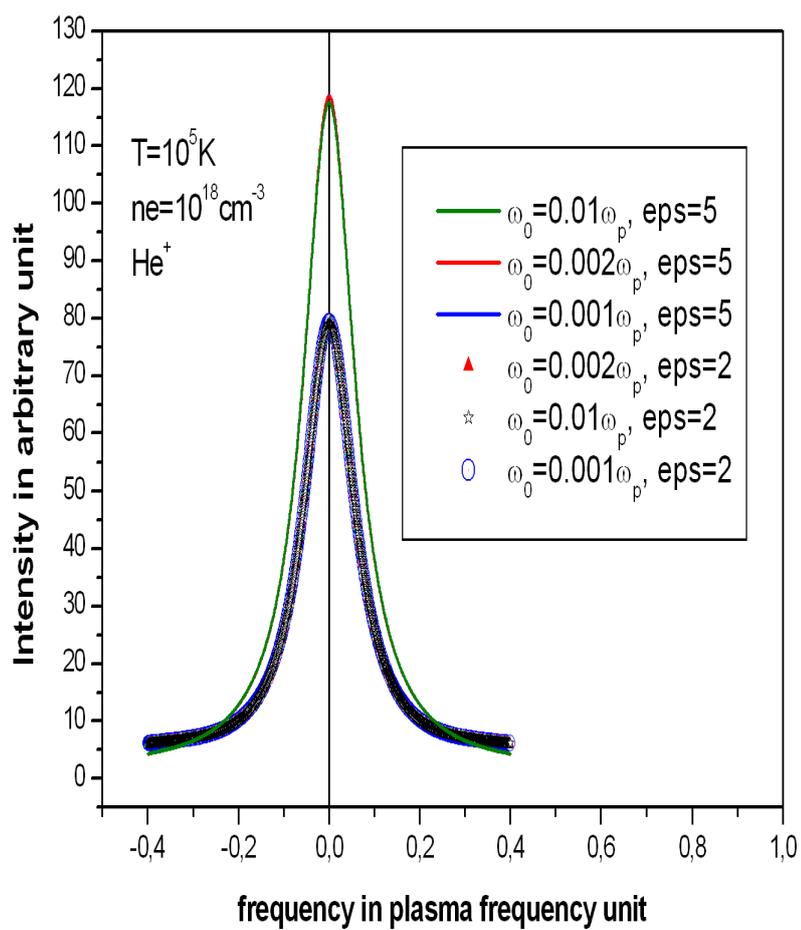


FIGURE 3.5.2 – Les raies Lyman alpha de He + en présence d'un champ électrique tournant avec différentes valeurs de ϵ_0 et différentes fréquences ω_0 à la température $10^5 K$ et $n_e = 10^{18} cm^{-3}$

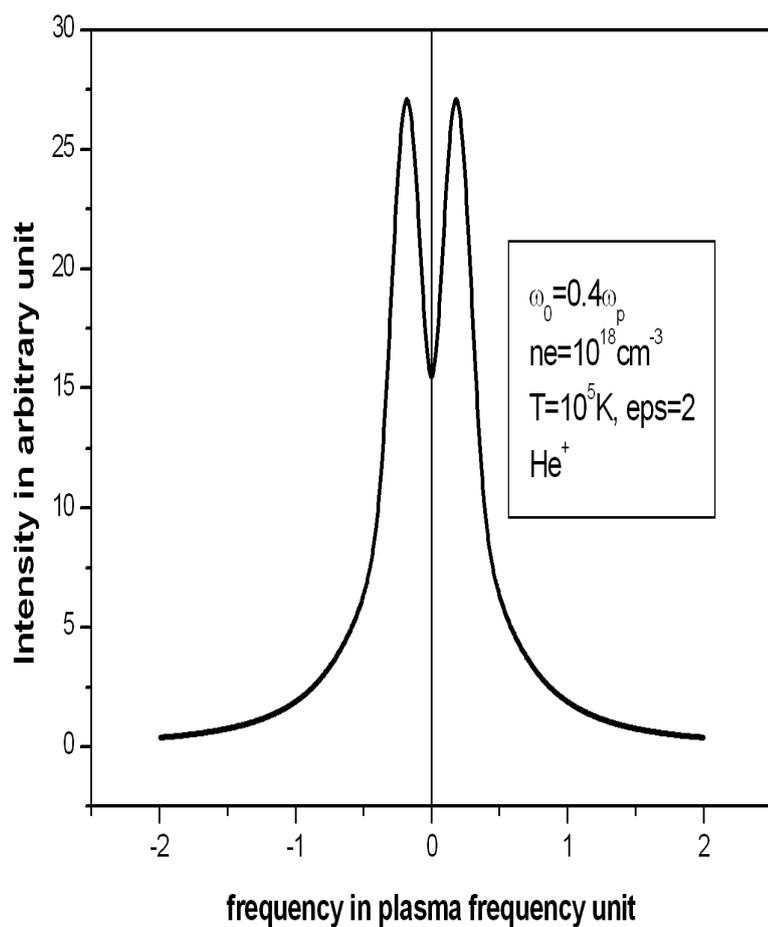


FIGURE 3.5.3 – Les raies Lyman alpha de He^+ en présence d'un champ électrique tournant avec $\epsilon_0 = 2$ et différentes fréquences $\omega_0 = 0.4\omega_p$ à la température $10^5 \text{ }^\circ\text{K}$ et $n_e = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$

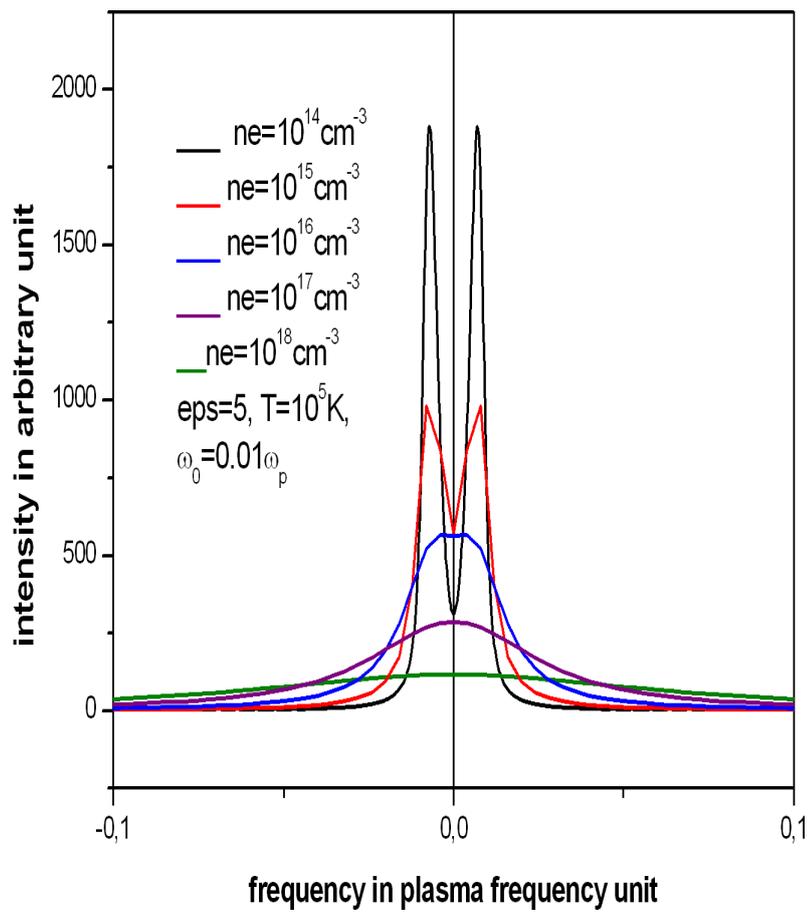


FIGURE 3.5.4 – Les raies Lyman alpha de $He+$ en présence d'un champ électrique tournant avec $\epsilon_0 = 5$ et différentes fréquences $\omega_0 = 0.01\omega_p$ à la température 10^5 K et $n_e = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$

3.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons dégagé la fonction d'auto-corrélation dipolaire (FACD), et l'intensité du rayonnement pour la raie Lyman alpha dans un plasma en utilisant l'approximation adiabatique (AA) sous la forme d'une perturbation adiabatique d'un champ électrique externe tournant. Nous avons montré qu'en plus de la décomposition Stark, il existe une nouvelle décomposition similaire à celle de Zeeman. La validité de cette approximation est discutée pour différentes conditions de plasma comme la densité, et la fréquence du champ électrique. Lorsque ω_0 diminue et tend vers zéro (pas de rotation de $\vec{\varepsilon}(t)$), la raie devient, comme d'habitude, élargie seulement par l'effet de Stark tandis que l'effet de Berry est absent. Mais lorsque ω_0 augmente en obéissant à la condition de (AA) ($\omega_0 \ll 3Zea\bar{f}/\hbar$), la décomposition de Berry apparaît au centre, et le maximum de l'intensité $I(\omega)$ diminue.

Bibliographie

- [1] H. Trygve and I. Tomashevsky, *Physica Scripta* 46, 354 (1992).
- [2] O. Peyrusse, *Phys. Rev. A* 79, 13411(2009).
- [3] O. Peyrusse, *Physica Scripta*, 56, 371 (1997).
- [4] P. Sauvan and E. Dalimier, *Phys. Rev. E.* 79, 036405 (2009).
- [5] W. Dittrich and M. Reuter, *Classical and Quantum Dynamics : from classical path to path integrals*, Springer Berlin Heidelberg (2001).
- [6] M. Difallah, M T. Meftah, A. Bekkouche, N. Bedida. *JQSRT* 113, 299-305(2012).
- [7] M. Difallah, M T. Meftah, N. Bedida. *Physica Scripta* 85, 055012 (2012).
- [8] H. R. Griem, M. Blaha et P. C. Kepple, *Phys. Rev. A* 19(6), 2121(1979).

Chapitre 4

Intégrale de chemin et rayonnement des plasmas

4.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous exposons un formalisme de la mécanique quantique mentionné dans la littérature [1-4], qui est inventé par Feynman en 1942. Ce formalisme dit intégrale de chemin, est particulièrement intéressant et permet de mieux faire le lien entre l'approche quantique et classique. Nous utilisons ce concept avec les exemples de la particule libre et l'oscillateur harmonique puis on va l'appliquer au calcul des fonctions d'auto-corrélation du dipôle électrique dans un plasma.

4.2 Construction physique de l'intégrale de chemin

4.2.1 Amplitude de probabilité

En mécanique quantique, on ne somme pas sur les probabilités des possibilités mais sur leurs amplitudes. Ce fait étrange est la base du phénomène d'interférence des électrons dans l'expérience des fentes de Young : par exemple quand un électron a deux trajets possibles pour aller de A vers B , l'amplitude de probabilité Φ_{AB} de l'événement est :

$$\Phi_{AB} = \Phi_{AB}(1) + \Phi_{AB}(2) \quad (4.2.1)$$

c'est-à-dire que la probabilité de l'événement est :

$$P_{AB} = |\Phi_{AB}|^2 \quad (4.2.2)$$

$$= |\Phi_{AB}(1)|^2 + |\Phi_{AB}(2)|^2 + 2Re(\Phi_{AB}(1)\Phi_{AB}^*(2)) \quad (4.2.3)$$

on appelle que $Re(\Phi_{AB}(1)\Phi_{AB}^*(2))$ est le facteur d'interférence. Ce terme fait la différence entre les deux approches quantique et classique. Cette propriété des amplitudes est

connue sous le principe de superposition. Ces amplitudes des probabilités obéissent aussi au principe de l'état intermédiaire, qui stipule que l'amplitude de probabilités pour aller de A vers B sachant qu'on passe par C

$$\Phi_{AB|C} = \Phi_{AC}\Phi_{CB} \quad (4.2.4)$$

En 1942, Feynman a basé sur ces propriétés, et il a pu élaborer un nouveau formalisme de la mécanique quantique dit intégrale de chemin de Feynman. Dans ce formalisme, il n'est pas nécessaire d'utiliser les quantités mathématiques qui ne commutent pas tels les opérateurs et à leur place on recourt au concept de trajectoires, comme dans la mécanique classique pour décrire les phénomènes quantiques.

4.2.2 Postulats de Feynman

Dans son formalisme de la mécanique quantique, Feynman a proposé un postulat pour calculer la contribution de chaque chemin à l'amplitude totale $K(b, a)$ pour aller d'un point spatio-temporel a à un autre b : on écrit $K(b, a)$ comme la somme des contributions individuelles $\Phi[x(t)]$ de chaque chemin $x(t)$

$$K(b, a) = \sum_{\text{tout les chemins de } a \text{ à } b} \Phi[x(t)] \quad (4.2.5)$$

où $\Phi[x(t)]$ est l'amplitude associée au chemin $x(t)$. Pour évaluer cette amplitude, Feynman a utilisé une remarque de Dirac dans laquelle il a montré un lien intime entre cette amplitude et l'action classique relative au chemin $x(t)$ quand le temps de propagation est très court. Feynman a utilisé la technique de discrétisation, c'est-à-dire, il discrétise le temps en instant à la durée de propagation $[t_i, t_f]$, puis il associe la suite de points $(t_i = t_0, t_1, \dots, t_N, t_{N+1} = t_f)$ et au chemin continu $x(t)$ qui fait correspondre une suite de points $(x_i = x_0, x_1, \dots, x_N, x_{N+1} = x_f)$. De cette manière on écrit l'amplitude comme : $\Phi[x(t)] \rightarrow \Phi(x_0, x_1, x_2, \dots, x_N, x_{N+1})$.

Suivant le principe de l'état intermédiaire, cette dernière se factorise comme :

$$\Phi(x_0, x_1, x_2, \dots, x_N, x_{N+1}) = \prod_{k=1}^{N+1} \Phi(x_k, x_{k-1}) \quad (4.2.6)$$

c'est l'amplitude de probabilité d'aller de a vers b sachant qu'on est passé par $\{x_1, x_2, \dots, x_N\}$.

Pour t_{j-1} très proche de t_j , ou bien x_j proche de x_{j-1} , il postule encore que :

$$\Phi(x_{j-1}, x_j) = M \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S(x_{j-1}, x_j) \right\} \quad (4.2.7)$$

où $S(x_{j-1}, x_j)$ est l'action classique. Donc même amplitude pour tous les chemins ; M , et des phases différentes et proportionnelles à l'action $S(x_{j-1}, x_j)$. Puis on somme sur

tous les points intermédiaires pour balayer toutes les probabilités

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \int dx_1 \dots dx_N M^{N+1} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{N+1} S(x_{j-1}, x_j) \right\} \quad (4.2.8)$$

où $S(x_{j-1}, x_j)$ n'est rien d'autre que l'action classique évaluée suivant un chemin droit

$$S_{Cl}(x_{j-1}, x_j) = \frac{m}{2} (t_j - t_{j-1}) \left(\frac{x_j - x_{j-1}}{t_j - t_{j-1}} \right)^2 - (t_j - t_{j-1}) V(\bar{x}_j) \quad (4.2.9)$$

avec $x_j = x(t_j)$ et $\bar{x}_j \in [x_{j-1}, x_j]$.

Dans le but de réaliser cette condition, Feynman rajoute une limite : $t_j - t_{j-1} \rightarrow 0$; c'est-à-dire qu'il revient à la trajectoire continue. Par conséquent, on écrit

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^N dx_k M^{N+1} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^{N+1} S(x_{k-1}, x_k) \right\}. \quad (4.2.10)$$

A la base de cette construction, l'amplitude de transition d'un point spatio-temporel à un autre est aussi dite propagateur car elle vérifie :

$$\Psi(x, t) = \int dy K(x, t; y, t') \Psi(y, t') \quad (4.2.11)$$

localement elle s'écrit :

$$\Psi(x, t + \varepsilon) = \int dy K(x, t + \varepsilon; y, t) \Psi(y, t) \quad (4.2.12)$$

Par conséquent, pour $\varepsilon \rightarrow 0$, $K(x, t + \varepsilon; y, t) \rightarrow \delta(x - y)$. Cette condition de normalisation nous permet d'identifier la constante $M = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t_j} \right)^{1/2}$.

La forme définitive du propagateur devient alors :

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^N dx_k \prod_{k=1}^{N+1} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{1/2} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^{N+1} \frac{m}{2\varepsilon} (x_k - x_{k-1})^2 - \varepsilon V(\bar{x}_j) \right\} \quad (4.2.13)$$

C'est la définition de l'intégrale de chemin de Feynman du propagateur de la mécanique quantique non relativiste sans spin à une dimension en présence d'un potentiel scalaire. Cette définition se généralise sans peine au cas $D - dim$: $x \equiv (x_1, \dots, x_D)$, $dx \equiv d^D x$ comme :

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^N dx_k \prod_{k=1}^{N+1} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{D/2} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^{N+1} \frac{m}{2\varepsilon} (x_k - x_{k-1})^2 - \varepsilon V(\bar{x}_j) \right\} \quad (4.2.14)$$

4.2.3 Intégrale de chemin et formule de Trotter

4.2.3.1 Opérateur d'évolution

Dans le cas d'un hamiltonien indépendant du temps, la solution formelle de l'équation de Schrödinger peut s'écrire comme :

$$|\Psi(t_b)\rangle = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}H(t_b - t_a)\right] |\Psi(t_a)\rangle \quad (4.2.15)$$

$$= U(t_a, t_b) |\Psi(t_a)\rangle \quad (4.2.16)$$

où U est l'opérateur d'évolution.

Parmi ces propriétés, on peut noter ce que suit :

1- Evolution inversée :

$$U^{-1}(t_b, t_a) = U(t_a, t_b) \quad (4.2.17)$$

2- Unitarité :

$$U^+(t_b, t_a) = U^{-1}(t_b, t_a) \quad (4.2.18)$$

3- Loi de composition :

$$U(t_b, t_a) = U(t_b, t_c)U(t_c, t_a) \quad (4.2.19)$$

4- L'opérateur d'évolution vérifie l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t_b}U(t_b, t_a) = HU(t_b, t_a) \implies i\hbar\frac{\partial}{\partial t_b}U^{-1}(t_b, t_a) = U^{-1}(t_b, t_a)H \quad (4.2.20)$$

5- L'élément de matrice de l'opérateur d'évolution c'est le propagateur

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \theta(t_a - t_b) \langle x_b | U(t_b, t_a) | x_a \rangle \quad (4.2.21)$$

l'évolution est causale.

6- Cet élément de matrice vérifie :

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t_b} - H_b\right) = i\hbar\delta(t_b - t_b)\delta(x_b - x_a) \quad (4.2.22)$$

7- $K(x_b, t_b; x_a, t_a)$ se développe, dans le cas du hamiltonien stationnaire, suivant la base des fonctions propres du hamiltonien :

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \sum_n \varphi_n(x_b) \varphi_n^*(x_a) \exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_n(t_a - t_b)\right] \quad (4.2.23)$$

Il est possible de déduire la formule de Feynman en partant directement de l'opérateur d'évolution. En effet, soit $t_b = T$ et $t_a = 0$; $U(T) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}T\right]$.

En subdivisant la durée T en $N + 1$ intervalles égaux $T = (N + 1)\varepsilon$, nous pouvons

écrire

$$\exp \left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H} T \right] = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \frac{T}{N+1} \right]^{N+1} \quad (4.2.24)$$

Le hamiltonien a la forme suivante

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \quad (4.2.25)$$

Donc par l'application de la formule de Trotter

$$\exp \left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \frac{T}{N+1} \right] = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\hat{p}^2}{2m} \frac{T}{N+1} \right) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} V(\hat{x}) \frac{T}{N+1} \right) + \mathcal{O} \left(\left(\frac{T}{N+1} \right)^2 \right) \quad (4.2.26)$$

Puis on écrit

$$\langle x_b | U(T) | x_a \rangle = \left\langle x_b \left| \left[\exp \left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\hat{p}^2}{2m} \frac{T}{N+1} \right) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} V(\hat{x}) \frac{T}{N+1} \right) \right]^{N+1} \right| x_a \right\rangle \quad (4.2.27)$$

$$= \int \prod_{k=1}^N dx_k \left\langle x_N \left| \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\hat{p}^2}{2m} \frac{T}{N+1} \right) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} V(\hat{x}) \frac{T}{N+1} \right) \right| x_{k-1} \right\rangle \quad (4.2.28)$$

où l'on a introduit la relation de fermeture à chaque instant $t_k \int dx_k |x_k\rangle \langle x_k| = 1$.

Maintenant évaluons l'élément de matrice infinitésimal, il est égal à :

$$\exp \left(-\frac{i}{\hbar} V(\hat{x}_{k-1}) \frac{T}{N+1} \right) \left\langle x_k \left| \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\hat{p}^2}{2m} \frac{T}{N+1} \right) \right| x_{k-1} \right\rangle \quad (4.2.29)$$

$$= \int dp_k \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\frac{\hat{p}_k^2}{2m} \frac{T}{N+1} + V(\hat{x}_{k-1}) \frac{T}{N+1} \right) \right] \langle x_k | p_k \rangle \langle p_k | x_{k-1} \rangle \quad (4.2.30)$$

$$= \int \frac{dp_k}{2\pi\hbar} \exp \left[ip_k (x_k - x_{k-1}) - \frac{i}{\hbar} \frac{T}{N+1} \left(\frac{\hat{p}_k^2}{2m} + V(\hat{x}_{k-1}) \right) \right] \quad (4.2.31)$$

Comme on le voit, il est aussi possible d'intervenir les opérateurs énergie cinétique et énergie potentiel dans cet élément infinitésimal. Ceci nous donne $V(\hat{x}_k)$ à la place de $V(\hat{x}_{k-1})$. En effet, on peut toujours choisir n'importe quel point $\bar{x}_k \in [x_k, x_{k-1}]$. Le résultat devient alors :

$$\langle x_b | U(T) | x_a \rangle = K(x_b, x_a; T) \quad (4.2.32)$$

$$= \int \prod_{k=1}^N dx_k \prod_{k=1}^{N+1} \frac{dp_k}{2\pi\hbar} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^{N+1} \left\{ p_k (x_k - x_{k-1}) - \varepsilon \left(\frac{\hat{p}_k^2}{2m} + V(\bar{x}_k) \right) \right\} \right] \quad (4.2.33)$$

L'intégration sur les p_k s'effectue facilement (forme gaussienne), son résultat donne exactement le résultat déjà trouvé du propagateur.

4.3 Utilisation du concept avec des exemples

4.3.1 La particule libre

Le propagateur de la particule libre s'écrit comme :

$$K(x_f, x_i; T) = \int_{x_i}^{x_f} Dx(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^T \frac{m}{2} \dot{x}^2 dt \right\} \quad (4.3.1)$$

$$= \int \prod_{k=1}^N dx_k \prod_{k=1}^{N+1} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{1/2} \exp \left[\frac{im}{2\pi \hbar \varepsilon} \sum_{k=1}^{N+1} \{(x_k - x_{k-1})^2\} \right] \quad (4.3.2)$$

avec $x_0 = x_i$, $x_{N+1} = x_f$, $T = (N + 1) \varepsilon$.

Comme il est facile de voir, c'est une intégrale gaussienne qui donc s'intègre facilement en utilisant l'identité :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} du \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp[-a(x-u)^2] \sqrt{\frac{\pi}{b}} \exp[-b(u-y)^2] = \sqrt{\frac{ab}{\pi(a+b)}} \exp\left(-\frac{ab}{a+b}(x-y)^2\right) \quad (4.3.3)$$

Dans notre cas on a : $a = b = \frac{m}{2i\hbar\varepsilon}$.

Par conséquent, l'intégration successive sur les variables $\{x_k\}_{k=1, \dots, N}$ donne

$$\sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (N+1) \varepsilon}} \exp \left[\frac{im}{2\hbar (N+1) \varepsilon} (x_{N+1} - x_0)^2 \right] \quad (4.3.4)$$

à la limite $N \rightarrow \infty$ on obtient,

$$K(x_f, x_i; T) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar T}} \exp \left[\frac{im}{2\hbar T} (x_f - x_i)^2 \right] \quad (4.3.5)$$

Remarque :

La forme de $K(x_f, x_i; T)$ est très simple

$$K(x_f, x_i; T) = F_0(T) \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_{Classique}^{Libre} \right] \quad (4.3.6)$$

$S_{Classique}^{Libre}$ est l'action évaluée suivant le chemin classique de la particule libre.

En dimension D , le résultat est facilement généralisé $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_D)$

$$K(x_f, x_i; T) = \left(\frac{m}{2\pi \hbar T} \right)^{D/2} \exp \left[\frac{im}{2\hbar T} (\vec{x}_f - \vec{x}_i)^2 \right] \quad (4.3.7)$$

4.3.2 L'oscillateur harmonique

Le propagateur à évaluer est

$$K(x_f, x_i; T) = \int_{x_i}^{x_f} Dx(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^T \left[\frac{m}{2} \dot{x}^2 - \frac{m}{2} \omega^2 x^2 \right] dt \right\} \quad (4.3.8)$$

$$= \int \prod_{k=1}^N dx_k \prod_{k=1}^{N+1} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{1/2} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^{N+1} \left\{ \frac{m}{2\varepsilon} (x_k - x_{k-1})^2 - \frac{m}{2} \varepsilon \omega^2 \bar{x}_k^2 \right\} \right] \quad (4.3.9)$$

avec $x_0 = x_i$, $x_{N+1} = x_f$, $T = (N+1)\varepsilon$ et $\bar{x}_k \in [x_k, x_{k-1}]$.

Comme l'action se développe à l'ordre 1 en ε , écrivons $\bar{x} = \frac{x_k^2 + x_{k-1}^2}{2}$, le propagateur infinitésimal prend la forme

$$K(x_k, x_{k-1}; \varepsilon) = N_0 \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[a(x_k^2 + x_{k-1}^2) - 2bx_k x_{k-1} \right] \right\} \quad (4.3.10)$$

avec $N_0 = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon} \right)^{1/2}$ et $b = \frac{m}{2\varepsilon}$ et $a = \frac{m}{2\varepsilon} \left[1 - 2 \left(\frac{\omega \varepsilon}{2} \right)^2 \right]$.

Le propagateur est une intégration successive des propagateurs infinitésimaux

$$K(x_f, x_i; T) = \int \prod_{k=1}^N dx_k \prod_{k=1}^{N+1} K(x_k, x_{k-1}; \varepsilon) \quad (4.3.11)$$

Donc, c'est une intégration successive de Gaussiennes. Le résultat est une Gaussienne, c'est-à-dire

$$N_{N+1} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[a_{N+1}(x_{N+1}^2 + x_0^2) - 2b_{N+1}x_{N+1}x_0 \right] \right\} \quad (4.3.12)$$

Il nous reste alors à déterminer les coefficients inconnus N_{N+1} , a_{N+1} et b_{N+1} , nous savons que

$$K(x_{N+1}, x_0; (N+1)\varepsilon) = \int dx_N K(x_{N+1}, x_N; \varepsilon) K(x_N, x_0; N\varepsilon) \quad (4.3.13)$$

De là, on tire la récurrence suivante :

$$N_{N+1} = N_0 N_N \sqrt{\frac{i\pi \hbar}{a_N + a_1}}, \quad (4.3.14)$$

$$a_{N+1} = \frac{a_N^2 - b_N^2 + a_1 a_N}{a_1 + a_N} = \frac{a_1^2 - b_1^2 + a_1 a_N}{a_1 + a_N} \quad (4.3.15)$$

et

$$b_{N+1} = \frac{b_1 b_N}{a_1 + a_N} \quad (4.3.16)$$

L'intégration est effectuée au moyen de la formule

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dy \exp[-ay^2 + by] = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp\left(\frac{b^2}{4a}\right) \quad (4.3.17)$$

la deuxième relation de récurrence nous donne

$$a_N^2 = b_N^2 + a_1^2 - b_1^2 \quad (4.3.18)$$

la troisième devient alors

$$b_{N+1} = \frac{b_1 b_N}{a_1 + \sqrt{b_N^2 + a_1^2 - b_1^2}} \quad (4.3.19)$$

qu'on écrit comme

$$\frac{1}{b_{N+1}} = \frac{1}{b_1} \left(\frac{a_1}{b_N} + \sqrt{1 - \frac{b_1^2 - a_1^2}{b_N^2}} \right) \quad (4.3.20)$$

Sachant que $\varepsilon \ll 1$ ($N \rightarrow \infty$) : $\frac{\omega\varepsilon}{2} = \sin \frac{\omega\varepsilon}{2}$

$$a_1 = \frac{m}{2\varepsilon} \left(1 - 2 \sin^2 \frac{\omega\varepsilon}{2} \right) = \frac{m}{2\varepsilon} \cos \omega\varepsilon \quad (4.3.21)$$

la récurrence sur b_{N+1} est alors simplifiée en :

$$\frac{1}{b_{N+1}} = \frac{\cos \omega\varepsilon}{b_N} + \frac{2\varepsilon}{m} \sqrt{1 - \frac{m \sin^2 \omega\varepsilon}{4\varepsilon^2 b_N^2}} \quad (4.3.22)$$

Introduisons la quantité $\beta_N = \frac{2\varepsilon}{m} b_N$, il vient

$$\frac{1}{\beta_{N+1}} = \frac{\cos \omega\varepsilon}{\beta_N} + \sqrt{1 - \frac{\sin^2 \omega\varepsilon}{\beta_N^2}} \quad (4.3.23)$$

avec

$$\beta_1 = \frac{2\varepsilon}{m} b_1 = 1 \quad (4.3.24)$$

$$\frac{1}{\beta_2} = \frac{\sin 2\omega\varepsilon}{\sin \omega\varepsilon} \quad (4.3.25)$$

$$\frac{1}{\beta_3} = \frac{\sin 3\omega\varepsilon}{\sin \omega\varepsilon} \quad (4.3.26)$$

d'où la forme de la récurrence de β_{N+1}

$$\frac{1}{\beta_{N+1}} = \frac{\sin \omega(N+1)\varepsilon}{\sin \omega\varepsilon} \quad (4.3.27)$$

Il est aisé de s'assurer que cette expression vérifie la récurrence.

Alors, on a

$$b_{N+1} = \frac{m}{2\varepsilon} \frac{\sin \omega\varepsilon}{\sin \omega(N+1)\varepsilon} \quad (4.3.28)$$

$$a_{N+1} = \frac{m}{2\varepsilon} \sin \omega\varepsilon \frac{\cos \omega(N+1)\varepsilon}{\sin \omega(N+1)\varepsilon} \quad (4.3.29)$$

$$N_{N+1} = N_0 \sqrt{\frac{\sin \omega\varepsilon}{\sin \omega(N+1)\varepsilon}} \quad (4.3.30)$$

A la limite, on aura

$$b_{N+1} = \frac{m\omega}{2} \frac{1}{\sin \omega T} \quad (4.3.31)$$

$$a_{N+1} = \frac{m\omega}{2} \frac{\cos \omega T}{\sin \omega T} \quad (4.3.32)$$

$$N_{n+1} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T}} \quad (4.3.33)$$

Le résultat du propagateur est alors

$$K(x_f, x_i; T) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \sin \omega T}} \exp \left[\frac{i m \omega}{2 \hbar \sin \omega T} (x_f^2 + x_i^2) \cos \omega T - 2 x_f x_i \right] \quad (4.3.34)$$

Remarquons là encore que le résultat est de la forme :

$$K(x_f, x_i; T) = F_{oscil}(T) \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_{Classique}^{Oscil} \right] \quad (4.3.35)$$

$S_{Classique}^{Oscil}$ est l'action de l'oscillateur évaluée suivant le chemin classique.

4.4 Technique de la déviation par rapport au chemin classique

Les deux résultats précédents s'inspirent d'une technique générale qui soit au moins correcte pour les systèmes quadratiques. En effet, l'apparition de l'action classique dans le résultat indique que le chemin classique est prépondérant dans l'évaluation. Le facteur $F(T)$ dépendant du temps contient les fluctuations quantiques relativement à ce chemin classique. Dans la suite, nous allons d'abord élaborer une technique dite déviation par rapport au chemin classique. Il s'avère que cette technique s'achève en calcul jusqu'à la fin pour les systèmes quadratiques, c'est-à-dire que $F(T)$ est calculable explicitement, le propagateur est donné par

$$K(x_f, x_i; T) = \int_{x_i}^{x_f} Dx(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^T \left[\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x) \right] dt \right\} \quad (4.4.1)$$

$$K(x_f, x_i; T) = \int_{x_i}^{x_f} Dx(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S[x(t)] \right\} \quad (4.4.2)$$

Introduisons le changement de variable

$$x(t) = \eta(t) + x_{Cl}(t) \quad (4.4.3)$$

où $x_{Cl}(t)$ est le chemin classique qui est la solution des équations classiques représentées par $\left. \frac{\partial S}{\partial x} \right|_{x_{Cl}} = 0$, $\eta(t)$ est la déviation par rapport au chemin classique avec

$$\eta(t_f) = \eta(t_i) = 0 \quad (4.4.4)$$

Le développement de Taylor donne

$$S[x(t)] = S[x_{Cl}] + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \Big|_{x_{Cl}} \eta^2(t) + \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 S}{\partial x^3} \Big|_{x_{Cl}} \eta^3(t) + \dots \quad (4.4.5)$$

Le calcul du propagateur se réduit alors à

$$K(x_f, x_i; T) = \tilde{K}(0, 0; T) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S_{Cl}[x(t)] \right\} \quad (4.4.6)$$

où

$$\tilde{K}(0, 0; T) = \int_0^0 D\eta(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \delta S_{Cl} \right\} \quad (4.4.7)$$

$$\delta S_{Cl} = \frac{1}{2!} \left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}_{Cl}^2} \Big|_{x_{Cl}} \dot{\eta}^2 + 2 \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}_{Cl} \partial x_{Cl}} \Big|_{x_{Cl}} \dot{\eta} \eta + \frac{\partial^2 L}{\partial x_{Cl}^2} \Big|_{x_{Cl}} \eta^2 \right) + \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 S}{\partial x^3} \Big|_{x_{Cl}} \eta^3 + \dots \quad (4.4.8)$$

4.5 L'approche perturbative dans le formalisme de l'intégrale de chemin

Si un système quantique est soumis à un potentiel qui n'introduit que des termes quadratiques dans l'action, alors le traitement du problème peut se faire dans l'intégrale de chemin. Cependant, de nombreux problèmes en mécanique quantique ont des potentiels non quadratiques. Ceci nécessite alors l'emploi d'une méthode d'approximation.

Une méthode d'approximation est le développement perturbatif qui est particulièrement utile quand l'énergie potentielle est petite devant l'énergie cinétique du système (par exemple le cas d'un plasma idéal).

Supposons qu'une particule est soumise à un potentiel $V(x, t)$ unidimensionnel. L'amplitude du mouvement entre deux points a et b dans ce potentiel est :

$$K_V(b, a) = \int_a^b D[x(t)] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x, t) \right] dt \right\} \quad (4.5.1)$$

On notera $K_0(b, a)$ l'amplitude d'une particule libre ($V = 0$). Si l'intégrale du potentiel le long d'un chemin est petite devant \hbar , selon l'inégalité :

$$\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} V(x, t) dt \ll \hbar \quad (4.5.2)$$

Il est possible de développer l'exponentielle dans (1.77) :

$$\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} V(x, t) dt \right\} = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} V(x, t) dt + \frac{1}{2} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \left(\int_{t_1}^{t_2} V(x, t) dt \right)^2 + \dots \quad (4.5.3)$$

Ceci nous permet d'écrire (1.77) sous la forme :

$$K_V(b, a) = K_0(b, a) + K^{(1)}(b, a) + K^{(2)}(b, a) + \dots \quad (4.5.4)$$

où les termes du développement s'écrivent comme :

$$K_0(b, a) = \int_a^b D[x(t)] \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} \frac{m}{2} \dot{x}^2 dt\right) \quad (4.5.5)$$

$$K^{(1)}(b, a) = -\frac{i}{\hbar} \int_a^b D[x(t)] \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} \frac{m}{2} \dot{x}^2 dt\right) \int_{t_1}^{t_2} V(x, \tau) d\tau \quad (4.5.6)$$

$$K^{(2)}(b, a) = -\frac{1}{2\hbar^2} \int_a^b D[x(t)] \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} \frac{m}{2} \dot{x}^2 dt\right) \int_{t_1}^{t_2} V(x, \tau) d\tau \int_{t_1}^{t_2} V(x, \tau') d\tau' \quad (4.5.7)$$

Pour évaluer les termes du développement considérons d'abord le terme $K^{(1)}(b, a)$ et intervertissons l'ordre d'intégration entre le temps et le chemin $x(t)$:

$$K^{(1)}(b, a) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} d\tau \int_a^b D[x(t)] \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} \frac{m}{2} \dot{x}^2 dt\right) V(x, \tau) \quad (4.5.8)$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} d\tau F(\tau) \quad (4.5.9)$$

où

$$F(\tau) = \int_a^b D[x(t)] \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} \frac{m}{2} \dot{x}^2 dt\right) V(x, \tau) \quad (4.5.10)$$

L'intégrale de chemin $F(\tau)$ peut être interprétée comme la somme sur tous les chemins de l'amplitude de la particule libre. Chaque chemin est affecté d'un poids qui est le potentiel $V(x, \tau)$ évalué au temps τ .

Chaque chemin peut donc être divisé en deux parties : une avant le temps $t = \tau$, l'autre après. Pour $t = \tau$ on suppose que chaque chemin passe par le point $x_c(\tau)$, point sur lequel on intègre par la suite. Si on appelle c le point $x_c(\tau)$, on peut tracer schématiquement le chemin dans l'espace-temps.

On peut maintenant utiliser la règle de multiplication des amplitudes pour des événements qui se succèdent, ce qui nous permet d'écrire :

$$F(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} K_0(b, c) V(x_c, \tau) K_0(c, a) dx_c \quad (4.5.11)$$

Ce qui mène à l'amplitude au premier ordre

$$K^{(1)}(b, a) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} \int_{-\infty}^{+\infty} K_0(b, c) V(c) K_0(c, a) dx_c d\tau \quad (4.5.12)$$

Sous cette forme, on peut interpréter l'interaction entre le potentiel et la particule comme une diffusion. L'amplitude au premier ordre comprend une seule diffusion de la particule, l'amplitude à l'ordre k comprend k diffusions.

Nous allons utiliser cette approche perturbative pour évaluer les propagateurs rencontrés dans les problèmes du rayonnement des plasmas. Pour ce qui suit, on va représenter la fonction d'auto-corrélation du dipôle électrique en terme de l'intégrale de chemin de Feynman. Sachant que la transformée de Fourier en temps de cette fonction n'est rien d'autre que le profil de raies, nous consacrons le chapitre suivant pour appliquer le concept de Feynman sur le calcul profil de raie de Lyman- α sans structure fine dans les deux cas : statique et impact.

4.6 Calcul de la fonction d'auto-corrélation du moment dipolaire par la méthode de l'intégrale de chemins

Comme nous l'avons signalé plus haut, la quantité importante pour l'étude des profils des raies est la fonction d'auto-corrélation du moment dipolaire. Dans le cas de la raie Lyman alpha, cette fonction s'écrit comme :

$$C(t) = \exp(-i\epsilon_\beta t) \sum_{\alpha\alpha'\beta\beta'} \overrightarrow{d}_{\alpha\beta} \{ \langle \alpha | T_a(t, 0) | \alpha' \rangle^* \}_{av} \overrightarrow{d}_{\alpha'\beta'}^* \quad (4.6.1)$$

où $\overrightarrow{d}_{\alpha\beta}$ est un élément de matrice dipolaire, $T_a(t, 0)$ est l'opérateur d'évolution qui évolue les états supérieurs α et α' .

En utilisant les deux relations de fermeture suivantes :

$$\int |\overrightarrow{y}\rangle \langle \overrightarrow{y}| d\overrightarrow{y} = 1 \quad (4.6.2)$$

et

$$\int |\overrightarrow{y}'\rangle \langle \overrightarrow{y}'| d\overrightarrow{y}' = 1 \quad (4.6.3)$$

on peut écrire les éléments de matrice de l'opérateur d'évolution des états supérieurs sous la forme [5-8] :

$$\langle \alpha | T_a(s, 0) | \alpha' \rangle = \int \int \langle \alpha | y \rangle \langle y | T_a(t, 0) | y' \rangle \langle y' | \alpha' \rangle dy dy' \quad (4.6.4)$$

Les produits scalaires qui apparaissent dans l'intégrale sont les fonctions d'ondes : $\langle \alpha | y \rangle = \varphi_\alpha(y)$ et $\langle y' | \alpha' \rangle = \varphi_{\alpha'}^*(y')$.

Ce qui mène à la fonction d'auto-corrélation du moment dipolaire

$$C(t) = \exp(-i\epsilon_\beta t) \sum_{\alpha\alpha'\beta\beta'} \overrightarrow{d}_{\alpha\beta} \overrightarrow{d}_{\alpha'\beta'}^* \int \int \varphi_\alpha(y) \varphi_{\alpha'}^*(y') \langle y | \{ T_a(t, 0) \}_{av} | y' \rangle dy dy' \quad (4.6.5)$$

où $\langle y | T_a(t, 0) | y' \rangle$ représente le propagateur de Feynman $K(y, t; y', 0)$

$$K(y, t; y', 0) = \int_{y(t)=y'}^{y(t)=y} D[\vec{y}(t)] \exp \frac{i}{\hbar} \int_0^t \left(\frac{m}{2} \dot{\vec{y}}^2 + \frac{Ze^2}{\|\vec{y}\|} + e \vec{y} \cdot \vec{E}(\tau) \right) d\tau \quad (4.6.6)$$

et $\vec{E}(\tau)$ est le champ électrique créé par tous les composantes des plasmas (ions et électrons) au centre de l'émetteur.

En écrivant le propagateur relatif à l'ion hydrogénéoïde non perturbé qui est défini par le propagateur initial $K_0(y, t; y', 0)$,

$$K_0(y, t; y', 0) = \int_{y(t)=y'}^{y(t)=y} D[\vec{y}(t)] \exp \frac{i}{\hbar} \int_0^t \left(\frac{m}{2} \dot{\vec{y}}^2 + \frac{Ze^2}{\|\vec{y}\|} \right) d\tau \quad (4.6.7)$$

qu'on peut l'écrire également selon la relation (4.2.23) comme :

$$K_0(y, t; y', 0) = \sum_n \varphi_n(y) \varphi_n^*(y') \exp \left[-\frac{i}{\hbar} E_n t \right], \quad (4.6.8)$$

il est possible de développer le propagateur comme une série :

$$K(y, t; y', 0) = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^k \frac{1}{k!} \int_0^t d\tau_1 \cdots \int_0^t d\tau_k \int d\vec{y}_1 \cdots \int d\vec{y}_k \left(\vec{E}_1 \vec{y}_1 \right) \cdots \left(\vec{E}_k \vec{y}_k \right) \prod_{j=0}^k K_0(\vec{y}_{j+1}, \tau_{j+1}; \vec{y}_j, \tau_j) \quad (4.6.9)$$

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

En remplaçant K_0 par son expression, on trouve

$$K(y, t; y', 0) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{\alpha_1 \cdots \alpha_{k+1}} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^k \frac{1}{k!} \int_0^t d\tau_1 \cdots \int_0^t d\tau_k \int d\vec{y}_1 \cdots \int d\vec{y}_k \left(\vec{E}_1 \vec{y}_1 \right) \cdots \left(\vec{E}_k \vec{y}_k \right) \cdots \varphi_{\alpha_{k+1}}^*(\vec{y}) \varphi_{\alpha_{k+1}}^*(\vec{y}_{k+1}) \exp \frac{i}{\hbar} \epsilon_{\alpha_{k+1}}(t - \tau_k) \varphi_{\alpha_1}^*(\vec{y}) \varphi_{\alpha_1}^*(\vec{y}_1) \exp \frac{i}{\hbar} \epsilon_{\alpha_1}(\tau_1 - 0) \quad (4.6.10)$$

On utilise la représentation $|nlm\rangle$, la fonction d'auto-corrélation du dipôle dans le cas de la série de Lyman s'écrit

$$C(t) = \exp(-i\epsilon_\beta t) \sum_{l'mm'} \langle nlm | \vec{d} | 100 \rangle \langle n'l'm' | \vec{d} | 100 \rangle^* \langle \langle nlm, 100 | \{T\} | n'l'm', 100 \rangle \rangle \quad (4.6.11)$$

Il est avantageux d'écrire le produit des éléments de matrice du moment dipolaire en utilisant les composantes standards de $\vec{d} = -e \vec{r}$

$$\begin{cases} r_0^1 = z \\ r_1^1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(x + iy) \\ r_{-1}^1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x - iy) \end{cases} \quad (4.6.12)$$

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

$$C(t) = \frac{\exp(-\nu\epsilon_\beta t)}{3} \sum_{l'l'mm'} \langle nl || d^1 || 10 \rangle \sum_{m=-1}^1 \langle \langle nlm, 100 | \{T\} | n'l'm', 100 \rangle \rangle \quad (4.6.13)$$

où $d^1 = er_0^1$.

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

$$C(t) = \frac{\exp(-\nu\epsilon_\beta t)}{3} \langle 21 || d^1 || 10 \rangle \{ \langle 210 | T | 210 \rangle + 2 \langle 211 | T | 211 \rangle \}_{av} \quad (4.6.14)$$

$$C(t) = \frac{\exp(-\nu\epsilon_\beta t)}{3} \langle 21 || d^1 || 10 \rangle \exp(\Phi_e t) \{ C_0(t) + 2C_1(t) \}_{av} \quad (4.6.15)$$

où Φ_e représente l'amplitude de l'opérateur de collision électronique.

On commence par le calcul de $C_0(t)$:

$$C_1(t) = \int \int dy dy' \varphi_{211}(y) \varphi_{211}^*(y') \langle K(y, t; y', t) \rangle \quad (4.6.16)$$

et on remplace le propagateur K par son expression :

$$\begin{aligned} C_1(t) = & \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{\alpha_2=1 \dots \alpha_{k+1}} \left(\frac{\nu}{\hbar} \right)^k \frac{1}{k!} \int_0^t d\tau_1 \dots \int_0^t d\tau_k \int d\vec{y}_1 \dots \int d\vec{y}_k \left(\vec{E}_1 \vec{y}_1 \right) \dots \left(\vec{E}_k \vec{y}_k \right) \\ & \dots \varphi_{211}(\vec{y}_{k+1}) \varphi_{\alpha_{k+1}}^*(\vec{y}_{k+1}) \varphi_{211}(\vec{y}_{k+1}) \varphi_{\alpha_{k+1}}^*(\vec{y}_{k+1}) \exp \frac{\nu}{\hbar} \epsilon_{\alpha_{k+1}} (t - \tau_k) \\ & \dots \varphi_{\alpha_1}^*(\vec{y}) \varphi_{\alpha_1}(\vec{y}_1) \exp \frac{\nu}{\hbar} \epsilon_{\alpha_1} (\tau_1 - 0) \end{aligned} \quad (4.6.17)$$

ou : $\vec{y}_{k+1} = \vec{y}$, $\vec{y}_0 = \vec{y}'$, $\tau_{k+1} = s$ et $\tau_0 = 0$.

$$\begin{aligned} C_1(t) = & \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{\alpha_2=1 \dots \alpha_{k+1}} \left(\frac{\nu}{\hbar} \right)^k \frac{1}{k!} \int_0^t d\tau_1 \dots \int_0^t d\tau_k \int d\vec{y}_0 \varphi_{\alpha_1}(\vec{y}_0) \varphi_{211}^*(\vec{y}_0) \\ & \int d\vec{y}_{k+1} \varphi_{211}(\vec{y}_{k+1}) \varphi_{\alpha_{k+1}}^*(\vec{y}_{k+1}) \int d\vec{y}_1 \dots \int d\vec{y}_k \left(\vec{E}_1 \vec{y}_1 \right) \dots \\ & \left(\vec{E}_k \vec{y}_k \right) \varphi_{\alpha_{k+1}}(\vec{y}_k) \varphi_{\alpha_k}^*(\vec{y}_k) \varphi_{\alpha_k}(\vec{y}_{k-1}) \dots \varphi_{\alpha_2}^*(\vec{y}_2) \varphi_{\alpha_2}(\vec{y}_1) \varphi_{\alpha_1}^*(\vec{y}_1) \\ & \exp \left[\frac{\nu}{\hbar} \epsilon_{\alpha_{k+1}} (s - \tau_k) + \frac{\nu}{\hbar} \epsilon_{\alpha_k} (\tau_k - \tau_{k-1}) + \dots + \frac{\nu}{\hbar} \epsilon_{\alpha_1} (\tau_1 - 0) \right] \end{aligned} \quad (4.6.18)$$

En utilisant l'orthogonalité des fonctions d'ondes :

$$\int d\vec{y}_{k+1} \varphi_{211}(\vec{y}_{k+1}) \varphi_{\alpha_{k+1}}^*(\vec{y}_{k+1}) = \delta_{211, \alpha_{k+1}} \quad (4.6.19)$$

$$\int d\vec{y}_0 \varphi_{\alpha_1}(\vec{y}_0) \varphi_{\alpha_{211}}^*(\vec{y}_0) = \delta_{\alpha_1, 211} \quad (4.6.20)$$

on obtient

$$C_1(s) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{\alpha_2=1 \dots \alpha_{k+1}} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^k \frac{1}{k!} \int_0^s d\tau_1 \dots \int_0^s d\tau_k \int d\vec{y}_1 \dots \int d\vec{y}_k \left(\vec{E}_1 \vec{y}_1\right) \varphi_{211}(\vec{y}_k) \varphi_{\alpha_k}^*(\vec{y}_k) \dots \varphi_{\alpha_2}^*(\vec{y}_1) \varphi_{211}(\vec{y}_1) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \epsilon_{211} s\right) \quad (4.6.21)$$

Nous allons omettre le facteur de phase $\exp\left(\frac{i}{\hbar} \epsilon_{211} s\right)$ dans tout le calcul, et nous le ferons à nouveau apparaître dans le résultat final.

Cas $k = 0$:

$$C_1^{(0)} = C_1^{k=0} = 1 \quad (4.6.22)$$

Cas $k = 1$:

$$C_1^{(1)}(s) = \frac{i}{\hbar} \int_0^s d\tau_1 \left\{ \vec{E}_1(\tau_1) \right\} \left[\int d\vec{y}_1 \varphi_{211}(\vec{y}_1) \vec{y}_1 \varphi_{211}^*(\vec{y}_1) \right] = 0 \quad (4.6.23)$$

par suite de l'application de la règle de sélection pour le moment orbital l , ou aussi par le fait que la moyenne du vecteur champ électrique est nulle.

Cas $k = 2$:

$$C_1^{(2)}(s) = \frac{1}{2!} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^s d\tau_1 \int_0^s d\tau_2 \sum_{\alpha_2=1} \left\{ \left[\vec{E}_1(\tau_2) \int d\vec{y}_2 \varphi_{211}(\vec{y}_2) \vec{y}_2 \varphi_{\alpha_2}^*(\vec{y}_2) \right] \left[\vec{E}_1(\tau_1) \int d\vec{y}_1 \varphi_{\alpha_2}(\vec{y}_1) \vec{y}_1 \varphi_{211}^*(\vec{y}_1) \right] \right\} \quad (4.6.24)$$

On remarque qu'un seul état $\alpha = 200$ contribue dans la somme, toujours par la règle de sélection.

En notant

$$\int d\vec{y}_1 \varphi_{200}(\vec{y}_1) \vec{y}_1 \varphi_{211}^*(\vec{y}_1) \equiv \vec{D}_+ \quad (4.6.25)$$

Alors, nous pouvons écrire

$$C_1^{(2)}(s) = \frac{1}{2!} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \left[\int d\vec{y} \vec{E}(\tau) \vec{D}_+ \right]^2 \quad (4.6.26)$$

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 d'auto-corrélation

du moment dipolaire. C'est ainsi que par exemple les termes d'ordres $n = 4$ et $n = 6$ sont respectivement égaux à :

$$C_1^{(4)}(s) = \frac{1}{2!} \left(\frac{\iota}{\hbar}\right)^2 \int_0^s d\tau_1 \int_0^s d\tau_2 \int_0^s d\tau_3 \int_0^s d\tau_4 \int d\vec{y}_1 \int d\vec{y}_2 \int d\vec{y}_3 \int d\vec{y}_4$$

$$\left(\vec{E}_1 \vec{y}_1\right) \left(\vec{E}_2 \vec{y}_2\right) \left(\vec{E}_3 \vec{y}_3\right) \left(\vec{E}_4 \vec{y}_4\right) \varphi_{211}(\vec{y}_4) \varphi_{\alpha_4}^*(\vec{y}_4) \varphi_{\alpha_4}(\vec{y}_3) \varphi_{\alpha_3}(\vec{y}_3)$$

$$\varphi_{\alpha_3}(\vec{y}_2) \varphi_{\alpha_2}^*(\vec{y}_2) \varphi_{\alpha_2}(\vec{y}_1) \varphi_{211}^*(\vec{y}_1) \quad (4.6.27)$$

la règle de sélection impose que $\alpha_2 = \alpha_4 = 200$, ce qui nous donne : $\int d\vec{y}_1 \varphi_{200}(\vec{y}_1) \vec{y}_1 \varphi_{211}^*(\vec{y}_1) \equiv \vec{D}_+^*$ et $\int d\vec{y}_4 \varphi_{211}^*(\vec{y}_4) \vec{y}_4 \varphi_{200}(\vec{y}_4) \equiv \vec{D}_+^*$

$$C_1^{(4)}(s) = \frac{1}{4!} \left(\frac{\iota}{\hbar}\right)^4 \int_0^s d\tau_1 \int_0^s d\tau_2 \int_0^s d\tau_3 \int_0^s d\tau_4 \left[\vec{E}(\tau_1) \vec{D}_+ \right] \left[\vec{E}(\tau_4) \vec{D}_+^* \right] \sum_{\alpha_3=1}$$

$$\left\{ \left[\vec{E}(\tau_3) \int d\vec{y}_3 \varphi_{200}(\vec{y}_3) \vec{y}_3 \varphi_{\alpha_3}^*(\vec{y}_3) \right] \left[\vec{E}(\tau_2) \int d\vec{y}_2 \varphi_{200}(\vec{y}_2) \vec{y}_1 \varphi_{\alpha_3}^*(\vec{y}_2) \right] \right\} \quad (4.6.28)$$

$$= \frac{1}{4!} \left(\frac{\iota}{\hbar}\right)^4 \left[\int_0^s d\tau \vec{E}(\tau) \vec{D}_+ \right]^2 \left[\left(\left[\int_0^s d\tau \vec{E}(\tau) \vec{D}_+ \right]^2 \right) + \left[\int_0^s d\tau \vec{E}(\tau) \vec{D}_0 \right]^2 + \left[\int_0^s d\tau \vec{E}(\tau) \vec{D}_- \right]^2 \right]$$

$$= \frac{1}{4!} \left(\frac{\iota}{\hbar}\right)^4 A_+^2(s) [A_+^2(s) + A_0^2(s) + A_-^2(s)] \quad (4.6.29)$$

et :

$$C_1^{(6)}(s) = \frac{1}{6!} \left(\frac{\iota}{\hbar}\right)^6 A_+^2(s) [A_+^2(s) + A_0^2(s) + A_-^2(s)]^2 \quad (4.6.30)$$

ou :

$$\int d\vec{y}_1 \varphi_{200}(\vec{y}_1) \vec{y}_1 \varphi_{210}^*(\vec{y}_1) \equiv \vec{D}_0,$$

$$\int d\vec{y}_1 \varphi_{200}(\vec{y}_1) \vec{y}_1 \varphi_{21-1}^*(\vec{y}_1) \equiv \vec{D}_-$$

$$\int d\vec{y}_1 \varphi_{200}(\vec{y}_1) \vec{y}_1 \varphi_{211}^*(\vec{y}_1) \equiv \vec{D}_+.$$

et

$$\int_0^s d\tau \vec{E}(\tau) \vec{D}_+ = A_+(s)$$

$$\int_0^s d\tau \vec{E}(\tau) \vec{D}_0 = A_0(s)$$

$$\int_0^s d\tau \vec{E}(\tau) \vec{D}_- = A_-(s)$$

En sommant les différents termes, le résultat pour la composante centrale peut s'écrire sous la forme compacte :

$$C_1(s) = 1 + A_+^2(s) \sum_{p=1}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^{2p} \frac{1}{(2p)!} [A_+^2(s) + A_0^2(s) + A_-^2(s)]^{p-1} \quad (4.6.31)$$

De la même façon, on trouve $C_0(s)$

$$C_0(s) = 1 + A_0^2(s) \sum_{p=1}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^{2p} \frac{1}{(2p)!} [A_+^2(s) + A_0^2(s) + A_-^2(s)]^{p-1} \quad (4.6.32)$$

la moyenne de $C_1(s)$ et $C_0(s)$:

$$\{C_1(s)\}_{av} = 1 + \{A_+^2(s)\}_{av} \sum_{p=1}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^{2p} \frac{1}{(2p)!} [\{A_+^2(s)\}_{av} + \{A_0^2(s)\}_{av} + \{A_-^2(s)\}_{av}]^{p-1} \quad (4.6.33)$$

comme les trois moyennes $\{A_0^2(s)\}_{av}$, $\{A_-^2(s)\}_{av}$ et $\{A_+^2(s)\}_{av}$ sont statiquement égaux, on a :

$$\begin{aligned} \{C_1(s)\}_{av} &= 1 + \{A_0^2(s)\}_{av} \sum \left(\frac{i}{\hbar}\right)^{2p} \frac{3^{p-1}}{(2p)!} [\{A_0^2(s)\}_{av}]^{p-1} \\ &= 1 + \frac{1}{3} \sum_{p=1}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^{2p} \frac{[3\{A_0^2(s)\}_{av}]^p}{(2p)!} \end{aligned} \quad (4.6.34)$$

et aussi pour $C_0(s)$:

$$\begin{aligned} \{C_0(s)\}_{av} &= 1 + \{A_0^2(s)\}_{av} \sum \left(\frac{i}{\hbar}\right)^{2p} \frac{3^{p-1}}{(2p)!} [\{A_0^2(s)\}_{av}]^{p-1} \\ &= 1 + \frac{1}{3} \sum_{p=1}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^{2p} \frac{[3\{A_0^2(s)\}_{av}]^p}{(2p)!} \end{aligned} \quad (4.6.35)$$

Regroupant maintenant les termes $\{C_1(s)\}$ et $\{C_0(s)\}$ dans (3.4.12), nous obtenons la fonction d'auto-corrélation du moment dipolaire électrique (après avoir remis la phase en énergie ε_2 du niveau $n = 2$)

$$\begin{aligned} C(s) &= \frac{1}{3} \langle 21 || d^1 || 10 \rangle \exp(\Phi_e s) \left[2 + \sum_{p=1}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^{2p} \frac{[3\{A_0^2(s)\}_{av}]^p}{(2p)!} \right] \\ C(s) &= \frac{1}{3} \langle 21 || d^1 || 10 \rangle \exp\left(\left(\Phi_e + \frac{i\Delta\varepsilon}{\hbar}\right) s\right) \left[2 + \cos \frac{\sqrt{3\{A_0^2(s)\}_{av}}}{\hbar} \right] \end{aligned} \quad (4.6.36)$$

Puisque \vec{D}_+ , \vec{D}_0 et \vec{D}_- ayant une seule composante, on peut omettre le symbole de

vecteur, et en écrit :

$$D_+ \cdot \int_0^s d\tau E(\tau) = A_+(s, 0)$$

$$D_0 \cdot \int_0^s d\tau E(\tau) = A_0(s, 0)$$

$$D_- \cdot \int_0^s d\tau E(\tau) = A_-(s, 0)$$

et de plus :

$$\{A_0^2(s)\}_{av} = D_0 \cdot \int_0^s d\tau \int_0^s d\tau' \{E(\tau) E(\tau')\}_{av} = \frac{D_0}{3} \cdot \int_0^s d\tau \int_0^s d\tau' \{E(\tau) E(\tau')\}_{av}$$

La fonction d'auto-correlation du dipôle prend la forme finale suivante :

$$C(s) = \frac{1}{3} \langle 21 || d^1 || 10 \rangle \exp \left(\left(\Phi_e + \frac{i\Delta\varepsilon}{\hbar} \right) s \right) \left[2 + \cos \frac{D_0}{\hbar} \sqrt{\int_0^s d\tau \int_0^s d\tau' \{E(\tau) E(\tau')\}_{av}} \right] \quad (4.6.37)$$

Nous utilisons la stationnarité du système c-à-d :

$$\begin{aligned} \int_0^s d\tau \int_0^s d\tau' \{E(\tau) E(\tau')\}_{av} &= \int_0^s d\tau \int_0^\tau d\tau' C(\tau - \tau') \\ &= 2 \int_0^s d\tau \int_0^\tau d\tau' C(\tau - \tau') \end{aligned} \quad (4.6.38)$$

on pose $z = \tau - \tau'$,

$$\int_0^s d\tau \int_0^s d\tau' \{E(\tau) E(\tau')\}_{av} = 2 \int_0^s d\tau \int_0^\tau dz C(z)$$

et mettons $\int_0^\tau dz C(z) = H(\tau)$, et écrivons

$$\int_0^s d\tau \int_0^s d\tau' \{E(\tau) E(\tau')\}_{av} = 2 \int_0^s d\tau H(\tau)$$

On intègre par partie $\int_0^s d\tau G(\tau)$:

$$\int_0^s d\tau G(\tau) = [\tau G(\tau)]_0^s - \int_0^s d\tau \tau G'(\tau)$$

Or $G'(\tau)$ n'est rien d'autre que : $H'(\tau) = C(\tau)$,

$$\begin{aligned} \int_0^s d\tau H(\tau) &= sH(s) - \int_0^s \tau d\tau H(\tau) \\ &= s \int_0^s d\tau C_{EE}(\tau) - \int_0^s \tau d\tau C_{EE}(\tau) = s \int_0^s d\tau \left(1 - \frac{\tau}{s}\right) C(\tau) \end{aligned}$$

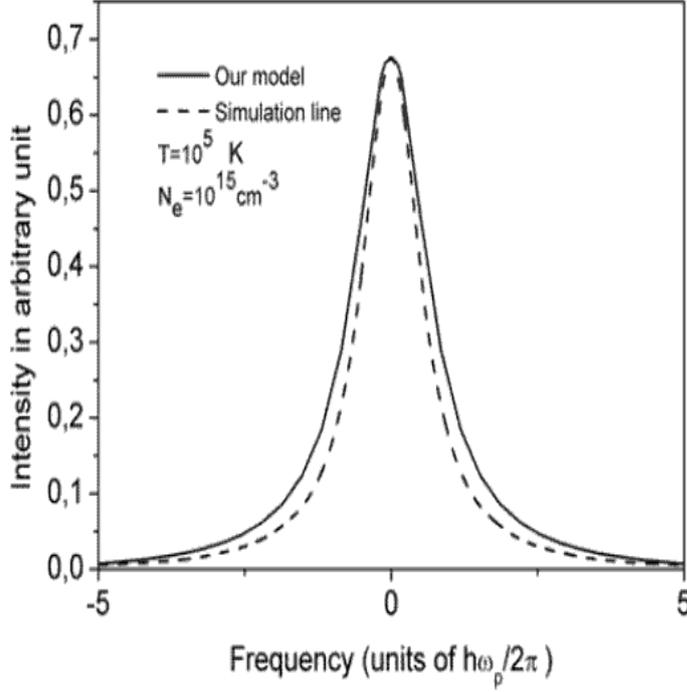


FIGURE 4.6.1 – La raie Lyman alpha à la température $10^5 \text{ }^\circ\text{K}$ et $n_e = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$

donc :

$$\begin{aligned} \int_0^s d\tau \int_0^s d\tau' \{E(\tau) E(\tau')\}_{av} &= 2 \int_0^s d\tau H(\tau) \\ &= 2s \langle E^2 \rangle \int_0^s d\tau \left(1 - \frac{\tau}{s}\right) C_{EE}(\tau) \end{aligned} \quad (4.6.39)$$

où $C_{EE}(\tau)$ est la fonction d'auto-corrélation du champ électrique.

Remplaçons (4.6.39) dans (4.6.37), on obtient

$$C(\bar{s}) = \frac{1}{3} \langle 21 || d^1 || 10 \rangle \exp \left(\left(\Phi_e + \frac{i\Delta\varepsilon}{\hbar\omega_p} \right) \bar{s} \right) \left[2 + \cos \frac{D_0}{\hbar\omega_p} \sqrt{2s \langle E^2 \rangle \int_0^{\bar{s}} d\tau \left(1 - \frac{\tau}{\bar{s}}\right) C_{EE}(\tau)} \right] \quad (4.6.40)$$

On considère une fonction d'auto-corrélation du microchamp celle proposée par Rosenbluth et Restoker [9] pour un plasma faiblement couplé, et si on compare le profil par un autre donné par la simulation pour une température $10^5 \text{ }^\circ\text{K}$ et densité 10^{18} cm^{-3} pour l'hydrogène, on voit que la théorie de l'intégrale de chemins donne un résultat satisfaisable (Figure 4.6.1).

4.6.1 Cas d'impact

En partant de l'équation (4.6.1) donnant la fonction d'auto-corrélation du moment dipolaire électrique pour la raie de Lyman- α :

$$C(s) = \exp(-i\epsilon_\beta s) \sum_{\alpha\alpha'} \overrightarrow{d_{\alpha\beta}} \{ \langle \alpha | T_a(s, 0) | \alpha' \rangle^* \}_{av} \overrightarrow{d_{\alpha'\beta}^*} \quad (4.6.41)$$

où les accolades $\{\dots\}$ désignent la moyenne sur les perturbateurs ioniques.

Dans la suite, on s'intéresse à appliquer l'approximation d'impact pour $\{ \langle \alpha | T_a(s, 0) | \alpha' \rangle \}$:

$$\begin{aligned} \Delta \{ \langle \alpha | T_a(s, 0) | \alpha' \rangle^* \} &= \Delta \{ T_{a_{\alpha\alpha'}}^*(s, 0) \} = T_{a_{\alpha\alpha'}}^*(s + \Delta s, 0) - T_{a_{\alpha\alpha'}}^*(s, 0) \\ &= \left\{ \left(T_{a_{\alpha\alpha'}}^*(s + \Delta s, s) - 1 \right) T_{a_{\alpha\alpha'}}^*(s, 0) \right\} \end{aligned}$$

On choisit Δs suffisamment grand ($\Delta s \gg \tau_c$) pour que les deux facteurs soient statiquement indépendants :

$$\Delta \{ T_{a_{\alpha\alpha'}}^*(s, 0) \} = \left\{ T_{a_{\alpha\alpha'}}^*(s + \Delta s, s) - 1 \right\} \{ T_{a_{\alpha\alpha'}}^*(s, 0) \} \quad (4.6.42)$$

En divisant par Δs :

$$\begin{aligned} \frac{\Delta \{ T_{a_{\alpha\alpha'}}^*(s, 0) \}}{\Delta s} &= \frac{\left\{ T_{a_{\alpha\alpha'}}^*(s + \Delta s, s) - 1 \right\}}{\Delta s} \{ T_{a_{\alpha\alpha'}}^*(s, 0) \} \\ &\equiv \Phi_i \{ T_{a_{\alpha\alpha'}}^*(s, 0) \} \end{aligned} \quad (4.6.43)$$

on obtient :

$$\{ T_{a_{\alpha\alpha'}}^*(s, 0) \} = \exp(s\Phi_i), \quad (4.6.44)$$

où

$$\Delta s\Phi_i = \left\{ T_{a_{\alpha\alpha'}}^*(s + \Delta s, s) - 1 \right\} \quad (4.6.45)$$

$$\{ T_{a_{\alpha\alpha'}}^*(s + \Delta s, s) \} = \int \int \varphi_\alpha(\vec{x}) \varphi_{\alpha'}^*(\vec{y}) \{ K(\vec{x}, s + \Delta s / \vec{y}, s) \} dx dy \quad (4.6.46)$$

ce que nous l'avons calculé avant en terme de l'intégrale de chemins :

$$T_{a_{\alpha\alpha'}}(s + \Delta s, s) = 1 + \frac{3}{2} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 A_0^2(s, s + \Delta s) \quad (4.6.47)$$

$$T_{a_{\alpha\alpha'}}(s + \Delta s, s) = 1 + \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \frac{D_0^2}{6} \int_s^{s+\Delta s} d\tau \int_s^{s+\Delta s} d\tau' E(\tau) E(\tau') \quad (4.6.48)$$

où

$$\overrightarrow{D}_0 = \int d\vec{y}_1 \varphi_{200}(\vec{y}_1) \vec{y}_1 \varphi_{210}^*(\vec{y}_1) \quad (4.6.49)$$

En utilisant le changement de variables $t = \tau - s$ et $t' = \tau' - s$, on aboutit à :

$$T_{a_{\alpha\alpha'}}(s + \Delta s, s) = 1 + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \frac{D_0^2}{6} \int_0^{\Delta s} dt \int_0^{\Delta s} dt' E(t) E(t') \quad (4.6.50)$$

ce qui permet d'écrire l'opérateur de collision sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \Delta s \Phi_i &= \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \frac{D_0^2}{6} \int_0^{\Delta s} dt \int_0^{\Delta s} dt' \{E(t) E(t')\} \\ &= \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \frac{D_0^2}{3} (\Delta s) \int_0^{\Delta s} dt \left(1 - \frac{t}{\Delta s}\right) C_{EE}(t) \end{aligned} \quad (4.6.51)$$

d'où pour $(\Delta s \rightarrow \infty)$

$$\Phi_i = \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \frac{D_0^2}{3} \int_0^{+\infty} dt C_{EE}(t) \quad (4.6.52)$$

Cette expression est similaire à celle des opérateurs d'impact pour les émetteurs hydrogénéoïdes [10] lorsque l'approximation du second ordre dans le potentiel d'interaction est considérée.

Finalement, on trouve que la fonction d'auto-corrélation du moment dipolaire dans l'approximation d'impact pour la raie de Lyman- α s'écrit comme :

$$C(s) = \exp(-i\Delta\varepsilon s) \sum_{\alpha\alpha'\beta} \overrightarrow{d_{\alpha\beta}} \overrightarrow{d_{\alpha\beta}^*} \exp(\Phi_i s) \quad (4.6.53)$$

4.6.2 Cas statique

Dans ce cas, le micro-champ varie lentement dans le temps, donc $\overrightarrow{E}(\tau) \approx \overrightarrow{E}(0)$. On peut considérer que $C_{EE}(\tau) = C_{EE}(0) = 1$, et la fonction d'auto-corrélation du dipôle électrique devient

$$C(s) = \frac{1}{3} \|\langle 21 || d^1 || 10 \rangle\|^2 \exp\left(\left(\frac{i\Delta\varepsilon}{\hbar}\right) s\right) \left[2 + \cos\left(\frac{D_0 s}{\hbar\omega_p} \sqrt{\langle E^2 \rangle}\right)\right] \quad (4.6.54)$$

Nous pouvons comparer cette expression avec les calculs publiés de la raie Lyman alpha dans le cas statique [11].

4.7 Conclusion

Nous avons utilisé un nouvel outil pour le calcul des profils de raies, que nous avons appliqué sur le cas de la raie Lyman alpha sans structure fine. L'expression trouvée possède deux limites : statique et impact. Nous concluons que cette technique de l'intégrale de chemin mérite d'abord une application quantitative complète pour ce cas, puis d'être étendue à des cas de structure atomique plus complexe. L'avantage de cette technique est qu'on peut la simuler numériquement. Par exemple, on peut appliquer la dynamique moléculaire au problème de l'élargissement, et qu'on peut retenir les effets quantiques d'une façon qu'on peut les contrôler numériquement. En effet, en choisissant dans l'espace des phases des chemins qui ne minimisent pas l'action classique (le chemin classique correspondant à l'action minimale S_{min}), on peut ajouter les contributions quantiques de tous les chemins dont l'action S s'écarte de S_{min} d'une valeur donnée.

Bibliographie

- [1] R. P. Feynman et A. R. Hibbs, Quantum Mechanics and Path integrals, McGraw-Hill, New York, 1965.
- [2] L. S. Schulman, Techniques and Applications of Path Integration, Wiley, New York, 1981.
- [3] H. Kleinert, Path integrals in Quantum Mechanics Statistics and Polymer Physics, World Scientific, 1990.
- [4] D. C. Khandekar, S. V. Lawande et K. V. Bhagwat, Path Integral Methods and their Applications, World Scientific, 1993.
- [5] I. Chihi, M T. Meftah, H. Kleinert. J. Plasma Physics, 70, 553 (2004).
- [6] H. Bouguettaia et al. JQSRT, 94, 335 (2005).
- [7] N. Bedida, M T. Meftah, D. Boland, R. Stamm, 19th ICSLS, 15, pp. 100, ed. M. Gigosos and M. Gonzales, AIP 1058 (2008).
- [8] M. Difallah, M T. Meftah, N. Bedida, D. Boland, R. Stamm. International Review of Atomic and Molecular Physics, 1, pp. 85-90 (2010).
- [9] M.N. Rosenbluth, N. Rostoker, "Phys. Fluids", 5, 776, (1962).
- [10] R. Stamm, B. Talin, E L. Pollock, C A. Iglesias. Phys Rev A, 34, 4144 (1986).
- [11] R. Stamm, E W. Smith, B. Talin. Phys Rev A, 30, 2039 (1984).

4.8 Conclusion générale

Dans cette thèse, nous avons montré que la phase de Berry se manifeste dans les profils des raies pour un système quantique (émetteur) dans un plasma soumis à un champ électrique tournant dont la fréquence de rotation obéit à la condition de l'approximation adiabatique. Nous avons appliqué cette approximation pour l'interaction entre les émetteurs du rayonnement dans un plasma et un champ électrique total résultant du champ local plus un champ laser extérieur. Nous avons constaté de nouveaux éclatements en plus l'éclatements Stark. La validité de cette approximation est discutée pour différentes conditions de plasma comme la densité, et la fréquence d'oscillation du champ électrique. Nous avons constaté que lorsque ω_0 diminue et tend vers zéro (pas de rotation pour $\vec{\varepsilon}(t)$), la raie devient, comme d'habitude, élargie seulement par l'effet Stark tandis que l'effet Berry est absent. Mais lorsque ω_0 augmente en gardant toujours la condition de l'approximation adiabatique (AA) ($\omega_0 \ll 3Zea\bar{f}/\hbar$), la décomposition de Berry apparaît au voisinage du centre, et le maximum de l'intensité $I(\omega)$ diminue. Nous avons également appliqué le formalisme de l'intégrale de chemins pour la théorie des raies spectrales, et nous avons constaté que ce formalisme est bien adapté pour étudier les cas extrêmes statique et impact. Il est également très pratique si la dynamique des ions est prise en compte, ainsi pour d'autres raies Balmer et Paschen avec et sans structure fine, qui fera l'objet d'un futur projet de recherche.