

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
Ministère de L'Enseignement Supérieur
et de la Recherche Scientifique



Université Echahid Hamma Lakhdar El-Oued
FACULTE DES SCIENCES ET TECHNOLOGIE

N° d'ordre :

N° de série :

Mémoire de fin d'étude
Présenté pour l'obtention du diplôme de

MASTER ACADEMIQUE

Domaine : Sciences de la Matière
Filière : physique
Spécialité : physique appliquée de rayonnement et énergie

Présenté par: Zouari Ahmed Bechira

Thème

**Calcul de distribution de micro-champ
ionique dans un plasma chaud**

Soutenu le : 11 / 06 / 2015

Membres du jury:

Président:	Mahboub Mohammed sadak	MCA	Université d'El-Oued
Examineur:	Meftah Mohammed Tayeb	Pr	Université de Ouargla
Examineur:	Delmi Samia	MCB	Université d'El-Oued
Rapporteur:	Difallah Mosbah	MCA	Université d'El-Oued

Année Universitaire: 2014/2015

DEDICACES

A la mémoire de mon père ;

A ma très chère mère ;

A mes chers frères Sadok et Amara ;

A ma chère sœur Hana ;

*A tous ceux qui m'ont encouragée de
prêt ou de loin ;*

Je dédie ce mémoire .

Bechíra

Remerciement

Je remercie Dieu le tout puissant, pour m'avoir donné la santé, le courage et la volonté d'étudier et pour m'avoir permis de réaliser ce modeste travail dans les meilleures conditions.

Je remercie mon directeur de recherche, Dr. M. Difallah, maître de conférence pour son soutien scientifique, ainsi que pour sa compétence et les bonnes orientations , Je lui exprime toute ma gratitude.

Je tiens à remercier, Le Président de jury, Dr. M S. Mahboub , ainsi que les examinateurs, Pr. Mohamed Tayeb Meftah et Dr. S. Delmi, pour l'honneur qu'ils m'ont fait en acceptant de juger ce travail .

Enfin, je remercie toute personne ayant participé à réaliser ce travail .

Table des matières

Introduction générale	8
1 Généralités sur les plasmas et profils des raies	9
1.1 Généralités sur les plasmas	9
1.1.1 Définition d'un Plasma	9
1.2 Les propriétés du plasma	15
1.3 La théorie quantique du rayonnement	18
1.3.1 Transition quantique	19
1.4 Le profil de raie	30
2 Formalisme de l'intégrale de chemins	37
2.1 Introduction	37
2.2 Propriétés de l'amplitude	39
2.2.1 Cas de deux événements	39
2.2.2 Extension à plusieurs événements	40
2.3 Exemple de la particule libre	41
2.4 L'approche perturbative dans le formalisme de l'intégrale de chemins . .	43
2.5 Le lien avec l'opérateur d'évolution	45
2.6 Développement de l'amplitude dans la basse non perturbée	47

3	Application du formalisme de l'intégrale de chemin au problème d'élargissement	50
3.0.1	La fonction de corrélation du moment dipolaire	50
3.1	Formule de profil de raie de la série de Lyman sans structure fine	53
4	Calcul de distribution des micro-champs ioniques dans le cas relativiste	63
4.1	La transformation de Lorentz :	63
4.2	Les quadrivecteurs :	64
4.3	Electrodynamique relativiste :	65
4.3.1	Rappel des lois de l'electromagnetisme :	66
4.3.2	Invariance des lois de l'electromagnetisme :	68
4.3.3	Le tenseur champ electromagnetique :	72
4.3.4	Transformation des champs :	74
4.4	Propriétés dynamique des micro-champs ioniques	76
4.5	Propriétés statique	76
	Conclusion générale	81
I	Appendice A : L'espace de Liouville	83

Introduction générale

La spectroscopie est une technique de diagnostic la plus puissante utilisée couramment par les physiciens des plasmas de nos jours. Le principal but de la spectroscopie des plasmas est l'étude du rayonnement émis par un milieu partiellement ou totalement ionisé. Les raies spectrales émises par les émetteurs dans un plasma ayant une certaine largeur et une forme qui renseignent sur les conditions physiques des atomes émetteurs, leur mesure et leur modélisation. La spectroscopie joue un rôle important dans la compréhension des phénomènes physiques car ils permettent de connaître les variables thermodynamiques intensives (pression, densité, température, etc.).

La spectroscopie a aussi permis, en observant très attentivement le rayonnement émis par le plus simple des atomes, l'hydrogène, de comprendre autant qu'il est possible les phénomènes dont il est le siège, et que seule la mécanique quantique a pu décrire convenablement.

Les spectres expérimentaux montrent une largeur réelle beaucoup plus importante. Parmi les causes de ces élargissements, on trouve en premier lieu l'effet Doppler : le mouvement désordonné des atomes dans leur milieu provoque des variations de fréquence en relation directe avec leurs vitesses. La mesure de cet élargissement permet d'ailleurs une très bonne estimation de la température du milieu. Il existe d'autres sources d'élargissement des raies spectrales que l'effet Doppler, ce qui est très utile dans le cadre de la spectroscopie des plasmas. Aussi l'élargissement dû à l'appareil de mesure peut aussi affecter les raies spectrales.

Dans de nombreux plasmas, la principale autre cause d'élargissement est la présence

du champ électrique engendré par les perturbateurs, ions et électrons, qui entraîne un couplage entre niveaux d'énergie qu'on appelle effet Stark. D'autre part, il règne dans certains plasmas un champ magnétique très intense, comme en particulier dans les machines expérimentales destinées à la fusion thermonucléaire contrôlée. Le programme ITER en particulier prévoit la construction d'un réacteur dans lequel l'intensité du champ magnétique atteindra une dizaine de teslas. Or quelque soit son intensité, un champ magnétique perturbe lui aussi l'atome, c'est l'effet Zeeman. Dans un dispositif tel qu'ITER cependant, le diagnostic est tout à fait essentiel pour en permettre le contrôle, ce que permet la spectroscopie des profils de raie des plasmas.

Les étoiles étant constituées principalement d'atomes d'hydrogène, l'étude de leurs profils de raies revêt un intérêt évident pour déduire de leur observation les caractéristiques physiques de ces objets stellaires. Ainsi, bien plus loin de nous que les plasmas de laboratoire, les mesures des profils de raies spectroscopiques conduisent constamment à de nouvelles découvertes. Par exemple, récemment un nouveau type de naine blanche a été détecté, dont l'atmosphère contient des traces de carbone et d'oxygène, et dont les spectres vont nécessiter une analyse spécifique.

Les modélisations théoriques des raies spectrales procurent des prédictions très satisfaisantes des formes de celles-ci. Ceci a permis dans de nombreux cas la réalisation précise du diagnostic en densité et en température du plasma. Toutefois, il reste quelques désaccords entre les différents modèles, d'une part, et entre les observations et les prédictions des modèles, d'autre part. Ceux-ci concernent par exemple les effets de dynamique des particules, en particulier quand plusieurs d'entre elles agissent simultanément sur l'émetteur. Peut-on expliquer ces différences par des insuffisances qui seraient intrinsèques aux formalismes employés ? Doit-on choisir un formalisme prenant en compte la totalité de la réalité quantique comme le propose la démarche de Feynman par intégrale de chemin ? Comment pouvons nous calculer un profil de raie dans un plasma chaud où les perturbateurs ioniques se déplacent avec une vitesse relativiste près d'un atome émetteur.

Dans ce mémoire nous étudierons donc le calcul des profils de raies dans un plasma

chaud en utilisant le formalisme de l'intégrale de chemins. Après un chapitre introductif sur les différents fondements de l'état plasma et un bref rappel sur la théorie quantique des profils de raies, nous avons consacré le second chapitre à la présentation du formalisme de l'intégrale de chemins. Dans le troisième chapitre, nous avons appliqué cette méthode au calcul de la raie Lyman alpha. Afin de trouver une distribution des micro-champs ioniques adéquate, nous avons procédé la méthode standard à sa dérivation en dernier chapitre.

Chapitre 1

Généralités sur les plasmas et profils des raies

Dans ce chapitre introductif, nous allons introduire les paramètres et les propriétés des plasmas, et décrire les différents processus qui interviennent dans le phénomène d'élargissement des raies émises par un atome ou un ion.

1.1 Généralités sur les plasmas

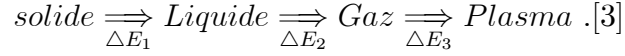
1.1.1 Définition d'un Plasma

Historiquement le terme "plasmas" a été utilisé en physique pour la première fois par les physiciens Langmuir, et Tonk en 1928 pour désigner le gaz ionisé contenu dans un tube à décharge [1].

Un plasma (grec $\pi\lambda\sigma\mu\alpha$) est un gaz ionisé, composé d'électrons libres, des ions et des atomes ou des molécules. Il se caractérise par son comportement collectif [2].

Le plasma est nommé comme " quatrième état de la matière", cette appellation vient du fait qu'au fur et mesure que la température d'un corps augmente, il change d'état.

il passe successivement de l'état solide à l'état liquide est gazeux. on a alors l'état de plasma [1].



Le plasma est donc un corps qui a été soumis à une quantité d'énergie suffisante pour dissocier les électrons de leurs atomes (phénomène d'ionisation). Comme ces particules sont chargées, le plasma se comporte d'une manière différentes qu'un gaz neutre en présence de champs électriques et /ou magnétiques [4].

Plasma froid et plasma chaud

Le plasma froid est le plasma dont la température est inférieure à quelques eV . Dans ce plasma, la densité de particules neutres est en général très supérieure à

la densité des particules chargées (ions et électrons). L'interaction entre les deux espèces précédentes médiatisée par des forces à beaucoup plus courte portée que

l'interaction coulombienne (forces de Van der Waals) c'est pour ça le plasma froid est appelé plasma collisionnel.

Lorsque la température d'un plasma est supérieure à plusieurs dizaines d' eV , on dit que ce plasma est chaud. Dans ce cas il n'y a quasiment plus de particules

neutres, et les particules chargées interagissent via l'interaction électrostatique coulombienne, et on dit que ce plasma est un milieu non collisionnel [3].

Les paramètres du plasma

Les plasmas sont caractérisés principalement par les paramètres suivants : Le degré d'ionisation, les températures (électronique et ionique), le libre parcours moyen, la longueur de Debye et les densités des particules chargées.

La densité La densité n est définie comme le nombre de particules par unité de volume, et ce pour chaque espèce (électrons, ions, neutres). La neutralité du plasma implique

$$n_e = n_i \text{ en supposant que la densité d'ions négatifs est quasiment nulle [5].}$$

Le température du plasma La température du plasma est définie comme la moyenne des énergies de translations des particules dans la décharge. Etant donné la différence de masses qui existe entre les électrons et les espèces lourdes, ces deux populations sont souvent considérées comme étant deux systèmes chacun dans leur propre équilibre thermodynamique. C'est pourquoi, lorsqu'on parle de plasma, on entend souvent parler de plusieurs températures (électronique, ionique, gaz) qui peuvent être toutes différentes. La température électronique est souvent considérée la plus importante pour déterminer et démontrer les phénomènes dans le plasma puisqu'ils sont les agents les plus actifs pour l'ionisation du gaz et la création de radicaux [6]. On définit cependant trois températures importantes $T_e \gg T_i > T_n$, où T_e est la température électronique, T_i la température ionique et T_n la température des neutres, proche de la température ambiante [7].

Fréquence plasma La fréquence plasma est la fréquence associée à un mouvement d'oscillation du à la force de coulomb, qui repousse les électrons quand ces électrons se déplacent

d'une petite distance (par rapport à la longueur de Debye λ_D). Elle est donnée par la formule [8] :

$$\omega_{pe} = \left(\frac{n_e q_e}{m_e \varepsilon_0} \right)^{1/2} \quad (1.1)$$

Pour les ions, la fréquence écrite comme suit :

$$\omega_{pi} = \left(\frac{n_i q_i}{m_i \varepsilon_0} \right)^{1/2} \quad (1.2)$$

où ω_{pe} , ω_{pi} est exprimée en système SI, n_e, n_i est la densité électronique et ionique du plasma non perturbé (initial) en (cm^{-3}), q_e, q_i est la charge d'électron et d'ion (en C),

m_e, m_i est la masse d'électron et d'ion (en kg) et ε_0 est la constante diélectrique.

Degré d'ionisation

Il est défini par la quantité α :

$$\alpha \equiv \frac{n_e}{n_e + n_n} = \frac{Z n_i}{Z n_i + n_n} \quad (1.3)$$

où n_e est la densité électronique (nombre de particules par unité de volume), n_i est la densité ionique et n_n est la densité des neutres.

- Le plasma est dit faiblement ionisé si $\alpha < 1$, tels que les plasmas industriels et l'ionosphère.
- Les plasmas fortement ionisés, $\alpha \approx 1$ tels que les plasmas thermonucléaires [9].

Loi de Saha La loi de Saha permet de déterminer le degré d'ionisation d'un milieu en équilibre thermodynamique. Elle permet entre autre de connaître le rapport des populations en fonction de la température du milieu.

Soit N_0 et N_1 les populations des niveaux fondamentaux de l'atome considéré et son ion lorsqu'il perd un électron. n_e représente la densité électronique du milieu. g_0, g_1 , et g_e sont, respectivement, les poids statistiques. La loi de Saha s'écrit :

$$\frac{N_1 n_e}{N_0} = \frac{g_1 g_e}{g_0} \frac{(2\pi m_e K T)^{3/2}}{h^3} e^{-\frac{x_i}{K T}} \quad (1.4)$$

x_i est le potentiel d'ionisation[10].

Longueur de Debye Considérons une charge ponctuelle q_i dans un plasma, dans le voisinage de cette particule le potentiel de debye est représenté par :

$$\varphi(r) = \frac{q_i}{4\pi\varepsilon_0 r} e^{-\frac{\lambda}{r}} \quad (1.5)$$

avec :

$$\lambda_D = \left(\frac{\varepsilon_0 K_B T}{q_e^2 n_e} \right)^{1/2} \quad (1.6)$$

où λ_D est la distance moyenne à partir de la quelle les particules du milieu font l'action d'un écran sur l'ion ; elle est appelée la longueur de Debye.

D'où k_B est la constant de Boltzmann. T est la température du plasma et q_e est la charge d'électron [8].

λ_D représente aussi la distance maximale pour que les interactions coulombiennes individuelles entre particules interviennent. La longueur de debye s'écrit aussi sous la fourme :

$$\lambda_D = 6.9 \left(\frac{T}{n_e} \right)^{1/2} \quad (1.7)$$

Longueur de landau La longueur de landau représente la longueur critique d'interaction binaire, c'est la distance à la quelle il faut que deux électrons s'approchent pour que l'énergie binaire soit de même ordre de grandeur que leurs énergies cinétiques [11].

$$r_0 = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 k_B T_e} \quad (1.8)$$

on peut écrire r_0 en (cm) sous la forme :

$$r_0 = (1.672 \cdot 10^{-3}) \frac{1}{T_e} \quad (1.9)$$

T_e : est la température électronique.

Sphère de Debye Le nombre des électrons situés dans une sphère de rayon égale à la longueur de Debye est appelé le nombre de Debye N_D :

$$N_D = n_e \frac{4\pi}{3} \lambda_D^3 \quad (1.10)$$

- Si $N_D \ll 1$, la sphère de Debye est faiblement peuplée, ce qui correspond à un plasma fortement couplé (régime de particules indépendantes).
- Si $N_D \gg 1$, la sphère de Debye est très peuplée, ce qui correspond à un plasma faiblement couplé (régime du comportement collectif)[3].

Rayon de la sphère ionique (Rayon de Wigner-Seitz) En appelant r_i le rayon de la sphère moyenne occupé par un ion en mouvement dans l'espace. Ce rayon est donné par la formule [12].

$$r_i = \left(\frac{3}{4\pi n_i} \right)^{1/3} (CGS) \quad (1.11)$$

n_i est la densité ionique du plasma (en cm^{-3}).

Rayon de la sphère électronique De même on définit la distance moyenne entre deux électrons :

$$r_e = \left(\frac{3}{4\pi n_e} \right)^{1/3} (CGS) \quad (1.12)$$

n_e est la densité électronique du plasma (en cm^{-3}).

Paramètre de couplage On peut introduire le paramètre plasma :

$$\Gamma = \frac{(Z_e)^2}{K_B T r_i} \quad (1.13)$$

où Z_e représente la charge de l'ion et T est la température du milieu et r_i le rayon de la sphère ionique.

- La condition $\Gamma \ll 1$ cela signifie que l'énergie d'interaction entre particules est faible devant l'énergie thermique, ces plasmas sont appelés plasmas faiblement couplés [13].
- Dans le cas $\Gamma \geq 1$ le Plasma est fortement couplé, c'est le cas où la sphère de Debye est peu peuplée.

Libre parcours moyen Le libre parcours moyen (λ) est la distance qu'une particule (électron, ion, neutre, etc.) traverse entre deux collisions, Il peut généralement être décrit par l'équation suivante [14] :

$$\lambda = \frac{1}{\prod (r_1 + r_2)^2 \times N} \quad (1.14)$$

où r_1, r_2 sont les rayons des particules en collisions; N est la densité du nombre de la particule (nombres de particules par unité de volume). C'est pourquoi les plasmas on a donc un libre parcours moyen plus grand. Cela permet aux particules d'avoir plus de temps pour être accéléré par le champ électrique entre les collisions et ainsi fournir un plus grand transfert d'énergie lors de la collision.

Ceci facilite l'ionisation et l'obtention d'un état plasma stable.

1.2 Les propriétés du plasma

Neutralité La première des caractéristiques d'un plasma est d'être quasiment neutre. Cette quasi neutralité est réalisée lorsque la densité des particules chargées est suffisante. Dans ce cas, les particules se répartissent de façon à neutraliser localement le milieu. Si une particule s'éloigne de sa position, les particules environnantes exercent sur elle une force de rappel. Ceci donne naissance à la notion d'oscillation plasma.

Conductivité électrique des plasmas Si un champ électrique $\vec{E}$ est appliqué au plasma, les particules chargées sont accélérées et transfèrent de l'énergie acquise par collisions aux autres particules du plasma [2]. La résistance électrique spécifique η d'un plasma est donnée par :

$$\eta = \frac{m_e^{1/2} Z e^2 \ln \Lambda}{3 (2\pi)^{3/2} \varepsilon_0^2 (K_B T_e)^{3/2}} \quad (1.15)$$

où Λ représente le longueur d'onde thermique de Broglie est égal à :

$$\Lambda = \frac{h^2}{(2\pi m K_B T)}$$

Coefficients caractéristiques dans les plasmas Les champs électrique et magnétique, qu'ils soient statiques, uniformes ou variables dans le temps et dans l'espace, agissent sur le mouvement des particules présentes dans le plasma et modifient les densités de courant et de charge. Nous nous intéressons à l'effet d'un champ électrique constant.

Mobilités Sous l'effet du champ électrique, les charges sont accélérées suivant la deuxième loi de Newton, sur le mouvement des particules, donnée ci dessous :

$$m_e = \frac{d\vec{u}_e}{dt} = -e\vec{E} \quad (1.16)$$

$$m_i = \frac{d\vec{u}_i}{dt} = +e\vec{E} \quad (1.17)$$

Avec $\vec{u}_e$ et $\vec{u}_i$ les vitesses des électrons et ions.

L'intégration de l'équation (1.16), dans le cas de l'électron par exemple, donne l'expression de sa vitesse :

$$\vec{u}_e = \frac{(-e\vec{E})}{m_e} \tau_e$$

Avec τ_e le temps moyen entre deux collisions, soit :

$$\tau_e = \frac{l_e}{v_e} \quad (1.18)$$

l_e : libre parcours moyen (puisque la vitesse d'agitation thermique électronique est plus élevée par rapport a la vitesse de dérive électronique ($\vec{v}_e \gg \vec{u}_e$)

$\vec{v}_e$: vitesse d'agitation thermique.

Ce qui permet d'écrire :

$$\vec{u}_e = \frac{-el_e}{m_e v_e} \vec{E} = u_e \vec{E} \quad (1.19)$$

Avec :

$$u_e = \frac{el_e}{m_e v_e} \quad (1.20)$$

Dans le cas des ions les relations (1.19) et (1.20) s'écrivent :

$$\vec{u}_i = \frac{-el_i}{m_i v_i} \vec{E} = u_i \vec{E} \quad (1.21)$$

Avec :

$$u_i = \frac{el_i}{m_i v_i} \quad (1.22)$$

u_e et u_i sont respectivement les mobilités des électrons et des ions.

Coefficient de diffusion La diffusion des particules est décrite par la loi de Fick :

$$\vec{j}_K = -D_K \overrightarrow{\text{grad}}(n_K) \quad (1.23)$$

où $\vec{j}_K$ est le flux des particules de type k en $[m^{-2}s^{-1}]$, et D_k est le coefficient de diffusion des particules de type k .

Ainsi, le déplacement des particules par diffusion crée un flux de charge qui s'exprime, dans le cas des électrons par :

$$\vec{j}_e = -D_e \overrightarrow{\text{grad}}(n_e) \quad (1.24)$$

Et dans le cas des ions par :

$$\vec{j}_i = -D_i \overrightarrow{\text{grad}}(n_i) \quad (1.25)$$

Si l'on considère simplement la théorie cinétique des gaz et que l'on suppose que les températures électronique et celle des espèces lourdes sont identiques :

$$T_K = T_e \implies D = \frac{l_K v_K}{3} \quad (1.26)$$

On déduit donc :

$$\frac{D_e}{D_i} = \frac{l_e v_e}{l_i v_i} = \frac{l_e}{l_i} \left(\frac{m_i}{m_e} \right)^{1/2} = \frac{u_e}{u_i} \quad (1.27)$$

1.3 La théorie quantique du rayonnement

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 10² *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[11] :

$$E = \hbar \omega \quad (1.28)$$

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

L'impulsion du photon est définie par :

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} = \hbar \frac{\omega}{c} \vec{n} \quad (1.29)$$

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 $\vec{\epsilon}$.

1.3.1 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 :

$$\psi_\alpha(\vec{r}, t) = \phi_\alpha(\vec{r}) \exp(-iE_\alpha t / \hbar) \quad (1.30)$$

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 $\varphi_\alpha(\vec{r}, t)$.

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 :

$$\varphi_\alpha(\vec{r}, t) = \sum_k a_{\alpha k}(t) \psi_k(\vec{r}, t) \quad (1.31)$$

$|a_{\alpha k}|^2$ 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 :

$$w_{\alpha\beta} = |a_{\alpha k}(\tau)|^2 \quad (1.32)$$

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

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

$$i\hbar \sum_k \frac{da_{\alpha k}}{dt} \psi_k = \sum_k a_{\alpha k} H' \psi_k \quad (1.33)$$

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[11] :

$$\frac{da_{\alpha k}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \sum_k a_{\alpha k} \langle \beta | \psi_k | \alpha \rangle \exp(i\omega_{\beta k} t) \quad (1.34)$$

où :

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

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 :

$$\varphi_n = \psi_n + v \quad (1.35)$$

où v 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 (1.31) sous la forme :

$$a_{nk} = \delta_{nk} + \left[a_{nk}^{(1)}(t) + a_{nk}^{(2)}(t) + \dots \right] \quad (1.36)$$

où on peut écrire que :

$$v = \sum_k \left[a_{nk}^{(1)}(t) + a_{nk}^{(2)}(t) + \dots \right] \psi_k(x; t) \quad (1.37)$$

Selon la relation (1.36), la quantité v 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 (1.34) et (1.36), on obtient en conservant seulement les termes du premier ordre :

$$\frac{da_{\alpha\beta}^{(1)}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \langle \beta | H' | \alpha \rangle \exp(i\omega_{\alpha\beta}t) \quad (1.38)$$

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 :

$$\frac{da_{\alpha\beta}^{(2)}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \sum_k a_{\alpha k}^{(1)} \langle \beta | H' | k \rangle \exp(i\omega_{\beta k}t) \quad (1.39)$$

Donc au premier ordre de la méthode des perturbations, en partant de (1.38), on trouve pour la probabilité de transition

$$w_{\alpha\beta}^{(1)} = \left| a_{\alpha\beta}^{(1)}(\tau) \right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^\tau \langle \beta | H'(t) | \alpha \rangle \exp(i\omega_{\alpha\beta}t) dt \right|^2 \quad (1.40)$$

et au deuxième ordre :

$$w_{\alpha\beta}^{(2)} = \left| a_{\alpha\beta}^{(2)}(\tau) \right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \sum_k \int_0^\tau a_{\alpha k}^{(1)} \langle \beta | H'(t) | k \rangle \exp(i\omega_{\beta k}t) dt \right|^2 \quad (1.41)$$

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 $t = \tau$:

$$H' = \begin{cases} 0 & \text{pour } t < 0, \text{ et } t > \tau \\ h(e^{-i\omega t} + e^{i\omega t}) & \text{pour } 0 < t < \tau \end{cases} \quad (1.42)$$

où l'opérateur h est indépendant du temps.

Au premier ordre de la méthode des perturbations, en introduisant (1.41) dans (1.42), on obtient :

$$w_{\alpha\beta}^{(1)} = \left| a_{\alpha\beta}^{(1)}(\tau) \right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |\langle \alpha | h | \beta \rangle|^2 \times \left| \frac{\exp(i(\omega_{\alpha\beta} - \omega)\tau) - 1}{\omega_{\alpha\beta} - \omega} + \frac{\exp(i(\omega_{\alpha\beta} + \omega)\tau) - 1}{\omega_{\alpha\beta} + \omega} \right|^2 \quad (1.43)$$

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 (1.43) est réduite au premier terme de la somme

à droite :

$$w_{\alpha\beta}^{(1)} = \left| a_{\alpha\beta}^{(1)}(\tau) \right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |\langle \alpha | h | \beta \rangle|^2 \times \left| \frac{\exp(i(\omega_{\alpha\beta} - \omega)\tau) - 1}{\omega_{\alpha\beta} - \omega} \right|^2 = \frac{\pi\tau}{\hbar^2} |\langle \alpha | h | \beta \rangle|^2 f(\sigma, \tau) \quad (1.44)$$

dans laquelle :

$$f(\sigma, \tau) = \sin^2(\sigma\tau)/\pi\sigma^2\tau \quad (1.45)$$

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 microsystème qui se trouvait primitivement au niveau E_α peut se trouver avec une probabilité significative dans l'un des états d'énergie :

$$E_\beta = E_\alpha + \hbar\omega + dE_\beta \approx E_\alpha + \hbar\omega + \hbar/\tau \quad (1.46)$$

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

$$\sin^2(\sigma\tau)/\pi\sigma^2\tau \rightarrow \delta(\sigma) \quad (1.47)$$

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 $10^{-15}s$. Dans ces cas, nous obtenons pour la probabilité de transition vers l'état d'énergie E_α l'expression suivante :

$$w_{\alpha\beta}^{(1)} = \frac{\pi\tau}{\hbar^2} |\langle\alpha|h|\beta\rangle|^2 \delta(\sigma) = \frac{\pi\tau}{\hbar^2} |\langle\alpha|h|\beta\rangle|^2 \delta(E_\alpha - E_\beta - \hbar\omega) \quad (1.48)$$

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

$$w_{\alpha\beta} = \frac{dW_{\alpha\beta}(\tau)}{d\tau} \quad (1.49)$$

On trouve alors que ce terme s'écrit [11] :

$$w_{\alpha\beta}^{(1)} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle\alpha|h|\beta\rangle|^2 \delta(E_\alpha - E_\beta - \hbar\omega) \quad (1.50)$$

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 :

$$H_e = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - q_e \vec{A} \right)^2 + q_e \phi_s \quad (1.51)$$

$\vec{A}(\vec{r}, t)$ 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

$$H_{int} = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - q_e \vec{A} \right)^2 + V \quad (1.52)$$

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 :

$$H_{int} = H_0 + H' \quad (1.53)$$

où H' est le hamiltonien d'interaction jouant le rôle de perturbation, et H_0 le hamiltonien de l'atome isolé. En utilisant les relations (1.51), (1.52) et (1.53), on trouve

$$H' = -\frac{q_e}{2mc} \left(\vec{P} \vec{A} + \vec{A} \vec{P} \right) + \frac{q_e^2}{2mc^2} A^2 \quad (1.54)$$

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

$$H' = -\frac{q_e}{2mc} \left(\vec{P} \vec{A} \right) + \frac{q_e^2}{2mc^2} A^2 \quad (1.55)$$

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 $H' = -\frac{q_e}{2mc} \left(\vec{P} \vec{A} \right)$ avec :

$$\vec{A} = \vec{A}(\vec{r}) \exp(i\omega t) + \vec{A}^+(\vec{r}) \exp(-i\omega t) \quad (1.56)$$

On voit qu'on peut utiliser les résultats donnés par l'équation (1.50).

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

$$w_{\alpha\beta}^{(1)} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \alpha \left| \frac{-q_e}{mc} \vec{P} \vec{A}(\vec{r}) \right| \beta \rangle \right|^2 \delta(E_\alpha - E_\beta - \hbar\omega) \quad (1.57)$$

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

$$\vec{A}(\vec{r}) = (2\pi c^2 \hbar)^{1/2} \frac{\vec{\epsilon}}{(\Lambda\omega)^{1/2}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (1.58)$$

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 $A(\vec{r})$ on trouve :

$$w_{\alpha\beta}^{(1)} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \alpha | \frac{-q_e}{mc} \left(\frac{2\pi c^2 \hbar}{\Lambda \omega} \right)^{1/2} \vec{\varepsilon} \cdot \vec{P} \exp(i \vec{k} \cdot \vec{r}) | \beta \rangle \right|^2 \delta(E_\alpha - E_\beta - \hbar\omega) \quad (1.59)$$

Introduisons la fonction $\phi(E)$ qui représente la densité des états finaux. La quantité $\phi(E)dE$ exprime le nombre d'états du microsystème dont l'énergie se situe dans l'intervalle E 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 :

$$dw_{\alpha\beta}^{(1)} = w_{\alpha\beta}^{(1)} \phi(E_\alpha) dE_\alpha \quad (1.60)$$

En introduisant (1.59) dans (1.60), on obtient :

$$dw_{\alpha\beta}^{(1)} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \alpha | \frac{-q_e}{mc} \left(\frac{2\pi c^2 \hbar}{\Lambda \omega} \right)^{1/2} \vec{\varepsilon} \cdot \vec{P} \exp(i \vec{k} \cdot \vec{r}) | \beta \rangle \right|^2 \delta(E_\alpha - E_\beta - \hbar\omega) \phi(E_\alpha) dE_\alpha \quad (1.61)$$

La relation (1.46) peut être appliquée ici mais à condition que la densité n'est 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 $d\phi = \phi(E_\alpha) dE_\alpha$, on peut écrire :

$$d\phi = \frac{\Lambda \omega^2}{\pi^2 c^3 \hbar} \frac{d\Omega}{8\pi} \quad (1.62)$$

En portant (1.62) dans (1.61) on trouve pour la probabilité d'absorption à un seul photon l'expression suivante :

$$dw_{\alpha\beta}^{(1)} = \frac{q_e^2 \omega}{2\pi c^3 m^2 \hbar} \sum_{i=1}^2 \left| \langle \alpha | \vec{\varepsilon}_i \cdot \vec{P} \exp \left(i \vec{k} \cdot \vec{r} \right) | \beta \rangle \right|^2 \delta(E_\alpha - E_\beta - \hbar\omega) d\Omega \quad (1.63)$$

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 $\vec{\varepsilon}$. La somme correspond aux deux possibilités indépendantes de polarisation transversale du photon[11].

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 :

$$d^2N = N_{\vec{k}\vec{\varepsilon}} \frac{\omega^2}{(2\pi c)^3} d\omega d\Omega \quad (1.64)$$

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 :

$$I_{\vec{k}\vec{\varepsilon}}(\omega)d\omega d\Omega = c\hbar\omega N_{\vec{k}\vec{\varepsilon}} \frac{\omega^2}{(2\pi c)^3} d\omega d\Omega \quad (1.65)$$

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

$$I_{\vec{k}\vec{\varepsilon}}(\omega) = \frac{N_{\vec{k}\vec{\varepsilon}} \hbar\omega^3}{(2\pi)^3 c^2} \quad (1.66)$$

Soit $d\omega^{spontanée}$, 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 [12] :

$$d\omega^{spontanée} = d\omega^{absorption} = d\omega^{spontanée} \frac{8\pi^3 c^2}{\hbar \omega^3} I_{\vec{k} \vec{\varepsilon}} \quad (1.67)$$

Transition dipolaire électrique et les transitions radiatives

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 :

$$\lambda \gg a \quad (1.68)$$

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 :

$$\exp(\pm i \vec{k} \cdot \vec{r}) \approx 1 \quad (1.69)$$

Dans ce cas on peut montrer que :

$$\left(\vec{P}_{\alpha\beta}(t) \right) = -i \frac{m\omega}{q_e} \left(\vec{d}_{\alpha\beta} \right) \quad (1.70)$$

Utilisons la formule de la fonction d'onde dépendante du temps donnée dans l'expression (1.30) :

$$\int \psi_{\beta}^*(\vec{r}, t) \vec{r} \psi_{\alpha}(\vec{r}, t) dV = \exp[i(E_{\alpha} - E_{\beta})t/\hbar] \int \psi_{\beta}^*(\vec{r}) \vec{r} \psi_{\alpha}(\vec{r}) dV \quad (1.71)$$

ou encore :

$$\vec{r}_{\alpha\beta}(t) = \int \psi_{\beta}^*(\vec{r}, t) \vec{r} \psi_{\alpha}(\vec{r}, t) dV = \exp(i\omega t) (\vec{r}_{\alpha\beta}) \quad (1.72)$$

On trouve par analogie :

$$(\vec{P}_{\alpha\beta}(t)) = \exp(i\omega t) (\vec{P}_{\alpha\beta}) \quad (1.73)$$

En utilisant la relation entre $\vec{r}$ et $\vec{p}$ on trouve :

$$\frac{d\vec{r}_{\alpha\beta}}{dt} = -i\omega \vec{r}_{\alpha\beta} \quad (1.74)$$

ou encore :

$$\frac{d\vec{r}_{\alpha\beta}}{dt} = -\frac{i\omega}{q_e} \vec{d}_{\alpha\beta} \quad (1.75)$$

où $\vec{d}$ est le module du moment dipolaire électrique de l'électron.

En introduisant (1.72) et (1.74) dans cette dernière égalité, on trouve :

$$i\omega \exp(i\omega t) (\vec{r}_{\alpha\beta}) = \exp(i\omega t) (\vec{P}_{\alpha\beta}) / m \quad (1.76)$$

Le résultat (1.70) découle immédiatement de cette dernière expression si l'on tient compte du fait que :

$$\vec{d} = -q_e \vec{r} \text{ et } \vec{d}_{\alpha\beta} = -q_e \vec{r}_{\alpha\beta} \quad (1.77)$$

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 :

$$dw_{\alpha\beta}^{(1)} = \frac{\omega^3}{2\pi\hbar c^3} \sum_{i=1}^2 \left| \langle \alpha | \vec{\varepsilon}_i \cdot \vec{d} | \beta \rangle \right|^2 \delta(\omega - \omega_{\alpha\beta}) d\Omega \quad (1.78)$$

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. Les règles de sélection dans l'approximation dipolaire électrique sont [11] :

$$\begin{aligned}\Delta n &= n - n' \quad \text{quelconque} \\ \Delta l &= 0, \pm 1 \\ \Delta j &= 0, \pm 1 \\ \Delta j &= 0, \pm 1 \quad 0 \rightarrow 0 \text{ interdite} \\ \Delta m_j &= 0, \pm 1 \quad 0 \rightarrow 0 \text{ interdite}\end{aligned}$$

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[13] :

$$P(\omega) = \frac{\omega^4}{2\pi c^3} \sum_{\alpha, \beta} \sum_{i=1}^2 \rho_\alpha \delta(\omega - \omega_{\alpha\beta}) \left| \langle \beta | \vec{\varepsilon}_i \cdot \vec{d} | \alpha \rangle \right|^2 \quad (1.79)$$

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.

si on écrit :

$$P(\omega) = \frac{\omega^4}{2\pi c^3} I(\omega) \quad (1.80)$$

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 $C(t)$:

$$C(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-i\omega t) I(\omega) d\omega \quad (1.81)$$

$$= \sum_{\alpha, \beta} \sum_{i=1}^2 \rho_{\alpha} \exp(-i\omega_{\alpha\beta} t) \left| \langle \beta | \vec{\varepsilon}_i \cdot \vec{d} | \alpha \rangle \right|^2 \quad (1.82)$$

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 $C(t)$:

$$I(\omega) = \pi^{-1} R \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(+i\omega t) C(t) dt \quad (1.83)$$

où R 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 :

$$C(t) = \sum_{\alpha, \beta} \sum_{i=1}^2 \rho_{\alpha} e^{-i\omega_{\alpha\beta} t} \left| \langle \beta | \vec{\varepsilon}_i \cdot \vec{d} | \alpha \rangle \right|^2 \quad (1.84)$$

$$= \sum_{\alpha, \beta} \sum_{i=1}^2 \rho_{\alpha} e^{-iE_{\alpha} t/\hbar} e^{+iE_{\beta} t/\hbar} \langle \beta | \vec{\varepsilon}_i \cdot \vec{d} | \alpha \rangle \langle \alpha | \vec{\varepsilon}_i \cdot \vec{d} | \beta \rangle \quad (1.85)$$

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

$$T(t) = e^{-iHt/\hbar} \quad (1.86)$$

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.

$$C(t) = \sum_{i=1}^2 Tr \left\{ \vec{\varepsilon}_i \cdot \vec{d} T^*(t) \vec{\varepsilon}_i \cdot \vec{d} T(t) \rho \right\} \quad (1.87)$$

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

En passant à la notation de Heisenberg :

$$\vec{d}(t) = T^*(t) \vec{d} T(t) \quad (1.88)$$

il vient :

$$C_{dd}(t) = \sum_{i=1}^2 Tr_E \left\{ \vec{\varepsilon}_i \cdot \vec{d}(0) \vec{\varepsilon}_i \cdot \vec{d}(0) \rho \right\} \quad (1.89)$$

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 $k_B T$. Dans la suite on va considérer des raies spectrales associées à une énergie de transition beaucoup plus petit que $k_B T$, et l'hypothèse du chaos initial va nous permettre de factoriser la matrice densité de notre système en un produit de deux matrices densités :

$$\rho = \rho_E \rho_B \quad (1.90)$$

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 (1.87) successivement sur chaque sous-système :

$$C(t) = \sum_{i=1}^2 Tr_E \left\{ \vec{\varepsilon}_i \cdot \vec{d} T_E^*(t) \vec{\varepsilon}_i \cdot \vec{d} T_E(t) \rho_E \right\} \quad (1.91)$$

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 :

$$C'(t) = \sum_{i=1}^2 Tr_E \left\{ \left\{ \vec{\varepsilon}_i \cdot \vec{d} T_E^*(t) \vec{\varepsilon}_i \cdot \vec{d} T_E(t) \right\}_{moy} \rho_E \right\} \quad (1.92)$$

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

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 Naturel D'un point de vue classique, on peut considérer l'atome émetteur comme un oscillateur ayant une durée d'émission limitée. Le spectre de Fourier d'une onde de fréquence ν ayant une durée de vie finie $\Delta\tau$ présente une largeur $\Delta\nu$ définie par l'équation :

$$\Delta\tau \Delta\nu \approx 1 \quad (1.93)$$

L'élargissement de la raie émise est inversement proportionnel à la durée de vie du niveau de l'émetteur : il suit un profil lorentzien. Cette largeur dite "naturelle" est très faible. Elle sera donc toujours négligeable vis à vis des élargissements mesurés expérimentalement .

Effet Doppler (profil gaussien) 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 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).

Bibliographie

- [1] B.Held ; "physique des plasmas froids " ; Ed. Masson ; VBN ; 1994.
- [2] A. Dinklage T. Klinger G.Marx L. Schweikhard ; "Plasma Physics" ; Springer ; Berlin Heidelberg 2005.
- [3] C.perck-winel ; "introduction à la spectroscopie des plasma" ; Gordon et Breach. Science publishers ; INC.NewYork ; 1967.
- [4] P. Fauchais ; "Un derstanding plasma spraying" ; Journal of Physics D (Applied Physics) ; 37 ; 86, 2004.
- [5] N.St.J. Braithwaite ; " Introduction to gas discharges " ; Plasma Sources Sci. Tech ; vol. 9 ; pp. 517-527 ; 2000.
- [6] H .R. Griem ; " Plasma Spectroscopy " ; McGraw-Hill, New York 1964.
- [7] JEAN Marcel Rax ; "physique des plasmas" ; Paris ; 2005 .
- [8] S.Ichimarui ; "plasma physics " ; Benjamin.cummings. Publishing company.Inc ; Menlo Park. California ; 1986.
- [9] R. Fitzpatrick ; " Introduction to Plasma Physics " ; University of Texas ; 1998.
- [10] A. Lieberman, and A. Lichtenberg ; " Principles of plasma Discharge and Materials Processing", New York : John Wiley & Sons. 600 ; 1994.
- [11] L.Tarassov ; "Bases physiques de l'électroniques quantique" ; Mir ed . Mascow ; 1979.
- [12] L.Landau,E.Lifchitz ; "Electrodynamique Quantique " ; 'physique Quantique' ; Tome 4.Mir ed . Mascow ; 1989.

- [13] H. R. Griem, "Spectral line Broadening by Plasmas"; Academic Press; New York and London; 1974.
- [14] A. Calisti, R. Stamm, B. Talin; "Phys Rev". 38; 4883; 1983.

Chapitre 2

Formalisme de l'intégrale de chemins

2.1 Introduction

Dans ce chapitre nous voulons faire une tentative d'utilisation de la formulation de la mécanique quantique proposée par Feynman [1] à ce problème d'élargissement Stark des raies. Le formalisme d'intégrale de chemin est particulièrement intéressant en ce qui concerne le lien entre l'approche quantique et classique ,et semble donc bien adapté pour traiter des situations "quasi-classique" que l'on trouve dans le problème d'élargissement

On considère une particule qui à l'instant s_a est en x_a ,et qui à l'instant s_b s'est déplacé en x_b . On définit en mécanique quantique l'amplitude de probabilité $K(a, b)$ pour aller du point a au point b . l'amplitude de probabilité est formée d'une somme des contributions de chaque trajectoire qui passe par le point initial et final .Une description classique du mouvement est différente car elle fait intervenir la notion de trajectoire classique, qui peut être déterminée en utilisant un principe de moindre action l'action est définie par la quantité .

$$S(b, a) = \int_{S_a}^{S_b} L(x, \dot{x}, s) ds \quad (2.1)$$

où L est ici le lagrangien du système [1].

Dans sa formulation de la mécanique quantique , Feynman a proposé un postulat pour calculer la contribution de chaque chemin à l'amplitude totale $K(a, b)$ pour aller de a et b : on écrit $K(a, b)$ comme la somme des contributions individuelles $\Phi[X(s)]$ de chaque chemin

$$K(a, b) = \sum_{a \text{ à } b} \phi [x(s)] \quad (2.2)$$

où la contribution de chaque chemin à l'amplitude est posée égale à :

$$\phi [x(s)] = M \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S[x(s)] \right\} \quad (2.3)$$

S est l'action classique et M est une constante choisie de manière à normaliser l'amplitude totale.

Il reste à donner une définition mathématique précise de la somme des contributions dans l'équation (2.2) .On utilise dans ce but un sous ensemble de chemins obtenus en divisant l'intervalle de temps $[S_a, S_b]$ en N intervalles égaux ε .pour chaque temps s_i un point particulier x_i .

On construit un chemin en connectant tous les points voisins par un segment . il est possible de définir une somme sur tous les chemins construits de cette manière en prenant l'intégrale multiple d'ordre $N-1$, Où chaque intégrale correspond à une somme sur toutes les positions x_i possible à un instant s_i donné .On peut donc :

$$K(a, b) \propto \int \dots \int dx_1 \dots dx_{(N-1)} \Phi [x(s)] \quad (2.4)$$

On n'intègre pas sur les points extrêmes x_a et x_b qui sont fixés . Nous n'avons pas écrit l'égalité dans l'expression précédente pour deux raisons .La première est qu'il faut prendre la limite ε tend vers zéro pour avoir un sous ensemble de chemins qui soit représentatif de l'ensemble complet. La seconde est la nécessité de calculer un facteur de normalisation pour l'amplitude .Feynman a calculé ce facteur [2] qui dépend de ε et assure ainsi un sens à la limite :

$$K(a, b) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} M \int \dots M \int dx_1 \dots M dx_{(N-1)} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S(b, a) \right\} \quad (2.5)$$

où le facteur M s'écrit :

$$M = \left(\frac{2i\pi\hbar\varepsilon}{m} \right)^{-1/2} \quad (2.6)$$

2.2 Propriétés de l'amplitude

2.2.1 Cas de deux événements

Considérons un instant s_c appartenant à l'intervalle de temps $[s_a, s_b]$.

L'action le long d'un chemin quelconque entre a et b peut s'écrire comme :

$$S(a, b) = S(b, c) + S(c, a) \quad (2.7)$$

Ceci est une conséquence directe de la définition de l'action comme une intégrale sur le temps. On peut écrire l'amplitude comme :

$$K(b, a) = \int D[x(s)] \exp \left(\frac{i}{\hbar} S(b, c) + \frac{i}{\hbar} S(c, a) \right) \quad (2.8)$$

où $D[x(s)]$ est la mesure d'intégration dans l'espace fonctionnelle des trajectoires.

Il est possible de scinder chaque chemin en deux parties. La première partie a les points extrêmes x_a et x_b , la deuxième les points x_c et x_b . On peut intégrer sur tous les chemins de a à c , puis sur tous les chemins de c à b , et enfin intégrer sur toutes les valeurs possibles de x_c . Le résultat de la première étape pour laquelle $S(b, c)$ est constant s'écrit comme :

$$K(b, a) = \int_{X_c} \int_c^b \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S(b, c) \right\} K(c, a) D[x(s)] dx_c \quad (2.9)$$

On effectue ensuite l'intégrale entre un point arbitraire x_c et le point b , il ne reste

que l'intégrale sur X_c :

$$K(b, a) = \int_{X_c} K(b, c)K(c, a)dx_c \quad (2.10)$$

En examinant cette dernière équation on peut remarque la règle suivante s'applique : les amplitudes pour des événements qui se succèdent se multiplient entre elles.

2.2.2 Extension à plusieurs événements

Il est tout à fait possible de faire deux divisions sur les chemins : une à s_c et une à s_d .

L'amplitude de probabilité s'écrit alors comme :

$$K(b, a) = \int_{X_c} \int_{X_d} K(b, c)K(c, d)K(d, a)dx_c dx_d \quad (2.11)$$

On considère que la particule qui suit le chemin de a à b passe d'abord par b , puis par c pour arriver enfin à b .L'amplitude de probabilité pour que les événements prennent place dans cet ordre est égale au produit des amplitudes relatives à chaque partie du chemin .L' amplitude pour aller de a à b est obtenue en intégrant ce produit sur toutes les valeurs possibles de x_c et x_d . Si on divise l'échelle de temps en N intervalles, on peut généraliser l'équation précédente :

$$K(b, a) = \int_{x_1} \int_{x_2} \dots \int_{x_{N-1}} K(b, N-1)K(N-1, N-2) \dots K(i+1, i) \dots \quad (2.12)$$

$$K(1, a)dx_1 dx_2 \dots dx_{N-1}$$

Si on compare à l'équation (2.5), on voit qu'on a une équation différente .Dans cette autre définition , on peut écrire l'amplitude pour une particule qui se déplace entre deux points séparés par un temps infinitésimal ε de la manière suivante :

$$K(i+1, i) = M \exp \frac{i\varepsilon}{\hbar} L \left(\frac{x_{(i+1)} - x_i}{\varepsilon}, \frac{x_{(i+1)} + x_i}{2}, \frac{s_{(i+1)} - s_i}{2} \right) \quad (2.13)$$

Expression qui est valable au premier ordre en ε . En utilisant la règle de multiplication des amplitudes pour des événements qui se succèdent on obtient multiplication des amplitudes pour des événements qui se succèdent on obtient

$$\Phi [x(s)] = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \prod_{i=0}^{N-1} K(i+1, i) \quad (2.14)$$

Pour l'amplitude d'un chemin complet. A partir de cette expression on peut montrer qu'on retrouve pour $K(b, a)$ une expression identique à l'éq.(2.5).

2.3 Exemple de la particule libre

A titre d'illustration, examinons l'exemple de la particule libre. Le Lagrangien de la particule libre de masse m s'écrit :

$$L = \frac{m\dot{x}^2}{2} \quad (2.15)$$

De la relation (2.5) on déduit l'amplitude de la particule libre :

$$K_0(b, a) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int \int \dots \int \left(\frac{2i\pi\hbar\varepsilon}{m} \right)^{-N/2} \exp \left(\frac{im}{2\hbar\varepsilon} \sum_{i=1}^N (x_i - x_{i-1})^2 \right) dx_1 \dots dx_{N-1} \quad (2.16)$$

Cette forme contient une succession d'intégrales gaussiennes faciles à calculer.

En utilisant $(N-1)$ fois l'identité :

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{2i\pi\hbar\varepsilon}{m} \right)^{-1} dx_1 \exp \left\{ \frac{m}{2i\hbar\varepsilon} [(x_2 - x_1)^2 + (x_1 - x_0)^2] \right\} \\ &= \left(\frac{2i\pi\hbar\varepsilon}{m} \right)^{-1/2} \exp \left\{ \frac{m}{2i\hbar(2\varepsilon)} (x_2 - x_0)^2 \right\} \end{aligned} \quad (2.17)$$

On aboutit à écrire l'amplitude de la particule libre sous la forme compacte suivante :

$$K_0(b, a) = \left[\frac{2\pi i\hbar (s_b - s_a)}{m} \right]^{-1/2} \exp \frac{im}{2\hbar (s_b - s_a)} (x_b - x_a)^2$$

Jusqu'à là ,nous avons discuté l'amplitude de probabilité pour qu'une particule atteigne un point particulier dans l'espace temps (x, s) en suivant pas à pas son mouvement . Cependant, il est souvent utile de considérer l'amplitude au point (x, s) sans tenir compte de son mouvement antérieur.

On définit alors une fonction $\psi(x, s)$ qui est l'amplitude au point (x, s) Sans spécifier sa situation antérieure. Cette amplitude est identique à la fonction d'onde ,c'est à dire que la probabilité de trouver la particule au point x à l'instant $|\psi(x, s)|^2$. La fonction $K(x_2, s_2; x_1, s_1)$ n'est en fait qu'une fonction d'onde particulière qui est l'amplitude pour la particule d'être en x_2, s_2 sachant qu'on était en x_1 à s_1 . Puisque la fonction d'onde est une amplitude ,elle satisfait aux règles de superposition des amplitudes d'événements qui se succèdent. Donc la fonction d'onde, d'après l'équation (2.10) satisfait à l'équation intégrale :

$$\Psi(x_2, s_2) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x_2, s_2; x_3, s_3) dx_3 \quad (2.18)$$

Une telle onde satisfait à l'équation d'onde de Schrodinger .Puisque $K(b, a)$ es une fonction d'onde , $K(x_2, s_2; x_1, s_1)$ doit satisfaire à son tour à l'équation de Schrodinger relativement aux variables $b(x_2, s_2)$ c'est -à- dire :

$$\frac{\partial K(b, a)}{\partial s_2} = -\frac{i}{\hbar} V(x, s) K(b, a) - \frac{\hbar}{2im} \frac{\partial^2 K(b, a)}{\partial x_2^2} \text{ pour } s_2 > s_1 \quad (2.19)$$

L'amplitude K n'est pas définie pour $S_2 < S_1$ et il est en général commode de la prendre nulle pour ces valeurs $S_2 < S_1$. En introduisant l'opérateur hamiltonien H_2 qui agit sur les variables 2, on a l'équation :

$$\frac{\partial K(b, a)}{\partial s_2} + \frac{i}{\hbar} H_2 K(b, a) = \delta(x_2 - x_1) \delta(s_2 - s_1) \quad (2.20)$$

Cette dernière montre que l'amplitude $K(b, a)$ joue le rôle d'une fonction de Green pour l'équation de Schrodinger.

2.4 L'approche perturbative dans le formalisme de l'intégrale de chemins

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 le formalisme de l'intégrale de chemin. Cependant, de nombreux problèmes qu'on rencontre en mécanique quantique ont des potentiels non quadratiques. Ceci nécessite alors l'emploi d'une méthode d'approximation.

Une méthode possible est le développement perturbatif qui est particulièrement utile quand l'énergie potentielle est petite devant l'énergie cinétique du système. Supposons qu'une particule est soumise à un potentiel $V(x, S)$ unidimensionnel. L'amplitude du mouvement entre deux points a et b dans ce potentiel est :

$$K_V(b, a) = \int_a^b D[x(s)] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{s_1}^{s_2} \left[\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x, s) \right] ds \right\} \quad (2.21)$$

L'indice V dans l'amplitude signifie que la particule est soumise au potentiel V .

On notera $K_0(a, b)$ 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 :

$$\int_{s_1}^{s_2} ds V(x, s) \ll \hbar \quad (2.22)$$

Il est possible de développer l'exponentielle dans (2.22) :

$$\exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{s_1}^{s_2} ds V(x, s) \right\} = 1 - \int_{s_1}^{s_2} ds V(x, s) + \frac{1}{2} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \left(\int_{s_1}^{s_2} ds V(x, s) \right)^2 + \dots \quad (2.23)$$

Ceci nous permet d'écrire (2.22) sous la forme :

$$K_V(b, a) = K_0(b, a) + K^{(1)}(b, a) + K^{(2)}(b, a) + \dots \quad (2.24)$$

Où les termes du développement s'écrivent comme :

$$K_0(b, a) = \int_a^b D[x(s)] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{s_1}^{s_2} \frac{m}{2} \dot{x}^2 ds \right\} \quad (2.25)$$

$$K^{(1)}(b, a) = -\frac{i}{\hbar} \int_a^b D[x(s)] \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{s_1}^{s_2} \frac{m}{2} \dot{x}^2 ds \right) ds \int_{s_1}^{s_2} d\tau V(x(\tau), \tau) \quad (2.26)$$

$$K^{(2)}(b, a) = -\frac{i}{\hbar} \int_a^b D[x(s)] \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{s_1}^{s_2} \frac{m}{2} \dot{x}^2 ds \right) ds \int_{s_1}^{s_2} d\tau V(x(\tau), \tau) \quad (2.27)$$

$$\int_{s_1}^{s_2} d\tau' V(x(\tau'), \tau')$$

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 $x(s)$:

$$K^{(1)}(b, a) = -\frac{i}{\hbar} \int_{s_1}^{s_2} d\tau \int_a^b D[x(s)] \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{s_1}^{s_2} \frac{m}{2} \dot{x}^2 ds \right) V(x(\tau), \tau) \quad (2.28)$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \int_{s_1}^{s_2} d\tau F(\tau) \quad (2.29)$$

où :

$$F(\tau) = \int_a^b D[x(s)] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{s_1}^{s_2} \frac{m}{2} \dot{x}^2 ds \right\} V(x(\tau), \tau) \quad (2.30)$$

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 $V(x(\tau), \tau)$ évalué au temps τ .

Chaque chemin peut donc être divisé en deux parties : une avant le temps $s = \tau$, l'autre après. Pour $s = \tau$ 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 :

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

Ce qui mène à l'amplitude au premier ordre

$$K^{(1)}(b, a) = -\frac{i}{\hbar} \int_{s_1}^{s_2} \int_{-\infty}^{+\infty} K_0(b, c) V(c) K_0(c, a) dx_c d\tau \quad (2.31)$$

Sous cette forme, on peut interpréter l'interaction entre le potentiel et la particule comme une diffusion de la particule, l'amplitude à l'ordre K comprend K diffusion.

2.5 Le lien avec l'opérateur d'évolution

On peut relier les amplitudes K à l'opérateur d'évolution. Utilisons la relation (2.13) qui permet de décrire l'évolution de la fonction d'onde :

$$\Psi(x_2, s_2) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x_2, s_2; x_1, s_1) \Psi(x_1, s_1) dx_1 \quad (2.32)$$

En utilisant la notation de Dirac :

$$\Psi(x_2, s_2) = \langle x_2 | \Psi(s_2) \rangle \quad (2.33)$$

$$\Psi(x_1, s_1) = \langle x_1 | \Psi(s_1) \rangle \quad (2.34)$$

Et sachant qu'il existe un opérateur d'évolution $U(s_1, s_2)$ tel que :

$$| \Psi(s_2) \rangle = U(s_1, s_2) | \Psi(s_1) \rangle \quad (2.35)$$

On peut écrire la fonction d'onde au point final (x_1, s_2) sous la forme suivante :

$$\Psi(x_2, s_2) = \langle x_2 | U(s_1, s_2) | \Psi(s_1) \rangle \quad (2.36)$$

ce qui peut aussi s'écrire

$$\Psi(x_2, s_2) = \int \langle x_2 | U(s_1, s_2) | x_1 \rangle \langle x_1 | \Psi(s_1) \rangle dx_1 \quad (2.37)$$

expression qui est facilement obtenue en utilisant la relation de fermeture :

$$\int | x_1 \rangle \langle x_1 | dx_1 = 1 \quad (2.38)$$

En comparant l'équation (2.32) avec (2.37) on identifie l'amplitude K à :

$$K(x_2, s_2; x_1, s_1) = \langle x_2 | U(s_1, s_2) | x_1 \rangle \quad (2.39)$$

2.6 Développement de l'amplitude dans la basse non perturbée

On peut exprimer l'amplitude sur la base des fonctions propres φ_n de l'hamiltonien non perturbée . Développons d'abord la fonction d'onde sur cette base :

$$\Psi(x, s_1) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n(s_1) \varphi_n(x) \quad (2.40)$$

et multiplions (2.40) par $\varphi_m^*(x)$ puis intégrons sur tout l'espace :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \varphi_m^*(x) \Psi(x, s_1) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n(s_1) \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_m^*(x) \varphi_n(x) dx = a_m(s_1) \quad (2.41)$$

Dans le cas ou l'Hamiltonien est indépendant du temps , la fonction d'onde se développe comme :

$$\Psi(x, s_1) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} E_n s_1 \right\} \varphi_n(x) \quad (2.42)$$

donc :

$$c_n = a_n \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} E_n s_1 \right\}$$

Ces relation permettent d'écrire $\psi(x, s_2)$ comme :

$$\begin{aligned} \psi(x, s_2) &= \sum_{n=1}^{\infty} c_n \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} E_n s_2 \right\} \varphi_n(x) \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} a_n(s_1) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} E_n (s_2 - s_1) \right\} \varphi_n(x) \end{aligned} \quad (2.43)$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n(x) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} E_n (s_2 - s_1) \right\} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_n^*(y) \psi(y, s_1) dy \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dy \left[\sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n(x) \varphi_n^*(y) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} E_n (s_2 - s_1) \right\} \right] \psi(y, s_1) \quad (2.44)
\end{aligned}$$

En comparant à l'équation (2.32), on peut déduire le développement du propagateur sur la base des fonctions propres :

$$K(x, s_2; y, s_1) = \left[\sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n(x) \varphi_n^*(y) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} E_n (s_2 - s_1) \right\} \right] \quad (2.45)$$

En conclusion la connaissance de l'amplitude de probabilité qu'on appellera dans la suite le propagateur ,fournit pratiquement toute l'information requise pour une description quantique du system . On peut déterminer à l'aide du propagateur les probabilités de transition entre les différents états du système, ainsi que les fonction d'onde et le spectre d'énergie .

Notons que la formulation que Lagrangienne de Feynman ne modifie pas les concepts fondamentaux de la mécanique quantique . Toutefois elle présente des avantages indiscutables sur la clarté des conceptions physiques et établit une liaison plus étroite entre la mécanique classique et la mécanique quantique. Ceci a été la motivation de la tentative d'utilisation de cette description au formalisme de l'élargissement des raies spectrales.

Bibliographie

- [1] R.P.Feynman et A.R. Hibbs ; "Quantum Mechanics and Path Integrals McGraw-Hill" ;New York ; 1965.
- [2] L.S. Schulmann ; "Techniques and applications of path integrals" Wely ; New York ; 1981.

Chapitre 3

Application du formalisme de l'intégrale de chemin au problème d'élargissement

Nous allons d'abord montrer comment on peut introduire le formalisme de l'intégrale de chemin sous sa forme la plus générale possible, puis dans une seconde étape nous allons l'appliquer au cas de la serie de Lyman α d'un hydrogénoïde sans structure fine.

3.0.1 La fonction de corrélation du moment dipolaire

Nous pouvons écrire la fonction de corrélation du moment dipolaire comme une moyenne sur les perturbateurs :

$$C(s) = \sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} \vec{d}_{\alpha\beta} \left\{ \langle \beta | T_b(s, 0) | \beta' \rangle \langle \alpha | T_b(s, 0) | \alpha' \rangle^* \right\}_{moy} \vec{d}_{\alpha'\beta'}^* \quad (3.1)$$

La somme est effectuée sur tous les états $\alpha, \alpha', \dots$ et $\beta, \beta', \dots$ des niveaux respectivement supérieurs et inférieurs. T_a, T_b font évoluer respectivement ces états supérieurs et inférieurs. En utilisant simultanément deux relations de fermeture (2.38), on peut écrire les éléments de matrice de l'opérateur d'évolution des états inférieurs et supérieurs sous

la forme :

$$\langle \beta | T_b(s, 0) | \beta' \rangle = \int \int \langle \beta | x \rangle \langle x | T_b(s, 0) | x' \rangle \langle x' | \beta' \rangle dx dx' \quad (3.2)$$

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

$$\langle \alpha | y \rangle = \varphi_\alpha(y) \quad (3.3)$$

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

$$C(s) = \sum_{\alpha\beta\alpha'\beta'} \delta_{\beta\beta'} \vec{d}_{\alpha'\beta'}^* \vec{d}_{\alpha\beta} \int \int \varphi_\alpha(y) \varphi_{\alpha'}^*(y') \langle y | \{T_a(s, 0)\}_{\text{moy}} | y' \rangle dy dy' \quad (3.4)$$

Nous avons supposé ici que les états inférieurs ne sont pas perturbés.

D'après l'éq.(2.39) les éléments de matrice de l'opérateur d'évolution dans la base sont $\{|y\rangle\}$ l'une des expressions du propagateur de Feynman K :

$$\begin{aligned} \langle y | T_a(s, 0) | y' \rangle &= K(y', s'; y, 0) \\ &= \int_{y(0)=y'}^{y(s)=y} D[\vec{y}(s)] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^s \left(\frac{m}{2} \dot{\vec{y}}^2 + \frac{e^2}{\|\vec{y}\|} + e \vec{E}(\tau) \right) d\tau \right\} \end{aligned} \quad (3.5)$$

En utilisant le développement (2.24) il est possible d'écrire le propagateur sous la forme :

$$\begin{aligned} K(y, s; y', 0) &= \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^k \frac{1}{k!} \int_0^s d\tau_1 \dots \int_0^s d\tau_k \int d\vec{y}_1 \dots \int d\vec{y}_k \\ &\quad \left(\vec{E}_1 \vec{y}_1 \right) \dots \left(\vec{E}_k \vec{y}_k \right) \prod_{j=0}^k K_0(\vec{y}_{j+1}, \tau_{j+1}; \vec{y}_j, \tau_j) \end{aligned} \quad (3.6)$$

où :

$$\overrightarrow{y}_{k+1} = \overrightarrow{y} \text{ et } \overrightarrow{y}_0 = \overrightarrow{y}' \quad (3.7)$$

en remplaçant K_0 par son expression (2.45) on obtient :

$$K(y, s; y', 0) = \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_{k+1}} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^k \frac{1}{k!} \int_0^s d\tau_1 \dots \int_0^s d\tau_k \int d\vec{y}_1 \int d\vec{y}_k \quad (3.8)$$
$$\begin{aligned}&\left(\vec{E}_1 \vec{y}_1\right) \ldots \left(\vec{E}_k \vec{y}_k\right) \varphi_{\alpha_{k+1}}^*\left(\vec{y}_{k+1}\right) \varphi_{\alpha_{k+1}}^*\left(\vec{y}_k\right) \\&\exp \left\{-\frac{i}{\hbar} E_{\alpha_{k+1}}\left(s-\tau_k\right)\right\} \\&\varphi_{\alpha_k}^*\left(\vec{y}_k\right) \varphi_{\alpha_k}^*\left(\vec{y}_{k-1}\right) \exp \left\{-\frac{i}{\hbar} E_{\alpha_k}\left(\tau_k-\tau_{k-1}\right)\right\} \\&\ldots \ldots \ldots \\&\ldots \ldots \ldots \\&\varphi_{\alpha_2}^*\left(\vec{y}_2\right) \varphi_{\alpha_2}^*\left(\vec{y}_1\right) \exp \left\{-\frac{i}{\hbar} E_{\alpha_2}\left(\tau_2-\tau_{k-1}\right)\right\} \\&\varphi_{\alpha_1}^*\left(\vec{y}_1\right) \varphi_{\alpha_1}^*\left(\vec{y}'\right) \exp \left\{-\frac{i}{\hbar} E_{\alpha_1}\left(\tau_1-\tau_0\right)\right\}\end{aligned}$$

L'équation (3.8) est le résultat générale donné par le formalisme de l'intégrale de chemin pour le propagateur qui apparait dans la fonction de corrélation du moment dipolaire. On peut à partir de cette expression faire différentes applications. Par exemple en effectuant une séparation entre les composantes de haute et de basse fréquence dans la moyenne sur le micro champ, on peut traiter séparément le problème d'élargissement électronique ou ionique. Pour l'élargissement électronique, cette équation est le point de départ d'un formalisme quantique qui doit reproduire les résultats obtenus par Baranger [2] quand on se place dans les conditions de l'approximation d'impact. Nous n'avons pas encore réalisé ce lien qui fera l'objet de développements futurs. Dans la suite nous appliquons le formalisme aux élargissements Stark et Doppler dans le cas simple de la raie Lyman- α sans structure fine.

3.1 Formule de profil de raie de la série de Lyman sans structure fine

En utilisant la représentation n, l, m , la fonction d'auto-corrélation du dipôle dans la cas de la série de Lyman s'écrit [1] :

$$C(s) = \sum_{ll'mm'} \langle nlm | \vec{d} | 100 \rangle \langle nl'm' | \vec{d} | 100 \rangle^* \langle \langle nlm, 100 | \{T\}_{\text{moy}} | nl'm', 100 \rangle \rangle \quad (3.9)$$

Où d et T sont respectivement l'opérateur dipolaire et d'évolution de l'émetteur et le symbole $\{\dots\}_{\text{moy}}$ signifie qu' on doit prendre une moyenne statistique sur le micro-champ en fin de calcul .Il est avantageux d'écrire le produit des éléments de matrice du moment dipolaire en utilisant les composantes standard de $\vec{r} = \vec{d}/(-e)$:

$$\begin{aligned} r_0^1 &= z \\ r_1^1 &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(x + iy) \\ r_{-1}^1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(x - iy) \end{aligned} \quad (3.10)$$

On obtient alors :

$$\begin{aligned} \langle nlm | \vec{r} | 100 \rangle \langle nl'm' | \vec{r} | 100 \rangle^* &= \langle nlm | r_0^1 | 100 \rangle \langle 100 | r_0^1 | nl'm' \rangle \\ &- \langle nlm | r_1^1 | 100 \rangle \langle 100 | r_{-1}^1 | nl'm' \rangle - \langle nlm | r_{-1}^1 | 100 \rangle \langle 100 | r_1^1 | nl'm' \rangle \end{aligned} \quad (3.11)$$

On peut maintenant utiliser le théorème de Wigner-Eckart [3] ,sous sa forme contenant les syboles $3 - j$:

$$\sum_{l'l' mm'} \langle nlm | \vec{r} | 100 \rangle \langle n'l'm' | \vec{r} | 100 \rangle^* = \quad (3.12)$$

$$\langle nl \| r^1 \| 10 \rangle \langle 10 \| r^1 \| n'l' \rangle \sum_{q=-1}^1 (-1)^{q+m+l'} \begin{pmatrix} 0 & 1 & l \\ 0 & q & -m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & l' \\ 0 & q & -m' \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

Les "inégalités du triangle" imposent que $l = l' = 1$, l'autre règle de sélection impose que $m = q$. La somme sur q peut alors s'écrire :

$$\begin{aligned} \sum_{q=-1}^1 (-1)^{q+m+l'} \begin{pmatrix} 0 & 1 & l \\ 0 & q & -m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & l' \\ 0 & q & -m' \end{pmatrix} = \\ \sum_{q=-1}^1 (-1)^{q+m+l'} \frac{1}{\sqrt{3}} \delta_{qm} (-1)^{m-1} \frac{1}{\sqrt{3}} \delta_{qm'} (-1)^{m'-1} \end{aligned} \quad (3.14)$$

Ce qui donne :

$$\langle nlm | \vec{d} | 100 \rangle \langle n'l'm' | \vec{d} | 100 \rangle^* = \frac{1}{3} \delta_{l1} \delta_{l'1} \delta_{mm'} |\langle nl \| d^1 \| 10 \rangle|^2 \quad (3.15)$$

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

$$C_{Ly-n}(s) = \frac{1}{3} |\langle nl \| d^1 \| 10 \rangle|^2 \sum_{m=-l}^l \left\langle \left\langle nlm, 100 \left| \{T\}_{\text{moy}} \right| nlm, 100 \right\rangle \right\rangle \quad (3.16)$$

On reprend la formule qui donne la fonction de corrélation du moment dipolaire électrique pour une raie Lyman - α [1], en omettant la notation moy dans la moyenne d'ensemble notée seulement $\{\dots\}$:

$$\begin{aligned}
C_{Ly-n}(s) &= \frac{1}{3} |\langle nl | d^1 | 10 \rangle|^2 \{ \langle 210 | T | 210 \rangle + 2 \langle 210 | T | 211 \rangle \} \\
&= \frac{1}{3} |\langle nl | d^1 | 10 \rangle|^2 \exp(\phi_e s) [C_0(s) + 2C_1(s)]
\end{aligned} \tag{3.17}$$

Où Φ_e représente l'opérateur de collisions électroniques.

Calculons d'abord $C_1(s)$:

$$C_1(s) = \int \int dy dy' \varphi_{211}(y) \varphi_{211}^*(y') \left\{ K(y, s; y', 0) \right\} \tag{3.18}$$

Et en remplaçant le propagateur K par son expression (2.45) et en intégrant sur y et y' , on obtient après avoir utilisé l'orthogonalité des fonctions d'onde :

$$\begin{aligned}
C_1(s) &= \sum_{\alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_k=1}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^k \frac{1}{k!} \int_0^s d\tau_1 \dots \int_0^s d\tau_k \int d\vec{y}_1 \int d\vec{y}_k \\
&\quad \left\{ \left(\vec{E}_1 \vec{y}_1 \right) \dots \left(\vec{E}_k \vec{y}_k \right) \right\} \varphi_{211}(\vec{y}_k) \varphi_{\alpha_k}^*(\vec{y}_k) \dots \varphi_{\alpha_2}(\vec{y}_1) \varphi_{211}^*(\vec{y}_1) \\
&\quad \exp \left[\frac{i}{\hbar} E_{211}(s - \tau_k) + \frac{i}{\hbar} E_{\alpha_k}(\tau_k - \tau_{k-1}) \dots + \frac{i}{\hbar} E_{\alpha_2}(\tau_2 - \tau_{k-1}) + \frac{i}{\hbar} E_{\alpha_1}(\tau_1) \right]
\end{aligned} \tag{3.19}$$

Ou encore :

$$\begin{aligned}
&\sum_{\alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_k=1}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^k \frac{1}{k!} \int_0^s d\tau_1 \dots \int_0^s d\tau_k \exp \left[\frac{i}{\hbar} E_{211}(s - 0) \right] \\
&\int d\vec{y}_1 \int d\vec{y}_k \left\{ \left(\vec{E}_1 \vec{y}_1 \right) \dots \left(\vec{E}_k \vec{y}_k \right) \right\} \varphi_{211}(\vec{y}_k) \varphi_{\alpha_k}^*(\vec{y}_k) \dots
\end{aligned} \tag{3.20}$$

$$\varphi_{\alpha_2}(\vec{y}_1) \varphi_{211}^*(\vec{y}_1)$$

Nous allons omettre le facteur de phase $\exp \left[\frac{i}{\hbar} E_{211}(s - 0) \right]$ dans tout le calcul, et

nous le ferons à nouveau apparaitre dans le résultat final.

Calculons (3.20) terme à terme pour différents ordre de K :

Cas $K = 0$

$$C_1^{(0)} = C_1^{k=0} = 1 \quad (3.21)$$

Cas $K = 1$

$$C_1^{(1)}(s) = \frac{i}{\hbar} \int_0^s d\tau_1 \left\{ \vec{E}(\tau_1) \right\} \cdot \left[\int d\vec{y}_1 \varphi_{211}(\vec{y}_1) \vec{y}_1 \varphi_{211}^*(\vec{y}_1) \right] = 0 \quad (3.22)$$

Par suite de l'application de la règle de sélection pour le moment orbital 1.ou aussi par le fait que la moyenne du vecteur champ électrique est nulle.

Cas $K = 2$

$$C_1^{(2)}(s) = \frac{i}{\hbar} \int_0^s d\tau_1 \int_0^s d\tau_2 \left(\sum_{\alpha_2=1}^{\infty} \left[\vec{E}(\tau_2) \int d\vec{y}_2 \varphi_{211}(\vec{y}_2) \vec{y}_2 \varphi_{\alpha_2}^*(\vec{y}_2) \right] \right) \quad (3.23)$$

$$\left[\vec{E}(\tau_1) \cdot \int d\vec{y}_1 \varphi_{\alpha_2}(\vec{y}_1) \vec{y}_1 \varphi_{211}^*(\vec{y}_1) \right]$$

Seul dans (3.23) .l'état $\alpha = 200$ contribue dans la somme toujours par la règle de sélection . En notant :

$$\int d\vec{y}_1 \varphi_{200}(\vec{y}_1) \vec{y}_1 \varphi_{211}^*(\vec{y}_1) = \vec{D}_+ \quad (3.24)$$

Nous pouvons écrire (3.23) comme :

$$C_1^{(2)}(s) = \frac{1}{2!} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \left\{ \left[\int_0^s d\tau \vec{E}(\tau) \vec{D}_+ \right]^2 \right\} \quad (3.25)$$

$$= \frac{1}{2!} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 D_+^2 \int_0^s d\tau \int_0^s d\tau' \left[\vec{E}_+(\tau) \vec{E}_+(\tau') \right] \quad (3.26)$$

$$= \frac{1}{2!} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \frac{D_+^2}{3} \int_0^s d\tau \int_0^s d\tau' \left[\vec{E}_+(\tau) \vec{E}_+(\tau') \right] \quad (3.27)$$

En suivant de proche en proche .on montre que les termes d'ordre n impair sont nuls et que seuls les termes d'ordre pairs contribuent dans le calcul de la fonction de corrélation du moment dipolaire .C'est ainsi que par exemple les termes d'ordre

$n = 4$ et $n = 6$ sont respectivement égaux à :

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

$$\sum_{\alpha_3=1}^{\infty} \left[\vec{E}(\tau_2) \cdot \int d\vec{y}_2 \varphi_{200}(\vec{y}_2) \vec{y}_2 \varphi_{\alpha_2}^*(\vec{y}_2) \right] \left[\vec{E}(\tau_3) \cdot \int d\vec{y}_3 \varphi_{\alpha_3}(\vec{y}_3) \vec{y}_3 \varphi_{200}^*(\vec{y}_3) \right] \quad (3.28)$$

La somme dans l'équation (3.28) porte sur tous les états du niveau supérieur

$(211, 210, 21 - 1)$ puisque les éléments de matrice dipolaires faisant intervenir l'état (200) ne sont pas nuls. En notant :

$$\int d\vec{y}_1 \varphi_{200}(\vec{y}_1) \vec{y}_1 \varphi_{210}^*(\vec{y}_1) = \vec{D}_0 \quad (3.29)$$

et

$$\int d\vec{y}_1 \varphi_{200}(\vec{y}_1) \vec{y}_1 \varphi_{21-1}^*(\vec{y}_1) = \vec{D}_- \quad (3.30)$$

Il vient que :

$$\begin{aligned}
C_1^{(4)}(s) = & \frac{1}{4!} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^4 \left\{ \left(\int_0^s d\tau \vec{E}(\tau) \vec{D}_+ \right)^2 \right\} \left(\left\{ \left(\int_0^s d\tau \vec{E}(\tau) \vec{D}_+ \right)^2 \right\} + \right. \\
& \left. \left\{ \left(\int_0^s d\tau \vec{E}(\tau) \vec{D}_0 \right)^2 \right\} + \left\{ \left(\int_0^s d\tau \vec{E}(\tau) \vec{D}_- \right)^2 \right\} \right) \quad (3.31)
\end{aligned}$$

Pour pouvoir factoriser les moyennes des carrés d'intégrales nous avons fait l'hypothèse que les fonction de corrélations d'ordre 4 en champ électrique peuvent s'écrire comme un produit de fonctions de corrélations d'ordre 2 .cette hypothèse est justifiée si on Considère que le champ électrique est une variable aléatoire stationnaire. Elle suppose que les fonctions de corrélations à 4 temps sont beaucoup plus petites que les fonctions de corrélations à deux temps [3].

Puisqu'il n'y a pas de direction privilégiée dans l'espace pour le champ électrique ,on peut écrire :

$$\begin{aligned}
\left\{ \left(\int_0^s d\tau \vec{E}(\tau) \vec{D}_0 \right)^2 \right\} &= \left\{ \left(\int_0^s d\tau \vec{E}(\tau) \vec{D}_- \right)^2 \right\} = \\
\left(\int_0^s d\tau \vec{E}(\tau) \vec{D}_+ \right)^2 &= \frac{D^2}{3} \left\{ \int_0^s d\tau \int_0^s d\tau' \vec{E}(\tau) \vec{E}(\tau') \right\} \quad (3.32)
\end{aligned}$$

$$= \frac{D^2}{3} h(s) \quad (3.33)$$

L'expression (3.31) prend alors la forme simple :

$$C_1^{(4)}(s) = \frac{1}{4!} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^4 \frac{D^4}{3} h^2(s) \quad (3.34)$$

Pour l'ordre $n = 6$, le résultat est immédiat en faisant les mêmes approximations

$$C_1^{(6)}(s) = \frac{1}{6!} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^6 \frac{D^6}{3} h^3(s) \quad (3.35)$$

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

sous la forme compacte :

$$\begin{aligned}
C_1(s) &= 1 + \frac{D^2}{3} h(s) \sum_{p=1}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^{2p} \frac{1}{2p!} [D^2 h(s)]^{p-1} \\
&= \frac{2}{3} + \frac{1}{3} \cos \left(\frac{D}{\hbar} \sqrt{h(s)} \right)
\end{aligned} \tag{3.36}$$

Calculons maintenant $C_0(S)$:

$$C_0(s) = \int \int dy dy' \varphi_{210}(y) \varphi_{210}^*(y') \left\{ K(y, s; y', 0) \right\} \tag{3.37}$$

En remplaçant le propagateur K par son expression (2.2) et en intégrant sur y et y' , on obtient :

$$\begin{aligned}
C_0(s) &= \sum_{\alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_k=1}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^k \frac{1}{k!} \int_0^s d\tau_1 \dots \int_0^s d\tau_k \int d\vec{y}_1 \int d\vec{y}_k \\
&\quad \left\{ \left(\vec{E}_1 \vec{y}_1 \right) \dots \left(\vec{E}_k \vec{y}_k \right) \right\} \varphi_{210}(\vec{y}_k) \varphi_{\alpha_k}^*(\vec{y}_k) \dots \varphi_{\alpha_2}(\vec{y}_1) \varphi_{2110}^*(\vec{y}_1) \\
&\quad \exp \left[\frac{i}{\hbar} E_{210}(s-0) \right]
\end{aligned} \tag{3.38}$$

de même que précédemment, nous allons omettre le facteur de phase en énergie, et nous le remettrons en fin de calcul. Le même raisonnement que pour calculer $C_0(s)$ conduit à :

Cas $K = 0$

$$C_1^{(0)}(s) = 1 \tag{3.39}$$

Cas $K = 1$

$$C_0^{(1)}(s) = \frac{i}{\hbar} \int_0^s d\tau_1 \left\{ \vec{E}(\tau_1) \right\} \cdot \left[\int d\vec{y}_1 \varphi_{210}(\vec{y}_1) \vec{y}_1 \varphi_{210}^*(\vec{y}_1) \right] = 0 \quad (3.40)$$

Cas $K = 2$

$$C_0^{(2)}(s) = \sum_{\alpha_2=0}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \frac{1}{2!} \int_0^s \int_0^s d\tau_1 d\tau_2 \left(\left[\vec{E}(\tau_2) \cdot \int d\vec{y}_2 \varphi_{210}(\vec{y}_2) \vec{y}_2 \varphi_{\alpha_2}^*(\vec{y}_2) \right] \right. \\ \left. \left[\vec{E}(\tau_1) \cdot \int d\vec{y}_1 \varphi_{\alpha_2}(\vec{y}_1) \vec{y}_1 \varphi_{210}^*(\vec{y}_1) \right] \right) \quad (3.41)$$

Seul, dans la somme, l'état $\alpha_2 = (200)$ contribue :

$$C_0^{(2)}(s) = \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \frac{1}{2!} \left\{ \left(\int_0^s d\tau \vec{E}(\tau) \vec{D}_0 \right)^2 \right\} \equiv \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \frac{1}{2!} \frac{D^2}{3} h(s) \quad (3.42)$$

Et ainsi de suite pour les termes d'ordres supérieurs (les termes d'ordre impairs sont comme précédemment nuls).

$$C_0(s) = C_1^{(0)}(s) + C_1^{(2)}(s) + \dots + C_1^{(\infty)}(s) \quad (3.43)$$

$$C_0(s) = C_1(s) = 1 + \frac{D^2}{3} h(s) \sum_{p=1}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^{2p} \frac{1}{2p!} [D^2 h(s)]^{p-1} \quad (3.44)$$

Regroupant maintenant les équations (3.44) et (3.36) dans (3.17), nous obtenons la fonction du corrélation du moment dipolaire électrique (après avoir remis le facteur de phase en énergie E_2 du niveau 2) :

$$C(s) = \frac{1}{3} |\langle nl | d^1 | 10 \rangle|^2 \exp \left(\left(\phi_e + \frac{i\Delta\varepsilon}{\hbar} \right) s \right) [C_0(s) + 2C_1(s)] \quad (3.45) \\ = \frac{1}{3} |\langle nl | d^1 | 10 \rangle|^2 \exp \left(\left(\phi_e + \frac{i\Delta\varepsilon}{\hbar} \right) s \right) \int (C_0(s) + 2C_1(s)) W(\vec{\varepsilon}) d\vec{\varepsilon}$$

A ce stade, il fallait calculer une distribution des micro-champs adéquate au problème afin d'obtenir le profil de raie Lyman α . Dans le suivant chapitre, nous avons fait une tentative pour calculer cette distribution qui facilite le calcul de transformée de Fourier.

Bibliographie

- [1] R.Stamm,B.Talin,E.L.Pllock etC.A.Iglesias ; "Phys.Rev".A34,4144 ;1986.
- [2] D.Baranger ; " Atomic and Molecular Processes "(édité par D.R.Bates) ;Academic Press ; New York ;1962.
- [3] N.G.Van Kampen ;"Stochastic Processes in Physics and Chemistry " ;North Holland ;1981.

Chapitre 4

Calcul de distribution des micro-champs ioniques dans le cas relativiste

Dans un plasma chaud, tous les perturbateurs ont des vitesses relativistes. Lorsque les vitesses des particules deviennent relativistes, le calcul des distributions électriques doivent tenir compte les principes de la relativité restreinte.

4.1 La transformation de Lorentz :

Considérons deux référentiels galiléen R et R' se déplaçant l'un par rapport à l'autre à une vitesse v selon l'axe des x .

Soit x, y, z, t les coordonnées d'espace-temps d'une particule dans R , si l'on veut exprimer les coordonnées x', y', z', t' de cette même particule dans le référentiel R' , alors on a d'après la transformation de Galilée :

$$\begin{aligned}
x' &= x - vt \\
y' &= y \\
z' &= z \\
t' &= t
\end{aligned}
\tag{4.1}$$

Dans le cadre de la relativité restreinte, la transformation est différente (même si elle est une transformation limite dans le cas des vitesses faibles de la transformation galiléenne), on a alors d'après la transformation de Lorentz [1] :

$$\begin{aligned}
x' &= \Gamma (x - \beta ct) \\
y' &= y \\
z' &= z \\
t' &= \Gamma \left(t - \frac{\beta}{c} x \right)
\end{aligned}
\tag{4.2}$$

avec : $\Gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$ et $\beta = \frac{v}{c}$.

4.2 Les quadrivecteurs :

On dit que a_1, a_2, a_3, a_4 sont des composantes d'un quadrivecteur $\vec{\mathbf{A}}$ si elles se transforment comme les coordonnées $x_1 = x$, $x_2 = y$, $x_3 = z$, $x_4 = ct$ d'un point d'univers lorsqu'on effectue un changement de référentiel galiléen[2] .

$$\vec{\mathbf{A}}' = (\wedge) \vec{\mathbf{A}} \quad \text{et} \quad \vec{\mathbf{A}} = (\wedge)^{-1} \vec{\mathbf{A}}'$$

soit

$$\begin{aligned}
a_1' &= \Gamma(a_1 - \beta a_4) \\
a_2' &= a_2 \quad a_3' = a_3 \\
a_4' &= \Gamma(a_4 - \beta a_1)
\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
a_1 &= \Gamma(a_1' + \beta a_4') \\
a_2 &= a_2' \quad a_3 = a_3' \\
a_4 &= \Gamma(a_4' + \beta a_1')
\end{aligned}$$

où $(\wedge)$ est la matrice de Loretz :

$$(\wedge) = \begin{bmatrix} \Gamma & 0 & 0 & -\beta\Gamma \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\beta\Gamma & 0 & 0 & \Gamma \end{bmatrix}$$

4.3 Electrodynamique relativiste :

la théorie de la relativité restreinte a été élaborée par Albert Einstein , pour montrer qu'à l'instar des autres lois de la nature , les lois de l'électromagnétisme sont les memes dans tous les référentiels d'inertie . On découvre alors que les composants ,du champ électrique et du champ magnétique , de l'espace tridimensionnel , ne sont en fait que les éléments d'un seul et meme tenseur , de l'espace à quatre dimensions : "le tenseur électromagnétique " .

4.3.1 Rappel des lois de l'électromagnétisme :

les lois de l'électromagnétisme peuvent être exprimées :

- soit en fonction des champs électrique et magnétique $\vec{E}$ et $\vec{B}$.
- soit en fonction des potentiels U et $\vec{A}$ à partir desquels on tire $\vec{E}$ et $\vec{B}$

Maxwell a exprimé ces lois sous la forme de quatre équations qui portent son nom :

$$\operatorname{div} \vec{D} = \rho \qquad \operatorname{div} \vec{B} = 0$$

$$\operatorname{rot} \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \qquad \operatorname{rot} \vec{H} = \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}$$

où $\vec{D}$ est le vecteur déplacement électrique , $\vec{H}$ le champ d'excitation magnétique ,
 ρ et $\vec{J}$ les densités de charge et de courant . Ces vecteurs sont reliés à $\vec{E}$ et $\vec{B}$ par :

$$\vec{D} = \varepsilon \vec{E} \qquad \vec{B} = \mu \vec{H}$$

ε est la permittivité diélectrique , et μ : la perméabilité magnétique du milieu . Dans
les conducteurs la conductivité σ est reliée à $\vec{J}$ par la loi d'Ohm :

$$\vec{J} = \sigma \vec{E}$$

Dans le vide ces expressions s'écrivent :

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E} \qquad \text{et} \qquad \vec{B} = \mu_0 \vec{H}$$

où : $\varepsilon_0 = \frac{1}{36\pi} 10^{-9}$ (Farad /mètre) et $\mu_0 = 4\pi 10^{-7}$ (Henry/mètre) .

En utilisant l'opérateur $\vec{\nabla}$ les équations de Maxwell deviennent :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\varepsilon} \tag{4.3}$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (4.4)$$

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (4.5)$$

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{B} = \mu \vec{J} + \varepsilon \mu \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (4.6)$$

Apartir de $\vec{E}$ et $\vec{B}$ on tire la force de lorentz

$$\vec{F} = q \left(\vec{E} + \vec{V} \wedge \vec{B} \right) \quad (4.7)$$

qui agit sur une particule de charge q animée d'une vitesse $\vec{V}$

Le principe de la conservation de la charge électrique est exprimé par l'équation :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (4.8)$$

les équation de Maxwell et l'équation conservation de charge électrique sont des "équation locales " c'est à dire qu'elles sont valables en tout point du milieu et à tout instant t .

Les champs $\vec{B}$ et $\vec{E}$ dérivent des des potentiels de Lorentz $\vec{A}$ et U

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \wedge \vec{A} \quad (4.9)$$

et

$$\vec{E} = -\vec{\nabla} U - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad (4.10)$$

les potentielles vecteur $\vec{A}$ et scalaire U ne sont pas définis de façon absolue par l'équation (4.9) et (4.10) , on peut alors choisir un couple $(\vec{A} \text{ et } U)$ qui satisfait à la "jauge de Lorentz"

$$div \vec{A} + \varepsilon \mu \frac{\partial U}{\partial t} = 0 \quad (4.11)$$

Après calculs [2] , en utilisant les équations de Maxwell et la jauge de Lorentz , on obtient :

$$\Delta U - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = -\frac{\rho}{\varepsilon} \quad (4.12)$$

et

$$\Delta \vec{A} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} = -\mu \vec{J} \quad (4.13)$$

où $v = 1/\sqrt{\varepsilon \mu}$.

Ces équations ont pour solutions .

$$U(r, t) = \frac{1}{4\pi\varepsilon} \int_v \frac{1}{r} \left[\rho \left(t - \frac{r}{v} \right) \right] dv \quad (4.14)$$

$$\vec{A}(r, t) = \frac{\mu}{4\pi} \int_v \frac{1}{r} \left[\vec{J} \left(t - \frac{r}{v} \right) \right] dv \quad (4.15)$$

4.3.2 Invariance des lois de l'électromagnétisme :

Nous allons considérer le vide comme milieu comportant des courants et des charges sources de densité $\vec{J}$ et ρ . Les potentiels U et $\vec{A}$, en un point M et à un instant t sont obtenus à partir de (4.14) et (4.15) avec :

$$\varepsilon = \varepsilon_0 , \mu = \mu_0 \text{ et } v = c$$

on tire les champs $\vec{B}$ et $\vec{E}$ à l'aide de (4.9) et (4.10)

L'analyse vectorielle dans l'espace quadridimensionnel :

On introduit , dans l'espace quadridimensionnel de Minkowski , l'opérateur " quadri-nabla "

$$\vec{\nabla} = \left(\vec{\nabla}, -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \right) \quad (4.16)$$

de composantes $\partial_1 = \frac{\partial}{\partial x}$, $\partial_2 = \frac{\partial}{\partial y}$, $\partial_3 = \frac{\partial}{\partial z}$, $\partial_4 = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}$

où $\vec{\nabla}$: est l'opérateur de l'espace à trois dimensions .

La quadridivergence d'un quadrivecteur :

$$\vec{\mathbf{A}} = \left(\vec{A}, a_4 \right)$$

est par définition ,le produit pseudo-scalaire de ce quadrivecteur et quadrinabla

$$\vec{\nabla} . \vec{\mathbf{A}} = \frac{\partial a_1}{\partial x} + \frac{\partial a_2}{\partial y} + \frac{\partial a_3}{\partial z} + \frac{1}{c} \frac{\partial a_4}{\partial t} \quad (4.17)$$

on définit le quadrigradient d'une fonction scalaire U par le quadrivecteur :

$$\vec{\nabla} U = \left(\vec{\nabla} U, -\frac{1}{c} \frac{\partial U}{\partial t} \right) \quad (4.18)$$

dont les composantes sont :

$$\frac{\partial U}{\partial x}, \frac{\partial U}{\partial y}, \frac{\partial U}{\partial z}, \frac{-1}{c} \frac{\partial U}{\partial t}$$

Le d'Alembertien est le carré pseudo - scalaire de l'opérateur quadrinabla :

$$\square = \vec{\nabla} . \vec{\nabla} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \quad (4.19)$$

Or le carré scalaire scalaire d'un quadrivecteur est un invariant , par conséquent :

$$\square = \text{invariant} \quad (4.20)$$

Quadrivecteur densité de courant :

l'expression (4.8)

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$$

qui exprime le principe de conservation de la charge à l'échelle locale , peut être présentée sous la forme

$$\frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} + \frac{\partial J_z}{\partial z} + \frac{1}{c} \frac{\partial c\rho}{\partial t} = 0$$

elle apparaît comme la quadrivergence d'un quadrivecteur

$$\vec{J} = \left(\vec{J}, c\rho \right) \quad (4.21)$$

et peut s'écrire sous la forme du produit pseudo scalaire de $\vec{\nabla}$ et $\vec{J}$:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0 \quad (4.22)$$

or un tel produit est un invariant dans tout changement de référentiel galiléen .Ainsi nous avons obtenu une formulation covariante de l'une des lois de m'électromagnétisme :le principe de la conservation de la charge .

Dans un référentiel galiléen (R') , en mouvement de translation uniforme par rapport à (R) ,à la vitesse v ,les quatre vecteur densité de courant devient :

$$\vec{J}' = (\wedge) \vec{J} \quad \text{et} \quad \vec{J} = (\wedge) \vec{J}' \quad (4.23)$$

soit

$$\begin{aligned} J'_x &= \Gamma(J_x - \beta c\rho) \\ J'_y &= J_y \quad J'_z = J_z \\ c\rho' &= \Gamma(c\rho - \beta J_x) \end{aligned} \quad (4.24)$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{J}^x &= \Gamma(\mathbf{J}'_x + \beta c \rho') \\
\mathbf{J}_y &= \mathbf{J}'_y \quad \mathbf{J}_z = \mathbf{J}'_z \\
c\rho &= \Gamma(c\rho' - \beta \mathbf{J}'_x)
\end{aligned} \tag{4.25}$$

Quadrivecteur potentiel

le champ $\vec{E}$ et $\vec{B}$ dérivent des potentiels $\vec{A}$ et U . Pour obtenir les équations

$$\Delta U - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = -\frac{\rho}{\varepsilon_0} \tag{4.26}$$

et

$$\Delta \vec{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} = -\mu_0 \vec{J} \tag{4.27}$$

nous avons imposé à $\vec{A}$ et U la condition de la jauge de Lorentz :

$$div \vec{A} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial U}{\partial t} = 0 \tag{4.28}$$

soit

$$\frac{\partial A_x}{\partial x} + \frac{\partial A_y}{\partial y} + \frac{\partial A_z}{\partial z} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{U}{c} \right) = 0$$

Là encore cette exepression fait apparaitre le produit pseudo scalaire de quadrinabla et d'un quadrivecteur

$$\vec{\mathbf{A}} = \left(\vec{A}, \frac{U}{c} \right) \tag{4.29}$$

que nous appellerons "quadrivecteur potentiel ". La jauge de Lorentz se présente , dans l'espace quadridimensionnnl de Minkowski , sous la forme :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathbf{A}} = 0 \tag{4.30}$$

la quadridivergence du quatre vecteur potentiel est nulle .

les équations (4.26) et (4.27) s'écrivent

$$\frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} = -\mu_0 \vec{J} \quad (4.31)$$

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = -\frac{\rho}{\varepsilon_0} \quad (4.32)$$

Si on introduit l'opérateur d'Alembertien et sachant que $c^2 \varepsilon_0 \mu_0 = 1$, les équations (4.31) et (4.32) deviennent :

$$\begin{aligned} \square \vec{A} &= -\mu_0 \vec{J} \\ \square \left(\frac{U}{c} \right) &= -\mu_0 \rho c \end{aligned} \quad \implies \square \vec{A} = -\mu_0 \vec{J} \quad (4.33)$$

L'expression (4.33), qui résume les quatre équations de Maxwell, se présente sous la forme covariante. Ce résultat a été obtenu parce que le quadrivecteur potentiel $\vec{A}$ satisfait à la jauge de Lorentz $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$.

Les expressions (4.22) et (4.33) montrent que les équations de l'électromagnétisme s'expriment de la même façon quelque soit le référentiel galiléen choisi.

4.3.3 Le tenseur champ électromagnétique :

Le champ électrique $\vec{E}$ et le champ magnétique $\vec{B}$ de l'espace tridimensionnel décrivent des potentiels U et $\vec{A}$

$$\vec{E} = -\overrightarrow{\text{grad}} U - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad \text{et} \quad \vec{B} = \overrightarrow{\text{rot}} \vec{A}$$

Ces relations peuvent être exprimées, dans un référentiel (R) , sous la forme :

$$\begin{aligned} E_x &= -c \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{U}{c} \right) - c \frac{\partial A_x}{\partial t} \\ E_y &= -c \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{U}{c} \right) - c \frac{\partial A_y}{\partial t} \\ E_z &= -c \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{U}{c} \right) - c \frac{\partial A_z}{\partial t} \end{aligned} \quad (4.34)$$

$$\begin{aligned}
B_x &= \frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z} \\
B_y &= \frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \\
B_z &= \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}
\end{aligned} \tag{4.35}$$

Dans l'espace quadridimensionnel de Minkowski nous considérons un point d'univers ($x = x_1, y = x_2, z = x_3, ct = x_4$) et le quadrivecteur potentiel $\vec{A}$ ($A_x = A_1, A_y = A_2, A_z = A_3, \frac{U}{c} = A_4$),

les expressions (4.34) et (4.35) deviennent :

$$\begin{aligned}
\frac{E_x}{c} &= -\frac{\partial A_4}{\partial x_1} - \frac{\partial A_1}{\partial x_4} \\
\frac{E_y}{c} &= -\frac{\partial A_4}{\partial x_2} - \frac{\partial A_2}{\partial x_4} \\
\frac{E_z}{c} &= -\frac{\partial A_4}{\partial x_3} - \frac{\partial A_3}{\partial x_4}
\end{aligned} \tag{4.36}$$

$$\begin{aligned}
B_x &= \frac{\partial A_3}{\partial x_2} - \frac{\partial A_2}{\partial x_3} \\
B_y &= \frac{\partial A_1}{\partial x_3} - \frac{\partial A_3}{\partial x_1} \\
B_z &= \frac{\partial A_2}{\partial x_1} - \frac{\partial A_1}{\partial x_2}
\end{aligned} \tag{4.37}$$

En introduisant les composantes de quadrinabla

$$\partial_1 = \frac{\partial}{\partial x_1}, \partial_2 = \frac{\partial}{\partial x_2}, \partial_3 = \frac{\partial}{\partial x_3} \text{ et } \partial_4 = \frac{\partial}{\partial x_4} \tag{4.38}$$

les six expressions précédentes peuvent être présentées sous la forme :

$$\mathcal{F}_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu \tag{4.39}$$

les $\mathcal{F}_{\mu\nu}$ sont les éléments d'un tenseur d'ordre 2 de l'espace quadridimensionnel

$$(\mathcal{F}) = \begin{bmatrix} \mathcal{F}_{11} & \mathcal{F}_{12} & \mathcal{F}_{13} & \mathcal{F}_{14} \\ \mathcal{F}_{21} & \mathcal{F}_{22} & \mathcal{F}_{23} & \mathcal{F}_{24} \\ \mathcal{F}_{31} & \mathcal{F}_{32} & \mathcal{F}_{33} & \mathcal{F}_{34} \\ \mathcal{F}_{41} & \mathcal{F}_{42} & \mathcal{F}_{43} & \mathcal{F}_{44} \end{bmatrix} \tag{4.40}$$

Ce tenseur est "antisymétrique " . En effet :

$$\mathcal{F}_{\mu\mu} = 0 \quad \text{et} \quad \mathcal{F}_{\mu\nu} = -\mathcal{F}_{\nu\mu} \quad (4.41)$$

Avec (4.38) et (4.39) les expressions (4.36) et (4.37) s'écrivent :

$$\begin{aligned} \frac{E_x}{c} &= \partial_4 A_1 - \partial_1 A_4 = \mathcal{F}_{41} & B_x &= \partial_2 A_3 - \partial_3 A_2 = \mathcal{F}_{23} \\ \frac{E_y}{c} &= \partial_4 A_2 - \partial_2 A_4 = \mathcal{F}_{42} & B_y &= \partial_3 A_1 - \partial_1 A_3 = \mathcal{F}_{31} \\ \frac{E_z}{c} &= \partial_4 A_3 - \partial_3 A_4 = \mathcal{F}_{43} & B_z &= \partial_1 A_2 - \partial_2 A_1 = \mathcal{F}_{12} \end{aligned} \quad (4.42)$$

et le tenseur (4.40) devient :

$$(\mathcal{L}) = \begin{bmatrix} 0 & B_z & -B_y & -\frac{E_x}{c} \\ -B_z & 0 & B_x & -\frac{E_y}{c} \\ B_y & -B_x & 0 & -\frac{E_z}{c} \\ \frac{E_x}{c} & \frac{E_y}{c} & \frac{E_z}{c} & 0 \end{bmatrix} \quad (4.43)$$

C'est le tenseur électromagnétique .

4.3.4 Transformation des champs :

Dans un repère (R') en déplacement par rapport à (R) à la vitesse constante v , l'expression (4.39) s'écrit :

$$\mathcal{F}'_{\mu\nu} = \partial'_\mu A'_\nu - \partial'_\nu A'_\mu \quad (4.44)$$

et le quadrivecteurs $\vec{\nabla}$ et $\vec{A}$ se transforment respectivement en :

$$\vec{\nabla}' = (\wedge) \vec{\nabla} \quad \text{et} \quad \vec{A}' = (\wedge) \vec{A}$$

soit

$$\begin{aligned}
\partial'_1 &= \Gamma (\partial_1 - \beta \partial_4) \\
\partial'_2 &= \partial_2 \quad \partial'_3 = \partial_3 \\
\partial'_4 &= \Gamma (\partial_4 - \beta \partial_1)
\end{aligned} \tag{4.45}$$

$$\begin{aligned}
A'_1 &= \Gamma (A_1 - \beta A_4) \\
A'_2 &= A_2 \quad A'_3 = A_3 \\
A'_4 &= \Gamma (A_4 - \beta A_1)
\end{aligned} \tag{4.46}$$

Calculons par exemple la composante B'_y de $\vec{B}'$. Avec (4.42) on a :

$$B'_y = \mathcal{F}'_{31} = \partial'_3 A'_1 - \partial'_1 A'_3$$

qui , avec (4.45) et (4.46) devient

$$B'_y = \Gamma (\partial_3 A_1 - \partial_1 A_3) + \Gamma \beta (\partial_4 A_3 - \partial_3 A_4)$$

On compare les expressions entre parenthèse avec (4.42) et on obtient :

$$B'_y = \Gamma \left(B_y + \frac{\beta}{c} E_z \right)$$

les autres composantes de $\vec{E}'$ et $\vec{B}'$ sont calculées de la même façon .D'où les formules de transformation de $\vec{E}$ et $\vec{B}$

$$\begin{aligned}
E'_x &= E_x & B'_x &= B_x \\
E'_y &= \Gamma (E_y - v B_z) & B'_y &= \Gamma \left(B_y + \frac{\beta}{c} E_z \right) \\
E'_z &= \Gamma (E_z + v B_y) & B'_z &= \Gamma \left(B_z - \frac{\beta}{c} E_y \right)
\end{aligned} \tag{4.47}$$

On obtient les formules inverses en changeant v en $-v$ et β en $-\beta$.

Si on décompose les champs électrique et magnétique suivant une direction parallèle à la vitesse $\vec{v}$ et une direction perpendiculaire , on trouve [3] :

$$\begin{aligned}
E'_{\parallel} &= E_{\parallel} & B'_{\parallel} &= B_{\parallel} \\
E'_{\perp} &= \Gamma \left(E_{\perp} + \vec{v} \wedge \vec{B} \right) & B'_{\perp} &= \Gamma \left(B_{\perp} - \frac{\vec{v} \wedge \vec{E}}{c^2} \right)
\end{aligned} \tag{4.48}$$

4.4 Propriétés dynamique des micro-champs ioniques

On considère un plasma très agité (haute température) pour lequel , nous pouvons considérer que le mouvement des charges ioniques est quasiment relativiste . Lors du passage d'un ion relativiste de charge Q au voisinage d'un atome neutre , ce dernier ressent le champ électrique (la trajectoire de la charge Q est une droite parallèle à Ox) :

$$\begin{aligned}
E_x &= \frac{Q\Gamma (x - vt)}{[\Gamma^2 (x - vt)^2 + y^2 + z^2]^{3/2}} \\
E_y &= \frac{Q\Gamma y}{[\Gamma^2 (x - vt)^2 + y^2 + z^2]^{3/2}} \\
E_z &= \frac{Q\Gamma z}{[\Gamma^2 (x - vt)^2 + y^2 + z^2]^{3/2}}
\end{aligned} \tag{4.49}$$

4.5 Propriétés statique

On peut calculer la distribution de ce micro-champ statique ($t = 0$) :

$$\begin{aligned}
E_x(M) &= \frac{Q \Gamma x}{[\Gamma^2 x^2 + y^2 + z^2]^{3/2}} \\
E_y(M) &= \frac{Q \Gamma y}{[\Gamma^2 x^2 + y^2 + z^2]^{3/2}} \\
E_z(M) &= \frac{Q \Gamma z}{[\Gamma^2 x^2 + y^2 + z^2]^{3/2}}
\end{aligned} \tag{4.50}$$

Partons par une experssion standard de la distribution de micro- champs ionique dans un plasma :

$$W(\vec{\varepsilon}) = \langle \delta(\varepsilon_x - E_x) \delta(\varepsilon_y - E_y) \delta(\varepsilon_z - E_z) \rangle \quad (4.51)$$

où :

$$\delta(\varepsilon_x - E_x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp iu(\varepsilon_x - E_x) du$$

$$\delta(\varepsilon_y - E_y) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp iv(\varepsilon_y - E_y) dv$$

$$\delta(\varepsilon_z - E_z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp iw(\varepsilon_z - E_z) dw$$

Ce qui mène à écrire :

$$\begin{aligned} W(\vec{\varepsilon}) &= \left\langle \int_{-\infty}^{+\infty} \exp iu(\varepsilon_x - E_x) du \int_{-\infty}^{+\infty} \exp iv(\varepsilon_y - E_y) dv \int_{-\infty}^{+\infty} \exp iw(\varepsilon_z - E_z) dw \right\rangle \\ &= \left\langle \int_{-\infty}^{+\infty} \exp iu\varepsilon_x \exp(-iuE_x) du \int_{-\infty}^{+\infty} \exp iv\varepsilon_y \exp(-ivE_y) dv \int_{-\infty}^{+\infty} \exp iw\varepsilon_z \exp(-iwE_z) dw \right\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \exp iu\varepsilon_x du \int_{-\infty}^{+\infty} \exp iv\varepsilon_y dv \int_{-\infty}^{+\infty} \exp iw\varepsilon_z dw \langle \exp(-i(uE_x + vE_y + wE_z)) \rangle \\ &= \int d\vec{u} e^{i\vec{u} \cdot \vec{\varepsilon}} \langle e^{-i\vec{u} \cdot \vec{E}} \rangle \end{aligned}$$

où :

$$\langle e^{-i\vec{u} \cdot \vec{E}} \rangle = \frac{1}{Z} \int e^{-\beta H - i\vec{u} \cdot \vec{E}} d\Omega$$

$\beta = \frac{1}{k_B T}$: constante de Boltzman, H : est l'Hamiltonien de particule libre , Z : fonction de partition et $d\Omega$ est l'espace de phase :

$$W(\vec{\varepsilon}) = \int \int \int \int \int \int \int 4\pi V^2 dV e^{i\vec{u} \cdot \vec{\varepsilon}} e^{-\frac{mv^2}{2k_B T} - i[uE_x + vE_y + wE_z]} dudvdwdxdydz$$

Finalement, on obtient :

$$W(\vec{\varepsilon}) = \int \int \int \int \int \int \int 4\pi V^2 dV e^{i\vec{u} \cdot \vec{\varepsilon}} e^{-\frac{mv^2}{2k_B T} - i\left[u \frac{Q \Gamma_x}{[\Gamma^2 x^2 + y^2 + z^2]^{3/2}} + v \frac{Q \Gamma_y}{[\Gamma^2 x^2 + y^2 + z^2]^{3/2}} + w \frac{Q \Gamma_z}{[\Gamma^2 x^2 + y^2 + z^2]^{3/2}}\right]} dudvdwdxdydz \quad (4.52)$$

posons :

$$\begin{aligned} \Gamma_x &= X \\ \Gamma_y &= Y \\ \Gamma_z &= Z \end{aligned}$$

on trouve :

$$W(\vec{\varepsilon}) = \int \int \int \int \int \int \int \frac{4\pi V^2}{\Gamma^3} e^{i\vec{u} \cdot \vec{\varepsilon}} e^{-\frac{mv^2}{2k_B T} - i\left[u \frac{Q X}{[X^2 + \frac{Y^2}{\Gamma^2} + \frac{Z^2}{\Gamma^2}]^{3/2}} + v \frac{Q Y}{[X^2 + \frac{Y^2}{\Gamma^2} + \frac{Z^2}{\Gamma^2}]^{3/2}} + w \frac{Q Z}{[X^2 + \frac{Y^2}{\Gamma^2} + \frac{Z^2}{\Gamma^2}]^{3/2}}\right]} dudvdwdV dX dY dZ \quad (4.53)$$

Cette formule de distribution des micro-champs ioniques ne peut pas etre evalues

analytiquement , on doit faire appel au calcul numérique .

Bibliographie

- [1] David J.Griffiths;"Intoduction to Electrodynamics"; pretince hall , third edition ,1999 .
- [2] Mohamed Bendaoud; "Relativité Restreinte";Office des Publications Universitaires;2003.
- [3] M, Bendaoud;"Vibrations & Ondes"; T II O.P .U , Alger.

Conclusion générale

Notre travail s'articule autour de la modélisation des propriétés radiatives dans les plasmas. Comme le rayonnement est dû aux transitions quantiques de l'ensemble des ions et atomes formant le plasma, cette modélisation se développe dans le contexte de la mécanique quantique et de la mécanique statistique. Nous avons introduit une méthode alternative, qui peut prendre en compte l'effet dynamique des ions. Cette méthode est basée sur le formalisme de Feynman dit intégrale de chemins, qui traite les électrons et les ions comme des particules chargées se déplaçant sur des trajectoires classiques qui présente un avantage par rapport à l'approche hamiltonienne standard pour résoudre les problèmes dépendant du temps. La plus part des recherches actuels dans le domaine de la spectroscopie des plasmas se basent sur les outils de la mécanique quantique standard, et principalement sur la résolution numérique de l'équation de Schrödinger de l'émetteur du rayonnement.

Sachant que la plus part des élargissements des profils de raies sont dus aux perturbateurs voisins, donc il est généralement suffisant de garder que le premier terme du développement multipolaire de l'interaction connu sous le nom de l'approximation dipolaire électrique. Ce problème a été largement étudié en utilisant l'approche hamiltonienne au niveau de la mécanique quantique standard. Dans la plus part des travaux antérieurs sont limités au cas des ions lents. Dans ce mémoire, on s'intéresse au cas des ions rapides, et on calcule la distribution ionique des micro-champs dans un plasma chaud.

Dans la première partie de ce mémoire, nous avons introduit une méthode analytique équivalente à la méthode opératorielle de Schrödinger pour calculer les profils de raies.

Cette méthode est fondée sur le concept de l'intégrale de chemins de Richard Feynman en 1948. Il a énoncé que l'amplitude de transition entre deux états quantiques correspond à l'exponentiel de l'action classique en sommant sur tous les trajectoires possibles entre ces états.

Nous avons utilisé le formalisme de l'intégrale de chemins au calcul des profil de raie que nous avons testé sur le cas d'une raie simple de Lyman α sans structure fine. 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. Le formalisme de l'intégrale de chemins est parfaitement applicable au calcul des profils de raies dans un plasma peu dense (idéal). Néanmoins, l'approche perturbative de l'intégrale de chemin est particulièrement utile quand l'énergie potentielle est petite devant l'énergie cinétique du système, autrement dit, cette méthode est valable que pour un plasma idéal.

Dans la deuxième partie, nous avons calculé la fonction d'auto-corrélation dipolaire électrique en terme du formalisme de l'intégrale de chemins, mais le calcul de la raie Lyman alpha se passe par une dérivation de la distribution des micro-champs ioniques.

Appendice A : L'espace de Liouville

L'espace de liouville L est defini comme le produit tensoriel de l'espace de Hilbert H et son dual H^d :

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

les vecteurs de base de cet espace , notés $|if\rangle\rangle$, sont les dyades $|i\rangle\langle f|$ construites à partir d'une base complète de H . On définit sur L le produit scalaire :

$$\langle\langle if | i' f' \rangle\rangle = \langle i | i' \rangle \langle f | f' \rangle^* \quad (\text{A.2})$$

On définit le vecteur A dans l'espace L comme suit :

$$|A\rangle\rangle = \sum_{i,f} \langle i | A | f \rangle |if\rangle\rangle \quad (\text{A.3})$$

On en déduit d'après la définition du produit scalaire :

$$\langle\langle A | = \sum_{i,f} \langle i | A | f \rangle^* \langle if | \quad (\text{A.4})$$

Dans cet espace L , la trace d'un opérateur Q est telle que :

$$Tr \{Q\} = \sum_g \langle\langle gg | Q \rangle\rangle \quad (\text{A.5})$$

La trace d'un produit d'opérateurs Q par S est alors :

$$Tr \{QS\} = \langle\langle S^+ | Q \rangle\rangle \quad (\text{A.6})$$

Appliqué à notre cas, on passe de l'expression de la fonction d'autocorrélation du dipole sous forme de trace à son expression dans l'espace de Liouville de la façon suivante :

$$C(t) = Tr \left\{ \vec{d}(0) \vec{d}(t) \right\} = \left\langle\langle \vec{d}^+(0) | \vec{d}(t) \rangle\rangle \quad (\text{A.7})$$

$$C(t) = \left\langle \left\langle \vec{d}^+ | \{U(t)\} | \vec{d} \right\rangle \right\rangle \quad (\text{A.8})$$

Où $U(t)$ est l'opérateur d'évolution dans l'espace de Liouville.

Un opérateur P de la base de Liouville est défini à partir de l'opérateur p de la base de Hilbert de la façon suivante :

$$P = p \otimes I^+ - I \otimes p^+ \quad (\text{A.9})$$

de sorte que le Liouvillien est défini à partir de l'Hamiltonien $H (= H^+)$:

$$L = \frac{1}{\hbar} (H \otimes I^+ - I \otimes H^+) \quad (\text{A.10})$$

إن إيجاد خطوط الطيف يتطلب معرفة دالة الترابط لثنائي القطب الكهربائي، لذلك قمنا في هذا العمل باستعمال تكامل المسارات للحصول على عبارة دالة الترابط لثنائي القطب المتعلقة بدوال التوزيع للحقل الكهربائي من أجل خط ليمان ثم حاولنا حساب دالة الترابط للتوزيع للحقول الكهربائية وذلك باستخدام الميكانيك الإحصائي وباستخدام دالة التوزيع للحقول الكهربائية للأيونات .

الكلمات المفتاحية: □□□□□ □□□□□ - خطوط الطيف - تعريض ستارك - تكامل □□□□□ - دالة توزيع الحقول الكهربائية

Résumé :

Le calcul des profils de raies dans les plasmas passe par la connaissance de la fonction d'auto-corrélation dipolaire électrique qui dépend de la fonction de distribution des micro-champs électrique.

Pour la raie Lyman, nous avons calculé la fonction d'auto-corrélation dipolaire par le formalisme de l'intégrale de chemins puis, nous avons tenté au calcul de fonction de distribution des micro-champ en utilisant la mécanique statistique et le mouvement relativiste des ions.

Mots clés :

Plasma chaud, profils de raies, Elargissement Stark, Intégrale de chemins, Fonction de distribution des micro-champs ioniques.

Abstract :

Calculating spectral line shapes in plasmas needs the knowledge of the time dipolar auto-correlation function, so; we used path integral method. Finally obtained an expression for dipolar auto-correlation function that depends on a distribution of ionic micro-fields. We calculated this distribution using some basics of statistical mechanics and retaining the relativistic movement of ions.

Key word :

Hot plasma, Spectral line shapes, Stark broadening, Path integrals, Micro-field distribution function.