



Université d'Aix-Marseille

Ecole doctorale de physique et sciences de la matière

Thèse pour obtenir le grade de docteur de l'université d'Aix-Marseille

Présentée par

Denis BOLAND

Contributions au formalisme de l'élargissement Stark
des profils de raies

Soutenance prévue le 16 Mars 2012 devant le jury composé de :

Magdalena CHRISTOVA
Tayeb MEFTAH
Hubert CAPES
Milan DIMITRIJEVIC
Laurence GODBERT-MOURET
Roland STAMM

Rapporteur
Rapporteur

Directeur de thèse

Contributions au formalisme de l'élargissement
Stark des profils de raies

Denis Boland

11 avril 2012

Remerciements

Ma gratitude, envers toutes celles et ceux qui m'ont permis de mener ce travail à bien, est une émotion d'une rare intensité.

Mes remerciements s'adressent en tout premier lieu à mon proche entourage, qui a enduré l'isolement qui m'était nécessaire pour travailler, alors que déjà j'étais peu disponible, pris par de nombreuses autres responsabilités, et qui a concédé d'importants sacrifices pour me faciliter la tâche, avec une remarquable abnégation, et une conviction chaleureuse et bénéfique pour m'apporter un complément de courage bienvenu. Ma persévérance a puisé sa source dans le réconfort, le soutien et l'affection des femmes de ma vie, Josiane, Muriel et Sylvie, de mes filles Noémie et Héloïse aux sourires réjouissants et vivifiants, et de mes amis chers et indispensables, Philippe, Jean-Pierre et tant d'autres.

Avec une infinie reconnaissance, je suis aussi très heureux de remercier Roland Stamm, mon Directeur de thèse, qui a su composer avec les aspects tellement baroques de ma personnalité (ce dont j'ai bien conscience qu'il s'agit d'un authentique exploit), ainsi qu'avec cette grâce divine qui, dans un incomparable acharnement, s'est manifestement appliquée à me compliquer la vie d'une myriade d'événements funestes, mais aussi parfois heureux, qui sans cesse perturbaient mon travail de recherche. Le soutien moral de Roland et sa compréhension m'ont considérablement aidé à faire face à cette adversité. Son extraordinaire humanité et sa volonté indéfectible de conduire vers la réussite les personnes qu'il prend sous son aile expérimentée, avec un goût incomparable pour la transmission de ses connaissances dont j'avais pu déjà savourer toute la brillance, ne sont pas ses moindres qualités.

Tout aussi bien, je ressens une immense gratitude envers les membres de l'équipe DGP (Diagnostics dans les Gaz et Plasmas), qui m'ont accompagné toutes ces années, m'apportant immédiatement et à la moindre demande les éclairages qui pou-

vaient m'être nécessaires pour surmonter les difficultés théoriques que je ne pouvais pas manquer de rencontrer. Tout spécialement Hubert Capes, qui oeuvre avec un plaisir manifeste pour communiquer son expertise en matière de modélisation statistique des plasmas et de l'évolution de leurs propriétés, jonglant avec les échelles d'espace et de temps pour en tirer les précieux renseignements que cette science rend accessibles. Mais aussi Joël Rosato, dont la fraîche et intense curiosité scientifique m'a souvent permis de mieux appréhender quelques concepts pointus de la mécanique quantique, en profitant de son sens inné de la pédagogie, dont je suis bien persuadé qu'il va continuer de le développer au contact des étudiants dont il a la charge.

Enfin, mes pensées chaleureuses vont aussi vers les membres de l'équipe CIML (Confinement d'Ions et Manipulations Laser), qui m'avaient accueilli lors de mon stage de M2, et dont la rigueur et la performance expérimentale au quotidien m'avaient encouragé à poursuivre ma trajectoire en physique des rayonnements et plasmas, en particulier Caroline Champenois, dont la patience et la passion n'ont eu d'égal que sa gentillesse et sa disponibilité.

Table des matières

1	Raies spectrales des plasmas avec effet Stark	11
1.1	Un peu d'Histoire	11
1.2	Elargissement du profil de raie et diagnostic	13
1.2.1	La largeur naturelle	14
1.2.2	L'effet Doppler	14
1.2.3	L'élargissement collisionnel	15
1.2.4	Perturbations électrique et magnétique	17
1.3	Le modèle quantique du profil de raie	17
1.4	Elargissement par effet Stark	19
1.5	Approximation statique	23
1.6	Approximation d'impact	24
2	Formalisme de l'intégrale de chemin appliqué à l'effet Stark	29
2.1	Intégrale de chemin en mécanique quantique	29
2.1.1	Justification physique de l'approche par intégrale de chemin	29
2.1.2	La construction du propagateur	31
2.2	Fonction d'autocorrélation dipolaire	33
2.3	Application à trois régimes d'effet Stark	38
2.3.1	Approximation d'impact	39
2.3.2	Approximation statique	40
2.3.3	Dynamique des ions	40
3	Calcul numérique et étude du rôle de la chronologie	45
3.1	Opérateur d'évolution et série de Dyson	45
3.2	Discrétisation de l'équation de Schrödinger	48

3.3	Matrice de la perturbation $V(t)$	48
3.4	Calcul de l'autocorrélation sans chronologie	51
3.5	Calculs avec champ constant en module et en direction	53
3.6	Calculs avec champ tournant	53
3.7	Calculs avec champ produit par une collision	61
4	Modélisation stochastique du microchamp	67
4.1	Modélisation stochastique	68
4.2	Le processus “kangourou” au sens de Frisch et Brissaud	73
4.3	Processus CTRW (marche au hasard en temps continu)	75
4.4	Effet Stark et CTRW	79
4.5	Processus CTRW séparable	84
4.6	Calcul numérique de l'effet Stark avec loi exponentielle pour le temps d'attente entre deux sauts	86
4.7	Transformée de Laplace de l'opérateur d'évolution	89
4.8	Profils obtenus par calcul numérique	91
5	Simulation de processus stochastiques	95
5.1	Construction d'une histoire de champ électrique	95
5.2	Résultats et comparaisons	96
	Bibliographie	101

Introduction

A la fin du XVII^{ème} siècle, Isaac Newton constate que lorsqu'une source lumineuse blanche traverse un prisme et que l'on place un écran devant, il apparaît toute une palette de couleurs, semblable aux arc-en-ciel : la lumière apparaît comme un mélange de ces couleurs, que le prisme parvient à séparer, permettant ainsi de les distinguer et même de mesurer l'importance relative de chacune. C'est l'acte de naissance de la spectroscopie.

Thomas Young, un siècle plus tard, démontre avec sa célèbre expérience des franges d'interférence que la lumière a un comportement ondulatoire, et que chaque couleur correspond à une longueur d'onde bien précise. Puis, au début du XIX^{ème} siècle, William Wollaston s'aperçoit qu'il existe des "absences" dans la lumière provenant du soleil, dont Joseph Fraunhofer étudie le spectre à son tour aussi précisément que possible à son époque, et de quelques autres étoiles. Il remarque qu'une double raie bien déterminée est présente à la fois dans le rayonnement solaire et dans la flamme du sodium : il semble possible d'identifier la matière à la source d'un rayonnement. Il constatera ainsi que de nombreuses raies sont communes avec le fer, et on croira un temps que le soleil est principalement constitué de fer en fusion.

Le 18 août 1868, à l'occasion d'une éclipse solaire, de nombreux astronomes, dont surtout le français Jules Janssen, découvrent dans son rayonnement des raies ne correspondant à aucun élément chimique connu sur Terre : en référence au mot grec "helios" (soleil), l'astronome Norman Lockyer et le chimiste Edward Frankland, tous deux anglais, le baptisent du nom d'hélium, dont Luigi Palmieri prouvera en 1882 qu'il existe bel et bien sur Terre aussi.

La grande idée de Max Planck, selon laquelle l'énergie était quantifiée, ne pouvant prendre que des valeurs discrètes et non continues, et qui finit rapidement par donner naissance à la mécanique quantique, permettra enfin de comprendre que ce sont les

propriétés atomiques, et leurs perturbations, qui engendrent la lumière que nous observons. La lumière est alors devenue un instrument de compréhension de l'atome, au moment même où la démonstration de l'existence de ce dernier fut définitivement établie, avec les rayons cathodiques de Joseph John Thomson (preuve de l'existence des électrons) et le bombardement alpha de feuilles d'or par Ernest Rutherford (preuve de l'existence des noyaux positifs).

Mais la lumière n'a bien sûr pas seulement permis d'identifier les éléments de matière dans les milieux chauds, et surtout les plasmas, permettant d'en connaître les variables thermodynamiques intensives (pression, densité, température, etc.). Elle 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. De nos jours, les raies spectroscopiques ayant une certaine largeur et une forme qui renseignent sur les conditions physiques des atomes émetteurs, leur mesure et leur modélisation sont devenues des enjeux majeurs de la compréhension des phénomènes physiques.

L'existence de l'atome, inaccessible directement à l'oeil, n'a pu être découverte que par l'acharnement intellectuel de l'être humain à vouloir comprendre la Nature. Sa structure intime a exigé davantage d'efforts encore, puisque seule la construction d'une théorie abstraite, très loin de l'intuition que nous procure le monde macroscopique, a permis de le décrire si bien qu'on est devenu capable de prédire valablement son comportement physique. Comment pouvons-nous confirmer et nous persuader de la validité de nos prévisions ? Essentiellement par l'examen minutieux de la langue de l'atome : la lumière qu'il émet. Pour interpréter celle-ci, un modèle fut introduit par Erwin Schrödinger en 1925, une équation d'onde qui porte son nom, et qui décrit l'évolution dans le temps de l'état de l'atome. La résolution de cette équation conduit à la détermination des différents niveaux d'énergie possibles pour le système atomique de l'hydrogène, un proton en interaction avec un électron. Lorsque, pour une raison quelconque, l'atome évolue depuis un certain état d'énergie plus élevée que celle dite fondamentale (minimale, en fait), vers un état d'énergie moins élevée, il émet un photon qui correspond remarquablement bien aux prévisions obtenues par la résolution de l'équation de Schrödinger, ce qui rend ce modèle très convaincant, et a permis sa reconnaissance universelle.

Que se passe-t-il précisément dans l'intimité d'un changement d'état d'énergie atomique ? La mécanique classique nous conduirait à penser que l'électron, étant soumis à l'accélération centripète de son orbite autour du proton, devrait rayonner de l'énergie, et consécutivement voir sa quantité diminuer, pour finir par rejoindre le proton attracteur, ce qui ne se produit pourtant jamais. De plus, les photons émis par un atome d'hydrogène et effectivement observés sont conformes au spectre discontinu prévu par l'équation de Schrödinger : l'énergie émise est quantifiée. D'autre part, seul un atome excité, c'est-à-dire dans un état d'énergie supérieure à celle de son état fondamental, est susceptible d'émettre un photon. L'atome en état fondamental ne rayonne pas, ce qui est contradictoire avec la mécanique classique. On considère cependant l'atome comme un oscillateur électromagnétique, qui rayonne continuellement mais à une fréquence déterminée, en assimilant le système proton-électron à un dipôle oscillant. Loin de ce système par rapport à ses dimensions, tout se passe comme si effectivement le mouvement de l'électron était purement longitudinal, et le dipôle oscillant correspondant rayonne alors dans tout l'espace environnant. La mécanique quantique, quant à elle, ne nous permet que très difficilement de percevoir directement et expérimentalement le détail de la transition atomique, même si de récentes recherches commencent à fournir des espoirs en ce sens. Il existe un aspect de la réalité physique qui ne sera pas considéré dans le cadre du travail présenté : la "structure fine". Il s'agit de groupes de raies très proches entre elles, pour les transitions, qui sont principalement le résultat des interactions entre les différents moments magnétiques, et qui leur procurent une explication satisfaisante.

Alors que la théorie prévoit, dans un milieu très dilué et froid, des raies d'une très grande finesse (dispersion infime autour de la fréquence centrale), cependant non nulle compte-tenu de la largeur dite naturelle, 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.

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

sence du champ électrique engendré par les perturbateurs, ions et électrons, qui entraîne un couplage entre niveaux d'énergie qu'on appelle effet Stark [1]. 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, qui n'est pas étudié dans le travail présenté. 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[2], 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 ? Quel est le rôle de la chronologie (non commutation de l'opérateur d'évolution à deux instants distincts) et de sa prise en compte ou non ? Existe-t-il un moyen de mieux représenter l'évolution du microchamp électrique en rendant possible l'emploi de distributions statistiques quelconques décrivant les temps d'attentes entre deux valeurs distinctes du microchamp ? Cette thèse est une exploration des réponses à ces questions, dans le cadre de l'effet Stark pour la raie Lyman- α de l'hydrogène, et recherche dans les diffé-

rentes approches théoriques examinées les éventuelles sources de désaccord entre les élargissements de raies.

Chapitre 1

Raies spectrales des plasmas avec effet Stark

1.1 Un peu d'Histoire

Les premières tentatives de modélisation des élargissements de profils de raies sont dues à H.A. Lorentz [3], dont l'approche, à l'aune de la mécanique classique, consistait à envisager des collisions inélastiques comme responsables d'une interruption soudaine du rayonnement d'un atome émetteur. Ce modèle montrait déjà une relation claire entre la fréquence de ces collisions et la largeur de la raie observée, permettant le diagnostic de la densité du milieu. Ces premiers développements conviennent pour des plasmas à faible densité, cinétiques, où le temps entre deux collisions est grand devant celui que dure la perturbation de l'une d'elles. A cette époque, on montre que le spectre de l'émission, qui détermine le profil de raie, s'obtient par la transformée de Fourier de la fonction d'autocorrélation de l'onde. En effet, considérant une fonction d'onde classique du type :

$$f(\omega, \vec{r}) = \exp\left(\vec{k} \cdot \vec{r} + \omega t\right) \quad (1.1)$$

où ω est la pulsation, $\vec{k}$ le vecteur d'onde, on peut écrire sa fonction d'autocorrélation telle que :

$$\phi(s) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} f^*(t) f(t+s) dt \quad (1.2)$$

Or, l'intensité lumineuse correspondant à une fréquence prise isolément, s'écrit :

$$I(\omega) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi T} \left\| \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} f(t) e^{-i\omega t} dt \right\|^2 \quad (1.3)$$

Le carré de la norme de la fonction, c'est aussi le produit de la fonction par son conjugué, on peut alors récrire :

$$I(\omega) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi T} \left\{ \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} f^*(t) e^{i\omega t} dt \right\} \left\{ \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} f(t') e^{-i\omega t'} dt' \right\} \quad (1.4)$$

On procède maintenant à un changement de variable, avec : $t' = t + s$. L'expression de $I(\omega)$ devient :

$$I(\omega) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi T} \left\{ \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} f^*(t) e^{i\omega t} dt \right\} \left\{ \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} f(t+s) e^{-i\omega(t+s)} ds \right\} \quad (1.5)$$

En remarquant que : $e^{i\omega t} e^{-i\omega t} = 1$ en écrivant le produit des intégrales comme une intégrale double, on obtient :

$$I(\omega) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi T} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} f^*(t) f(t+s) e^{-i\omega s} dt ds \quad (1.6)$$

On sépare de nouveau les intégrations :

$$I(\omega) = \lim_{T \rightarrow \infty} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} ds \frac{e^{-i\omega s}}{2\pi T} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} f^*(t) f(t+s) dt \quad (1.7)$$

Ce qui fait apparaître en fin de compte une transformée de Fourier de la fonction d'autocorrélation $\phi(s)$:

$$I(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega s} ds \phi(s) \quad (1.8)$$

Par la suite, la contribution des collisions élastiques a été mise en évidence, considérant cette fois qu'une particule perturbatrice pouvait entraîner un déphasage du

train d'onde, enrichissant ainsi le spectre de l'émission, comme l'ont montré Lenz [4] et Weisskopf [5]. Mais une trentaine d'années plus tard, afin d'améliorer la précision des prédictions des formes de raies, de nouveaux modèles prenant en compte le caractère quantique de l'atome émetteur, tout en conservant pour les perturbateurs la notion de trajectoire (approche semi-classique), voient le jour, établis par les travaux d'Alan Kolb et Hans Griem [6]. Peu après, Michel Baranger apporte ses propres contributions à cette démarche, et ajoute un traitement quantique pour les perturbateurs également [7, 8, 9].

1.2 Elargissement du profil de raie et diagnostic

Le plasma, ce “quatrième” état de la matière, que l'on n'observe sur Terre que lorsque de hautes températures le rendent possible, est le constituant des étoiles, et la matière condensée ne représente qu'une infime proportion de la quantité de matière recensée dans l'univers visible. Par l'étude attentive du rayonnement stellaire, on a pu apprendre une quantité impressionnante d'informations sur leur constitution, leur dynamique, leur évolution, et bien d'autres propriétés. Sur Terre, les plasmas sont toujours artificiels, à l'exception de rares phénomènes naturels, comme la foudre, où la haute atmosphère. Cependant, les plasmas trouvent chaque jour des applications dans tous les domaines, industriel, énergétique, médical, etc. C'est notamment le cas dans la tentative internationale ITER de produire et contrôler une réaction de fusion thermonucléaire pour remplacer la production électrique obtenue par les centrales thermiques classiques, par de futurs réacteurs consommant un mélange d'hélium et de tritium, isotope de l'hydrogène. L'hélium est disponible en abondance, et le tritium s'obtient à volonté, en quantités virtuellement inépuisables sur Terre, d'où l'intérêt pour réussir à pallier l'épuisement des ressources pétrolières. Afin de contrôler les premiers réacteurs expérimentaux, il est devenu essentiel de pouvoir interpréter le plus correctement possible la lumière émise par les plasmas qu'ils contiennent, afin d'établir précisément le diagnostic des conditions physiques (notamment la température et la densité), et ainsi pouvoir contrôler l'évolution du système et son efficacité. En effet, l'étude fine d'un profil de raie, à partir de modèles appropriés, fournit les renseignements nécessaires, par l'interprétation judicieuse des causes d'élargissement.

1.2.1 La largeur naturelle

En l'absence de toute perturbation, un atome excité retourne à son état fondamental lorsque la durée de vie de son excitation s'achève “naturellement”, cet événement pouvant survenir selon une certaine dispersion statistique en temps, et donc en longueur d'onde également, de sorte que la raie d'émission correspondante possède une largeur, très fine comparée à d'autres sources d'élargissement, mais bien déterminée : la largeur naturelle. Celle-ci trouve sa source dans la relation d'incertitude de Werner Heisenberg, qui lie le sort de la durée de vie de l'état excité avec son énergie :

$$\Delta E \cdot \Delta \tau \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1.9)$$

où $\Delta \tau$ représente la durée de vie de l'état excité, dont la valeur n'est pas absolument fixe, et varie avec une certaine amplitude. Ces très légères variations entraînent de part la relation d'incertitude une certaine largeur également en énergie ΔE , au moment de la désexcitation (et donc en nombre d'onde, en longueur d'onde, etc). Cela étant, l'élargissement que ce phénomène apporte à la raie spectrale est généralement infime devant les autres causes que nous allons aborder plus loin (en particulier l'effet Doppler), et demeure de l'ordre du dix millième d'angström, pour les premières raies permises de l'hydrogène. La contribution de la largeur naturelle s'exprime sous une forme lorentzienne (conséquence d'un processus d'extinction dont le temps d'attente suit une loi exponentielle), mais demeure presque imperceptible pour les instruments de mesure, du fait de son extrême finesse et de son masquage par les autres sources d'élargissement.

1.2.2 L'effet Doppler

Le mouvement des atomes se compose avec la longueur d'onde des photons qu'ils émettent, qui sont donc soumis à l'effet Doppler. De la même façon qu'un véhicule émettant une fréquence sonore fixe et bien déterminée nous semble avancer vers nous avec un son plus aigu, alors que lorsqu'il s'éloigne le même son paraît plus grave (ce qui est effectivement le cas : sa longueur d'onde s'allonge réellement pour l'observateur se trouvant dans un référentiel fixe), les atomes émetteurs, selon le

module et la direction de leurs vitesses, donnent à percevoir des photons à longueur d'onde considérablement distribuée. Lorsqu'un photon provient d'un atome dont le mouvement est dirigé vers l'instrument de mesure, sa longueur d'onde est raccourcie, et sa fréquence est décalée dans le sens supérieur : vers le bleu, lorsque le photon appartient au domaine visible. En revanche, si l'atome s'éloigne, la longueur d'onde d'un photon émis s'allonge, et la fréquence est décalée dans le sens inférieur : vers le rouge, pour un photon visible (ainsi on sait que les galaxies s'éloignent les unes des autres : plus on observe loin, plus leur lumière est décalée vers le rouge, ce qui conduit les cosmologistes à concevoir notre univers comme un modèle en constante expansion). Les effets de l'élargissement Doppler sur les profils de raie sont le plus souvent dominants, ce qui gêne l'interprétation des mesures concernant les autres effets, mais sont cependant d'un secours précieux pour estimer la température d'un milieu. Ceci provient de la relation directe entre la température (donc la distribution des vitesses) et la largeur Doppler, comme le montre l'expression de cette contribution au profil :

$$\frac{I(\Delta\omega)}{I_0} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\Delta\omega_0} \exp - \left(\frac{\Delta\omega}{\Delta\omega_0} \right)^2 \quad (1.10)$$

où I_0 est l'intensité maximale de la raie, ω_0 est la fréquence centrale de celle-ci (transition), et où :

$$\Delta\omega_0 = \omega_0 \frac{v_0}{c} \quad (1.11)$$

est la largeur Doppler. La vitesse moyenne v_0 est telle que $v_0^2 = \frac{2kT}{m}$ avec T la température, m la masse des atomes considérés, et k la constante de Boltzmann, c étant la vitesse de la lumière. La mesure de l'élargissement Doppler procure donc un bon diagnostic de la température du milieu, puisque les autres grandeurs sont des constantes, et sont connues.

1.2.3 L'élargissement collisionnel

Dans les premiers temps de la modélisation des profils de raie, Lorentz [3] a proposé un modèle dans lequel les atomes sont considérés comme des oscillateurs émettant des trains d'ondes, qu'une particule passant dans son voisinage interrompt

par une collision. Adoptant une approche statistique, faisant intervenir un intervalle de temps moyen entre collisions, et considérant que celles-ci sont statistiquement indépendantes, on aboutit à une loi de probabilité de collision en loi exponentielle, telle que :

$$W(t) = \frac{1}{\tau} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \quad (1.12)$$

où τ est le temps moyen entre deux collisions. Pour un train d'onde d'une durée T , après transformée de Fourier, on en déduit le spectre pour un oscillateur unique, en intégrant de 0 à T :

$$F(\omega, T) = \frac{[\exp i(\omega_0 - \omega)T] - 1}{i(\omega_0 - \omega)} \quad (1.13)$$

puis le spectre d'énergie :

$$E(\omega, T) = \frac{1}{2\pi} F^*(\omega, T) F(\omega, T) = \frac{1}{2\pi} \frac{[e^{-i(\omega_0 - \omega)T} - 1][e^{i(\omega_0 - \omega)T} - 1]}{(\omega_0 - \omega)^2} \quad (1.14)$$

qu'il faut maintenant moyenner, T appartenant à la distribution dont la loi est 1.12 que l'on utilise pour calculer cette moyenne, et finalement, il vient :

$$I(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\frac{1}{\tau}}{\frac{1}{\tau^2} + \Omega^2} \quad (1.15)$$

avec $\Omega = \omega - \omega_0$. Ce type de profil, qui varie comme l'inverse d'un carré prend le nom de lorentzienne, en hommage au travail du physicien. Les ailes d'un tel profil sont nettement plus larges (les pentes de décroissance sont bien plus douces) que celles d'une gaussienne. L'interprétation de leur contribution au profil complet d'une raie spectrale permet d'apprécier la densité du milieu, car il existe une relation entre la section efficace de perturbation, et la durée de l'émission du train d'onde (puisque'il est interrompu par une perturbation) [10].

Un élargissement de profil de raie résultant de la combinaison d'un profil de type gaussien (par exemple un effet Doppler) avec un profil de type lorentzien (collisionnel) aboutit à une forme caractéristique qu'on appelle profil de Voigt.

1.2.4 Perturbations électrique et magnétique

Constitués de charges électriques en mouvement, noyau positif et électrons, les atomes sont le siège de moments dipolaires électriques et magnétiques. Dès lors, en présence d'un champ électrique ou magnétique, ces moments sont soumis à des forces de Coulomb et de Lorentz, avec qui l'interaction va avoir pour conséquence de perturber l'équilibre énergétique des atomes : les niveaux d'énergie sont modifiés, et les émissions de photons vont avoir lieu selon des fréquences également modifiées. Lorsque l'on considère la seule influence d'un champ électrique, on qualifie le phénomène d'effet Stark, et c'est le cadre de travail de cette thèse, car les intensités de ce type de champ sont couramment fortes dans les plasmas de laboratoire, en particulier ceux obtenus par décharge électrique provoquant l'ionisation des atomes du milieu soumis à la différence de potentiel.

Quand le type de champ à l'oeuvre est magnétique, comme c'est le cas des dispositifs à confinement destinés à explorer les possibilités de fusion thermonucléaire, contrôlée ou non, l'effet sur l'atome prend le nom de Zeeman. Ce dernier n'est pas considéré dans l'ensemble des travaux présentés ici, non plus que la structure fine dont la présence s'explique par les interactions entre les moments magnétiques caractérisant l'atome et son noyau.

1.3 Le modèle quantique du profil de raie

Comme déjà évoqué, les premiers développements de la spectroscopie des plasmas ont été formalisés initialement par Lorentz [3], en se fondant sur des considérations de physique classique faisant intervenir des collisions uniquement binaires dans des milieux très dilués, donnant son nom à l'équation de profil qui porte son nom et décrivant déjà avec une bonne approximation un profil de raie élargi.

Par la suite, soit un peu plus d'un demi-siècle plus tard, Baranger [7], Griem, Kolb et Shen [6] ont établi des descriptions beaucoup plus fines de la réalité en se fondant sur l'exploitation de la description quantique d'un atome émetteur, mais aussi en affinant la modélisation de la statistique décrivant un grand nombre de particules en interaction. En effet, comme il ne serait pas raisonnable d'espérer décrire le comportement individuel de chacun des atomes, ions, et électrons constituant un

milieu plasma, il est nécessaire de disposer d'un modèle statistique aussi réaliste que possible.

Les spécialistes qui se sont penchés sur les profils de raies avec une approche totalement quantique, en particulier Baranger, abordent tous le formalisme suivant un modèle global. Il ne serait pas raisonnable de considérer chacun des corps présents dans un plasma, en nombre bien trop grand. L'approche adoptée consiste par conséquent à considérer un atome émetteur comme plongé dans un milieu représenté par des grandeurs statistiques qui le caractérisent, émetteur et milieu ambiant formant un système quantique unique, avec ses états propres et leurs niveaux d'énergies correspondants, des transitions entre eux étant la source des rayonnements que l'on peut mesurer. Pour une raie d'émission correspondant à une transition entre un état α et un état β , on montre que la puissance émise s'écrit :

$$P_{\alpha \rightarrow \beta} = \frac{4\omega_{\alpha\beta}^4}{3c^3} |\langle \beta | \vec{d} | \alpha \rangle|^2 \quad (1.16)$$

Dans cette expression, $\vec{d}$ représente le moment dipolaire du système quantique, et la fréquence $\omega_{\alpha\beta} = \frac{E_\alpha - E_\beta}{\hbar}$ est celle de la transition envisagée. La puissance totale, correspondant à l'ensemble des transitions possibles, est la somme des contributions de chacune, en faisant la moyenne sur tous les états initiaux, ce qui s'écrit :

$$P(\omega) = \frac{4}{3c^3} \sum_{\alpha\beta} \omega_{\alpha\beta}^4 |\langle \beta | \vec{d} | \alpha \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{\alpha\beta}) \rho_\alpha$$

où δ est la distribution de Dirac, et ρ_α est la matrice densité de probabilité pour l'état initial α . Le profil de la raie d'émission est donné par la sommation telle que :

$$L(\omega) = \sum_{\alpha\beta} |\langle \beta | \vec{d} | \alpha \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{\alpha\beta}) \rho_\alpha \quad (1.17)$$

La transformée de Fourier de ce spectre de fréquences s'écrit :

$$C(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} L(\omega) \exp(-i\omega t) d\omega \quad (1.18)$$

En substituant $L(\omega)$ par son expression telle qu'en 1.17, cette transformée s'écrit maintenant :

$$C(t) = \sum_{\alpha\beta} | \langle \beta | \vec{d} | \alpha \rangle |^2 \exp(-i\omega_{\alpha\beta}t) \rho_{\alpha} \quad (1.19)$$

La connaissance de cette fonction $C(t)$ permet donc de revenir au profil de raie, en prenant sa transformée de Fourier :

$$L(\omega) = \frac{1}{\pi} \Re \int_0^{+\infty} C(t) \exp(i\omega t) dt \quad (1.20)$$

On peut transformer l'expression de $C(t)$ de la façon suivante :

$$C(t) = \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | \vec{d} | \beta \rangle \exp\left(\frac{iE_{\beta}t}{\hbar}\right) \langle \beta | \vec{d} | \alpha \rangle \exp\left(\frac{-iE_{\alpha}t}{\hbar}\right) \rho_{\alpha} \quad (1.21)$$

A ce stade, on introduit l'opérateur d'évolution $U(t) = \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right)$ du système quantique, dont l'hamiltonien est H , et on obtient :

$$C(t) = Tr \left[\vec{d} U^{\dagger}(t) \vec{d} U(t) \rho \right] \quad (1.22)$$

En remarquant que $U^{\dagger}(t) \vec{d} U(t) = \vec{d}(t)$, opérateur moment dipolaire, on aboutit à :

$$C(t) = Tr \left[\vec{d}(0) . \vec{d}(t) \rho \right] \quad (1.23)$$

La fonction $C(t)$ est donc la fonction d'autocorrélation dipolaire de l'intensité de l'émission lumineuse.

1.4 Elargissement par effet Stark

On choisit de supposer que l'interaction entre le champ électrique dans lequel baigne l'atome émetteur, et le moment dipolaire de ce dernier peut être considérée comme une perturbation de son état énergétique. L'approximation dipolaire est justifiée tant que l'on estime que la grande majorité des variations du champ électrique a pour origine des "collisions" avec des particules chargées dont les trajectoires se situent à des distances grandes vis-à-vis de la longueur d'onde de De Broglie, ce

qui justifie de traiter ces perturbateurs selon des trajectoires au sens classique. En revanche, on conserve un traitement quantique pour l'évolution de l'atome perturbé. L'énergie de l'atome d'hydrogène isolé peut être modélisée par un hamiltonien formé d'une contribution cinétique (classiquement, liée à la quantité de mouvement de l'électron), et d'une contribution potentielle (force de Coulomb d'attraction entre le noyau positif, et l'électron, de charge négative). En présence d'un champ électrique, la perturbation induite V s'écrit telle que :

$$V = -\vec{d} \cdot \vec{E} \quad (1.24)$$

soit l'interaction entre le moment dipolaire de l'atome (en se plaçant suffisamment loin de l'atome par rapport au rayon de Bohr, l'ensemble noyau plus électron peut valablement être vu comme un dipôle oscillant) et le champ électrique ambiant. Ce dernier est la résultante de toutes les contributions externes à l'atome, ions et électrons, du plasma dans lequel il baigne :

$$\vec{E} = \sum_i \frac{q_i}{4\pi\epsilon_0} \frac{\vec{r}_i}{r_i^3} \quad (1.25)$$

où q_i représente la charge électrique d'une particule chargée participant à la perturbation, et $\vec{r}_i$ est l'opérateur position qui lui correspond.

Debye a montré que seules les particules contenues dans un espace proche ont une influence significative, un effet d'écran se produisant au-delà d'une certaine distance qui définit une sphère autour de l'atome à l'intérieur de laquelle seul contribuent vraiment les perturbateurs qui s'y trouvent. Le rayon de cette sphère est la longueur de Debye :

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0 k T}{n e^2}} \quad (1.26)$$

où n est la densité, et k la constante de Boltzmann.

L'opérateur d'évolution atomique obéit à l'équation de Schrödinger, de sorte que l'on peut écrire :

$$i\hbar \frac{dU(t)}{dt} = (H_0 + V(t)) U(t) \quad (1.27)$$

Cet opérateur s'insère dans la fonction d'autocorrélation dipolaire, qui s'écrit alors :

$$C(t) = \left\{ Tr \left(\rho \vec{d} \cdot U^\dagger(t) \vec{d} U(t) \right) \right\}_{moy} \quad (1.28)$$

où ρ est l'opérateur densité des états de l'atome, supposé diagonal. La moyenne est faite sur les positions des perturbateurs considérés classiquement, en partant du principe qu'ils sont suffisamment éloignés de l'atome pour que le traitement quantique qui devrait s'appliquer en toute rigueur, puisse être remplacé par le modèle classique de trajectoire.

Le profil de raie s'obtient par la transformée de Fourier de la fonction d'autocorrélation, qui permet donc de passer au domaine spectral. Comme l'énergie est une grandeur uniquement réelle, $C(-t) = C^*(t)$, et l'intensité en fonction de la pulsation peut s'exprimer comme le double de l'intégration réalisée sur les seuls temps positifs, soit :

$$L(\omega) = \frac{1}{\pi} \Re \int_0^{+\infty} C(t) \exp(i\omega t) dt \quad (1.29)$$

L'essentiel du formalisme repose donc sur l'obtention de la fonction d'autocorrélation, dont se déduit le profil de raie. Celui-ci est la résultante des diverses transitions d'états $|\alpha\rangle$, $|\alpha'\rangle$, initiaux vers des états $|\beta\rangle$, $|\beta'\rangle$, finaux. Pour les raies qui nous intéressent ici, les écarts entre deux sous-niveaux initiaux ou deux sous-niveaux finaux sont petits devant les énergies des transitions $|\alpha\rangle \rightarrow |\beta\rangle$, de sorte que ces dernières peuvent être négligées et que les éléments de matrice du type $\langle \alpha | U(t) | \beta \rangle$ seront pris comme nuls. Dans ces conditions, l'équation 1.28 peut être réécrite tel que :

$$C(t) = \sum_{\alpha\alpha'\beta\beta'} \rho_{\alpha\alpha'} \vec{d}_{\alpha\beta} \cdot \vec{d}_{\alpha'\beta'}^* \{ U_{\alpha\alpha'}(t) U_{\beta\beta'}^*(t) \} \quad (1.30)$$

avec $\vec{d}_{\alpha\beta} = \langle \alpha | \vec{d} | \beta \rangle$, etc., pour les différents éléments de matrice. Cette expression requiert la connaissance de l'opérateur d'évolution tel qu'en 1.27 dans les deux espaces d'états, initial et final. L'espace de Liouville $\mathcal{L}$ mis à contribution par Fano [11], produit tensoriel entre un espace $\mathcal{H}$ d'états et son dual $\mathcal{H}^*$, permet de contour-

ner la difficulté d'un double calcul. Cet espace permet de considérer les opérateurs de l'espace de Hilbert comme des vecteurs, sur lesquels agissent des super-opérateurs, tel que $\hat{U}(t)$ qui agit sur l'opérateur densité dans $\mathcal{H}$, pris comme vecteur dans $\mathcal{L}$:

$$|\rho(t) \gg = \hat{U}(t) |\rho(0) \gg \quad (1.31)$$

qui obéit au correspondant de l'équation de Schrödinger dans l'espace de Liouville, pour lequel $\hat{L}$ est le liouvillien, correspondant de l'hamiltonien, et où $\hat{V}(t) = -\vec{d} \cdot \vec{E}$ est formé avec le super-opérateur moment dipolaire $\vec{d}$:

$$i \frac{d\hat{U}(t)}{dt} = \left(\hat{L} + \hat{V}(t) \right) \hat{U}(t) \quad (1.32)$$

C'est l'équation de Liouville. Un super-opérateur $\hat{L}$ agit ainsi sur un opérateur $|A \gg :$

$$\begin{aligned} \hat{L}|A \gg &= \frac{1}{\hbar} | [H, A] \gg \\ \hat{\vec{d}}(t) &= \frac{1}{\hbar} | [\vec{d}(t), A] \gg \end{aligned} \quad (1.33)$$

La correspondance entre les éléments de matrice du super-opérateur $\hat{U}(t)$ et l'opérateur $U(t)$ de $\mathcal{H}$ dont il est issu se fait selon l'expression :

$$\ll \alpha' \beta' | \hat{U}(t) | \alpha \beta \gg = U_{\alpha \alpha'}(t) U_{\beta \beta'}^*(t) \quad (1.34)$$

Avec ces nouveaux outils algébriques, la fonction d'autocorrélation s'exprime avec le super-opérateur d'évolution ainsi :

$$C(t) = \sum_{\alpha \alpha' \beta \beta'} \rho_{\alpha \alpha'} \vec{d}_{\alpha \beta} \cdot \vec{d}_{\alpha' \beta'}^* \left\{ \ll \alpha' \beta' | \hat{U}(t) | \alpha \beta \gg \right\} \quad (1.35)$$

L'espace de Liouville permet donc de n'avoir qu'une seule équation différentielle à résoudre, ce qui est de nature à procurer un gain de temps appréciable lors de calculs effectués par simulation sur ordinateur. Il reste à calibrer le temps pendant lequel les calculs doivent être menés pour être pertinents, autrement dit il faut encore déterminer le temps d'intérêt.

En vue d'y parvenir, et partant du principe que ce temps serait logiquement lié à la largeur du profil s'agissant de grandeurs conjuguées, on souhaite faire apparaître dans les expressions utiles la quantité $\Delta\omega = \omega - \omega_0$, écart à la pulsation centrale, au lieu d'une fonction de la pulsation sans référence. Dans ce but, on écrit :

$$\tilde{\hat{U}}(t) = \exp(i\hat{L}t) \hat{U}(t) \quad (1.36)$$

Ce nouveau super-opérateur d'évolution en représentation d'interaction obéit à l'équation de Liouville, telle que :

$$i \frac{d\tilde{\hat{U}}(t)}{dt} = \tilde{\hat{V}}(t) \tilde{\hat{U}}(t) \quad (1.37)$$

avec $\tilde{\hat{V}}(t) = \exp(i\hat{L}t) \hat{V}(t) \exp(-i\hat{L}t)$. Le profil de raie s'écrit alors :

$$L(\Delta\omega) = \frac{1}{\pi} \Re \int_0^{+\infty} \tilde{C}(t) \exp(i\Delta\omega t) dt \quad (1.38)$$

la fonction d'autocorrélation $\tilde{C}(t)$ s'écrivant quant à elle :

$$\tilde{C}(t) = \sum_{\alpha\alpha'\beta\beta'} \rho_{\alpha\alpha} \vec{d}_{\alpha\beta} \cdot \vec{d}_{\alpha'\beta'}^* \left\{ \ll \alpha'\beta' | \tilde{\hat{U}}(t) | \alpha\beta \gg \right\} \quad (1.39)$$

Dans la nouvelle expression du profil telle qu'en 1.38 on voit que le produit de la fonction de corrélation par le terme oscillant ne sera significatif que pour des temps plus petits que $\frac{2\pi}{|\Delta\omega|}$, ce qui permet de définir le temps d'intérêt pour la conduite des calculs numériques :

$$\tau_i = \frac{2\pi}{|\Delta\omega|} \quad (1.40)$$

1.5 Approximation statique

L'un des deux principaux cas physiques auxquels on s'intéresse dans ce travail est l'approximation statique. Elle consiste à considérer que, durant le temps caractéristique d'intérêt, le champ électrique environnant l'atome demeure pratiquement constant. Dans ce modèle, le temps d'intérêt est sensiblement plus long que celui

d'une collision, et c'est le comportement des ions perturbateurs qui détermine les effets constatés sur le profil. Avec un microchamp qui ne varie pas en fonction du temps dans l'équation de Liouville, on obtient les éléments de matrice du super-opérateur d'évolution avec l'expression :

$$\ll \alpha' \beta' | \tilde{U}(t) | \alpha \beta \gg = \ll \alpha' \beta' | \exp(i \tilde{d} \cdot \vec{E} t) | \alpha \beta \gg \quad (1.41)$$

Pour en calculer la moyenne statistique, il convient d'insérer la distribution de la probabilité $W(\vec{E})$ des valeurs prises par le champ initialement, puis moyenner sur l'ensemble de ses valeurs possibles :

$$\left\{ \ll \alpha' \beta' | \tilde{U}(t) | \alpha \beta \gg \right\} = \int W(\vec{E}) \ll \alpha' \beta' | \exp(i \tilde{d} \cdot \vec{E} t) | \alpha \beta \gg d^3 \vec{E} \quad (1.42)$$

La fonction de distribution des valeurs prises par le champ s'exprime :

$$W(\vec{E}) = \int \mathcal{P}(\vec{r}_1, \dots) \delta\left(\vec{E} - \sum_i \frac{q_i \vec{r}_i}{4\pi\epsilon_0 r_i^3}\right) d^3 \vec{r}_1 \dots \quad (1.43)$$

où $\mathcal{P}$ désigne la fonction de distribution des positions des particules. La détermination de la fonction de distribution des valeurs prises par le champ électrique est un élément essentiel de la modélisation, et de nombreux travaux en ont proposé différentes, dont en particulier Holtsmark [12] et Hooper [13, 14], et c'est cette dernière qui a été retenue pour les modélisations numériques fondées sur les processus stochastiques présentés plus loin.

1.6 Approximation d'impact

De l'autre côté du temps d'intérêt, on peut au contraire considérer des événements si rapides qu'il s'en produit un grand nombre pendant son écoulement, et que le champ électrique y varie très souvent. C'est notamment le cas lorsqu'au lieu de considérer les contributions des ions, on s'intéresse aux électrons, généralement beaucoup plus véloce puisque de masse beaucoup plus faible, de trois ordres de grandeur. Dans ce modèle, la durée des collisions (chaque fois complètement dérou-

lées) est assimilée à une perturbation très brève de durée t_c devant le temps qui sépare deux collisions successives, avec donc : $t_c \ll t_i$, qui s'écrit telle que :

$$t_c = \frac{r_0}{v_0} \quad (1.44)$$

où r_0 est la distance moyenne entre particules, et v_0 la vitesse thermique. Un travail devenu aujourd'hui une référence a été accompli par Griem, Kolb et Shen, et aboutit à l'établissement d'un opérateur de collision en deux contributions, l'une pour les collisions dites faibles, et la seconde pour les collisions fortes.

On procède en recherchant pour $\tilde{U}(t)$ une équation d'évolution portant sur une échelle de temps intermédiaire, très grande devant le temps d'intérêt défini plus haut, mais cependant qui demeure petite devant le temps entre deux collisions. Il s'agit de trouver un équivalent de l'équation de Liouville plus simple que l'original. Pour cela, on exprime la variation de $\tilde{U}(t)$ sur un intervalle en principe conforme à l'exigence d'échelle de temps intermédiaire :

$$\Delta\tilde{U}(t) = \tilde{U}(t + \Delta t) - \tilde{U}(t) = \left[\tilde{U}(t + \Delta t, t) - 1 \right] \tilde{U}(t) \quad (1.45)$$

en exploitant : $\tilde{U}(t + \Delta t) = \tilde{U}(t + \Delta t, t) \tilde{U}(t)$. Le super-opérateur ainsi défini permettant de faire passer $\tilde{U}(t)$ à $\tilde{U}(t + \Delta t)$ peut être remplacé par le suivant, considérant que toutes les fois qu'elles ont lieu les collisions sont totalement achevées :

$$\tilde{S} = \lim_{t \rightarrow \infty} \tilde{U}\left(\frac{t}{2}, -\frac{t}{2}\right) \quad (1.46)$$

En calculant la moyenne de la variation $\Delta\tilde{U}(t)$ et considérant que les collisions sont indépendantes les unes des autres, on parvient à l'expression :

$$\left\{ \Delta\tilde{U}(t) \right\}_{moy} = -\tilde{\Phi} \left\{ \tilde{U}(t) \right\}_{moy} \Delta t \quad (1.47)$$

avec comme "opérateur de collision" :

$$\tilde{\Phi} = \sum_j \nu_j (1 - \tilde{S}_j) \quad (1.48)$$

qui prend en compte tous les types de collisions binaires de fréquences ν_j . Pour le

moment, on ne s'est intéressé qu'au cas d'une collision unique, il faut donc maintenant prendre en compte une durée beaucoup plus grande que celle qui sépare deux collisions, afin de toutes les prendre en compte. En assimilant $\{\Delta\tilde{U}(t)\}$ à un accroissement différentiel, autrement dit en posant que :

$$\{\Delta\tilde{U}(t)\} = \frac{d\{\tilde{U}(t)\}}{dt}\Delta t \quad (1.49)$$

et en reportant cette expression dans celle de l'opérateur pour la collision unique 1.47, on obtient :

$$\frac{d\{\tilde{U}(t)\}}{dt} = -\tilde{\Phi}\{\tilde{U}(t)\} \quad (1.50)$$

équation différentielle dont la solution immédiate est :

$$\{\tilde{U}(t)\} = \exp(-\tilde{\Phi}t) \quad (1.51)$$

La suite du calcul conduit à une inversion matricielle qui fournit le profil de raie :

$$I(\omega) = -\frac{1}{\pi}\Im \sum_{\alpha\alpha'\beta\beta'} \rho_{\alpha\alpha'} \vec{d}_{\alpha\beta} \cdot \vec{d}_{\alpha'\beta'}^* \left\{ \ll \alpha'\beta' | (\Delta\omega + i\tilde{\Phi})^{-1} | \alpha\beta \gg \right\} \quad (1.52)$$

Lorsque la base $(|\alpha\beta\rangle)$ est une base propre de l'opérateur de collision $\tilde{\Phi}$, il en résulte que l'inversion de matrice conduit à un profil qui apparaît comme une somme de fonctions lorentziennes :

$$I(\Delta\omega) = \sum_{\alpha\beta} C_{\alpha\beta} \frac{\gamma_{\alpha\beta}}{\pi} \frac{1}{\Delta\omega^2 + \gamma_{\alpha\beta}^2} \quad (1.53)$$

où $\gamma_{\alpha\beta} = \ll \alpha\beta | \tilde{\Phi} | \alpha\beta \gg$ est la largeur de chaque fonction, et $C_{\alpha\beta} = \rho_{\alpha\alpha} |\vec{d}_{\alpha\beta}|^2$ son intensité.

Suivant les situations physiques et les types d'atomes et ions en présence, il existe différentes expressions pour l'opérateur de collision. Pour l'hydrogène, objet du travail présenté, le calcul se poursuit avec comme modèle de collision des trajectoires droites de perturbateurs [6], classées en deux catégories selon que le paramètre

d'impact est grand (collision dite faible), ou petit (collision forte). Pour un électron perturbateur, le résultat est un opérateur somme de deux contributions :

$$\tilde{\Phi} = \tilde{\Phi}_s + \tilde{\Phi}_w \quad (1.54)$$

Les collisions fortes sont représentées par la contribution $\tilde{\Phi}_s$ (indice s pour l'anglais strong), à termes uniquement diagonaux et identiques, dont l'expression est :

$$\tilde{\Phi}_s = 2\sqrt{\pi}n_e\rho_{We}^2v_e \quad (1.55)$$

alors que les collisions faibles sont représentées par la contribution $\tilde{\Phi}_w$ (indice w pour l'anglais weak), et s'écrit :

$$\tilde{\Phi}_w = 2\sqrt{\pi}n_e\rho_{We}^2v_e \left(\frac{\hbar\hat{d}_{nn'}}{n^2ea_0} \right)^2 \int_{y_{min}}^{\infty} \frac{\exp -y}{y} dy \quad (1.56)$$

Dans ces deux contributions, n_e est la densité en électrons, et v_e leur vitesse thermique, pendant que ρ_{We} est le rayon de Weisskopf électronique, qui détermine la frontière entre les paramètres d'impact correspondant aux collisions faibles ou fortes. Cette quantité s'exprime :

$$\rho_{We} = \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{\hbar n^2}{m_e v_e} \quad (1.57)$$

dans laquelle n est le nombre quantique principal du niveau supérieur de la transition, et m_e la masse de l'électron.

Ce formalisme, qui permet des modélisations efficaces dans de nombreux cas, repose néanmoins sur des limitations dont on peut penser légitimement qu'elles occultent des phénomènes importants, qui peuvent expliquer des divergences entre les observations expérimentales, et les prévisions théoriques. En particulier, on n'a considéré jusqu'ici que le cas de collisions binaires, or, même si elles sont statistiquement majoritaires, il existe nécessairement des collisions à trois corps, voire davantage, qu'il ne convient peut-être pas d'écarter, et dont il faudrait tenir compte. On peut également souligner le caractère réducteur de la dichotomie entre collisions fortes d'une part, et faibles d'autre part. Celle-ci a bien sûr le mérite de fournir des modélisations efficaces pour établir des calculs fondés sur la prise en compte de l'une

ou l'autre catégorie, mais là encore, il n'est pas certain que ce choix n'entraîne pas une simplification excessive de la réalité physique. En particulier les collisions fortes peuvent se dérouler dans des conditions où la distance séparant émetteur et perturbateur devient de l'ordre de la longueur d'onde de De Broglie, de sorte que pour décrire convenablement l'évolution du système un traitement quantique s'impose. Il est donc légitime de rechercher une approche qui, intrinsèquement, contienne potentiellement tous les cas de figures : c'est précisément le fondement de la démarche par intégrale de chemin, due à Richard Feynmann, que nous allons appliquer à l'effet Stark.

Chapitre 2

Formalisme de l'intégrale de chemin appliqué à l'effet Stark

2.1 Intégrale de chemin en mécanique quantique

C'est à Richard Feynman [15] que l'on doit cette variante de l'approche quantique des phénomènes atomiques, transposition de la mécanique lagrangienne : l'intégrale de chemin.

2.1.1 Justification physique de l'approche par intégrale de chemin

En mécanique quantique, on considère que la probabilité de réalisation d'un événement possède un caractère intrinsèquement ondulatoire. Par conséquent, pour évaluer la probabilité de la réalisation de deux événements distincts, on est amené à faire la somme des amplitudes de ces probabilités, et non pas de leurs modules. Ceci explique les phénomènes d'interférence observés avec des électrons dans l'expérience des fentes de Young. Par exemple, quand un électron a deux trajets possibles pour aller de A vers B, l'amplitude de probabilité ϕ_{AB} de l'événement réalisant l'un ou l'autre trajet est :

$$\phi_{AB} = \phi_A(1) + \phi_B(2) \tag{2.1}$$

et par suite, la probabilité de réalisation de l'événement est :

$$P_{AB} = |\phi_{AB}|^2 = |\phi_{AB}(1)|^2 + |\phi_{AB}(2)|^2 + 2\Re(\phi_{AB}(1)\phi_{AB}^*(2)) \quad (2.2)$$

Le dernier terme de cette expression, soit $2\Re(\phi_{AB}(1)\phi_{AB}^*(2))$, est le terme d'interférence. Le principe de superposition permet de procéder exactement de la même manière pour trois chemins possibles, quatre, cinq, etc. Les termes d'interférences deviennent alors de plus en plus nombreux. Les amplitudes de probabilités obéissent également au principe dit de l'état intermédiaire. Ainsi, dès lors qu'un trajet entre A et B peut passer par un troisième point C, l'amplitude de probabilité du trajet de A vers B est le produit des amplitudes de A vers C, et de C vers B, soit :

$$\phi_{AB}|_C = \phi_{AC}\phi_{CB} \quad (2.3)$$

L'approche élaborée par Feynman, inspirée de la mécanique lagrangienne et qui s'en rapproche fortement, s'appuie sur la prise en compte de ces deux principes, et d'une remarque dont il avait fait part à Dirac en 1946, à laquelle ce dernier n'a guère accordé de considération, au contraire de son confrère, anecdote racontée par Schweber [16]. La remarque de Dirac portait sur le fait que, entre deux instants très voisins t et $t + \epsilon$, l'amplitude de transition $\langle q_2(t + \epsilon) | q_1(t) \rangle$ est "analogue" à $\exp(iS[q])/\hbar$, et ceci conduisit Feynman à conclure et démontrer qu'il existait une relation de proportionnalité entre deux états quantiques très voisins dans le temps, en relation avec l'action au sens de Lagrange entre ces deux points. Ainsi, pour une particule non relativiste de masse m , et pour laquelle le lagrangien s'écrit : $L(q, \dot{q}) = \frac{m}{2}\dot{q}^2 - V(q)$, on peut écrire :

$$\psi(q_2, t + \epsilon) = C \int dq_1 \exp\left(i\frac{S[q(t)]}{\hbar}\right) \psi(q_1, t) \quad (2.4)$$

où $S[q(t)]$ est l'action classique, et C une constante intervenant dans la fameuse proportionnalité, égale dans le cas présent à : $\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon}}$. L'exploitation de cette propriété de proportionnalité a permis à Feynman, qui a établi la forme précise de son expression, d'édifier un formalisme pour la mécanique quantique qui ne nécessite pas l'usage de son arsenal mathématique habituel (opérateurs qui souvent ne commutent pas, etc.), mais qui repose plutôt sur le concept d'une infinité de trajectoires

spatio-temporelles possibles, à la manière de la mécanique classique : le formalisme par intégrale de chemin. Nous allons maintenant voir comment s'y prendre pour établir l'expression du correspondant, dans ce cadre, de l'opérateur d'évolution : le propagateur de Feynman.

2.1.2 La construction du propagateur

Le postulat de base consiste à supposer que la probabilité pour aboutir d'un point spatio-temporel à un autre est simplement la somme des probabilités de chaque chemin possible entre les deux points. Ce que l'on peut écrire comme :

$$K(b, a) = \sum_{\text{chemins}} \phi[x(t)] \quad (2.5)$$

Il reste à déterminer la contribution de chaque chemin. Pour cela, en vue d'exploiter la propriété suggérée par Dirac et établie par Feynman, on découpe le temps en N intervalles suffisamment fins pour qu'elle soit effectivement valable, et on associe à chacune des dates de ces intervalles les points correspondants du chemin suivi. Ainsi, aux instants ($t_i = t_0, t_1, \dots, t_N = t_f$) existant entre les deux bornes temporelles de début et de fin, $[t_i, t_f]$, il correspond les points suivants du chemin emprunté : ($x_i = x_0, x_1, \dots, x_N = x_f$). La probabilité de la totalité du chemin est donc, en vertu du principe de l'état intermédiaire, le produit de chacune des contributions, soit :

$$\phi(x_0, x_1, \dots, x_N) = \prod_{k=1}^N \phi(x_k, x_{k-1}) \quad (2.6)$$

Or, la propriété de proportionnalité nous permet d'écrire, entre deux instants séparés par un ordre élémentaire :

$$\phi(x_j, x_{j-1}) = M \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S(x_j, x_{j-1}) \right\} \quad (2.7)$$

Autrement dit, une série de probabilités dont l'amplitude est toujours la même, et qui ne diffèrent entre elles que par leurs phases. La somme des probabilités correspondant à chacun des chemins possibles permet donc d'écrire le propagateur de la façon suivante :

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \int dx_1 \dots dx_N M^N \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N S(x_j, x_{j-1}) \right\} \quad (2.8)$$

L'action (au sens classique) entre les deux points x_j et x_{j-1} s'écrit quant à elle comme le produit de l'intervalle de temps avec la différence entre les énergies cinétiques et potentielles, soit pour une particule matérielle de masse m :

$$S(x_j, x_{j-1}) = \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_j - x_{j-1}}{t_j - t_{j-1}} \right)^2 - V(\bar{x}_j) \right] (t_j - t_{j-1}) \quad (2.9)$$

Dans cette expression, $\bar{x}_j$ représente la position moyenne entre x_j et x_{j-1} . Si N est très grand, on peut récrire le propagateur en passant à la limite :

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^N dx_k M^N \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^N S(x_k, x_{k-1}) \right\} \quad (2.10)$$

On peut remarquer que, muni de cette expression, on peut alors écrire :

$$\psi(x, t) = \int dy K(x, t; y, t') \psi(y, t') \quad (2.11)$$

Et, au niveau élémentaire, de point spatio-temporel en point spatio-temporel, il est justifié de qualifier également de propagateur l'expression suivante :

$$\psi(x, t + \epsilon) = \int dy K(x, t + \epsilon; y, t) \psi(y, t) \quad (2.12)$$

Lorsque $\epsilon \rightarrow 0$, $K(x, t + \epsilon; y, t) \rightarrow \delta(x - y)$. Ceci suggère, comme l'a démontré Dyson, que le propagateur est en fait une fonction de Green. En exploitant cette limite, on parvient à déterminer la constante $M = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t_j} \right)^{1/2}$. L'ensemble de ces résultats permet maintenant d'écrire le propagateur tel que :

$$K(x_f, t_f; x_i, t_i) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^N dx_k \prod_{k=1}^N \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t_j} \right)^{1/2} \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^N \left[\frac{m}{2\epsilon} (x_k - x_{k-1})^2 - \epsilon V(\overline{x_k}) \right] \right\} \quad (2.13)$$

2.2 Fonction d'autocorrélation dipolaire

Dans le cas Lyman- α , le formalisme de Liouville n'a pas d'intérêt particulier, et la fonction d'autocorrélation du moment dipolaire atomique s'écrit :

$$C(s) = \exp(-is\epsilon_\beta) \times \sum_{\alpha\beta\alpha'} \vec{d}_{\alpha\beta} \{ \langle \alpha | T_\alpha(s, 0) | \alpha' \rangle^* \}_{moy} \vec{d}_{\alpha'\beta}^* \quad (2.14)$$

où :

- $\vec{d}_{\alpha\beta}$ est la matrice moment dipolaire
- T_a est l'opérateur d'évolution dont les seuls éléments non nuls existent pour les transitions entre sous-états $\alpha, \alpha', \dots$
- ϵ_β est l'énergie du niveau inférieur non perturbé

On néglige les perturbations entre sous-niveaux inférieurs car on s'intéresse au cas Lyman- α sans structure fine.

En exploitant le théorème de Wigner-Eckart, la fonction d'autocorrélation dipolaire peut s'écrire, dans la base $|n, l, m\rangle$:

$$C(s) = \exp(-is\epsilon_\beta) | \langle 21 | \vec{d} | 10 \rangle |^2 \left(\{ \langle 210 | T | 210 \rangle \}_{moy} + 2 \{ \langle 211 | T | 211 \rangle \}_{moy} \right) \quad (2.15)$$

Afin de parvenir à exprimer la fonction d'autocorrélation en faisant intervenir l'intégrale de chemin, on commence par écrire l'opérateur d'évolution dans la base spatiale $\{ |\vec{y}\rangle \}$:

Posons les égalités :

$$\begin{aligned}\int |\vec{y} \rangle \langle \vec{y}| d\vec{y} &= 1 \\ \int |\vec{y}' \rangle \langle \vec{y}'| d\vec{y}' &= 1\end{aligned}\quad (2.16)$$

Introduisons l'expression de l'évolution de l'état α' vers l'état α . Il vient :

$$\langle \alpha | T_a(s, 0) | \alpha' \rangle = \int \int \langle \alpha | y \rangle \langle y | T_a(s, 0) | y' \rangle \langle y' | \alpha' \rangle dy dy' \quad (2.17)$$

La notation $\langle \dots | \dots \rangle$ représente un produit scalaire, de sorte qu'on peut écrire $\langle \alpha | y \rangle = \varphi_\alpha(y)$ et la fonction d'autocorrélation devient :

$$C(s) = \exp(-is\epsilon_\beta) \times \sum_{\alpha\beta\alpha'} \vec{d}_{\alpha'\beta}^* \vec{d}_{\alpha\beta} \int \int \varphi_\alpha(y) \varphi_{\alpha'}^*(y') \langle y | \{T_a(s, 0)\} | y' \rangle dy dy' \quad (2.18)$$

Les éléments de matrice $\langle y | \{T_a(s, 0)\} | y' \rangle$ de l'opérateur d'évolution écrit dans la base spatiale représentent en fait ce qu'on appelle le propagateur de Feynman $K(y, s; y', 0)$ dont l'établissement est présenté au paragraphe précédent.

$$K(y, s; y', 0) = \int_{y(0)=y'}^{y(s)=y} D[y(s)] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^s \left(\frac{m_e}{2} \dot{\vec{y}}^2 + \frac{Ze^2}{||\vec{y}||} + e\vec{y} \cdot \vec{E}(\tau) \right) d\tau \right\} \quad (2.19)$$

Ce propagateur décrit l'atome soumis à une perturbation électrique de son moment dipolaire $e\vec{y}$, où $\vec{E}(\tau)$ est le champ électrique dû à l'ensemble des constituants du plasma agissant sur l'émetteur, e est la charge de l'électron, m_e sa masse, et Z est la charge nucléaire de l'ion hydrogénoïde.

Pour l'élément de matrice $\{\langle 211 | T | 211 \rangle\}_{\text{moy}}$, on peut alors écrire :

$$\{\langle 211 | T | 211 \rangle\}_{\text{moy}} = \int \int \varphi_{211}(y) \varphi_{211}^*(y') \{K(y, s; y', 0)\}_{\text{moy}} \quad (2.20)$$

A partir de l'expression du propagateur initial, correspondant à l'atome hydrogéoïde non perturbé :

$$K_0(y, s; y', 0) = \int_{y(0)=y'}^{y(s)=y} D[\vec{y}(s)] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^s \left(\frac{m}{2} \dot{\vec{y}}^2 + \frac{Ze^2}{\|\vec{y}\|} \right) d\tau \right\} \quad (2.21)$$

il est possible d'écrire un développement en série du propagateur $K(y, s; y', 0)$:

$$\begin{aligned} K(y, s; y', 0) &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^k \frac{1}{k!} \int_0^s d\tau_1 \dots \int_0^s d\tau_k \int d\vec{y}_1 \dots \int d\vec{y}_k (e\vec{E}_1 \vec{y}_1) \dots (e\vec{E}_k \vec{y}_k) \\ &\times \prod_{j=0}^k K_0(\vec{y}_{j+1}, \vec{\tau}_{j+1}; \vec{y}_j, \vec{\tau}_j) \end{aligned} \quad (2.22)$$

où $\vec{y}_{k+1} = \vec{y}, \vec{y}_0 = \vec{y}'$. L'expression de K_0 est connue [17] et s'écrit avec les fonctions d'ondes de l'hydrogène :

$$K_0(\vec{y}_{j+1}, \vec{\tau}_{j+1}; \vec{y}_j, \vec{\tau}_j) = \sum_n \varphi_n^*(y_{j+1}) \varphi_n(y_j) \exp[-i\epsilon_n (\tau_{j+1} - \tau_j)] \quad (2.23)$$

En introduisant cette expression de K_0 et en intégrant sur les y et les y' en exploitant l'orthogonalité des fonctions d'onde, on obtient un développement de $\{< 211|T|211>_{moy}\}$:

$$\begin{aligned} \{< 211|T|211>_{moy}\} &= \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_{k+1}} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^k \frac{1}{k!} \int_0^s d\tau_1 \dots \int_0^s d\tau_k \int d\vec{y}_1 \dots \int d\vec{y}_k \\ &\times \exp \left[\frac{is}{\hbar} \epsilon_{211} \right] \left\{ (e\vec{E}_1 \vec{y}_1) \dots (e\vec{E}_k \vec{y}_k) \right\}_{moy} \varphi_{211}(\vec{y}_k) \\ &\times \varphi_{\alpha_k}^*(\vec{y}_k) \dots \varphi_{\alpha_2}(\vec{y}_1) \varphi_{211}^*(\vec{y}_1) \end{aligned} \quad (2.24)$$

Il va être intéressant d'examiner la forme des premiers termes de ce développement, qui seront repérés selon leur rang k par U^k . Les quatre premiers termes

s'écrivent :

$$U^0 = 1 \quad (2.25)$$

pour le premier terme, de rang $k = 0$. Le second terme, de rang $k = 1$, est nul, du fait des règles de sélection :

$$U^1 = \frac{ie}{\hbar} \left\{ \int_0^s d\tau_1 \vec{E}(\tau_1) \left[\int d\vec{y}_1 \varphi_{211}(\vec{y}_1) \cdot \vec{y}_1 \varphi_{211}^*(\vec{y}_1) \right] \right\} = 0 \quad (2.26)$$

Pour le troisième terme, de rang $k = 2$, son expression s'écrit dans un premier temps :

$$U^2 = \frac{1}{2!} \left(\frac{ie}{\hbar} \right)^2 \int_0^s d\tau_1 \int_0^s d\tau_2 \times \left\{ \sum_{\alpha_2} \left[\vec{E}(\tau_2) \int d\vec{y}_2 \varphi_{211}(\vec{y}_2) \cdot \vec{y}_2 \varphi_{\alpha_2}^*(\vec{y}_2) \right] \cdot \left[\vec{E}(\tau_1) \int d\vec{y}_1 \varphi_{\alpha_2}(\vec{y}_1) \cdot \vec{y}_1 \varphi_{211}^*(\vec{y}_1) \right] \right\}_{moy} \quad (2.27)$$

Puis, considérant que seul l'état $\alpha_2 = |200\rangle$ contribue dans la somme, il vient :

$$U^2 = \frac{1}{2!} \left(\frac{ie}{\hbar} \right)^2 \left\{ \left[\int_0^s d\tau \vec{E}(\tau) \int d\vec{y} \varphi_{200}(\vec{y}) \cdot \vec{y} \varphi_{211}^*(\vec{y}) \right]^2 \right\}_{moy} \quad (2.28)$$

Enfin, le quatrième terme, de rang $k = 3$, a pour expression dans un premier temps :

$$U^3 = \frac{1}{3!} \left(\frac{ie}{\hbar} \right)^3 \int_0^s d\tau_1 \int_0^s d\tau_2 \int_0^s d\tau_3 \times \sum_{\alpha_3} \left\{ \begin{aligned} & \left[\vec{E}(\tau_3) \int d\vec{y}_3 \varphi_{211}(\vec{y}_3) \cdot \vec{y}_3 \varphi_{\alpha_3}^*(\vec{y}_3) \right] \times \\ & \left[\vec{E}(\tau_2) \int d\vec{y}_2 \varphi_{\alpha_3}(\vec{y}_2) \cdot \vec{y}_2 \varphi_{\alpha_2}^*(\vec{y}_2) \right] \times \\ & \left[\vec{E}(\tau_1) \int d\vec{y}_1 \varphi_{\alpha_2}(\vec{y}_1) \cdot \vec{y}_1 \varphi_{211}^*(\vec{y}_1) \right] \end{aligned} \right\}_{moy} \quad (2.29)$$

Mais en appliquant les règles de sélection, qui imposent que seul contribue à la

somme les états : $\alpha_2 = \alpha_3 = |200 \rangle$, il apparaît que ce quatrième terme est nul :

$$U^3 = 0 \quad (2.30)$$

Il apparaît rapidement, en poursuivant l'examen des termes successifs, que tous ceux de rang impair sont nuls, et que seul les termes de rang pair contribuent à la fonction d'autocorrélation. Dans le but de rendre possible la poursuite du calcul, une approximation est appliquée au champ électrique : on considère que l'on peut faire l'hypothèse que le champ ne varie que de paires en paires successives. Ceci entraîne la perte de la prise en compte de corrélations d'ordre supérieur à deux, et que celles de second ordre sont d'importance faible. Dans ces conditions, les termes pairs du propagateur peuvent faire l'objet d'une resommation, qui conduit, pour l'élément de matrice $\{ \langle 211|T|211 \rangle \}_{moy}$, au résultat :

$$\{ \langle 211|T|211 \rangle \}_{moy} = \left[1 + \frac{1}{3} \sum_{p=1}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^{2p} \left[\frac{D_0^2 \int_0^s d\tau \int_0^s d\tau' \left\{ \vec{E}(\tau) \vec{E}(\tau') \right\}_{moy}}{(2p)!} \right]^p \right] \times \exp \left(\frac{is}{\hbar} \epsilon_2 \right) \quad (2.31)$$

où apparaît le carré de l'élément de matrice réduite :

$$D_0^2 = | \langle 21 || e\vec{r} || 10 \rangle |^2 \quad (2.32)$$

Dans le même esprit, on s'intéresse maintenant à l'élément de matrice $\{ \langle 210|T|210 \rangle \}_{moy}$, et on aboutit cette fois au résultat suivant pour son expression :

$$\{ \langle 210|T|210 \rangle \}_{moy} = \left[1 + \frac{1}{3} \sum_{p=1}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^{2p} \left[\frac{D_0^2 \int_0^s d\tau \int_0^s d\tau' \left\{ \vec{E}(\tau) \vec{E}(\tau') \right\}_{moy}}{(2p)!} \right]^p \right] \times \exp \left(\frac{is}{\hbar} \epsilon_2 \right) \quad (2.33)$$

A partir de l'expression des deux éléments de matrice $\{ \langle 211|T|211 \rangle \}_{moy}$ et

$\{< 210|T|210>\}_{moy}$, il est maintenant possible de déterminer l'expression de la fonction d'autocorrélation dipolaire, telle que :

$$C(s) = \exp\left(\frac{is\Delta\epsilon}{\hbar}\right) |< 21|\vec{d}|10>|^2 \times \left[2 + \cos \frac{D_0}{\hbar} \sqrt{\int_0^s d\tau \int_0^s d\tau' \left\{ \vec{E}(\tau) \vec{E}(\tau') \right\}_{moy}} \right] \quad (2.34)$$

avec $\Delta\epsilon = \epsilon_1 - \epsilon_2$. Il est possible de faire apparaître dans l'expression de $C(s)$ celle de la fonction d'autocorrélation du microchamp électrique $C_{EE}(\tau)$, et on aboutit en intégrant sur τ' , à l'équation :

$$C(s) = \exp\left(\frac{is\Delta\epsilon}{\hbar}\right) |< 21|\vec{d}|10>|^2 \times \left[2 + \cos \frac{D_0}{\hbar\omega_p} \sqrt{2s < E^2 > \int_0^s d\tau \left(1 - \frac{\tau}{s}\right) C_{EE}(\tau)} \right] \quad (2.35)$$

Dans cette expression, l'unité de temps est l'inverse de la fréquence plasma, $\omega_p^{-1} = (m_e\epsilon_0/n_e e^2)^{1/2}$, exprimée en unités CGS. Les effets dynamiques du microchamp sur les propriétés radiatives des émetteurs sont inclus dans la fonction $C_{EE}(\tau)$.

La fonction d'autocorrélation dipolaire obtenue en 2.35 est indépendante du type de particules chargées perturbatrices. Il est donc possible de l'appliquer, selon le domaine auquel on s'intéresse, aussi bien aux ions qu'aux électrons. Dans la suite, nous allons examiner trois situations concernant les ions : l'approximation d'impact (temps de collision court devant celui entre deux collisions), l'approximation statique (microchamp considéré comme quasiment constant dans le temps), et le cas intermédiaire entre les deux premiers.

2.3 Application à trois régimes d'effet Stark

Cette démarche peut être exploitée valablement en s'intéressant aux perturbateurs ioniques dans différents régimes : limite impact, approximation statique et

dynamique des ions. On s'intéresse ici au cas de la raie Lyman- α de l'hydrogène.

2.3.1 Approximation d'impact

Dans les plasmas peu denses, il est possible de considérer que les collisions, perturbation d'un atome émetteur par le passage à proximité d'une particule chargée en trajectoire droite, se déroulent dans un temps caractéristique τ_c faible devant Δ_s , celui qui sépare deux événements de ce genre : en faisant le choix d'ignorer les autres collisions, au motif qu'elles sont beaucoup plus rares, on effectue donc une approximation, dite d'impact. L'ordre de grandeur de l'intervalle Δ_s correspond à l'inverse de la largeur de la raie spectroscopique, exprimé en unités de fréquence angulaire. Cela revient à dire que les collisions les plus fréquentes sont faibles, soit que le produit de l'interaction par le temps de collision doit rester petit devant $\hbar$. Ceci justifie un traitement perturbatif dans la mesure où l'on considère que l'émetteur n'est jamais fortement affecté par la particule chargée. L'argument du cosinus de l'équation 2.35 représente un changement de phase cumulé de la radiation entre les instants 0 et s . Dans la mesure où on s'intéresse à des conditions dans lesquelles l'approximation d'impact est valide, on considère que ce changement de phase est petit, et nous pouvons développer le cosinus jusqu'au terme de second ordre. Prenant en compte le fait que $2 + \cos(X) \cong 3(1 - X^2/6)$ on peut écrire la fonction d'autocorrélation dipolaire en utilisant l'expression de $f(s)$ telle qu'en 2.35 :

$$C(s) = | \langle 21 | \vec{d} | 10 \rangle |^2 \exp\left(\frac{is}{\hbar} \Delta \varepsilon\right) \times \left[1 - 3 \left(\frac{D_0}{\hbar \omega_p} \right)^2 s \langle E^2 \rangle \int_0^s d\tau \left(1 - \frac{\tau}{s} \right) C_{EE}(\tau) \right] \quad (2.36)$$

Puisque le temps de collision est petit devant celui séparant deux collisions successives, nous substituons la borne supérieure s de l'intégrale par ∞ , ce qui conduit à la transformation :

$$\int_0^s d\tau \left(1 - \frac{\tau}{s} \right) C_{EE}(\tau) \rightarrow \int_0^\infty d\tau C_{EE}(\tau) \quad (2.37)$$

On introduit un opérateur d'impact ionique ϕ_i et la fonction d'autocorrélation

dipolaire s'écrit alors :

$$C(s) = | \langle 21 | \vec{d} | 10 \rangle |^2 \exp\left(\frac{is}{\hbar} \Delta\varepsilon\right) \exp(s\phi_i) \quad (2.38)$$

Par identification avec l'expression 2.36, et en tenant compte du développement au premier ordre de l'exponentielle, on obtient pour ce modèle un opérateur d'impact pour la limite des collisions faibles tel que :

$$\phi_i = -\frac{1}{3} \left(\frac{D_0}{\hbar\omega_p} \right)^2 \langle E^2 \rangle \int_0^\infty d\tau C_{EE}(\tau) \quad (2.39)$$

Cette expression est semblable aux autres opérateurs d'impact que l'on trouve dans la littérature [18] pour l'émetteur hydrogène, lorsque l'on considère une approximation au second ordre pour le potentiel d'interaction.

2.3.2 Approximation statique

L'approche du cas statique consiste à supposer que le microchamp électrique varie très lentement, de sorte que $\vec{E}(\tau) \cong \vec{E}(0)$. Dans cette logique, la fonction d'autocorrélation du microchamp peut être considérée comme constante, autrement dit : $C_{EE}(\tau) = C_{EE}(0)$. Ceci conduit alors à écrire la fonction d'autocorrélation dipolaire dans le cas limite telle que :

$$C(s) = | \langle 21 | \vec{d} | 10 \rangle |^2 \exp\left(\frac{i\Delta\varepsilon}{\hbar} s\right) \left[2 + \cos \frac{D_0}{\hbar\omega_p} \sqrt{\langle E^2 \rangle} \right] \quad (2.40)$$

Cette expression est comparable aux calculs obtenus lors de calculs antérieurs [19] pour la raie Lyman alpha dans le cas statique. Pour un champ électrique moyen, cette forme de la fonction d'autocorrélation dipolaire $C(s)$ est semblable aux résultats de la référence évoquée (voir équation 3.2 de celle-ci).

2.3.3 Dynamique des ions

Pour les raies de l'hydrogène à petit nombre quantique principal, la dynamique des ions peut affecter les profils de raie avec des densités telles que celles des plasmas de laboratoire, ou de la périphérie des plasmas de fusion par confinement magnétique (plasmas de bord). Ces conditions correspondent à des plasmas essentiellement

cinétiques, faiblement couplés [20]. Afin d'étudier les propriétés dynamiques, nous utilisons une expression théorique de la fonction d'autocorrélation du microchamp dérivée du travail réalisé par Rosenbluth et Rostoker [21] pour les plasmas faiblement couplés :

$$C_{EE}(\tau) = \frac{3}{\sqrt{\pi}} \frac{r_0}{\lambda_D} \frac{1}{\tau} \left[1 + \tau^2 - \sqrt{\pi} \tau \left(\tau^2 + \frac{3}{2} \right) \exp(-\tau^2) \operatorname{erfc}(\tau) \right] \quad (2.41)$$

où τ représente le temps en unités de fréquence plasma, et λ_D est la longueur de Debye électronique. Afin d'obtenir le profil de raie, il est nécessaire de commencer par insérer cette expression de $C_{EE}(\tau)$ dans la fonction d'autocorrélation dipolaire. Le profil de raie dans le référentiel de l'atome en fonction de la fréquence ω est fourni par la transformée de Fourier :

$$I(\omega) = \frac{1}{\pi} \Re \int_0^\infty ds C(s) \exp(i\omega s) \quad (2.42)$$

On compare maintenant cette approche par intégrale de chemin avec les résultats obtenus par une technique *ab initio* qui consiste à effectuer une simulation numérique des mouvements d'un grand nombre de particules chargées, au cours de laquelle l'opérateur d'évolution est résolu par une discrétisation de l'équation de Schrödinger. De nombreuses répétitions fournissent une collection d'histoires qu'il faut ensuite moyenner pour obtenir un résultat statistique. Durant ces trois dernières décennies, de nombreuses équipes ont exploité de telles simulations par ordinateur [22, 23, 24, 25], ce qui a fourni de nombreuses références permettant de confronter les modèles aux expériences. Dans les conditions qui correspondent aux plasmas faiblement couplés, nous procédons à une simulation mettant en oeuvre un ensemble d'ions suivant des trajectoires droites à l'intérieur d'un cube dont le côté est suffisamment grand devant la longueur de Debye, et dont la population en ions perturbateurs est maintenue constante afin que la densité le demeure également. La figure 2.1 montre la comparaison entre un profil obtenu avec le formalisme par intégrale de chemin présenté ici, avec une simulation numérique. Les conditions physiques pour la comparaison ont été choisies telles que la densité soit $N_e = 10^{15} \text{cm}^{-3}$ avec une température de 10^5K . L'observation des deux courbes montre un accroissement de l'ordre de 15%

de la largeur de la raie calculée par intégrale de chemin par rapport à la simulation. A noter que pour des densités plus élevées, la simulation est en bon accord avec les expériences. Une explication de cette différence réside possiblement dans le fait que l'approximation adoptée a consisté à factoriser des expressions contenant un grand nombre de valeurs de champ dans un produit de moyennes qui ne contiennent que des paires de valeurs de champ. A noter aussi que dans ces mêmes conditions, une approximation statique conduirait à un profil plus étroit d'un ordre de grandeur. L'intégrale de chemin semble donc permettre de prendre en compte l'essentiel de l'élargissement dû à la dynamique des ions. Ce résultat, dont il semble peu probable de pouvoir en prolonger les calculs compte-tenu des difficultés formelles qu'il implique, montre donc que l'approche semi-classique est assez bien justifiée, puisque l'intégrale de chemin, totalement quantique, aboutit à des profils de raie similaires. Les aspects purement quantiques semblent donc avoir une importance limitée dans la compréhension des élargissements. On est donc conduit à rechercher dans d'autres causes l'écart entre résultats expérimentaux et prévisions théoriques. Des travaux antérieurs sur la dynamique des ions ont déjà montré que la prise en compte des effets de rotations du microchamp n'est pas négligeable [26], et qu'il convient de prendre en compte convenablement la chronologie : l'opérateur d'évolution ne commute pas à deux instants différents, même très proches. Il convient donc maintenant d'examiner plus précisément comment les variations de champ agissent sur la fonction d'autocorrélation dipolaire, et les conséquences de la prise en compte, ou non, de l'existence de l'opérateur de chronologie.

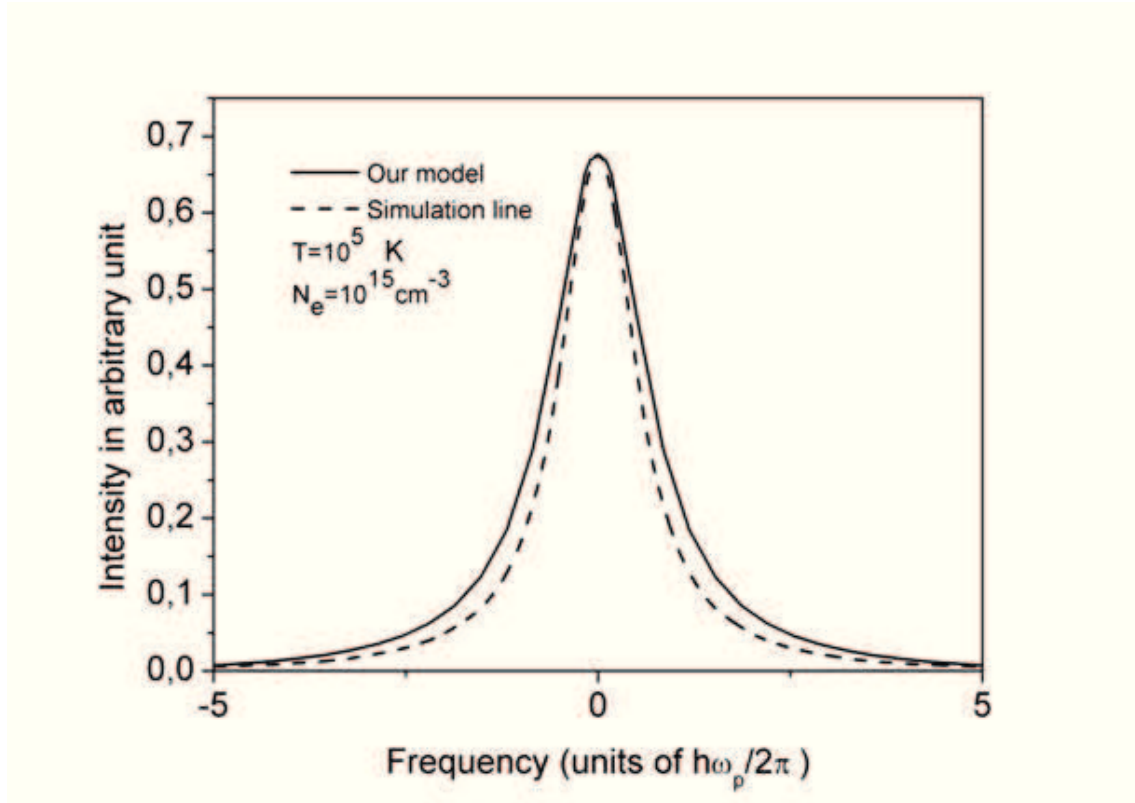


FIGURE 2.1: Comparaison des intensités spectrales obtenues par le calcul par intégrale de chemin (trait continu) avec celle obtenue par simulation numérique (trait interrompu) pour la raie Lyman- α pour une densité électronique $N_e = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ et une température de $T = 10^5 \text{ K}$.

Chapitre 3

Calcul numérique et étude du rôle de la chronologie

La perturbation engendrée par le champ électrique, entre deux instants successifs très proches, n'a pas les mêmes effets selon qu'ils se produisent l'un après l'autre, ou le contraire : l'ordre chronologique compte. Ainsi, l'opérateur d'évolution correspondant ne commute pas pour ces deux instants, et conduit à l'apparition d'un opérateur de chronologie issu de la série de Dyson, qui s'établit par un calcul récursif, et que l'on peut choisir ensuite d'ignorer, ou non, afin d'établir des comparaisons, et tenter de comprendre le rôle exact de l'ordre chronologique, et comment celui-ci s'exerce, dans le cadre de la raie Lyman- α [27].

3.1 Opérateur d'évolution et série de Dyson

L'opérateur d'évolution concernant une perturbation de type effet Stark, solution de l'équation de Schrödinger, est donc donné par la série de Dyson :

$$U(t) = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' V(t') + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_0^t dt' V(t') \int_0^{t'} dt'' V(t'') + \dots$$

où $V(t) = \vec{d} \cdot \vec{E}(t)$ décrit l'effet Stark dû au champ électrique créé par les perturbateurs.

On établit la forme de cette série par un calcul récursif. Pour l'établir, on procède

comme suit.

L'équation de Schrödinger pour la perturbation, en représentation d'évolution, s'écrit :

$$i\hbar \frac{\partial U(t, 0)}{\partial t} = V(t)U(t, 0) \quad (3.1)$$

En intégrant de part et d'autre, et en considérant que : $U(0, 0) = 1$, on obtient :

$$i\hbar [U(t, 0) - 1] = \int_0^t \tilde{V}(t')U(t', 0)dt' \quad (3.2)$$

Soit finalement la forme générale exacte :

$$U(t, 0) = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \tilde{V}(t')U(t', 0)dt' \quad (3.3)$$

Dans cette expression, l'opérateur d'évolution $U(t, 0)$ est défini en apparaissant encore sous le signe intégral. Or, $U(t', 0)$ s'écrit à son tour comme :

$$U(t', 0) = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_0^{t'} \tilde{V}(t'')U(t'', 0)dt'' \quad (3.4)$$

En substituant $U(t', 0)$ dans $U(t, 0)$, on obtient :

$$U(t, 0) = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \tilde{V}(t') \left(1 + \frac{1}{i\hbar} \int_0^{t'} \tilde{V}(t'')U(t'', 0)dt'' \right) dt' \quad (3.5)$$

Soit :

$$U(t, 0) = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \tilde{V}(t')dt' + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_0^t \tilde{V}(t') \left(\int_0^{t'} \tilde{V}(t'')U(t'', 0)dt'' \right) dt' \quad (3.6)$$

A son tour, il est possible de substituer $U(t'', 0)$ par son expression selon la forme générale de $U(t, 0)$ mais en prenant une troisième variable temporelle t''' . On obtient ainsi :

$$U(t, 0) = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \tilde{V}(t')dt' + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_0^t \tilde{V}(t') \left(\int_0^{t'} \tilde{V}(t'')dt'' \right) dt'$$

$$+ \frac{1}{(i\hbar)^3} \int_0^t \tilde{V}(t') \left(\int_0^{t'} \tilde{V}(t'') \left(\int_0^{t''} \tilde{V}(t''') U(t''', 0) dt''' \right) dt'' \right) dt'$$

L'expression de $U(t, 0)$ prend la forme d'un développement en série dont le terme d'ordre n est donc :

$$\frac{1}{(i\hbar)^n} \int_0^t \tilde{V}(t') \left(\int_0^{t'} \tilde{V}(t'') \left(\dots \int_0^{t^{n-1}} \tilde{V}(t^n) U(t^n, 0) dt^n \right) dt'' \right) dt' \quad (3.7)$$

La série de Dyson s'écrit donc finalement comme une exponentielle “avec chronologie”, c'est-à-dire qui prend la forme suivante :

$$U(t) = \mathcal{O} e^{\frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' V(t')}$$

où $\mathcal{O}$ est l'opérateur de chronologie (“time ordering operator”) et tient compte du fait que les opérateurs $V(t)$ ne commutent pas à priori à deux instants différents ; il vérifie la propriété suivante :

$$\mathcal{O} [V(t)V(t')] = \begin{cases} V(t)V(t') & t > t' \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.8)$$

Pour quantifier l'effet de la chronologie sur un profil de raie, on peut examiner la différence entre le résultat exact, c'est-à-dire basé sur l'utilisation de la série de Dyson, et un résultat négligeant la chronologie : on remplace alors l'opérateur par l'unité. Dans ce dernier cas, en renonçant à tenir compte du fait que l'opérateur d'évolution ne commute pas à deux instants différents, l'expression de l'opérateur d'évolution devient :

$$U(t) = e^{\frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' V(t')} \quad (3.9)$$

Dans ce cas, il devient possible d'obtenir pour certaines formes de la matrice perturbative $V(t)$ une solution analytique pour la fonction d'autocorrélation, que l'on peut alors comparer avec une simulation numérique, pour une même histoire de champ électrique, afin de découvrir comment la prise en compte ou non de la chronologie agit sur le calcul du profil de raie.

3.2 Discrétisation de l'équation de Schrödinger

En représentation d'interaction, dans le cas d'une perturbation par effet Stark, l'opérateur d'évolution obéit à l'équation de Schrödinger, ce qui s'écrit :

$$i\hbar \frac{dU(t)}{dt} = V(t)U(t) \quad (3.10)$$

où $U(t)$ est l'opérateur d'évolution, et $V(t) = -\vec{d} \cdot \vec{E}$ la perturbation due à l'interaction entre le moment dipolaire de l'atome, $\vec{d} = -e\vec{r}$, et le champ électrique perturbateur du plasma à l'endroit de l'atome. Le temps est découpé en pas Δt égaux entre eux qui séparent deux instants successifs très voisins. Afin de construire la discrétisation de l'équation de Schrödinger, on va considérer des accroissements supposés très faibles tels que $\Delta U(t) = U(t + \Delta t) - U(t)$ de sorte que l'on peut écrire :

$$i\hbar \frac{U(t + \Delta t) - U(t)}{\Delta t} = V(t)U(t) \quad (3.11)$$

Après de simples manipulations algébriques on aboutit à la formule :

$$U(t + \Delta t) = \left(1 - \frac{i}{\hbar} V(t) \Delta t \right) U(t) \quad (3.12)$$

En considérant enfin qu'au temps $t = 0$, $U(0) = 1$, on calcule par itérations successives selon $n\Delta t = t$ la valeur numériquement approchée de $U(t)$ par l'expression :

$$U_{n+1} = \left(1 - \frac{i}{\hbar} V_n \Delta t \right) U_n \quad (3.13)$$

Le pas de temps Δt doit être choisi suffisamment fin pour que l'évolution de la fonction d'autocorrélation obtenue au fur et à mesure à chaque pas de temps soit suffisamment détaillée pour pouvoir représenter convenablement la réalité simulée. Δt étant choisi, il reste à déterminer les éléments de la matrice perturbative pour pouvoir effectuer les calculs itératifs.

3.3 Matrice de la perturbation $V(t)$

Dans les conditions de l'approximation dipolaire, on obtient les différents éléments de la matrice perturbative pour Lyman- α $V(t) = -\vec{d} \cdot \vec{E}$ à partir des compo-

santes de l'opérateur moment dipolaire de l'atome, exprimées dans la base des états propres liés à l'effet Stark, pris dans cet ordre : $|200\rangle, |210\rangle, |211\rangle, |21-1\rangle$, et des composantes du champ électrique perturbateur. A partir de la fonction d'état de l'électron dans l'atome d'hydrogène, et de ses projections selon les composantes de l'opérateur position exprimées dans la base sphérique telles que $r_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}}(x \pm iy)$ et $r_0 = z$, on obtient, en unités atomiques, les éléments de matrice de d_{-1} , d_{+1} et d_0 . Les termes non nuls sont donnés par :

$$z_{nlm}^{n'l+1m} = \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+3)(2l+1)}} R_{nl}^{n'l+1} \quad (3.14)$$

$$z_{nlm}^{n'l-1m} = \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{(2l+1)(2l-1)}} R_{nl}^{n'l-1} \quad (3.15)$$

avec :

$$R_{n,l-1}^{n'l} = R_{nl}^{n',l-1} = -\frac{3}{2}n\sqrt{n^2 - l^2} \quad (3.16)$$

d'où : $\langle 210|z|200\rangle = -3$ et : $\langle 200|z|210\rangle = -3$

car $R_{n,l-1}^{n'l} = R_{nl}^{n',l-1} = -3\sqrt{3}$

puis :

$$(x + iy)_{nlm}^{n'l+1m+1} = \sqrt{\frac{(l+m+2)(l+m+1)}{(2l+3)(2l+1)}} R_{nl}^{n'l+1} \quad (3.17)$$

$$(x + iy)_{nlm}^{n'l-1m+1} = -\sqrt{\frac{(l-m)(l-m-1)}{(2l+1)(2l-1)}} R_{nl}^{n'l-1} \quad (3.18)$$

d'où : $\langle 211|z|200\rangle = -3\sqrt{2}$ et $\langle 200|z|21-1\rangle = 3\sqrt{2}$

ainsi que :

$$(x - iy)_{nlm}^{n'l+1m-1} = -\sqrt{\frac{(l-m+2)(l-m+1)}{(2l+3)(2l+1)}} R_{nl}^{n'l+1} \quad (3.19)$$

$$(x - iy)_{nlm}^{n'l-1m-1} = \sqrt{\frac{(l+m)(l+m-1)}{(2l+1)(2l-1)}} R_{nl}^{n'l-1} \quad (3.20)$$

d'où : $\langle 21 - 1 | z | 200 \rangle = 3\sqrt{2}$ et $\langle 200 | z | 211 \rangle = -3\sqrt{2}$

De sorte qu'on obtient pour chacune des composantes de $\vec{d}$:

$$\begin{aligned} d_{-1} &= +\frac{1}{\sqrt{2}}ea_0 \begin{pmatrix} 0 & 0 & -3\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ d_0 &= ea_0 \begin{pmatrix} 0 & -3 & 0 & 0 \\ -3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ d_{+1} &= -\frac{1}{\sqrt{2}}ea_0 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 3\sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -3\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.21)$$

Finalement, après calcul du produit tensoriel de ces grandeurs, tel que : $\vec{d} \cdot \vec{E} = (-1)^{-1}d_{-1}.E_{+1} + (-1)^0d_0.E_z + (-1)^1d_{+1}.E_{-}$, on aboutit à :

$$\vec{d} \cdot \vec{E} = 3ea_0 \begin{pmatrix} -E_z(t) & E_{+1}(t) & E_{-1}(t) \\ -E_z(t) \\ -E_{-1}(t) \\ -E_{+1}(t) \end{pmatrix} \quad (3.22)$$

Avec e , la charge de l'électron, a_0 le rayon de Bohr, et le champ électrique étant décomposé selon la base sphérique en E_z , et $E_{\pm 1} = \mp (E_x \pm iE_y) / \sqrt{2}$.

Finalement, l'énergie potentielle de la perturbation s'écrit :

$$V(t) = -\vec{d} \cdot \vec{E} = 3ea_0 \begin{pmatrix} E_z(t) & -E_{+1}(t) & -E_{-1}(t) \\ E_z(t) \\ E_{-1}(t) \\ E_{+1}(t) \end{pmatrix} \quad (3.23)$$

On dispose maintenant de toutes les informations requises pour procéder au cal-

cul de la fonction d'autocorrélation dipolaire, seul l'allure du microchamp électrique restant à choisir parmi une série de modèles qui vont être testés dans la suite : champ à orientation fixe variant en module dans le temps, champ constant en module mais dont la direction tourne uniformément au cours du temps, et enfin champ produit par une collision avec un perturbateur. Les calculs numériques, qui résolvent l'équation de Schrödinger de proche en proche et respectent la chronologie de manière intrinsèque, vont être comparés avec la fonction d'autocorrélation obtenue par un calcul purement analytique, les champs électriques étudiés étant délibérément choisis pour qu'un tel calcul soit possible.

3.4 Calcul de l'autocorrélation sans chronologie

En considérant que les sous-niveaux sont, statistiquement, équi-peuplés, la fonction d'autocorrélation s'écrit comme la trace de la matrice dipolaire pour tout instant t (avec comme condition initiale $C(t = 0) = 1$:

$$C(t) = \frac{1}{3}(\langle 210|U(t)|210 \rangle + \langle 211|U(t)|211 \rangle + \langle 21-1|U(t)|21-1 \rangle) \quad (3.24)$$

L'évolution de $U(t)$ permet donc à chaque pas de temps de déterminer l'amplitude de la fonction d'autocorrélation, et ainsi d'en obtenir la courbe en fonction de la précision de calcul que l'on choisit de se donner.

Afin de comparer les allures respectives de la fonction d'autocorrélation selon que l'on tient compte correctement de la chronologie par une simulation numérique, ou que l'on procède à une intégration analytique en ignorant le rôle de l'opérateur de chronologie, il est nécessaire d'obtenir l'expression de l'exponentielle de la matrice $-\frac{i}{\hbar}V(t)$. Le logiciel de calcul formel Maple est mis à contribution. Pour rendre plus lisible l'introduction des grandeurs intervenant dans la matrice, on ignore dans un premier temps la constante $\frac{3eao}{\hbar}$ en facteur et on remplace les éléments E_z , E_{+1} et E_{-1} par des éléments tels que : $a = E_z$ et $b = -E_{+1}$. Cette matrice de travail prend la forme :

$$\begin{pmatrix} 0 & Ia & \frac{1}{2}Ib\sqrt{2} & -\frac{1}{2}I\bar{b}\sqrt{2} \\ Ia & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}I\bar{b}\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2}Ib\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

où I représente l'unité imaginaire. L'exponentiation par Maple, fournit le résultat suivant, dont seul les termes diagonaux sont d'intérêt, et donc reproduits ici, pour obtenir ensuite la trace :

$$\begin{pmatrix} D_{11} & & & \\ & \frac{b^2+a^2D_{11}}{a^2+b^2} & & \\ & & \frac{a^2+\frac{1}{2}b^2+\frac{1}{2}b^2D_{11}}{a^2+b^2} & \\ & & & \frac{a^2+\frac{1}{2}b^2+\frac{1}{2}b^2D_{11}}{a^2+b^2} \end{pmatrix} \quad (3.26)$$

avec la quantité $D_{11} = \cos(\sqrt{a^2 + b^2})$. La moyenne des éléments diagonaux, sauf le premier, conduit au résultat :

$$\frac{2}{3} + \frac{1}{3} \cos(\sqrt{a^2 + b^2}) \quad (3.27)$$

Il faut intégrer cette expression instantanée sur toute la durée de temps considéré pour le calcul de $C(t)$, ce qui conduit à l'expression suivante pour la fonction d'auto-corrélation sans chronologie, obtenue analytiquement, en réintroduisant la constante $\frac{3ea_0}{\hbar}$:

$$C(t) = \frac{1}{3} + \frac{2}{3} \cos \left(\frac{3ea_0}{\hbar} \left[\left(\int_0^t E_x(\tau) d\tau \right)^2 + \left(\int_0^t E_y(\tau) d\tau \right)^2 + \left(\int_0^t E_z(\tau) d\tau \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \right) \quad (3.28)$$

3.5 Calculs avec champ constant en module et en direction

Un champ électrique apparaissant soudainement, puis disparaissant, n'est bien sûr pas très réaliste, mais permet de voir comment "agit" la chronologie dans ces circonstances. Plus précisément, on utilise dans un premier temps un champ constant en module pendant une durée limitée, à la manière d'une fonction porte. Le champ que nous considérons est dans une direction fixe que nous choisissons dans le plan x,y . La fonction de corrélation du dipôle est invariante si on refait le calcul pour une autre direction du champ fixe. Nous avons vérifié numériquement que la fonction de corrélation du dipôle ne dépend pas du choix de la direction de ce champ. Pour un champ fixe unique appliqué sous la forme d'un créneau, les calculs ne sont pas affectés par la chronologie, et nous pouvons utiliser la solution donnée par l'équation 3.28. Sur la figure 3.1, on a reporté l'effet sur la fonction de corrélation du dipôle d'un champ appliqué pendant un intervalle de temps $\Delta\tau$ (entre $\tau = 5$ et $\tau = 25$ dans nos unités arbitraires) pour un champ unité (courbe en trait continu) et un champ doublé en module (courbe en tirets).

On peut voir sur la figure que la fonction de corrélation subit une oscillation harmonique pendant l'application du champ, et qu'à la fin de cette application, la fonction de corrélation conserve la valeur prise au dernier temps d'application. La fréquence ω_E de l'oscillation est proportionnelle à la valeur du module du champ. On voit sur la figure l'effet d'un doublement du module du champ qui est un doublement de la fréquence d'oscillation (courbe en tirets).

3.6 Calculs avec champ tournant

De telles situations existent réellement dans les dispositifs de confinement magnétique de plasmas (particulièrement dans les Tokamak qui étudient la possibilité de fusion thermonucléaire contrôlée), où constamment les particules chargées sont susceptibles de générer des champs tournant à vitesse constante, du fait de la présence du champ magnétique de confinement, intense (quelques teslas), et constant.

La figure 3.2 montre la fonction d'autocorrélation dipolaire obtenue par calcul

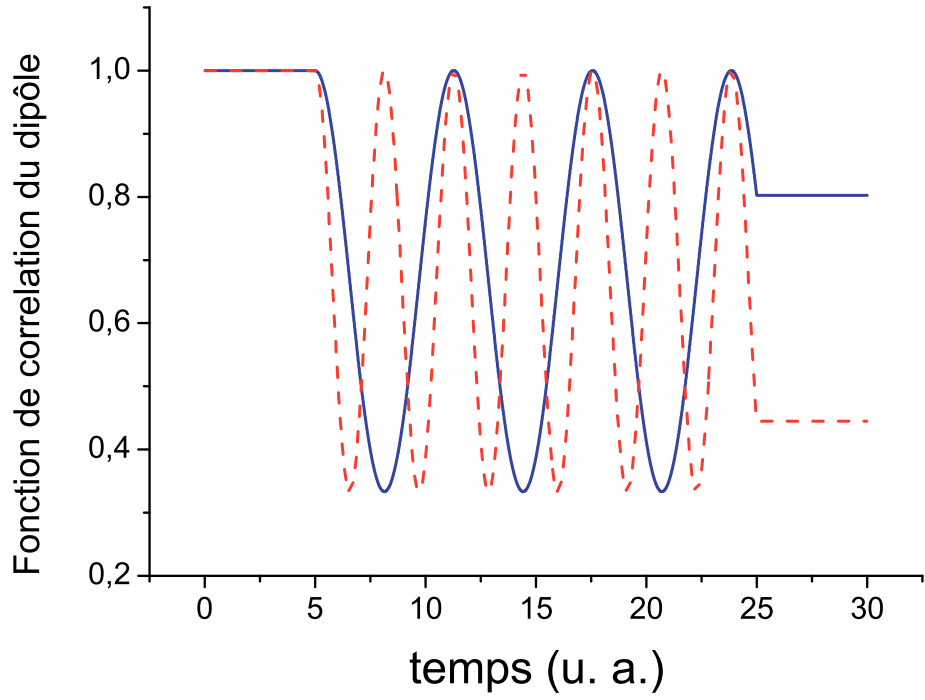


FIGURE 3.1: Fonction de corrélation obtenue avec un champ électrique fixe en module et en direction. La courbe bleue en trait plein montre l'oscillation obtenue durant le temps $\Delta\tau = 20$ en données arbitraires, avec pour le même intervalle de temps la courbe rouge en tirets qui montre qu'avec un doublement de l'intensité du champ, on double la fréquence de l'oscillation.

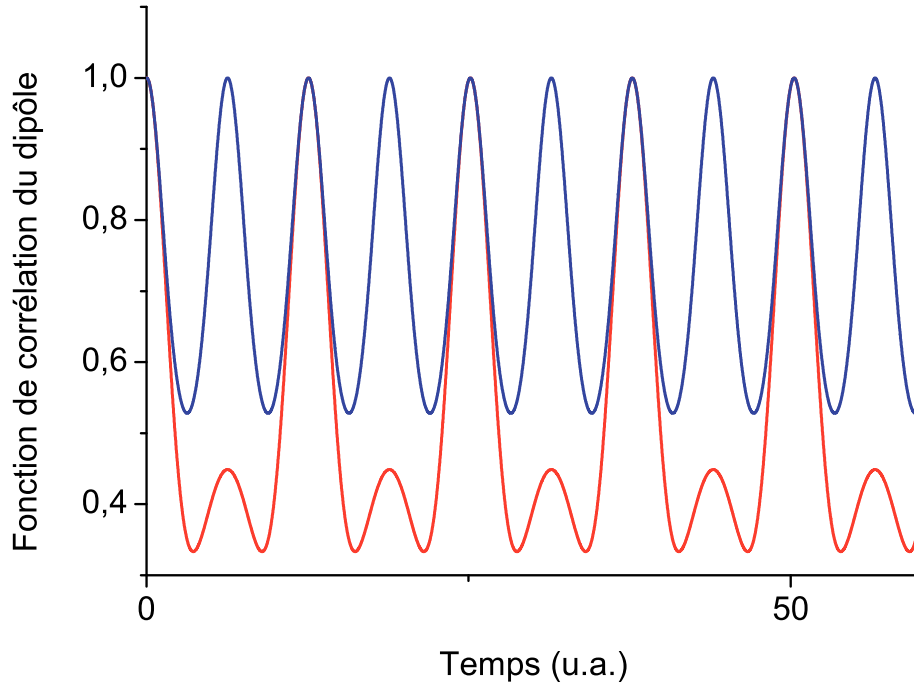


FIGURE 3.2: Fonction de corrélation obtenue avec des champs tournants, lorsque le calcul ne tient pas compte de la chronologie.

numérique avec des champs tournants dont les pulsations sont constantes, lorsque l'on ne tient pas compte de la chronologie.

On a maintenant deux fréquences, la fréquence ω_E liée à la valeur du champ électrique qui provoque l'oscillation avec un champ fixe (cette fréquence est proportionnelle au module du champ électrique), et la fréquence de rotation ω_R . Dans le cas sans chronologie, la fonction de corrélation du dipôle répond par une oscillation périodique avec une fréquence unique proportionnelle à la fréquence ω_R de rotation du champ exciteur, dans les cas où $\omega_R > \omega_E$. Dans les cas contraires, l'oscillation comprend plusieurs fréquences. La forme de cette oscillation dépend des valeurs respectives du champ électrique et de la fréquence de rotation 3.2.

Si maintenant on effectue les calculs en prenant convenablement en compte la chronologie, on obtient des résultats sensiblement différents.

Dans le cas où $\omega_R > \omega_E$, on peut observer des oscillations avec un caractère

quasi-périodique. On observe sur la figure 3.3 la superposition des deux fréquences d'oscillation avec des amplitudes différentes. Dans le cas où $\omega_R < \omega_E$, on peut observer des oscillations plus complexes, mais toujours avec un caractère quasi-périodique. Il est intéressant de comparer les cas avec et sans chronologie portés sur la figure 3.4. On constate que retenir la chronologie résulte en un comportement plus complexe, avec en particulier des périodes de temps où la décorrélation est fortement amplifiée si on la compare au cas sans chronologie, en alternance avec d'autres périodes où les oscillations sont similaires.

Quand les deux fréquences sont du même ordre, on peut observer des oscillations non périodiques de la fonction de corrélation du dipôle 3.5 avec des fréquences qui sont des combinaisons de ω_E et ω_R . On peut aussi remarquer que pour certains domaines de paramètres on observe un phénomène de battement, comme sur la figure 3.6, avec une oscillation rapide à la fréquence $(\omega_E + \omega_R)/2$, et une fréquence lente $|(\omega_E - \omega_R)|/2$.

L'observation de ces figures montre que le spectre des fréquences contenues dans la fonction d'autocorrélation, lorsqu'on prend en compte la chronologie, est plus riche et plus complexe que lorsqu'on ignore celle-ci. Les effets de rotation du champ électrique contribuent donc, à travers la chronologie, à l'élargissement du profil. L'enrichissement fréquentiel dépend manifestement, non seulement de la fréquence de rotation du champ, mais aussi de l'intensité de ce dernier, selon des modalités qui paraissent difficiles à déterminer de prime abord, et qu'il conviendrait d'examiner plus précisément si l'on souhaitait connaître le détail du rôle de la chronologie. La conclusion générale qui nous intéresse à ce stade, c'est que la chronologie semble bien ne pas devoir être ignorée pour que la fonction de corrélation puisse représenter convenablement l'évolution de l'atome en présence du champ électrique.

Ces premières constatations conduisent maintenant tout naturellement à examiner le cas réaliste du champ électrique produit par une particule chargée passant à proximité de l'atome émetteur selon une trajectoire droite, et qui va automatiquement induire des composantes de rotation, tout spécialement lorsque la particule est la plus proche de l'atome dans son mouvement.

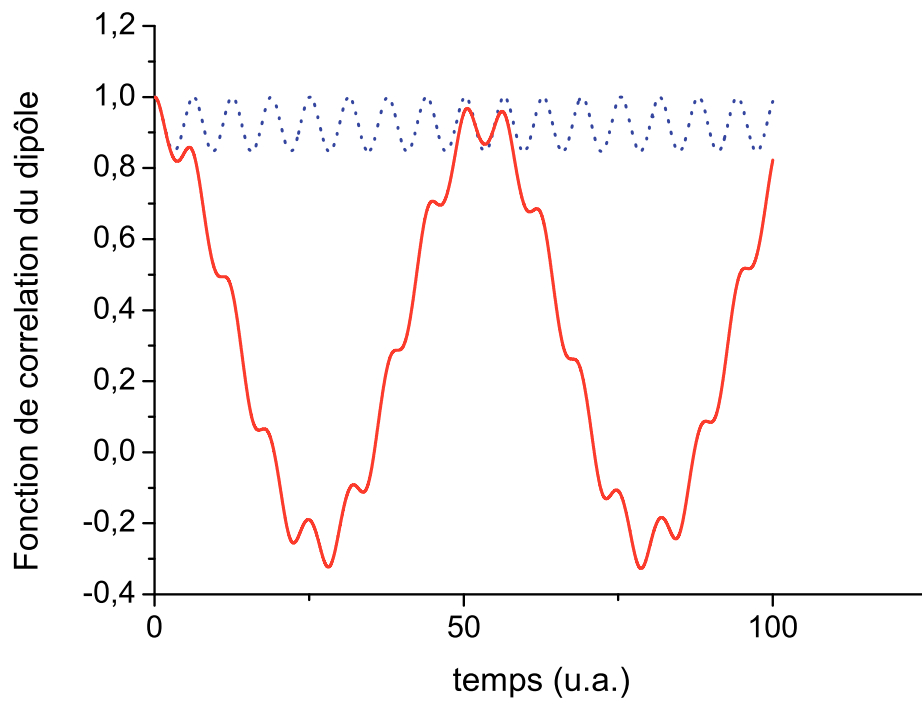


FIGURE 3.3: Fonction de corrélation obtenue avec des champs tournants, lorsque le calcul prend bien en compte la chronologie. Le trait pointillé correspond au calcul sans chronologie.

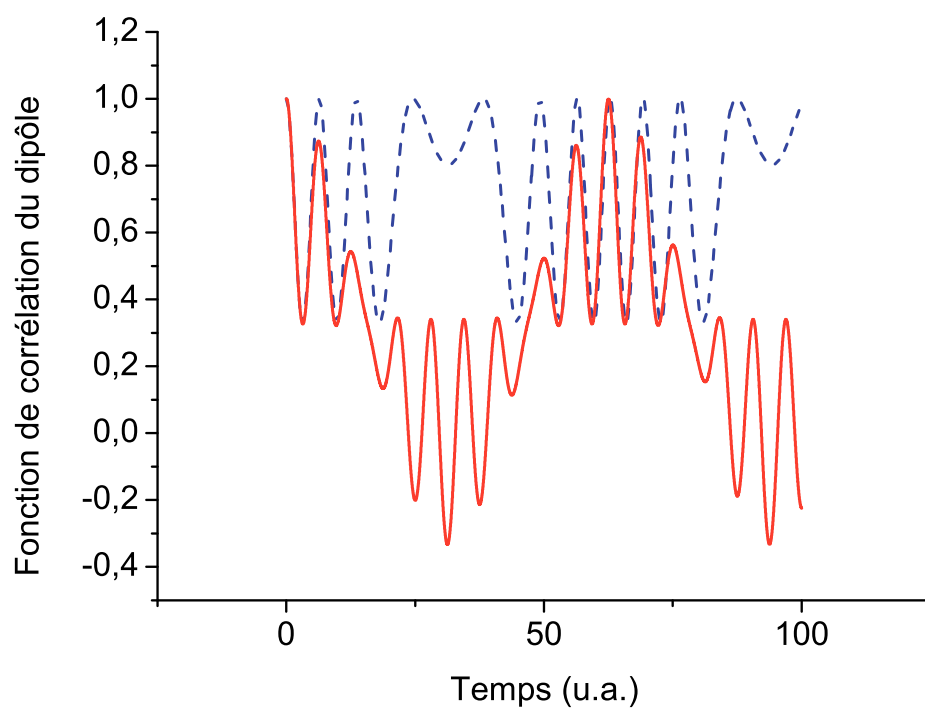


FIGURE 3.4: Comparaison des fonctions d'autocorrélation lorsque la fréquence du champ tournant est proche de l'oscillation liée à l'intensité du champ électrique. Le trait en tirets correspond au calcul sans chronologie.

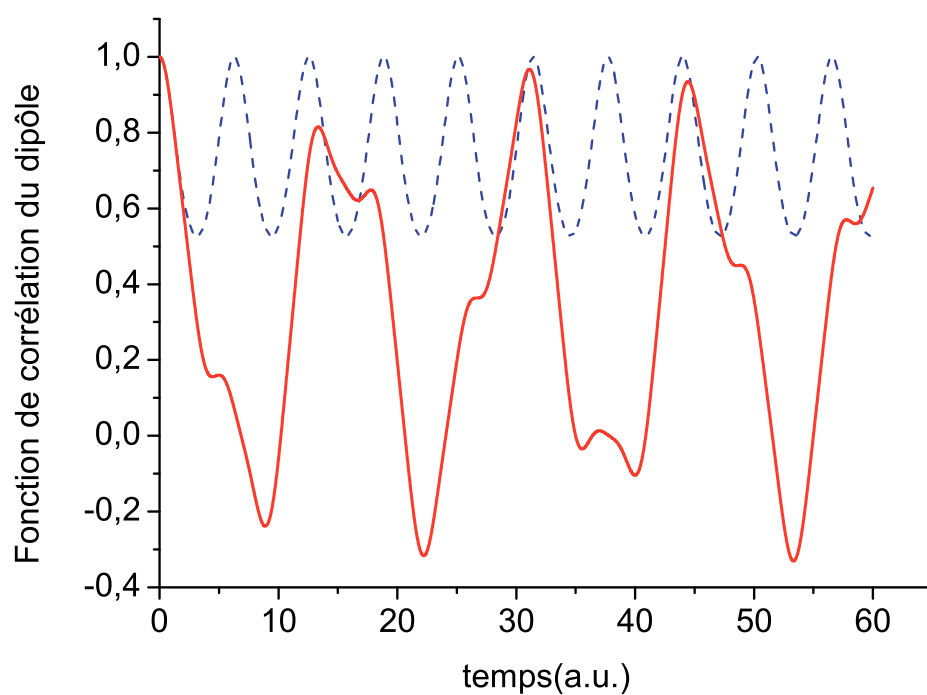


FIGURE 3.5: Comparaison des fonctions d'autocorrélation lorsque la fréquence du champ tournant est proche de l'oscillation liée à l'intensité du champ électrique. Le trait en tirets correspond au calcul sans chronologie.

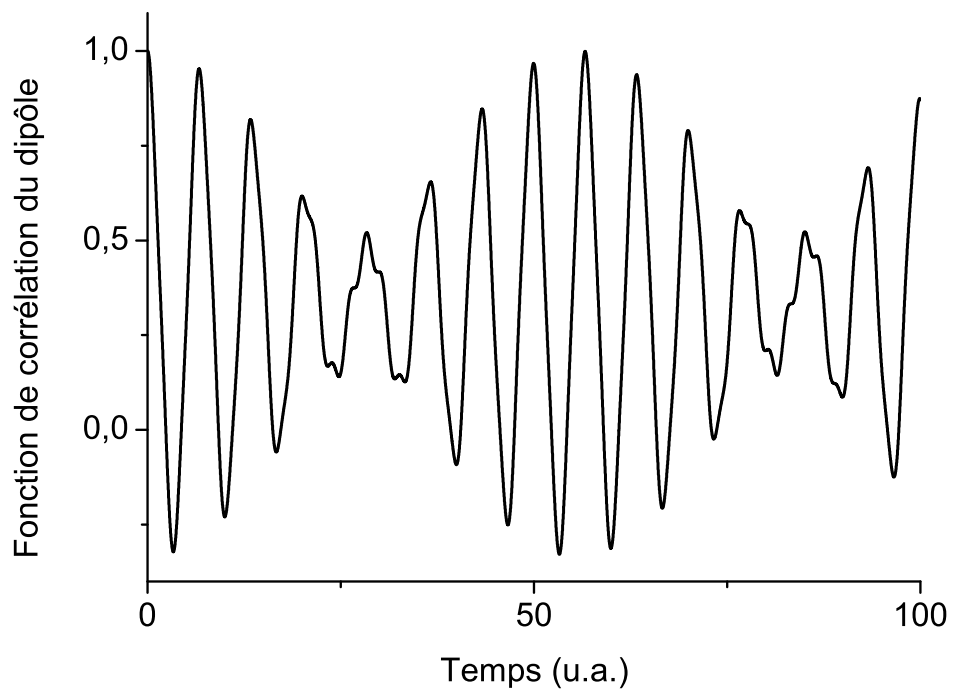


FIGURE 3.6: Mise en évidence d'un phénomène de battement entre la fréquence d'oscillation liée à l'intensité du champ, et celle de la vitesse de rotation du champ (calcul tenant compte de la chronologie).

3.7 Calculs avec champ produit par une collision

Sur le fondement des observations des calculs effectués avec des champs simples, qui ont le mérite d'apporter des éléments de connaissance, mais à partir de situations plus académiques que réalistes, l'analyse d'une collision s'annonce quant à elle intéressante.

Pour des raisons de commodités de calcul qui n'enlèvent aucune généralité aux résultats, on choisit d'écrire l'équation de Schrödinger de l'atome émetteur dans un référentiel où l'axe z tourne avec le champ électrique, à l'endroit où se trouve l'atome hydrogène émetteur. On suppose que ce dernier est excité à l'état $n = 2$ avant le passage de l'ion perturbateur, et on mène les calculs comme précédemment, sans prise en compte de la structure fine. On constate que la force de la collision (proximité de la trajectoire de l'ion avec le lieu de l'atome) entraîne des formes de fonctions d'autocorrélation dipolaire de plus en plus oscillantes. Comme critère permettant de qualifier l'importance de la collision, on détermine un angle de phase α tel que :

$$\alpha = -\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} V_{ij}(t') dt' \quad (3.29)$$

où V_{ij} est un élément de matrice typique de la matrice perturbative $V(t)$.

Lorsque cet angle est de l'ordre de π , on observe sur la figure 3.7 une décorrélation plus rapide, dans une proportion de l'ordre de 40%, lorsque le calcul tient compte de la chronologie, juste après le passage de l'ion devant l'atome lorsqu'il en est le plus proche.

Pour obtenir une perturbation sensiblement plus intense, on rapproche la trajectoire de l'ion de sorte que l'angle de perturbation soit cette fois de l'ordre de 10π . Dans cette situation que l'on peut observer sur la figure 3.8 on constate qu'une oscillation importante prend naissance, à l'approche de l'ion, et se poursuit ensuite dans des proportions semblables, la décorrélation étant beaucoup plus significative lorsque la chronologie est prise en compte. On peut interpréter ce phénomène comme étant lié à la non-adiabaticité de la transition, dont on sait qu'elle contribue de façon significative à la décorrélation. On peut maintenant s'intéresser à un grand nombre de collisions pour en prendre la moyenne et déterminer le profil Lyman- α pour un

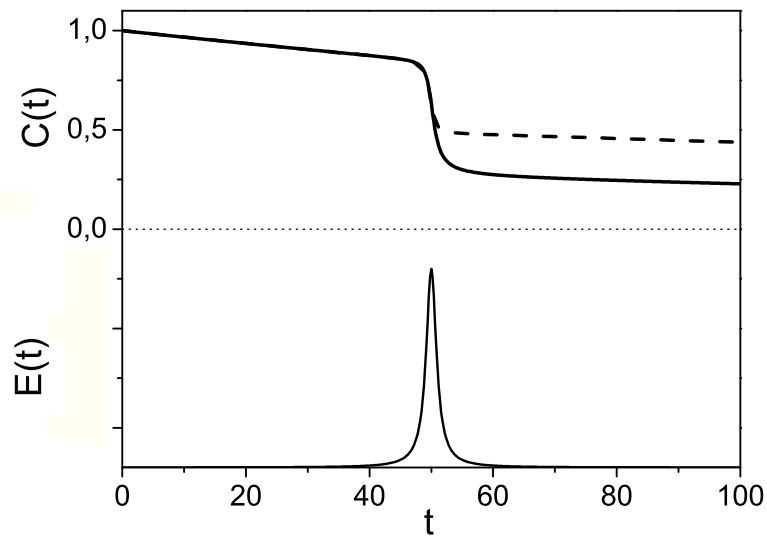


FIGURE 3.7: Fonction d'autocorrélation dipolaire (et raie correspondante) obtenue avec (trait continu) et sans (trait interrompu) prise en compte de la chronologie pour une perturbation modérée (critère $\alpha = \pi$).

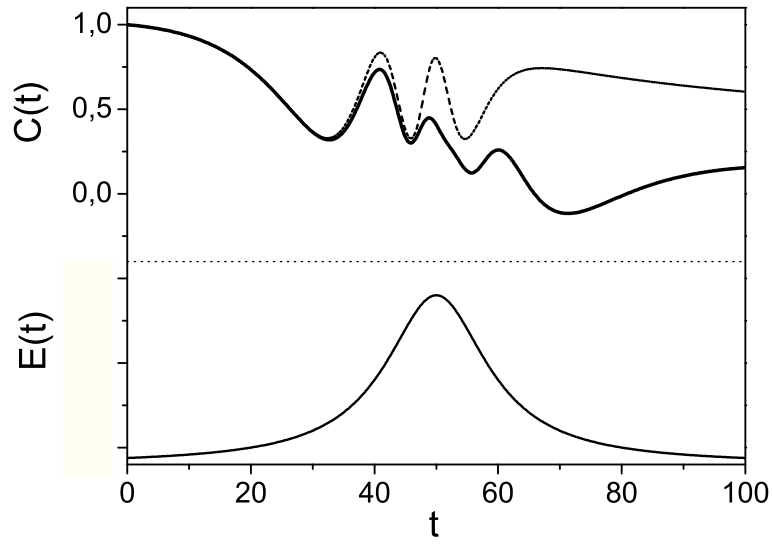


FIGURE 3.8: Fonction d'autocorrélation dipolaire (et raie correspondante) obtenue avec (trait continu) et sans (trait en tirets) prise en compte de la chronologie pour une perturbation forte (critère $\alpha = 10\pi$).

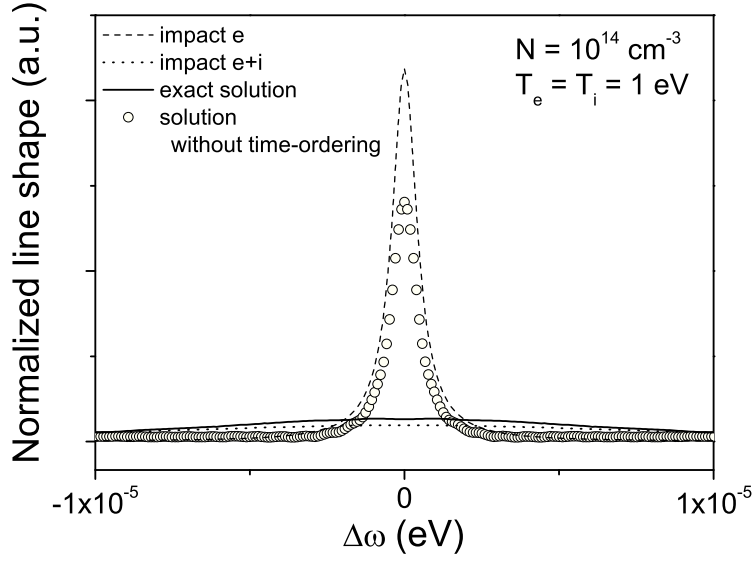


FIGURE 3.9: Profils Lyman- α calculés pour une densité $N = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, et une température $T = 1 \text{ eV}$, obtenus par simulation numérique (trait continu), sans prise en compte de la chronologie (cercles), en approximation impact pour les électrons seuls (trait en tirets) et en approximation impact pour les ions et les électrons (pointillés).

plasma dans lequel la densité $N = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ et la température $T = 1 \text{ eV}$.

La figure 3.9 montre les résultats des calculs obtenus avec et sans chronologie, et dans la limite impact avec les électrons seuls d'une part, et avec électrons et ions d'autre part. On constate que manifestement l'élargissement de la raie prenant en compte la chronologie est beaucoup plus important, ce qui entraîne la nécessité de la respecter pour obtenir un profil réaliste pour Lyman- α . Si l'on n'en tient pas compte, on voit également que le profil devient similaire à celui qu'on obtient avec la composante impact électronique seule. Dans les conditions physiques du modèle de plasma considéré, la solution exacte est en fait plus proche d'un profil obtenu pour les ions et les électrons à la fois, la raie obtenue étant plus large qu'avec les électrons seuls dans une proportion de l'ordre de la racine carré du rapport des masses entre ion et électron.

Le respect de la chronologie dans toute modélisation est donc un impératif à prendre bien en compte dans un formalisme afin d'éviter de perdre une information

significative, responsable d'une part de l'élargissement. La succession des collisions subies par un émetteur dans le temps, si elle est aléatoire en direction et en importance, n'en obéit pas moins cependant à des propriétés statistiques, et on est fondé à envisager un formalisme qui puisse contenir le respect de la chronologie de façon intrinsèque, tout en mettant à profit des représentations fondées sur des considérations physiques, des propriétés statistiques de l'évolution du microchamp électrique. Celui-ci, à condition de le considérer constant par intervalles de temps suffisamment petits, permet dans ce cas de résoudre l'équation de Schrödinger simplement, et d'envisager, à travers une modélisation stochastique, d'en tirer des équations cinétiques fournissant des outils nouveaux de nature à enrichir la connaissance des causes d'élargissement. Une telle approche n'est d'ailleurs pas sans rappeler celle de l'intégrale de chemin, mise à contribution au début de ce travail, fondée sur une succession d'opérateurs d'évolution très proches les uns des autres dans le temps, car concernant des intervalles de temps suffisamment courts. A partir du moment où l'on ne considère plus des intervalles de temps d'attente entre deux valeurs différentes du microchamp de durées identiques, et que ceux-ci obéissent à une loi de probabilité, une modélisation par processus stochastique devient possible.

Chapitre 4

Modélisation stochastique du microchamp

Une approche statistique et probabiliste de l'évolution dans le temps du microchamp électrique généré par les ions d'un plasma, et permettant de modéliser et calculer l'effet Stark, a été initiée en 1970 par Frisch et Brissaud. Cette méthode (MMM : Méthode du Microchamp Modèle) se fonde sur une série d'approximations, au premier rang desquelles on trouve celle considérant les positions des ions comme quasiment statiques, entre deux perturbations subies par un atome émetteur. On assimile le mouvement des ions perturbateurs qui environnent l'atome dans leur globalité à une variation subite du microchamp qu'il perçoit, qui demeure constant durant un intervalle, jusqu'à ce qu'une autre configuration rende cette intensité de champ électrique différente, mais cependant toujours considérée constante, et ainsi de suite, au fur et à mesure de la succession de ces perturbations. Les temps d'attente entre deux valeurs distinctes du champ appartiennent à une fonction de distribution stable et définie. Une autre fonction de distribution fournit quant à elle les valeurs prises par l'intensité du champ électrique, au cours des différents paliers qui se succèdent, et provient de modélisations qui ont permis d'en définir les propriétés statistiques, suivant les conditions physiques considérées [13, 14].

4.1 Modélisation stochastique

Une série de dates t_i au nombre total de N détermine des intervalles de temps durant lesquels, pour chacun d'entre eux, la valeur du vecteur champ électrique E_i (ainsi noté dans toute la suite à la manière d'un scalaire pour simplifier l'écriture) appartient à une certaine distribution. La probabilité pour que la série des valeurs de champ E_i se réalise durant les intervalles de temps $[t_{i+1} - t_i]$ s'écrit :

$$P_N(E_1, t_1; E_2, t_2; \dots; E_N, t_N) \quad (4.1)$$

Puisque les E_i peuvent prendre au cours du temps des valeurs appartenant à une certaine distribution, l'ensemble de toutes les réalisations possibles impose la normalisation :

$$\int dE_1 dE_2 \dots dE_N P_N(E_1, t_1; E_2, t_2; \dots; E_N, t_N) = 1 \quad (4.2)$$

La probabilité conditionnée qui examine celle d'une réalisation s'arrêtant à l'intervalle antérieur, sachant les N intervalles réalisés, et appelée ${}_1P_{N-1}$, s'exprime telle que :

$${}_1P_{N-1}(E_N, t_N | E_1, t_1; \dots; E_{N-1}, t_{N-1}) = P_N / P_{N-1} \quad (4.3)$$

La densité de probabilité de la réalisation à partir de l'événement de rang S jusqu'au rang N , appelée densité réduite P_S s'écrit quant à elle :

$$P_S(E_1, t_1; \dots; E_S, t_S) = \int P_N(E_1, t_1; E_2, t_2; \dots; E_N, t_N) dE_{S+1} \dots dE_N \quad (4.4)$$

En tenant compte de cette écriture, on peut alors exprimer P_2 comme le produit de la probabilité $P_1(E_1, t_1)$ par la probabilité que le rang 2 soit réalisé, sachant le rang 1 réalisé :

$$P_2(E_1, t_1; E_2, t_2) = {}_1P_1(E_2, t_2 | E_1, t_1) P_1(E_1, t_1) \quad (4.5)$$

puis :

$$P_1(E_2, t_2) = \int {}_1P_1(E_2, t_2|E_1, t_1) P_1(E_1, t_1) dE_1 \quad (4.6)$$

avec bien sûr :

$$\int {}_1P_1(E_2, t_2|E_1, t_1) dE_2 = 1 \quad (4.7)$$

Dans le même esprit, on construit la probabilité réduite de rang 2 sur le même principe, et exprimant d'abord la probabilité correspondant aux trois premiers événements telle que :

$$P_3(E_1, t_1; E_2, t_2; E_3, t_3) = {}_1P_2(E_3, t_3|E_2, t_2; E_1, t_1) P_2(E_1, t_1; E_2, t_2) \quad (4.8)$$

Ce qui permet d'écrire P_2 de la façon suivante :

$$P_2(E_1, t_1; E_3, t_3) = \int {}_1P_2(E_3, t_3|E_2, t_2; E_1, t_1) P_2(E_1, t_1; E_2, t_2) dE_2 \quad (4.9)$$

A partir de la définition de la probabilité conditionnée, et en substituant l'expression de P_2 obtenue en 4.5, on obtient finalement pour la probabilité du troisième événement, sachant le premier réalisé :

$${}_1P_1(E_3, t_3|E_1, t_1) = \int {}_1P_2(E_3, t_3|E_2, t_2; E_1, t_1) {}_1P_1(E_2, t_2|E_1, t_1) dE_2 \quad (4.10)$$

Et ainsi de suite, de proche en proche, on établit la probabilité conditionnée de parvenir à l'événement final étant supposé réalisé l'événement initial, selon toute l'histoire pour y parvenir. Cependant, on peut introduire à ce stade une approximation, due à Markov, qui consiste à considérer qu'un événement de rang N ne dépend que de l'événement de rang antérieur $N - 1$. Cela revient à écrire que :

$${}_1P_1(E_N, t_N|E_1, t_1; \dots; E_{N-1}, t_{N-1}) = {}_1P_1(E_N, t_N|E_{N-1}, t_{N-1}) \quad (4.11)$$

Pour $N = 3$, l'équation 4.10 devient l'équation de Chapman-Kolmogorov ou de

Bachelier :

$${}_1P_1(E_3, t_3|E_1, t_1) = \int {}_1P_1(E_3, t_3|E_2, t_2) {}_1P_1(E_2, t_2|E_1, t_1) dE_2 \quad (4.12)$$

Cette fois, à l'aide de cette équation, on peut déterminer, de proche en proche, à la manière des maillons d'une chaîne constituée des probabilités conditionnées successives, l'expression :

$${}_1P_1(E_N, t_N|E_1, t_1) = \int {}_1P_1(E_N, t_N|E_{N-1}, t_{N-1}) \dots {}_1P_1(E_2, t_2|E_1, t_1) \times dE_{N-1} dE_{N-2} \dots dE_2 \quad (4.13)$$

Au-dessus du temps microscopique, il est possible d'obtenir une sorte de vue d'ensemble évoluant dans une échelle de temps sensiblement moins fine, décrite par une équation dite cinétique. On considère alors des intervalles de temps Δt contenant eux-mêmes un grand nombre d'intervalles microscopiques δt séparant deux sauts, autrement dit : $\delta t = t_{i+1} - t_i$. Pour accéder à une telle équation faisant intervenir Δt , c'est-à-dire deux événements éloignés par un grand nombre d'autres, il suffit de reproduire l'équation 4.6 de t_1 jusqu'à t_N :

$${}_1P_1(E_N, t_N) = \int {}_1P_1(E_N, t_N|E_{N-1}, t_{N-1}) {}_1P_1(E_{N-1}, t_{N-1}|E_{N-2}, t_{N-2}) \dots \times P_1(E_1, t_1) dE_{N-1} dE_{N-2} \dots dE_1 \quad (4.14)$$

En utilisant l'équation de Chapman-Kolmogorov telle qu'en l'équation 4.12, on parvient pour un intervalle Δt séparant t_1 de t_N à l'équation :

$$P_1(E_N, t_N) = \int {}_1P_1(E_N, t_N|E_1, t_1) P_1(E_1, t_1) \quad (4.15)$$

Considérant Δt comme l'écart entre $t = t_1$ et $t_N = t_1 + \Delta t$, on suppose que $\Delta t/\delta t \gg 1$ lorsque Δt est suffisamment grand. La statistique étant stationnaire, la probabilité conditionnée ${}_1P_1(E, t + \Delta t|E_1, t_1)$ ne dépend que de Δt , et peut être

notée de manière abrégée : $P_{\Delta t}(E, E_1)$, avec également :

$$P_1(E, t + \Delta t) = \int dE_1 P_{\Delta t}(E, E_1) P_1(E_1, t_1) \quad (4.16)$$

Pour un Δt suffisamment petit, on peut décomposer $P_{\Delta t}(E, E_1)$ selon deux contributions dépendant du taux de transition $W(E, E_1)$:

$$P_{\Delta t}(E, E_1) = A(E)\delta(E - E_1) + \Delta t W(E, E_1) \quad (4.17)$$

avec, grâce à la condition de normalisation 4.2 :

$$A(E) = 1 - \Delta t \int W(E, E_1) dE_1 \quad (4.18)$$

La quantité mésoscopique $P_{\Delta t}(E, E_1)$ peut être exprimée sous la forme d'une équation d'évolution. En vue de parvenir à une telle expression, on utilise l'équation de Chapman-Kolmogorov telle qu'en 4.10, ce qui permet d'écrire :

$$P_{t_3-t_1}(E_3, E_1) = \int P_{t_3-t_2}(E_3, E_2) P_{t_2-t_1}(E_2, E_1) dE_2 \quad (4.19)$$

On insère ensuite dans cette nouvelle expression le développement 4.17 en posant $t = t_2 - t_1$ et $\Delta t = t_3 - t_2$ et on obtient :

$$\begin{aligned} P_{t+\Delta t}(E_3, E_1) = & \left(1 - \Delta t \int W(E', E_1) dx'\right) P_t(E_3, E_1) \\ & + \Delta t \int W(E_3, E_2) P_t(E_2, E_1) \end{aligned} \quad (4.20)$$

Il est maintenant possible de former le taux d'accroissement :

$$[P_{t+\Delta t}(E_3, E_1) - P_t(E_3, E_1)] / \Delta t \quad (4.21)$$

qui lorsque $\Delta t \rightarrow 0$ permet d'établir une équation différentielle appelée équation maîtresse et qui s'écrit :

$$\frac{dP_t(E, E_1)}{dt} = \int W(E, E_2) P_t(E_2, E_1) dE_2 - \int W(E_2, E) P_t(E, E_1) dE_2 \quad (4.22)$$

avec la condition initiale :

$$P_{t=0}(E, E_1) = \delta(E - E_1) \quad (4.23)$$

Cette équation intégral-différentielle peut être résolue avec la connaissance de la quantité $W(E, E_1)$: il s'agit de celle qu'on appelle une équation maîtresse. En l'intégrant sur le temps, on parvient à une équation maîtresse intégrale dont l'expression est la suivante :

$$P_t(E, E_1) = \delta(E - E_1) \Phi_E(t) + \int_0^t dt' \int dE' \Phi_E(t - t') W(E, E') P_{t'}(E', E_1) \quad (4.24)$$

avec :

$$\Phi_E(t) = 1 - \int_0^t dt' \varphi_E(t') \quad (4.25)$$

où $\varphi_E(t)$ suit une loi exponentielle, telle que :

$$\varphi_E(t) = \nu(E) \exp -\nu(E) t \quad (4.26)$$

avec pour $\nu(E)$ l'intégrale sur tous les champs de $W(E, E')$, en moyenne, soit : $\nu(E) = \int dE' W(E', E)$. Quant à $\varphi_E(t)$, on peut l'interpréter comme la densité de probabilité pour que l'intervalle de temps séparant deux valeurs différentes du champ E soit égal à t , pendant que $\Phi_E(t)$ représente la probabilité pour qu'il ne se produise aucun saut durant l'intervalle de temps t . La moyenne des intervalles de temps séparant deux valeurs distinctes du champ E , autrement dit la durée moyenne d'un palier, est donnée par :

$$< \Delta t >_E = \int t \varphi_E(t) dt = \nu(E)^{-1} \quad (4.27)$$

La forme intégrale de l'équation maîtresse, dont l'allure générale est fondée sur les

probabilités $\varphi_E(t)$ et $\Phi_E(t)$, suggère une généralisation à des distributions du temps d'attente non exponentielles, ce qui va faire l'objet d'une discussion ultérieure. On peut également à partir des équations 4.15 et 4.24 établir une équation intégrale pour $P_1(E, t)$:

$$P_1(E, t) = P(E) \phi_E(t) + \int_0^t dt' \int dE' \phi_E(t - t') W(E, E') P(E, t') \quad (4.28)$$

4.2 Le processus “kangourou” au sens de Frisch et Brissaud

Lorsque le taux de transition, $W(E, E')$, peut s'écrire sous la forme d'un produit de deux fonctions dépendant séparément de E et de E' , le processus markovien est appelé processus kangourou par Van Kampen, et cette définition correspond également à celle utilisée par Frisch et Brissaud. En écrivant le taux de transition sous la forme :

$$W(E, E') = q(E) \nu(E') \quad (4.29)$$

On fait apparaître une densité de probabilité $q(E)$ pour que le champ prenne la valeur E immédiatement après le saut suivant. Pour déterminer $q(E)$, on impose que le processus stochastique doit être stationnaire à chaque instant, c'est-à-dire que $P_1(E, t) = P(E)$, où $P(E)$ correspond à la densité de probabilité stationnaire du champ. On peut montrer que l'équation d'évolution de $P_1(E, t)$ admet une solution stationnaire à chaque instant si $q(E)$ est liée à $P(E)$ par la relation suivante :

$$q(E) = \frac{\nu(E) P(E)}{\int \nu(E) P(E) dE} \quad (4.30)$$

Lorsque $\nu(E)$ est une constante, comme c'est le cas pour le processus de Kubo-Anderson, la relation précédente se réduit à :

$$q(E) = P(E). \quad (4.31)$$

L'avantage de l'hypothèse 4.29 est de conduire à une solution analytique pour la

probabilité conditionnée $P_t(E, E')$. On obtient en effet :

$$P_t(E, E_1) = \delta(E - E_1) \Phi_E(t) + \int_0^t dt' \int dE' \Phi_E(t - t') q(E) \nu(E') P_t(E', E) \quad (4.32)$$

En vue de résoudre cette équation, on calcule d'abord la quantité :

$$\int dE \nu(E) P_t(E, E_1) \quad (4.33)$$

puis on multiplie chaque membre de l'égalité par $\nu(E)$, et on intègre sur E . Une transformée de Laplace effectuée sur le temps permet d'aboutir à l'expression suivante :

$$\int dE \nu(E) \widetilde{P}_s(E, E_1) = \frac{\nu(E_1) \widetilde{\Phi}_{E_1}(s)}{1 - \int dE \nu(E) \widetilde{\Phi}_E(s)} \quad (4.34)$$

Pour y parvenir, on a utilisé comme définition de la transformée de Laplace l'expression :

$$\widetilde{F}(s) = \int_0^\infty dt F(t) \exp -st \quad (4.35)$$

et par conséquent :

$$\widetilde{P}_s(E, E_1) = \int_0^\infty dt P_t(E, E_1) \exp -st \quad (4.36)$$

Lorsque $\varphi_E(t)$ suit une exponentielle :

$$\widetilde{\Phi}_E(s) = \frac{1}{s + \nu(E)} \quad (4.37)$$

et finalement la solution de l'équation maîtresse intégrale s'écrit :

$$\widetilde{P}_s(E, E_1) = \frac{1}{s + \nu(E)} \left[\delta(E - E_1) + \frac{q(E) \nu(E_1) / s}{[s + \nu(E_1)] \int dE \frac{q(E)}{s + \nu(E)}} \right] \quad (4.38)$$

Cette solution permet de calculer la fonction d'autocorrélation du champ <

$E(t) E(t') >$ qui ne dépend que de la différence $t - t'$ pour un milieu stationnaire :

$$\begin{aligned} \langle E(t) E(t') \rangle &= \int dE dE' E.E' P_2(E, t, E', t') \\ &\equiv \int dE dE' E.E' P_{t-t'}(E, E') P(E') \quad (4.39) \end{aligned}$$

En considérant que $\nu(E)$ et $q(E)$ sont des fonctions paires, seul le premier terme de l'équation maîtresse 4.38 contribue, et après inversion de la transformée de Laplace, on obtient :

$$\langle E(t) E(0) \rangle = \int dE . E^2 P(E) \exp -\nu(E) t \quad (4.40)$$

Différentes fonctions $\nu(E)$ peuvent être envisagées, ainsi que l'a fait Brissaud, pour déterminer les fonctions d'autocorrélations correspondantes.

4.3 Processus CTRW (marche au hasard en temps continu)

La notion traditionnelle de marche au hasard concerne au départ des événements qui se succèdent à intervalles réguliers. On a vu précédemment que les équations 4.24 ou 4.32 décrivent en fait un processus de marche au hasard temporel où la distribution du temps d'attente entre deux événements suit une loi exponentielle. Dans ce cas, la marche au hasard est continue en temps puisque l'intervalle entre deux événements n'est plus fixé, mais peut prendre toute valeur compatible avec la loi de probabilité. Avec la théorie de la marche au hasard en temps continu, CTRW pour Continuous Time Random Walk, due à Montroll et Weiss [28], on cherche à étendre le modèle de marche au hasard à des distributions de temps d'attente quelconques. On a vu que les équations 4.24 et 4.32 reposent sur l'hypothèse de Markov 4.11. L'approche de Montroll et Weiss permet, en partie, de s'affranchir de cette hypothèse.

Dans le cadre du CTRW nous présentons maintenant un calcul de la probabilité conditionnée $P_t(E, E')$ à partir du formalisme développé par Haus et Kehr [29]. Ce

même formalisme sera utilisé plus loin pour calculer l'opérateur d'évolution atomique moyen dans le cadre de l'effet Stark.

En appelant $\psi_t(E, E')$ la densité de probabilité pour que, juste après un saut ayant lieu à la date t , le champ qui avait pris une valeur E' lors d'un saut antérieur prenne la valeur E , on peut écrire :

$$\int dE \int_0^\infty dt \psi_t(E, E') = 1 \quad (4.41)$$

La densité de probabilité du temps d'attente entre deux sauts, $\varphi_E(t)$ est donnée par la relation :

$$\varphi_E(t) = \int dE' \psi_t(E, E') \quad (4.42)$$

On cherche à établir une équation cinétique pour $P_t(E, E')$, densité de probabilité pour atteindre à la date t un champ d'intensité E , cette date ne coïncidant pas nécessairement avec celle d'un saut, en un nombre de sauts arbitraire, alors qu'initialement le champ valait E' . Cependant, il faut considérer que la nouvelle valeur du champ pourrait aussi bien avoir été atteinte lors d'un saut se produisant exactement à la date t , ou bien lors d'un saut qui s'est produit avant.

Appelons $E(t)$ la variable stochastique pour que le champ électrique passe de la valeur E' à la valeur E , au saut se produisant à la date t . Appelons $Q_m(E, E', t)$ la densité de probabilité pour qu'en m sauts E' devienne E . Pour que l'action se réalise en $m + 1$ sauts plutôt qu'en m , connaissant la probabilité pour celle-ci, on peut écrire :

$$Q_{m+1}(E, E', t) = \int dE_1 \int_0^t d\tau Q_m(E, E_1, t - \tau) \psi_\tau(E_1, E') \quad (4.43)$$

Ce qui revient à dire que le champ commence par prendre la valeur E_1 après un premier saut ayant lieu à l'instant τ avec pour cela la probabilité $\psi_\tau(E_1, E')$, puis, en m sauts atteint la valeur E à la date t , avec la densité de probabilité Q_m . Cette manière de procéder introduit donc une relation de récurrence.

Le nombre de sauts pouvant varier, depuis aucun jusque l'infini à la limite, pour que le champ atteigne la valeur E à l'instant t , on peut définir la densité de probabilité totale pour cet événement en écrivant la somme :

$$Q(E, E', t) = \sum_{m=0}^{\infty} Q_m(E, E', t) \quad (4.44)$$

On aboutit à une équation intégrale permettant d'exprimer $Q(E, E', t)$ telle que :

$$Q(E, E', t) = Q_0(E, E', t) + \int dE_1 \int_0^t d\tau. Q_m(E, E_1, t - \tau) \psi_\tau(E_1, E') \quad (4.45)$$

où $Q_0(E, E', t) = \delta(E - E') \delta(t)$ est la condition initiale.

En définitive, la probabilité conditionnée $P_t(E, E')$ prend la forme :

$$P_t(E, E') = \int_0^t d\tau. \Phi_E(t - \tau) Q(E, E', \tau) \quad (4.46)$$

où Φ_E est toujours le complémentaire intégré de la densité φ_E , à savoir la probabilité pour qu'il n'y ait pas de saut jusqu'à la date t .

Il serait possible également, au lieu de considérer une valeur intermédiaire de champ après un premier saut, puis un nombre variable de sauts pour atteindre la valeur finale, de renverser le point de vue. En considérant plutôt d'abord un nombre variable de sauts pour atteindre la valeur intermédiaire E_1 , puis le dernier saut faisant prendre au champ la valeur E , on parvient alors à une expression pour la probabilité Q de forme légèrement différente à la précédente :

$$Q(E, E', t) = Q_0(E, E', t) + \int dE_1 \int_0^t d\tau. \psi_{t-\tau}(E, E_1) Q(E_1, E', \tau) \quad (4.47)$$

Ces deux expressions couplées avec celle de la probabilité conditionnée $P_t(E, E')$ peuvent être résolues grâce à l'hypothèse de stationnarité, par transformée de Laplace, ce qui conduit pour chaque point de vue à une équation intégrale :

$$\widetilde{P}_S(E, E') = \delta(E - E') \widetilde{\Phi}_E(s) + \int dE_1 \widetilde{P}_S(E, E_1) \widetilde{\psi}_s(E_1, E') \quad (4.48)$$

pour le premier, et :

$$\widetilde{P}_S(E, E') = \delta(E - E') \widetilde{\Phi}_E(s) + \int dE_1 \widetilde{K}_{E, E_1}(s) \widetilde{P}_s(E_1, E') \quad (4.49)$$

pour le second, avec :

$$\widetilde{K_{E,E'}}(s) = \widetilde{\Phi_E}(s) \widetilde{\psi_{E,E'}}(s) \widetilde{\Phi_{E'}}^{-1}(s) \quad (4.50)$$

Ces deux équations intégrales conduisent aux mêmes développements, et si ces derniers convergent elles sont identiques [30]. Elles permettent d'étendre l'équation maîtresse pour $P_t(E, E')$, établie pour des processus markoviens, à d'autres qui ne le sont pas, avec une loi de probabilité quelconque, pour le temps d'attente entre deux sauts $\varphi_E(t)$.

Dans le cas du processus Kangourou, on retrouve l'équation 4.32 en utilisant dans 4.49 pour la probabilité de transition $\psi_t(E, E')$ de passer de E' à E en un temps t :

$$\psi_t(E, E') = \Phi_{E'}(t) q(E) \nu(E') \equiv q(E) \varphi_{E'}(t) \quad (4.51)$$

où $\varphi_E(t)$ suit une loi exponentielle, et où $q(E)$ est la densité de probabilité d'obtenir le champ E juste après un saut. $\psi_t(E, E')$ apparaît donc comme un produit de deux densité de probabilités : celle de sauter au temps t , le champ valant initialement E' , par celle d'atteindre la valeur E après un saut. Cette factorisation peut être exploitée pour étendre les processus Kangourou et CTRW à des distributions de temps d'attente non exponentielles, introduisant ainsi la prise en compte d'un effet mémoire dont on peut explorer les implications sur l'élargissement du profil de raie.

Toutefois lorsque la distribution du temps d'attente dépend du champ, on peut montrer que le processus stochastique n'est pas stationnaire. En d'autres termes, il n'est pas possible de déterminer une fonction $q(E)$ qui rende $P(E, t)$ indépendant du temps et donc d'exprimer $q(E)$ en termes de la probabilité stationnaire $P(E)$. Une telle relation ne peut être obtenue que dans la limite asymptotique des temps plus grands que la durée moyenne du temps d'attente entre deux sauts.

Pour rendre le processus rigoureusement stationnaire, une possibilité consiste à modifier la distribution du temps d'attente pour le premier saut [31],[30]. Ce cas ne sera pas traité dans la suite car nous allons nous restreindre ici au cas où la distribution du temps d'attente reste indépendante du champ. On peut parler d'un modèle CTRW séparable en temps et en champ. Dans ce cas, $q(E)$ est identique à $P(E)$.

4.4 Effet Stark et CTRW

Afin d'exploiter la modélisation CTRW pour le champ électrique perturbateur d'un atome d'hydrogène plongé dans un plasma et d'obtenir le profil correspondant pour la raie Lyman- α , on simplifie l'évolution du champ perçu par l'atome sous la forme d'une succession de paliers constants. En effet, durant chaque palier la solution de l'équation de Schrödinger s'obtient facilement, la perturbation étant constante, et on suppose d'autre part que les propriétés statistiques de l'évolution du champ en fonction du temps sont stationnaires. Les dates de chacun des sauts de la succession ne sont pas fixés à l'avance, mais obéissent à une loi de probabilité conditionnée. Celle-ci respecte la normalisation :

$$\int dE \int_0^\infty \psi_t(E, E') = 1 \quad (4.52)$$

Ainsi qu'elles ont été précédemment définies, $\varphi_E(t)$ et $\Phi_E(t)$ désignent respectivement la densité de probabilité d'avoir un saut et la probabilité de n'en avoir pas durant le temps t . Pour établir l'expression de l'opérateur d'évolution atomique, il convient de le moyenner sur toutes les histoires possibles du champ électrique, représenté par la variable stochastique $E(t)$, continue et constante par intervalles de temps. L'opérateur d'évolution, solution de l'équation :

$$\frac{dU(t)}{dt} = -i(H_0 - d.E(t))U(t) \quad (4.53)$$

s'exprime tel que :

$$U_E(t) = \exp -i(H_0 - d.E)t \quad (4.54)$$

pour chaque palier durant lequel le champ prend une valeur E constante. En respectant l'ordre chronologique de la succession des paliers numérotés par l'ensemble des entiers naturels, l'opérateur d'évolution pour une histoire complète peut s'écrire :

$$U(t) = \prod_{i=1}^{i=m} U_{E_i}(t_i - t_{i-1}) \quad (4.55)$$

produit ordonné avec les indices les plus petits placés à droite, avec $t_m = t$, et i

prenant toutes les valeurs de 0 à m , nombre de sauts effectués pendant la totalité du temps t . Si la valeur initiale du champ électrique est E_1 , et vaut E_{m+1} juste après le dernier saut, l'opérateur d'évolution atomique moyen par unité de champ et de temps a pour expression :

$$T_m(E_{m+1}, E_1, t) = \int_0^t dt_1 \int_{t_1}^t dt_2 \dots \int_{t_{m-2}}^t dt_{m-1} \int dE_2 \dots dE_m \\ \times \prod_{i=1}^m U_{E_i}(t_i - t_{i-1}) \psi_{t_i - t_{i-1}}(E_{i+1}, E_i) \quad (4.56)$$

Naturellement, la chronologie doit être respectée ainsi que cela a été montré précédemment, puisque les opérateurs $U_{E_i}(t_i - t_{i-1})$ ne commutent pas entre eux. Les différents éléments doivent donc être pris en compte successivement depuis la gauche de l'expression. Pour les premiers sauts, pour lesquels m prend les valeurs 0, 1, 2 et 3, on obtient ainsi les quatre premières relations :

$$T_0(E = E_1, E_1, t) = \delta(E - E_1) \delta(t) I \quad (4.57)$$

$$T_1(E_2, E_1, t) = U_{E_1}(t) \psi_t(E_2, E_1) \quad (4.58)$$

$$T_2(E_3, E_1, t) = \int_0^t dt_1 \int dE_2 U_{E_2}(t - t_1) \psi_{t_1}(E_2, E_1) \psi_{t-t_1}(E_3, E_2) \quad (4.59)$$

$$T_3(E_4, E_1, t) = \int_0^t dt_1 \int_{t_1}^t dt_2 \int dE_2 \int dE_3 U_{E_1}(t_1) U_{E_2}(t_2 - t_1) U_{E_3}(t - t_1) \\ \times \psi_{t_1}(E_2, E_1) \psi_{t_2 - t_1}(E_3, E_2) \psi_{t - t_2}(E_4, E_3) \quad (4.60)$$

avec I opérateur identité. En faisant apparaître l'opérateur $T_2(E_4, E_2, t - t_1)$ au sein de $T_3(E_4, E_1, t)$, cette dernière peut être réécrite de la façon suivante :

$$T_3(E_4, E_1, t) = \int_0^t dt_1 \int dE_2 U_{E_1}(t_1) \psi_{t_1}(E_2, E_1) T_2(E_4, E_2, t - t_1) \quad (4.61)$$

En raisonnant par récurrence, on aboutit à la relation ordonnée suivante :

$$T_{m+1}(E, E_1, t) = \int dE' \int_0^t d\tau \psi_{t-\tau}(E', E_1) U_{E_1}(t - \tau) T_m(E, E', \tau) \quad (4.62)$$

Ainsi formulée, cet opérateur peut être vu comme une décomposition en deux parties, la première permettant de réaliser d'abord la valeur E' avec la densité de probabilité $\psi_{t-\tau}(E', E_1) U_{E_1}$ à l'instant $t - \tau$, puis la seconde permettant d'atteindre la valeur E avec m sauts et selon l'opérateur $T_m(E, E', \tau)$. Pour tous les nombres de sauts possibles, l'opérateur moyen $T(E, E', t)$ permettant de passer de la valeur initiale E' à la valeur E à l'instant t juste après un saut doit tenir compte de toutes les valeurs de m , y compris la valeur $m = 0$:

$$T(E, E', t) = \sum_{m=0}^{\infty} T_m(E, E', t) \quad (4.63)$$

En sommant la relation de récurrence 4.62 sur le nombre de sauts, on établit une équation intégrale pour $T(E, E', t)$:

$$T(E, E', t) = T_0(E, E', t) + \int dE_1 \int_0^t d\tau \psi_{t-\tau}(E_1, E') U_{E'}(t - \tau) T(E, E_1, \tau) \quad (4.64)$$

Finalement, cet opérateur $T_t(E, E')$ sur un intervalle de temps t quelconque, tenant compte du fait que l'atome qui vient de subir un dernier saut de champ à l'instant τ , peut rester tout le temps restant $t - \tau$ sans subir une autre variation de champ, s'écrit :

$$T_t(E, E') = \int_0^t d\tau T(E, E', \tau) U_E(t - \tau) \Phi_E(t - \tau) \quad (4.65)$$

En reportant l'expression de $T(E, E', t)$ dans celle de $T_t(E, E')$, on aboutit à

l'équation intégrale :

$$T_t(E, E') = \delta(E - E') \Phi_E(t) U_E(t) + \int_0^t d\tau \int dE_1 \psi_{t-\tau}(E_1, E') U_{E'}(t - \tau) T_\tau(E, E_1) \quad (4.66)$$

Pour obtenir l'opérateur d'évolution atomique final, à partir duquel on calcule le profil de raie, il reste à moyenner cette expression sur E et E' en se donnant la probabilité $P_1(E')$ du champ électrique initial E' . Finalement, il vient :

$$T(t) = \int dE \int dE' P_1(E') T_t(E, E') \quad (4.67)$$

L'équation 4.66 peut être résolue analytiquement si on utilise l'hypothèse 4.51. Supposons que l'on puisse définir la probabilité $q(E)$ en terme de la distribution statique du champ $P(E)$, ce qui est effectivement le cas si la distribution du temps d'attente est exponentielle, ou même quelconque, mais en tous cas indépendante du champ. En reportant 4.51 dans 4.66, on obtient l'équation intégrale suivante :

$$T_t(E, E') = \delta(E - E') \Phi_E(t) U_E(t) + \int_0^t d\tau \int dE_1 q(E_1) \varphi_{E'}(t - \tau) U_{E'}(t - \tau) T_\tau(E, E_1) \quad (4.68)$$

Pour résoudre cette équation, on introduit les quantités :

$$\begin{aligned} X_E(t) &= \varphi_E(t) U_E(t) \\ Y_E(t) &= \Phi_E(t) U_E(t) \end{aligned} \quad (4.69)$$

Après avoir effectué une transformée de Laplace de la nouvelle forme de $T_t(E, E')$ telle qu'en 4.68 on calcule la quantité auxiliaire $\int dE' q(E') \tilde{T}_S(E, E')$:

$$\int dE' q(E') \tilde{T}_S(E, E') = \left[I - \int dE q(E) \tilde{X}_E(s) \right]^{-1} q(E) \tilde{Y}_E(s) \quad (4.70)$$

ce qui conduit, en l'injectant dans l'équation intégrale de $T_t(E, E')$, à la solution suivante :

$$\tilde{T}_S(E, E') = \delta(E - E') \tilde{Y}_E(s) + \tilde{X}_{E'}(s) \left[I - \int dE q(E) \tilde{X}_E(s) \right]^{-1} q(E) \tilde{Y}_E(s) \quad (4.71)$$

Finalement en reportant ce résultat dans 4.67 on obtient l'opérateur recherché :

$$\begin{aligned} \tilde{T}(s) &= \int dE P_1(E) \tilde{Y}_E(s) \\ &+ \int dE P_1(E) \tilde{X}_E(s) \left[I - \int dE q(E) \tilde{X}_E(s) \right]^{-1} \int dE q(E) \tilde{Y}_E(s) \end{aligned} \quad (4.72)$$

avec les quantités :

$$\begin{aligned} \tilde{X}_E(s) &= \int_0^\infty dt \varphi_E(t) \exp - (s + iH_0 - id.E) t \\ \tilde{Y}_E(s) &= \int_0^\infty dt \Phi_E(t) \exp - (s + iH_0 - id.E) t \end{aligned} \quad (4.73)$$

Dans le cas du processus Kangourou standard (selon hypothèse 4.51), où la densité de probabilité du temps d'attente suit une loi exponentielle, telle que :

$$\varphi_E(t) = \nu(E) \exp -\nu(E) t \quad (4.74)$$

on vérifie les relations suivantes :

$$\begin{aligned} \tilde{X}_E(s) &= \nu(E) \tilde{U}_E[s + \nu(E)] \\ \tilde{Y}_E(s) &= \tilde{U}_E[s + \nu(E)] \end{aligned} \quad (4.75)$$

avec :

$$\tilde{U}_E(s) = (s + iH_0 - id.E)^{-1} \quad (4.76)$$

En reprenant l'équation 4.71 avec ces expressions, celle-ci devient :

$$\begin{aligned} \tilde{T}_S(E, E') &= \delta(E - E') \tilde{U}_E[s + \nu(E)] + \nu(E') \tilde{U}_{E'}[s + \nu(E')] \\ &\times \left[I - \int dE q(E) \nu(E) \tilde{U}_E[s + \nu(E)] \right]^{-1} q(E) \tilde{U}_E[s + \nu(E)] \quad (4.77) \end{aligned}$$

et la transformée de Laplace de l'opérateur $\tilde{T}(t)$ devient quant à elle :

$$\begin{aligned} \tilde{T}(s) &= \int dE P_1(E) \tilde{U}_E[s + \nu(E)] + \int dE' P_1(E') \nu(E') \tilde{U}_{E'}[s + \nu(E')] \\ &\times \left[I - \int dE q(E) \nu(E) \tilde{U}_E[s + \nu(E)] \right]^{-1} \int dE q(E) \tilde{U}_E[s + \nu(E)] \quad (4.78) \end{aligned}$$

avec $q(E) = \nu(E) P_1(E) / \int \nu(E) P_1(E) dE$. Cette solution est identique à celle présentée par Brissaud [32].

4.5 Processus CTRW séparable

On s'intéresse à un cas particulier de la factorisation de la densité de probabilité de transition $\psi_t(E, E')$, celui où la distribution du temps d'attente est totalement indépendante de la valeur du champ électrique, les densités $q(E)$ et $\varphi(t)$ sont alors séparables l'une de l'autre, et la dernière peut être choisie selon une loi différente d'une loi exponentielle. Dans ce cas, l'expression du profil de raie devient :

$$\begin{aligned} \tilde{T}(s) &= \left[\int dE . P(E) \tilde{Y}_E(s) \right] \\ &+ \left[\int dE . P(E) \tilde{X}_E(s) \right] \left[I - \int dE . q(E) \tilde{X}_E(s) \right] \left[\int dE . q(E) \tilde{Y}_E(s) \right] \quad (4.79) \end{aligned}$$

avec :

$$\tilde{X}_E(s) = \int_0^\infty dt. \varphi(t) \exp - (s + iH_0 - id.E) t \quad (4.80)$$

et :

$$\tilde{Y}_E(s) = \int_0^\infty dt. \Phi(t) \exp - (s + iH_0 - id.E) t \quad (4.81)$$

où $\Phi(t) = 1 - \int_0^\infty dt' \varphi(t')$, autrement dit la probabilité pour qu'aucun saut n'ait lieu.

Dans ce cadre, $q(E) = P(E)$, et l'expression du profil peut alors se simplifier de la façon suivante :

$$\tilde{T}(s) = \left[I - \int dE. P(E) \tilde{X}_E(s) \right]^{-1} \left[\int dE. P(E) \tilde{Y}_E(s) \right] \quad (4.82)$$

avec :

$$\tilde{Y}_E(s) = \tilde{U}_E(s) \left(I - \tilde{X}_E(s) \right) \quad (4.83)$$

En vue de rendre la fonction de distribution du temps d'attente plus large sur les durées longues, on peut introduire une fonction Gamma [33] du type $\Gamma(a) = \int_0^\infty t^{a-1} e^{-t} dt$, de sorte que :

$$\varphi(t) = \frac{\nu}{\Gamma(a)} (\nu t)^{a-1} \exp - \nu t \quad (4.84)$$

où le paramètre $a \geq 1$. Les transformées de Laplace correspondantes sont :

$$\tilde{\varphi}(t) = \frac{1}{\left(1 + \frac{s}{\nu}\right)^a} \quad (4.85)$$

et :

$$\tilde{\Phi}(t) = \frac{1}{s} \left(1 - \frac{1}{\left(1 + \frac{s}{\nu}\right)^a} \right) \quad (4.86)$$

On a :

$$\tilde{X}_E(s) = [1 + (s + iH_0 - id.E) / \nu]^{-a} \quad (4.87)$$

et $\tilde{Y}_E(s)$ s'obtient en exploitant 4.83. On remarque que si le paramètre a est choisi égal à l'unité, on revient à la loi exponentielle.

4.6 Calcul numérique de l'effet Stark avec loi exponentielle pour le temps d'attente entre deux sauts

Les travaux de Frisch et Brissaud [34, 32] pour la raie Lyman- α peuvent être revisités par simulation numérique, en particulier lorsque la fonction d'attente suit une loi exponentielle, dans le cas quasi-statique. En vue d'y parvenir, un certain nombre de choix et de calculs analytiques sont nécessaires. Le modèle de champ électrique utilisé est celui conforme à la fonction de distribution de Hooper [13]. Celle-ci étant tabulée, une interpolation s'avère indispensable pour fournir des valeurs de champ en dehors des points de la tabulation. La méthode retenue est celle des "spline", qui a l'avantage d'éviter le phénomène de Runge (qui entraîne que l'augmentation du nombre de points d'interpolation, dans une approximation polynomiale, ne constitue pas nécessairement à une amélioration de l'approximation, mais au contraire sa dégradation). A l'intérieur de chaque palier de temps, l'opérateur d'évolution atomique moyen s'obtient aisément, puisque le champ électrique est considéré constant pendant toute la durée de l'intervalle, et s'exprime :

$$U(t)_{QS} = \langle U_E(t) \rangle_{QS} = \int U_E(t) P(E) dE \quad (4.88)$$

où l'indice QS rappelle la condition quasi-statique pour les ions du plasma dans lequel baigne l'atome émetteur considéré, et $P(E)$ est la fonction de distribution du champ électrique de Hooper. La connaissance des éléments de cet opérateur est nécessaire pour poursuivre. Avant de s'y atteler, il convient de constater que la moyenne angulaire de ses éléments de matrice est nulle ailleurs que sur la diagonale, ce que nous allons démontrer.

Il est possible, à l'aide d'un changement de base judicieux proposé par Frerichs

[35] dans le cadre d'un travail menant à une simulation complète des conditions physiques, de manipuler une matrice perturbative à coefficients tous réels, ce qui facilite grandement les calculs.

On choisit un ensemble de vecteurs d'état $|0\rangle$, $|1\rangle$, $|2\rangle$ et $|3\rangle$, définis ainsi :

$$|0\rangle = |200\rangle,$$

$$|1\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}} (|211\rangle - |21-1\rangle),$$

$$|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|211\rangle + |21-1\rangle),$$

$$|3\rangle = |210\rangle.$$

Ceci permet de construire la matrice de passage P suivante :

$$P = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & & & -i \\ & \frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \\ & \frac{-i}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \end{pmatrix} \quad (4.89)$$

avec (transposée conjuguée) :

$$P^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & \frac{-i}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} & \\ & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \\ & i & & \end{pmatrix} \quad (4.90)$$

On obtient, en appliquant le changement de base à la matrice $V(t)$:

$$P^{-1}V(t)P = 3ea_0 \begin{pmatrix} & \frac{i}{\sqrt{2}}(-E_{+1} - E_{-1}) & \frac{-1}{\sqrt{2}}(E_{+1} + E_{-1}) & -iE_z \\ \frac{-i}{\sqrt{2}}(E_{-1} - E_{+1}) & & & \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(E_{-1} + E_{+1}) & & & \\ -iE_z & & & \end{pmatrix} \quad (4.91)$$

Puis, en tenant compte de $E_{\pm 1} = \mp (E_x \pm iE_y) / \sqrt{2}$ on aboutit à la matrice qui, multipliée par $\frac{i}{\hbar}$ donne :

$$P^{-1}V(t)P = \frac{3ea_0}{\hbar} \begin{pmatrix} & -E_x & -E_y & E_z \\ E_x & & & \\ E_y & & & \\ -E_z & & & \end{pmatrix} \quad (4.92)$$

N'apparaissent dans cette expression matricielle que des coefficients réels : les coordonnées du champ électrique.

Compte-tenu de la symétrie sphérique du système, il est naturel de changer de système de coordonnées en exprimant les composantes du champ électrique suivant son module E et ses angles φ dans le plan x, y et θ selon l'axe z , propres aux coordonnées sphériques. La matrice de la perturbation devient :

$$V_S = \frac{3ea_0}{\hbar} \begin{pmatrix} & -E \sin \theta \cos \varphi & -E \sin \theta \sin \varphi & E \sin \theta \\ E \sin \theta \cos \varphi & & & \\ E \sin \theta \sin \varphi & & & \\ -E \sin \theta & & & \end{pmatrix} \quad (4.93)$$

Dans l'intervalle de temps où le champ électrique est considéré constant, la résolution de l'équation de Schrödinger pour l'opérateur d'évolution nécessite la connaissance de l'exponentielle E_{VS} de la matrice $V_S \Delta t$. De six termes non nuls on aboutit à une matrice dont plus aucun terme n'est nul, et dont il faut alors déterminer la moyenne angulaire. Celle-ci s'obtient en intégrant chacun des termes selon le modèle :

$$\langle E_{VSij} \rangle_{\theta, \varphi} = \frac{3ea_0}{\hbar} \frac{1}{4\pi} \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi E_{VSij} \Delta t \quad (4.94)$$

On constate alors que tous les termes $\langle E_{VSij} \rangle_{\theta, \varphi}$ sont nuls pour $i \neq j$, et que seul les termes diagonaux ne le sont pas. Le terme $\langle E_{VS11} \rangle_{\theta, \varphi} = \cos \left(\frac{3ea_0}{\hbar} E \Delta t \right)$, et les trois autres sont identiques, avec :

$$\langle E_{VS22} \rangle_{\theta, \varphi} = \langle E_{VS33} \rangle_{\theta, \varphi} = \langle E_{VS44} \rangle_{\theta, \varphi} = \frac{1}{3} \left[2 + \cos \left(\frac{3ea_0}{\hbar} E \Delta t \right) \right] \quad (4.95)$$

La trace réduite aux éléments pour lesquels $l = 1$ est donc égale à : $2 + \cos\left(\frac{3ea_0}{\hbar} E \Delta t\right)$.

4.7 Transformée de Laplace de l'opérateur d'évolution

La fonction de temps d'attente entre deux sauts faisant intervenir une loi exponentielle, qui s'écrit :

$$\varphi(t) = \nu \exp -\nu t \quad (4.96)$$

fait intervenir une fréquence de saut ν est supposée constante, et indépendante de la valeur du champ. L'opérateur d'évolution moyenné sur toutes les histoires possibles de champ s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \langle U(t, 0) \rangle_{PSP} = & \exp(-\nu t) U_{QS}(t) \\ & + \int_0^t \nu \exp -\nu(t-t_1) U_{QS}(t-t_1) \langle U(t_1, 0) \rangle_{PSP} dt_1 \end{aligned} \quad (4.97)$$

Dans cette expression, l'indice *PSP* rappelle à la manière de Frisch et Brissaud que l'on a choisi une fonction d'attente suivant une loi exponentielle, et dont la répartition des dates de sauts est distribuée selon une loi de Poisson (Poisson Step Process). Le premier terme représente la contribution du cas où aucun saut n'a eu lieu durant le temps t , et le second fait la somme des contributions de tous les instants t_1 possibles auxquels le dernier saut a eu lieu, en tenant compte de l'évolution moyenne jusqu'à t_1 , avec $\langle U(t_1, 0) \rangle_{PSP}$.

Pour transposer $\langle U(t, 0) \rangle_{PSP}$ dans le domaine spectral en vue d'obtenir le profil de raie, on effectue une transformée de Laplace, et on obtient :

$$\langle \tilde{U}(\omega) \rangle_{PSP} = \left\{ I - \nu \tilde{U}_{QS}(\omega + i\nu) \right\}^{-1} \tilde{U}_{QS}(\omega + i\nu) \quad (4.98)$$

La matrice de $\tilde{U}_{QS}$ est relativement simple, à moitié creuse, et se présente sous la forme suivante, en considérant un champ électrique colinéaire à l'axe z du référentiel de l'atome, ce qui n'affecte en rien la généralité des calculs :

$$\begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & & \\ r_{12} & r_{22} & & \\ & & r_{33} & \\ & & & r_{33} \end{pmatrix} \quad (4.99)$$

avec donc quatre termes différents seulement, tels que :

$$\begin{aligned} r_{11} &= \frac{[(\phi_1 + \nu) + i\omega]}{\Delta_1} \\ r_{12} &= \frac{-3ea_0 E_z}{\Delta_1} \\ r_{22} &= \frac{[(\phi_0 + \nu) + i\omega]}{\Delta_1} \\ r_{33} &= \frac{1}{[(\phi_1 + \nu) + i\omega]} \\ \Delta_1 &= (i\omega + \phi_0)(i\omega + \phi_1) + (3ea_0 E_z)^2 \end{aligned} \quad (4.100)$$

On en déduit l'expression de celle de $\langle \tilde{U}(\omega) \rangle_{PSP}$ qui s'écrit :

$$\begin{pmatrix} \frac{(1-\nu r_{22})r_{11}+\nu r_{12}^2}{\Delta} & \frac{(1-\nu r_{22})r_{12}+\nu r_{12}r_{22}}{\Delta} & & \\ \frac{\nu r_{11}r_{12}+(1-\nu r_{11})r_{12}}{\Delta} & \frac{\nu r_{12}^2+(1-\nu r_{11})r_{22}}{\Delta} & & \\ & & \frac{r_{33}}{1-\nu r_{33}} & \\ & & & \frac{r_{33}}{1-\nu r_{33}} \end{pmatrix} \quad (4.101)$$

et avec la quantité Δ telle que :

$$\Delta = (1 - \nu r_{11})(1 - \nu r_{22}) - \nu^2 r_{12}^2 \quad (4.102)$$

Le profil de raie correspondant est donné par la partie réelle de la trace de $\langle \tilde{U}(\omega) \rangle_{PSP}$ réduite aux éléments pour lesquels le nombre atomique quantique $m = 0$, soit les trois derniers, et s'exprime donc, puisque les deux derniers sont identiques :

$$I(\omega) = \Re \left[(3\pi)^{-1} \left(\langle \tilde{U}(\omega) \rangle_{PSP_{22}} + 2 \langle \tilde{U}(\omega) \rangle_{PSP_{33}} \right) \right] \quad (4.103)$$

La quantité $(3\pi)^{-1}$ normalise le profil obtenu. Il ne reste plus qu'à programmer les calculs en langage FORTRAN qui vont permettre les intégrations progressives à chaque pas de temps, et établir les profils de raie correspondant à différentes conditions physiques du plasma, pour pouvoir comparer avec les profils de référence.

4.8 Profils obtenus par calcul numérique

Le code produit en FORTRAN 90 utilise un paramètre réduit, $\beta = \frac{E}{E_0}$, dans lequel $E_0 = \frac{e}{r_0^2}$ est, en unités CGS, le champ électrique moyen de la distribution de Hooper, afin de simplifier l'obtention des intégrations. L'équation 4.103 permet de déterminer pas à pas les valeurs prises par l'intensité de la raie en fonction de la fréquence, puis de tracer le profil, et le comparer, dans différentes conditions physiques, à la limite statique, d'une part en utilisant un temps d'attente suivant une loi exponentielle conduisant à des dates de sauts distribuées selon une loi de Poisson, et d'autre part un temps d'attente mettant en scène une fonction gamma, comme évoqué plus haut, qui permet de favoriser les temps d'attente dont la moyenne est au-dessus de celle d'une loi exponentielle. Dans le cas étudié, nous avons choisi d'étudier le cas du paramètre $a = 2$.

La figure 4.1 montre les résultats obtenus pour une température $T = 10000 K$ et une densité élevée $n_e = 10^{17} cm^{-3}$. On prend en référence la limite statique (trait pointillé). On constate que les deux types de temps d'attente, qui prennent en compte la dynamique des ions, conduisent à un élargissement supérieur de l'ordre de 40%. Le rôle de la dynamique des ions est établi de longue date sur ce type de profil, et son importance est confirmée par ces calculs. Entre les deux profils avec loi exponentielle d'une part et avec fonction gamma d'autre part, on note un écart de l'ordre de 15% qui semble accréditer la présence d'effets non markoviens. Avec la densité envisagée dans ce calcul, on constate que le profil obtenu avec loi exponentielle est plus élargi qu'avec la fonction d'attente utilisant une gamma, ce qui suggère que les effets de mémoire tendraient à se rapprocher d'un comportement plus proche de la limite statique.

Sans changer de température, on peut effectuer de nouveaux calculs avec cette fois une densité beaucoup plus faible, de quatre ordres de grandeur, soit $n_e = 10^{13} cm^{-3}$. Dans cette situation, le plasma est beaucoup plus cinétique, et assez

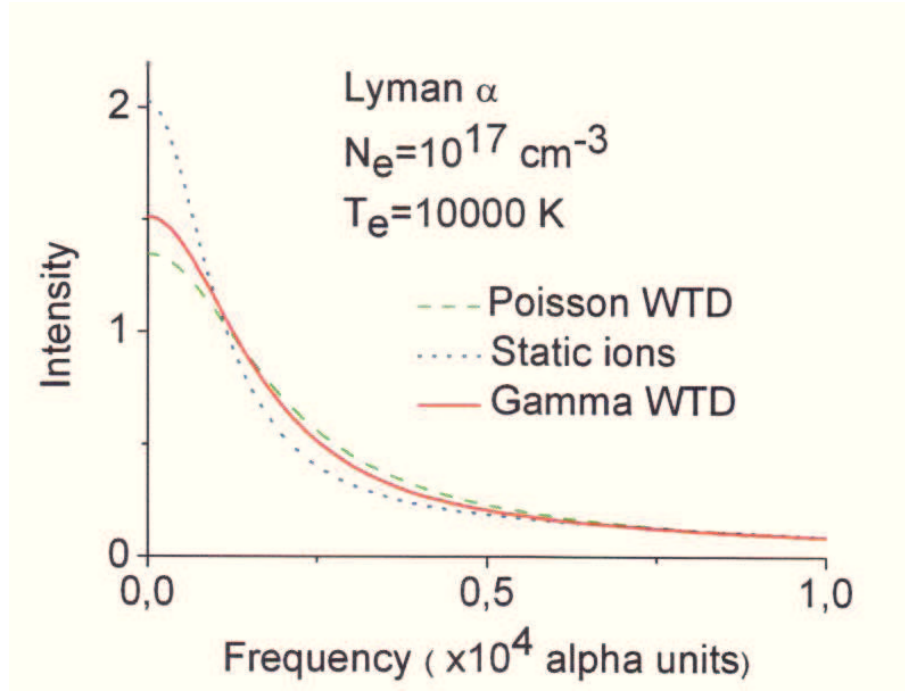


FIGURE 4.1: Profils Lyman- α pour une densité $n_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ et une température $T = 10000 \text{ K}$. Le trait pointillé montre le profil de la limite statique, choisi en référence. Les deux autres, qui tiennent compte de la dynamique des ions, montrent les résultats numériques obtenus pour un temps d'attente entre deux sauts du champ électrique suivant une loi exponentielle (trait en tirets), ainsi que pour un temps d'attente dirigé par une fonction gamma (trait continu), avec comme valeur de paramètre $a = 2$.

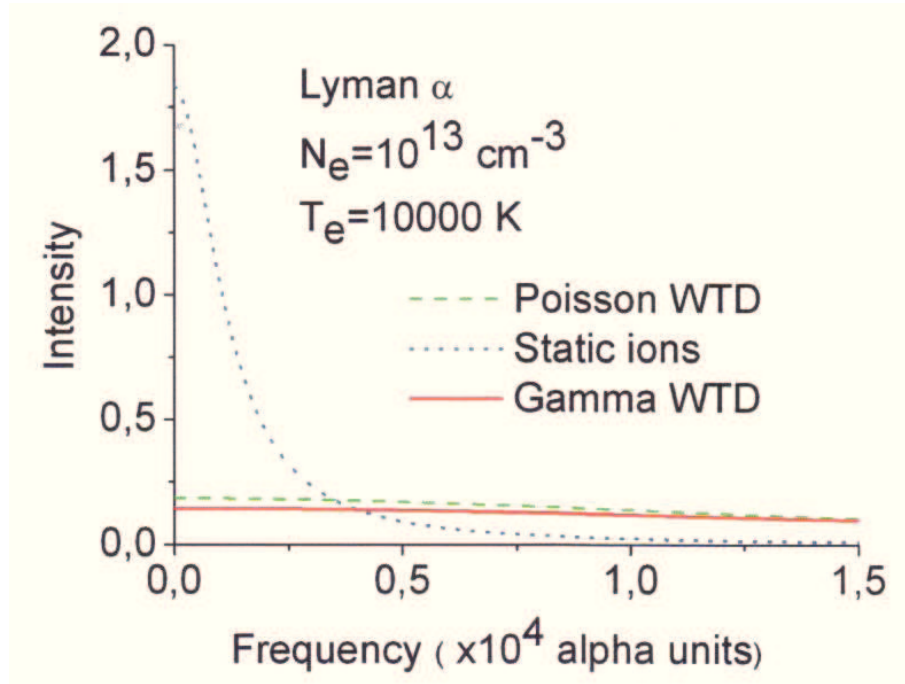


FIGURE 4.2: Profils Lyman- α pour une densité $n_e = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ et une température $T = 10000 \text{ K}$. Le trait pointillé montre le profil de la limite statique, choisi en référence. Les deux autres, qui tiennent compte de la dynamique des ions, montrent les résultats numériques obtenus pour un temps d'attente entre deux sauts du champ électrique suivant une loi de exponentielle (trait en tirets), ainsi que pour un temps d'attente dirigé par une fonction gamma (trait continu), avec comme valeur de paramètre $a = 2$.

éloigné de la limite statique. On est alors très proche des hypothèses de la limite impact pour les ions. Ceci explique la différence très importante observée entre celle-ci et la limite statique, comme le montre la figure 4.2. La légère différence entre les deux profils prenant en compte la dynamique des ions suggère à nouveau la présence d'effets non markoviens, avec cette différence que cette fois, à basse densité, c'est la profil obtenu avec un temps d'attente selon une fonction gamma qui est plus large que celui obtenu avec une loi exponentielle.

On constate en observant ces calculs que la loi régissant le temps d'attente entre deux sauts du microchamp électrique a une influence non négligeable sur l'élargissement du profil Stark de la raie Lyman- α . Ils sont cependant fondés sur une fréquence de saut moyenne constante, et il resterait à déterminer l'influence qu'aurait sur les

profils une fréquence non constante. Mais déjà, avec une fréquence constante, les différences sont significatives entre les deux modèles mettant en scène l'approche CTRW, celle utilisant un temps d'attente conforme à une loi exponentielle, et celle exploitant une fonction gamma. Il reste à étendre le travail accompli à d'autres lois de temps d'attente, pour mieux établir l'importance de celles-ci et leur rôle dans l'élargissement du profil.

Chapitre 5

Simulation de processus stochastiques

Une alternative existe au calcul du profil de raie fondé sur les grandeurs statistiques des processus stochastiques modélisant l'évolution du champ électrique : c'est la simulation elle-même de ces processus, par tirage aléatoire, comme l'ont fait Seidel [31] ou Frerichs [35]. Dans une telle approche, qui fait dans ce travail l'objet à nouveau d'un calcul numérique, les dates auxquelles un saut intervient sont obtenues par tirage aléatoire en vérifiant que le temps d'attente obtenu est chaque fois bien conforme à la loi exponentielle. De la même façon, chaque valeur de champ électrique obtenue après un saut est tirée aléatoirement, et on s'assure qu'elle appartient bien à la distribution de Hooper, à l'exception du premier pas du temps. En effet, lorsque l'on démarre une histoire de champ, la valeur initiale n'a aucune raison particulière de coïncider avec un saut à la date zéro, ce qui, pour tenir compte de ce fait demande de considérer une fonction de distribution différente pour les conditions initiales.

5.1 Construction d'une histoire de champ électrique

On considère que le champ ne varie ni en module ni en direction entre deux sauts successifs, mais seulement à l'instant d'un saut. Dans ces conditions, les éléments de matrice de l'opérateur d'évolution demeurent constants également entre deux sauts. A l'instant t_n , la valeur de l'opérateur d'évolution est ainsi simplement le produit

ordonné de ses valeurs successives aux instants antérieurs depuis l'instant zéro, soit :

$$U(t_n, 0) = U(t_n, t_{n-1}) U(t_{n-1}, t_{n-2}) \dots U(t_1, 0) \quad (5.1)$$

Pour chaque histoire de champ faisant l'objet d'une simulation, aux dates successives qui rythment les valeurs constantes de ses paliers, correspondent parallèlement les plages temporelles pendant lesquelles l'opérateur d'évolution prend également des valeurs constantes. Ceci conduit à une valeur approximative de l'évolution d'une certaine histoire, avec une résolution moyenne sur le temps égale à l'inverse de la fréquence moyenne de saut. En appliquant cette méthode à la raie Lyman- α , on peut voir sur la figure 5.1 comment s'ajoutent pour deux histoires de champ distinctes les fonctions d'autocorrélation dipolaires correspondantes. On constate sur cette figure que la somme induit l'accroissement du nombre de dates auxquelles le champ change de valeur, autrement dit le nombre de sauts. Avec un nombre suffisant d'histoires conduisant à autant de fonctions d'autocorrélations ajoutées les unes aux autres, on parvient à une somme lissée suffisamment régulière pour qu'une transformation de Fourier-Laplace soit pertinente afin d'obtenir le profil de raie correspondant. La figure 5.2 montre un profil résultant de la somme des fonctions d'autocorrélation de 5000 histoires de champ.

Le principal intérêt de cette méthode réside d'une part en sa vitesse de calcul, rapide, et dans le fait qu'il est très aisé de changer de processus stochastique, une fois le code bien établi, d'autre part. Si les conditions de stationnarité sont vérifiées, différentes combinaisons de processus stochastiques et de fonctions de distribution du champ électrique peuvent être examinées. En particulier, il est possible d'envisager de mener les calculs pour des plasmas hors d'équilibre, comme par exemple dans les turbulences qui prennent naissance dans les plasmas des machines expérimentales de fusion.

5.2 Résultats et comparaisons

Les premiers essais ont été menés dans le cadre de la raie Lyman- α de l'hydrogène, comme pour le reste de ce travail. Cette raie est très sensible à la dynamique du microchamp, et son calcul est rendu plus rapide par le fait que l'état fondamental de

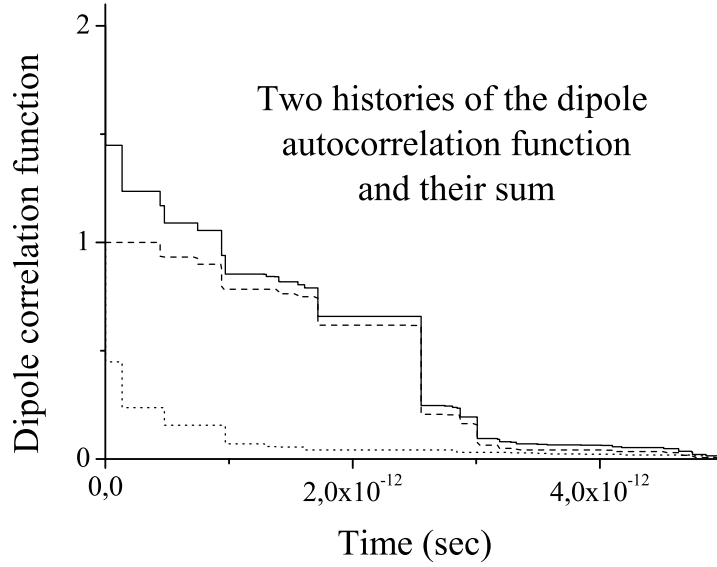


FIGURE 5.1: Somme des fonctions d'autocorrélation dipolaire correspondant à deux histoires de champ distinctes.

l'atome n'est pas affecté par l'élargissement Stark dominant. Toujours en négligeant la structure fine, on utilise la base sphérique $|n, l, m\rangle$ dans le sous-espace de nombre quantique principal $n = 2$. Le potentiel d'interaction est alors représenté par une matrice 4×4 , de même que l'opérateur d'évolution. Dans les calculs qui suivent, on compare donc pour la raie Lyman- α de l'hydrogène deux méthodes pour un cas simple. La figure 5.2 présente une comparaison de la fonction d'autocorrélation dipolaire obtenue par la méthode de simulation, avec deux calculs issus de l'approche MMM, pour une densité $N_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ et une température $T = 10000 \text{ K}$. On observe une décorrélation nettement plus marquée dans le cas du calcul obtenu par la simulation par rapport à celui provenant du MMM effectué avec la fréquence de saut originale. Dans l'espoir de mieux se rapprocher de cette référence, un second résultat est présenté en employant une fréquence de saut augmentée d'un facteur constant de 2.2. Cependant, une telle démarche échoue à se rapprocher davantage de la simulation, il conviendrait donc plutôt d'agir plutôt sur les caractéristiques du processus stochastique pour mieux s'accorder avec la simulation. Le processus kangourou utilise pour la distribution du temps d'attente entre deux sauts une forme

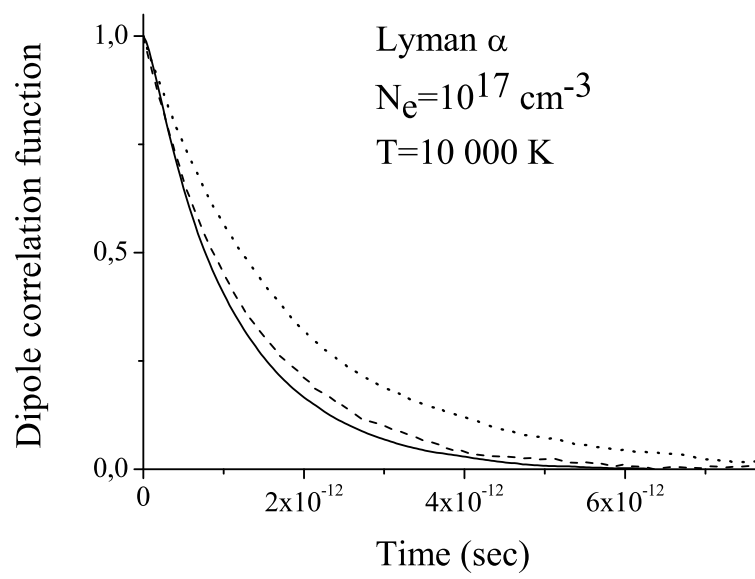


FIGURE 5.2: Fonction d'autocorrélation dipolaire pour les ions uniquement. Le trait plein correspond à la simulation, que l'on compare avec les résultats du calcul MMM correspondant à la fréquence de saut originale (tirets) ainsi qu'avec une fréquence multipliée par 2.2 (courbe pointillée).

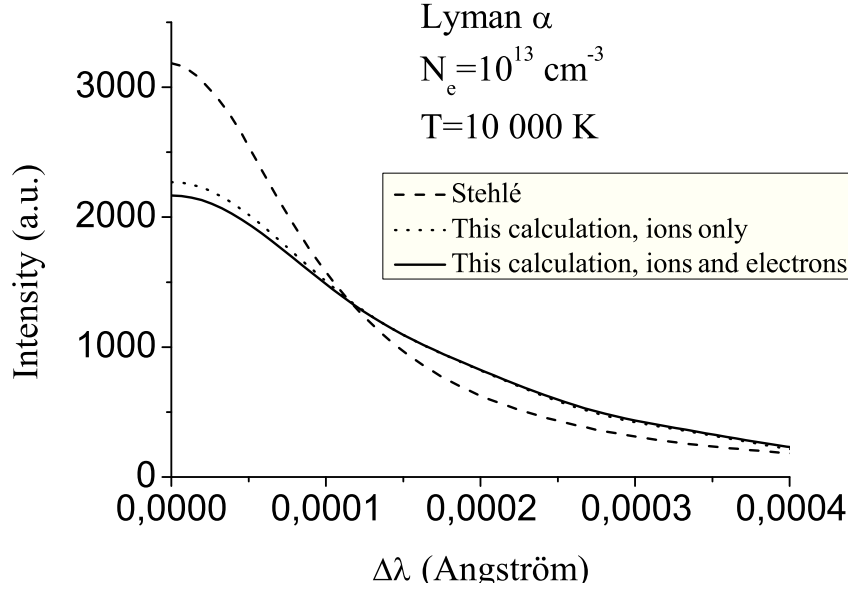


FIGURE 5.3: Profile de raie pour les ions et les électrons. Le trait plein correspond à la simulation, les tirets aux résultats du calcul MMM.

exponentielle, qui est un cas limite d'un processus de renouvellement markovien. Il existe beaucoup d'autres modèles possibles, et le prolongement de cette recherche pourrait se faire en direction de processus intégrant des effets mémoire. On peut tout de même noter que les résultats MMM s'accordent, en général, à 20% près avec ceux de la simulation. Par exemple, la figure 5.3 montre une comparaison entre calculs obtenus pour un élargissement de raie dû à la fois aux ions et aux électrons. On peut observer que le profil obtenu par simulation est de l'ordre de 15% plus large que celui provenant du calcul MMM.

Conclusions et perspectives

Au cours de ce travail, nous avons d'abord tenté de détecter, à travers une approche prenant en compte de façon globale toute la réalité quantique d'un atome plongé dans un bain de perturbateurs, dans quelle mesure on pouvait disposer d'un modèle complet permettant de restituer convenablement l'élargissement du profil de la raie Lyman- α , par le formalisme par intégrale de chemin de Feynman. Les courbes obtenues ont permis de voir que le régime où la dynamique des ions est importante est très bien représenté, puisque l'accord avec les résultats des travaux antérieurs est très cohérent, l'écart avec eux demeurant faible, de l'ordre de 15%. Cependant, il faut tenir compte du fait que de nombreuses approximations ont été acceptées, et peuvent par conséquent expliquer une partie de ces écarts. Il paraît cependant très difficile de prolonger ces calculs plus avant, car on se heurte à des difficultés mathématiques importantes inhérentes au formalisme par intégrale de chemin lui-même.

En résolvant numériquement l'équation de Schrödinger, nous avons pu constater que la chronologie joue un rôle si important qu'il ne serait pas fondé de tenter de simplifier les calculs en ignorant l'opérateur qui lui correspond (c'est-à-dire en le remplaçant par une matrice unité). Le respect de la chronologie montre que les composantes de rotation dans les variations du champ électrique perturbant l'émetteur ont une influence significative sur l'élargissement du profil de raie, en introduisant dans le spectre d'émission des fréquences notamment issues de battements entre les fréquences en présence, celle liée à la présence du champ électrique et à son intensité, et celle de la rotation de celui-ci.

Par une modélisation par processus stochastiques de l'évolution du champ électrique perturbateur, nous avons pu voir que le choix du type de processus déterminant le temps d'attente entre deux variations soudaines, le champ demeurant

constant de l'une à la suivante, n'est pas sans conséquences. Ainsi, en tempérant la loi exponentielle du temps d'attente, qui conduit à une distribution de sauts du type loi de Poisson, par une fonction gamma, qui favorise les temps d'attente plus longs en enrichissant les valeurs de la fonction de distribution vers les temps longs, nous avons pu observer que ce choix entraîne une modification de la largeur du profil de raie : parfois elle entraîne une augmentation de l'élargissement constaté, mais d'autres fois c'est un rétrécissement qu'on constate.

Enfin, par une simulation du type Monte-Carlo, reproduisant par tirages aléatoires les modèles de processus stochastiques dont les caractéristiques d'ensemble avaient auparavant permis de mener des calculs analytiques, nous avons pu retrouver des résultats très proches de ceux obtenus avec la technique MMM (en moyennant les calculs sur un grand nombre d'histoires de champ électrique), ce qui permet de valider la démarche. Comme la méthode de simulation autorise le choix, à priori, de n'importe quelle fonction de distribution pour le temps d'attente entre deux sauts, ces résultats ouvrent des perspectives particulièrement intéressantes. En effet, on peut légitimement s'attendre à pouvoir déterminer par ce moyen les caractéristiques statistiques effectivement conformes au processus qui se rapproche le mieux des réalités expérimentales observées, et ainsi d'en extraire les éléments de diagnostic des paramètres physiques caractérisant des milieux pour lesquels on ne dispose pas jusqu'à présent de modèles suffisamment précis.

Bibliographie

- [1] Stamm, R., Boland, D., Christova, M., Godbert-Mouret, L., Koubiti, M., Marandet, Y., Mekkaoui, A., and Rosato, J. *New Astronomy Reviews* **53**, 272 (2009).
- [2] Dufour, P., Liebert, J., Fontaine, G., and Behara, N. *Nature* **450**, 522 (2007).
- [3] Lorentz, H. *Proceedings of Royal Academy of Amsterdam* **8**, 591 (1906).
- [4] Lenz, W. *Z. Physik* **25**, 299 (1924).
- [5] Weisskopf, V. *Z. Physik* **75**, 287 (1932).
- [6] Griem, H. R., Kolb, A., and Shen, K. Y. *Phys.Rev.* **116**, 4 (1959).
- [7] Baranger, M. *Phys.Rev.* **111**, 481 (1958).
- [8] Baranger, M. *Phys.Rev.* **111**, 494 (1958).
- [9] Baranger, M. *Phys.Rev.* **112**, 855 (1958).
- [10] Mihalas, D. *Stellar Atmospheres*. W.H. Freeman & Co Ltd, (1970).
- [11] Fano, U. *Phys. Rev.* **131**, 259 (1963).
- [12] Holtsmark, J. *Ann. Physik* **58**, 577 (1919).
- [13] Hooper, C. *Phys. Rev.* **149**, 77 (1966).
- [14] Hooper, C. *Phys. Rev.* **165**, 215 (1983).
- [15] Feynman, R. and Hibbs, A. *Quantum Mechanics and Path Integrals*. McGraw-Hill, (1965).

- [16] Schweber, S. S. *Rev.Mod.Phys.* **58**, 449 (1986).
- [17] Kleinert, H. *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics and Polymer Physics*. World Scientific, Singapore, (1990).
- [18] Griem, H. *Spectral Line Broadening by Plasmas*. McGraw-Hill, (1964).
- [19] Stamm, R., Talin, B., Pollock, E., and Iglesias, C. *Phys. Rev. A* **34**, 4144 (1986).
- [20] Difallah, M., Meftah, M., Bedida, N., Boland, D., and Stamm, R. *IRAMP* **1**, 85 (2010).
- [21] Rosenbluth, M. and Rostoker, N. *Phys. Fluids* **5**, 776 (1962).
- [22] Stamm, R. and Voslamber, D. *J.Q.S.R.T.* **22**, 599 (1979).
- [23] Stamm, R., Smith, E., and Talin, B. *Phys. Rev. A* **30**, 2039 (1984).
- [24] Gigoso, M. and Cardenoso, V. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **20**, 6005 (1987).
- [25] Rosato, J., Marandet, Y., Capes, H., Ferri, S., Mossé, C., Godbert-Mouret, L., Koubiti, M., and Stamm, R. *Phys. Rev. E* **79**, 046408 (2009).
- [26] Voslamber, D. and Stamm, R. *Proceedings ICSLS* **1**, 63 (1981).
- [27] Rosato, J., Boland, D., Capes, H., Marandet, Y., and Stamm, R. *Proceedings ICSLS* **1058**, 12 (2008).
- [28] Montroll, E. and Weiss, G. *J. of Mathematical Physics* **6**, 167 (1965).
- [29] Haus, J. and Kehr, K. *Phys. Rep.* **5**, 150 (1987).
- [30] Feller, W. *An introduction to probability theory and its applications, Vol1*. Wiley, (1971).
- [31] Seidel, J. *Z. Naturforsch.* **32a**, 1195 (1977).
- [32] Frisch, U. and Brissaud, A. *J.Q.S.R.T.* **11**, 1767 (1971).

- [33] Capes, H., Christova, M., Boland, D., Bouzaher, A., Catoire, F., Godbert-Mouret, L., Koubiti, M., Mekkaoui, S., Rosato, J., Marandet, Y., and Stamm, R. *Proceedings ICSLS* **1301**, 129 (2010).
- [34] Brissaud, A. and Frisch, U. *J.Q.S.R.T.* **11**, 1753 (1971).
- [35] Frerichs, M. R. *Z. Phys. D Atoms, Molecules and Clusters* **11**, 315 (1989).
- [36] Anderson, P. W. *Phys. Rev.* **76**, 647 (1949).
- [37] Bergeron, P., Ruiz, M. T., and Leggett, S. K. . *APJS* **108**, 339 (1997).
- [38] Kampen, N. G. V. *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*. North Holland, (1981).
- [39] Meftah, T. *Contributions au formalisme de l'élargissement de raies dans les plasmas*. PhD thesis, Université de Provence, (1996).