

UNIVERSITE CHEIKH ANTA DIOP DE DAKAR

FACULTE DES SCIENCES ET TECHNIQUES

DEPARTEMENT DE PHYSIQUE



Année académique 1997/1998

*Doctorat 3<sup>e</sup> cycle  
ès sciences*

Discipline : Physique –Spécialité : PHYSIQUE ATOMIQUE ET NUCLEAIRE

**SUJET** :

**“ CONTRIBUTION A LA THEORIE DE L'ELARGISSEMENT PAR  
PRESSION DES RAIES SPECTRALES EMISES PAR LES PLASMAS  
D'INTERET ASTROPHYSIQUE ”**

Présenté et soutenu publiquement le 19 décembre 1997 par :

**Maurice NDEYE**

Pour l'obtention du grade de **Docteur 3<sup>e</sup> cycle ès Sciences Physiques**

**Jury** :

**Président : M. Chérif**

**BADJI**

**Professeur UCAD**

**Membres : MM. Christian Sina**

**DIATTA**

**Professeur UCAD**

**Mary Teuw**

**NIANE**

**Professeur UFR Maths St-Louis**

**Ismaila**

**DIEDHIOU**

**Maître-Assistant UCAD**

**Mouhamed**

**GAYE**

**Maître-Assistant UCAD**

*Cette thèse est dédiée :  
à la mémoire de ma mère,  
à mon père ,mes frères,  
mes sœurs et amis .*

## REMERCIEMENTS

Je tiens à témoigner ma profonde reconnaissance au professeur Christian Sina DIATTA pour sa rigueur dans l'encadrement, aux professeurs Chérif BADJI, Mary Teuw NIANE, aux Maître-Assistant Ismaïla DIEDHIOU et Mouhamed GAYE pour avoir accepté de faire partie du jury, au Maître-Assistant Benjamin MANPASSY pour sa précieuse contribution scientifique apportée à la réalisation de cette thèse.

Je dois également exprimer ma profonde gratitude à Monsieur Ngagne DIEYE, à Erick Arial FARGEAS, à Monsieur TALL du L.E.R. de l'école Polytechnique de l'Université Cheikh Anta Diop de Dakar, à Monsieur EMILLION, Directeur du Centre de calcul informatique de l'U.C.A.D. de m'avoir offert des facilités pour la mise en forme définitive du texte.

J'adresse mes remerciements aux camarades étudiants du 3ème cycle de physique atomique et nucléaire de l'I.T.N.A., en particulier à Ibrahima Sadibou TALL, Diène NDIAYE pour les échanges et les collaborations utiles que nous avons eus.

Qu'il me soit permis de remercier Madame DIEDHIOU, Secrétaire à l'I.T.N.A. de l'Université Cheikh Anta Diop de Dakar, pour son soutien moral.

Je dois enfin rendre hommage à tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation de ce travail. Il serait merveilleux, mais impossible, de les nommer tous.

## Plan

### I- Introduction

### II L'élargissement des raies spectrales émises par les plasmas.

II-1 L'élargissement naturel

II-2 L'élargissement Doppler

II-3 L'élargissement par pression

II-3a Historique des théories de l'élargissement des raies spectrales

II-3b Formalisme quantique dans l'étude de l'élargissement par pression

II-3c Problème statistique

II-3d "One perturber approximation" : Approximation du perturbateur le plus proche

### III - Théorie des impacts

III-1 Les temps caractéristiques

III-2 Conditions de validité de la théorie des impacts

III-3 Expression du profil de la raie pour les électrons dans l'approximation des impacts et pour les ions dans l'approximation quasi-statique

III-4 Conclusion

### IV- Etude critique de la contribution des électrons dans le cadre de la théorie des impacts : fonctions caractéristiques du moment dipolaire :

$A(z, rz)$ ,  $B(z, rz)$

IV-1 Expression de l'opérateur  $\Phi_{ab}$

IV-2 Calcul des éléments matriciels de  $\Phi_{ab}$

IV-3 Etude des fonctions caractéristiques  $A(z_1, z_2)$  et  $B(z_1, z_2)$

IV-4 Conclusion

### V- Application au spectre de $HeI$

V-1 Caractérisation de la raie  $\lambda = 3888.6\text{\AA}$

V-2 Développement en série de l'expression

$\langle \alpha | \langle \beta | [i\omega - i(H_a(E) - H_b(E))/\hbar + \Phi_{ab}(E)]^{-1} | \alpha' \rangle | \beta' \rangle$

V-3 Expression  $\Phi_{ab}$

V-4 Eléments matriciels de l'opérateur moment dipolaire

V-5 Calcul de la largeur et du déplacement de la raie

V-6 Conclusion

### VI- Revue des théories de l'élargissement des raies spectrales

VI-1 Approximation des impacts pour les électrons et approximation quasi-statique pour les ions

VI-2 Formalisme de SAHAL-BRECHOT

VI-3 Correction par la dynamique des ions (BANARD, COOPER et SMITH)

VI-4 La théorie unifiée de l'élargissement par effet STARK des raies spectrales

VI-4a Approximations simplificatrices

VI-5 La théorie stochastique du microchamp modèle

## **VII Conclusion générale**

### **Annexe**

### **Bibliographie**

## RESUME

Dans le présent travail, la théorie de l'élargissement des raies spectrales émises par les plasmas est passée en revue et les fonctions fondamentales ont été calculées.

Elle permet d'avoir sous le formalisme de la théorie des impacts une expression du profil de la raie au moyen d'un opérateur indépendant du temps dont le calcul des éléments matriciels entre les états atomiques de l'émetteur fait apparaître des fonctions caractéristiques  $A(z, rz)$  et  $B(z, rz)$  de la raie émise. L'intégrale de ces fonctions permet d'avoir la largeur et le déplacement de la raie émise par le plasma. On opère à une analyse générale de ces fonctions et à leur application à l'atome de l'hélium neutre *HeI* dans le cadre d'une étude critique des théories existantes. Le tracé de ces fonctions pour différentes raies de *HeI* permet d'évaluer leur sensibilité aux paramètres fondamentaux des profils de raie (densité de particules, température, .etc). Le dernier volet de cette étude est une application à la raie isolée 3888.6Å de l'hélium *HeI* à l'aide des programmes obtenus à partir du logiciel Matlab.

---

*CHAPITRE I*  
*INTRODUCTION GENERALE*

# I- Introduction

Les raies spectrales émises par un plasma peuvent être élargies et déplacées par plusieurs causes. L'étude de ces spectres permet d'avoir des informations sur l'atome émetteur et son environnement (par exemple : la densité des particules, la température du milieu, la nature de la raie émise (isolé ou à composantes interdites), la présence de champ magnétiques, etc.

Une raie spectrale émise par un atome isolé et stationnaire a toujours une certaine largeur de raie due à son élargissement naturel, la raie est une Lorentzienne. Si l'atome est en mouvement par rapport à un l'observateur supposé fixe sa raie est élargie du fait de l'effet Doppler et son profil est Gaussien si la distribution des vitesses est maxwelliennes.

Un autre mécanisme important se produit lorsque l'atome émetteur se trouve plongé dans un bain de perturbateurs : c'est l'élargissement par pression qui est dû à l'interaction entre l'atome émetteur et les particules environnantes. Ce type d'élargissement peut être divisé en 3 catégories distinctes :

1. L'élargissement par résonance si les perturbateurs sont neutres et du même type que l'atome émetteur. L'interaction dipôle-dipôle au premier ordre varie en  $r^{-3}$ .

2. L'élargissement de VAN DER WAALS dans lequel, les perturbateurs sont neutres et de type différents de l'atome émetteur. L'interaction dipôle-dipôle varie en  $r^{-6}$ .

3. L'élargissement Stark qui est dû à l'interaction des particules chargées (ions et électrons) avec l'atome émetteur. Cet interaction s'exprime par l'action des champs ioniques et électroniques sur l'émetteur et le potentiel d'interaction peut s'écrire approximativement

$$V = \frac{Z_1 Z_2}{r} - \vec{d} \cdot \vec{E} \quad (I.1)$$

$z_1$  est la charge de l'atome émetteur,  $z_2$  la charge de l'ion.  $\vec{d}$  est le moment dipolaire de l'émetteur et  $\vec{E}$  le champ de l'ion.

$r$  est la distance entre l'atome émetteur et l'ion.

Du fait de la plus longue portée de l'élargissement STARK par rapport à l'élargissement de VAN DER WAALS, seules les particules chargées sont prises en compte lorsqu'on a besoin de traiter des gaz ionisés : c'est le cas des plasmas de laboratoires et des plasmas stellaires.

Les électrons et les ions interagissent de façon identique avec l'émetteur, cependant ils sont traités différemment du fait de / que leur différence de vitesse.

Les plus lents (ions) sont traités dans le cadre de l'approximation quasi-statique et les plus rapides (électrons) dans l'approximation des impacts. Le problème de l'élargissement des raies spectrales dans un plasma étant posé, nous exposerons l'une des grandes théories souvent utilisées par la plupart des théoriciens de la spectroscopie des plasmas (GRIEM (1964, 1974)), BARANGER (1958) a), GRIEM, BARANGER, KOLB, OERTEL (1962), SHAMEY (1969), la théorie des impacts dans laquelle la prise en compte de l'effet des ions est faite sous l'angle de la théorie quasi-statique. Cependant, dans les deux types d'approximations utilisées le calcul du profil de la raie



émise revient au calcul des éléments matriciels d'un opérateur ou et ce calcul nécessite la connaissance des fonctions  $A(z_1, z_2)$  et  $B(z_1, z_2)$ .

L'essentiel de notre travail est le calcul et l'analyse de ces fonctions souvent appelées fonction " largeur " et fonction " déplacement " (GRIEM (1974)).

Ces fonctions permettent d'avoir la largeur et le déplacement de la raie à partir de la partie réelle et de la partie imaginaire des éléments matriciels de .

Ces fonctions dépendent du paramètre d'impact  $P$ , de la vitesse moyenne  $V$  mais aussi de la fréquence du système. L'étude des fonctions  $A$  et  $B$  montrent que celles-ci peuvent s'exprimer en fonction des fonctions de BESSEL modifiées qui se présentent sous la forme d'intégrales à bornes infinis dès lors le problème du choix de la borne infini se pose pour le calcul numérique. Par ailleurs, les paramètres de  $V$ , sont à prendre en compte surtout dans l'interprétation des coefficients  $A$  et  $B$ . Le paramètre d'impact permet de délimiter les régions d'étude à l'aide des coupures telles que celles de LEWIS ou de WEISSKOPF. Le paramètre  $r$  détermine un rapport énergétique entre deux niveaux. Il varie selon le type de transition ; est proportionnel à l'énergie d'un niveau déterminé. Un calcul numérique des fonctions  $A$  et  $B$ , de même que celui de  $a$  et  $b$  (intégrales de  $A$  et  $B$  par rapport à ) sera fait en vue d'une comparaison avec les calculs de GRIEM et de SHAMEY.

Enfin, les tracés des fonctions  $A, B, a, b$  nous permettront de donner une interprétation physique dans l'étude des différentes régions définies par le paramètre d'impact mais aussi des précisions pour certains valeurs particulières de (petites et grandes valeurs).

Les tracés des fonctions  $A, B, a$  et  $b$  se feront pour les raies suivantes de l'Hélium neutre  $HeI$ ,  $3888,6\text{Å}$ ,  $3187,7\text{Å}$ ,  $4026,2\text{Å}$ ,  $4471,5\text{Å}$ ,  $4713,1\text{Å}$ ,  $4921,9\text{Å}$ ,  $5016\text{Å}$ , . Le choix de l'Hélium se justifié par le fait qu'il est d'un grand intérêt astrophysique.

Le second volet de notre étude est l'application de la théorie des impacts à l'étude du spectre de l'atome  $HeI$ , particulièrement à la raie  $3888,6\text{Å}$ .

La programmation informatique à l'aide du logiciel Matlab des coefficients de RACAH, de CLEBS-GORDON et l'obtention des valeurs numériques de  $a$  et  $b$  (sous certaines conditions) nous permet de calculer les éléments matriciels du moment dipolaire de l'atome émetteur. On peut ainsi avoir les éléments matriciels de l'opérateur correspondant à la transition étudiée. D'autre part la programmation de la fonction de distribution des champs de HOOPER ou de HOLTSMARK permet enfin le tracé du profil de la raie émise par le plasma.

Nous précisons que ce tracé n'est qu'un essai. L'étude systématique de raies spectrales déterminées pourrait faire l'objet des travaux ultérieurs une fois maîtrisé le calcul des fonctions  $A$  et  $B$ . Seules les grandes lignes sont énoncées et plus tard nous permettront de tracer les raies émises pour d'autres types d'atomes. En annexe, ces programmes seront indiqués. Le dernier volet de notre étude est la revue des théories de l'élargissement des raies spectrales, qui donnent un aperçu sur la diversité des approches théoriques faites par les astrophysiciens pour le diagnostic des plasmas de laboratoire, des plasmas stellaires et interstellaires.

---

**CHAPITRE II**  
**L'ELARGISSEMENT DES RAIES SPECTRALES EMISES**  
**PAR LES PLASMAS**

*II.1 L'élargissement naturel*

*II.2 L'élargissement Doppler*

*II.3 L'élargissement par pression*

*II.3.1 Historique des théories d'élargissement par pression*

*II.3.2 Formalisme quantique de l'élargissement par pression*

*II.3.4 Une perturbation approximation : Approximation du perturbateur le plus proche.*

*II.4 Conclusion*

---

## II- L'élargissement des raies spectrales émises par les plasmas

Les causes de l'élargissement des raies spectrales dans un plasma sont nombreuses. Toutefois, on peut les classer en 3 grandes catégories principales :

- l'élargissement naturel ;
- l'élargissement DÖPPLER ;
- l'élargissement par pression.

### II.1. Elargissement naturel

Une raie spectrale qu'elle soit observée en absorption ou en émission n'est pas infiniment fine. Elle a une certaine largeur donc un certain profil qui est la répartition de l'intensité spectrale autour de la fréquence centrale (ou longueur d'onde centrale) de l'atome.

En effet, on met en évidence qu'un système quantique opérant une transition d'un état excité (*a*) vers un état (*b*) d'énergie inférieure prouve que ces états ne sont pas stationnaires. Ils ont une certaine durée de vie finie dont l'inverse représente la largeur de la raie émise (SOBEL'MAN 1972 page 378, HITLER 1953 pages 181, 185).

La théorie quantique et classique ont montré que le profil de la raie naturelle d'un système (atome) est une Lorentzienne (WEISSKOPF et WIGNER 1930). L'action du champ électromagnétique produit par l'électron optique sur lui-même entraîne que les vibrations de l'atome émetteur sont amorties et la constante d'amortissement du mouvement de l'oscillateur est égale à la largeur de la raie (LORENTZ 1916).

La probabilité de trouver l'atome émetteur dans un état (*j*) est donnée par :

$$P_j(t) = \Psi_j^*(r,t)\Psi_j(r,t).e^{-\Gamma t} \quad (\text{II-1})$$

$$\text{ou } \Psi_j(r,t) = U(r).e^{-iE_j t/\hbar} \quad (\text{II-2})$$

$\Psi_j(r,t)$  est la fonction d'onde qui décrit l'état de l'atome à l'état excité (*j*). cette fonction peut s'exprimer sous forme d'un produit de la partie radiale  $U(r)$  et de la partie temporaire  $\exp(-iE_j t/\hbar)$ .

$\Gamma$  représente le taux d'émission et  $E_j$  l'énergie de l'atome émetteur à l'état (*j*).

L'état (*j*) n'est plus stationnaire mais décrit une succession d'états d'énergies voisines de  $E$  d'après le principe d'incertitude de HEINSENBURG.

$$\Delta E \sim \frac{\hbar}{\Delta t} \quad (\text{II-3})$$

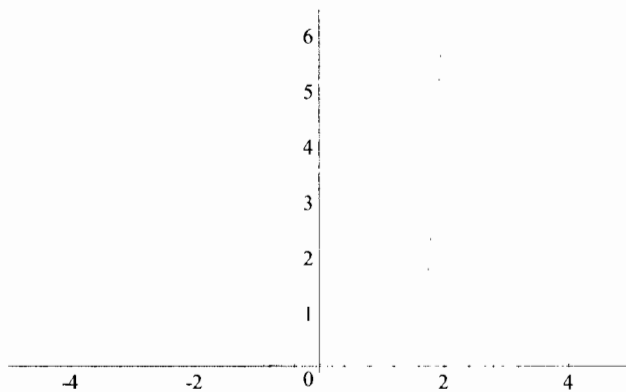
L'amplitude de la distribution de l'énergie est la transformée de Fourier de la fonction d'onde à l'état (*j*) et la probabilité est le carré de l'amplitude.

Considérons que les oscillations de l'atome commencent au temps  $t = 0$ , la distribution de l'énergie est donnée par la relation suivante :

$$E(\omega) = (2\pi)^{-1} F^*(\omega)F(\omega) \quad (\text{II-4})$$

$$F(\omega) = \int_0^\infty U_j(r) e^{-t(E_j/\hbar + \Gamma/2)} e^{i\omega t} dt \quad (\text{II-5})$$

ou  $F(\omega)$  est la transformée de la fonction d'onde de l'atome. On trouve alors que la fonction de distribution donne un profil Lorentzien et dont l'allure est la suivante :



$$E(\omega) = \frac{\Gamma/2\pi}{(\omega - \omega_0)^2 + (\Gamma/2)^2} \quad (\text{II-6})$$

$\omega_0$  est la fréquence nominal de l'atome émetteur. Le calcul de la largeur de la raie

donne une largeur à mi-hauteur

$$\Delta\omega = \Gamma$$

## II.2. Elargissement DOPPLER

Cet élargissement est prépondérant dans les plasmas peu denses et de température élevée. Il est une conséquence du mouvement des atomes et des ions dans une enceinte à une température  $T$ , où la fonction de distribution des vitesses est Maxwellienne (Picker-Wimel 1966 pages 76-77).

Le nombre d'atomes  $N$  dont la vitesse est comprise entre  $v_x$  et  $v_x + dx$  est :

$$dN = \frac{N}{\alpha\sqrt{\pi}} e^{-v_x/\alpha^2} \quad (\text{II-7})$$

$\alpha$  est la vitesse la plus probable, elle correspond au maximum de la répartition des vitesses Maxwelliennes.

Si le mouvement des particules est d'origine thermique on a :

$$\frac{1}{2}m\alpha^2 = kT \quad (\text{II-8})$$

$k$  est la constante de BOLTZMAN,  $m$  est la masse des atomes.

Un atome au repos émet un rayonnement de fréquence  $\nu_0$  lorsqu'il est animé d'une vitesse  $v_x$ , il émettra en vertu du principe de DÖPPLER une fréquence apparentée  $\nu'_0$  telle que :

$$\nu'_0 = \nu_0(1 - v_x/c) \quad (\text{II-9})$$

$$\frac{\nu - \nu_0}{\nu_0} = \frac{\Delta\nu}{\nu_0} = \frac{v_x}{c} = \frac{\Delta\lambda}{\lambda} \quad (\text{II-10})$$

$\lambda_0$  est la longueur non perturbée,  $c$  la vitesse de la lumière.

Soit  $\Delta\nu_D$  le déplacement DÖPPLER de la fréquence,  $\Delta\lambda_D$  le déplacement DOPPLER de la longueur d'onde on a :

$$\frac{\Delta\nu_D}{\nu_D} = \frac{\Delta\lambda_D}{\lambda_0} = \frac{\alpha}{c} \quad (\text{II-11})$$

On considère que le milieu est optiquement mince. La raie n'est donc pas influencée par les absorptions et émissions successives du rayonnement qui auraient lieu avant que le photon ne s'échappe du milieu (cas du milieu optiquement épais).

Par contre si les mouvements de turbulence se produisent dans le plasma et que l'on puisse considérer leur répartition comme Gaussienne avec une vitesse de turbulence la plus probable  $\vec{u}$

La vitesse  $\alpha$  intervenant dans le calcul de  $\Delta\lambda_D$  sera alors telle que :

$$\alpha^2 = \frac{2kT}{m} + u^2 \quad (\text{II-12})$$

$$\text{et } \frac{dN}{N} = \frac{I_\nu}{I} d\nu = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\nu_x/\alpha^2} d\nu_x \quad (\text{II-13})$$

$N$  est la densité de particule dans le plasma.

L'intensité de la raie est :

$$I = \int I_\nu d\nu \quad (\text{II-14})$$

$$\frac{I_\nu}{I} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{\Delta\nu_D} e^{-(\Delta\nu/\Delta\nu_D)} \quad (\text{II-15})$$

Le profil est une Gaussienne définie par une fonction de la forme

$$g(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\beta} e^{-x^2/\beta^2} \quad (\text{II-16})$$

avec  $\beta = \Delta\nu_D$

La normalisation de l'intensité  $I$  de la raie implique

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x) dx = 1 \quad (\text{II-17})$$

au centre de la raie  $\nu = \nu_0$  ;  $\Delta\nu = 0$

$$I_{\nu_0} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{\Delta\nu_D} \quad (\text{II-18})$$

$$I_0 = I_{\nu_0} e^{-(\Delta\nu/\Delta\nu_D)^2} = I_{\lambda_0} e^{-(\Delta\lambda/\Delta\lambda_D)^2} \quad (\text{II-19})$$

$$I_{\lambda_0} = \frac{I}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{\Delta\lambda_D} \quad (\text{II-20})$$

L'intensité de la raie sera réduite de  $1/e$  de sa valeur maximale, si  $\Delta\nu = \Delta\nu_D$   
(ou  $\Delta\lambda = \Delta\lambda_D$ )

On appelle largeur Doppler, la largeur de la raie à une intensité moitié. On obtient alors :

$$e^{-(\Delta\lambda/\Delta\lambda_D)^2} = \frac{1}{2} \text{ ainsi}$$

$$\Delta\lambda = \Delta\lambda_D \sqrt{\ln 2} \quad (\text{II-21})$$

Si le seul mouvement existant est d'origine thermique.

$$\alpha = \sqrt{\frac{2kT}{m}} \text{ et}$$

$$\Delta\lambda_D = \frac{\lambda}{c} \sqrt{\frac{2kT}{m}} \quad (\text{II-22})$$

En pratique, la largeur DOPPLER est :

$$2\Delta\lambda = 7.16.10^{-7} \sqrt{\frac{T}{\mu}} \quad (\text{II-23})$$

$\mu$  est la masse de l'atome considéré.

## II.3. Elargissement par pression

L'élargissement par pression est dû au fait que l'atome émetteur se trouve dans un bain de perturbateurs et entre ainsi en interaction avec ce bain. On a un élargissement collisionnel des raies spectrales de l'émetteur.

### II.3.1 Historiques de l'élargissement des raies spectrales

La première contribution dans l'étude de l'élargissement par pression a été faite par Michelson en 1896 qui explique que c'est un élargissement par une interruption soudaine des vibrations de l'atome émetteur par collision avec les particules du milieu. Il montre alors que la largeur de la raie émise est de l'ordre de avec le temps moyen entre les collisions.

Cette idée fut suivie par Lorentz (1906). Il montra que la forme de la raie émise est une Lorentzienne. D'autres approches furent introduites telles que la théorie quasi-statique de Debye et Holtzmark (1919) qui considèrent que l'influence de l'environnement sur l'atome émetteur est celle des particules chargées qui entraîne un changement lent de la fréquence émise. Entre 1932 et 1933, Weisskopf réalise un important progrès en considérant que l'interruption des oscillations atomiques est une interruption de phase. Si ce changement de phase est supérieur à une certaine valeur critique.

( $n = 1$  radian) alors le train d'onde est effectivement terminé et la largeur de la raie émise est déterminée par le temps moyen entre de telles collisions fortes : le profil est aussi une Lorentzienne.

En 1945, Lindholm inclut dans son formalisme à la fois les grands déphasages et les collisions lointaines. Il rendit compte de l'élargissement et du déplacement de la raie.

Le formalisme général dans le modèle des perturbateurs indépendants a été obtenu par Anderson en 1949 dans une approche semi-classique et par Baranger entre 1958 et 1962 dans une approche quantique.

D'autres travaux et publications ont été faites notamment par Griem (1964, 1974), Baranger (1962), Griem, Baranger, Kolb et Oertel en 1962, Shamey (1964), Sahal-Brechot, Cooper, Volzlamber pour ne citer que ceux-ci.

### II.3.2. Formalisme quantique de l'étude de l'élargissement par pression

Considérations générales

Le problème posé est celui du calcul des raies spectrales émises, absorbées par le plasma.

Nous considérons que le plasma peut être découpé en cellules. Chaque cellule contenant un atome émetteur et des perturbateurs : ce qui suppose que la quantité d'atomes rayonnants est faible et donc l'interaction entre eux-ci est négligeable.

Ce mode de découpage permet de négliger l'influence des perturbateurs situés à la frontière d'une cellule sur l'atome rayonnant (ex. : effet d'écran dans le cas de l'effet STARK). Cet hypothèse impose que les cellules soient indépendants, donc

non-interagissantes.

L'étude de la puissance émise par une cellule permet d'obtenir la puissance totale émise par le plasma en multipliant par le nombre de cellule c'est-à-dire par le nombre d'atomes rayonnants.

Soit  $H$  l'hamiltonien total d'une cellule.

$$H = H_A + H_P + H_{interaction} = H_A + H_P + V \quad (\text{II-24})$$

Soit  $\Psi_i$  l'état propre initial de  $H$ ,  $\Psi_f$  l'état final de  $H$ .  $\Psi$  est une fonction d'onde du système (cellule).

$$H\Psi_i = E_i\Psi_i \quad (\text{II-25a})$$

$$H\Psi_f = E_f\Psi_f \quad (\text{II-25b})$$

$E_i$  et  $E_f$  sont respectivement les énergies du système à l'état( $i$ ) et ( $j$ ).

En supposant que la transition dipolaire spontanée du système, la probabilité de transition de( $i$ ) à ( $f$ ) par unité de temps est :

$$P_{if} = \frac{3}{4} \frac{\omega_{if}^3}{\hbar c^3} \left| \langle \Psi_i | \vec{d} | \Psi_f \rangle \right|^2 \quad (\text{II-26})$$

$$\omega_{if} = \frac{E_i - E_f}{\hbar} \quad (\text{II-27})$$

$c$  est la vitesse de la lumière dans le vide,  $\hbar$  la constante de PLANCK,  $\vec{d}$  est le moment dipolaire électrique de la cellule (émetteur + perturbateur).

Du fait que nous étudions les raies émises par l'émetteur on peut supposer par approximation que le moment dipolaire de la cellule est celui de l'atome émetteur. On pose alors que :

$$\vec{d} = \vec{d}_{\text{émetteur}} \quad (\text{II-28})$$

La puissance totale émise par le gaz est donnée par la relation :

$$P(\omega) = N\hbar\omega_{if}P_{if}\delta(\omega - \omega_{if}) \quad (\text{II-29})$$

$$P(\omega) = N\frac{\hbar\omega_{if}^4}{4c^3}\delta(\omega - \omega_{if})\left|\langle \Psi_i | \vec{d} | \Psi_f \rangle\right|^2 \rho_i$$



$N$  est le nombre total de cellule, la probabilité de trouver la cellule dans un état initial( $i$ ).

$\delta(\omega - \omega_{if})$  est la distribution de DIRAC, dont l'interprétation se trouve dans le fait que l'énergie du système total du système est conservée. En fait, l'énergie cinétique des particules est prélevée par l'émetteur de façon discrète, cette énergie est libérée lorsqu'il retombe dans son état initial et ainsi on a conservation de l'énergie du système.

La sommation se trouvant dans la relation est faite sur tous les états initiaux ( $i$ ) et finals ( $j$ ) du système.

On montre que la puissance totale rayonnée par unité de fréquence s'écrit :

$$P_T(\omega) = \sum_{if} N \hbar \omega_{if} P_{if}$$

$$P_T(\omega) = N \frac{\omega_{if}^4}{3c^3} \sum_{if} \delta(\omega - \omega_{if}) \left| \langle \Psi_i | \vec{d} | \Psi_f \rangle \right|^2 \rho_i \quad (\text{II-30})$$

$$P_T(\omega) = \frac{4}{3} N \omega_{if} I(\omega) \text{ avec}$$

$$I(\omega) = \sum_{if} \delta(\omega - \omega_{if}) \left| \langle \Psi_i | \vec{d} | \Psi_f \rangle \right|^2 \rho_i \quad (\text{II-31})$$

Dans la théorie de l'élargissement des raies spectrales, le problème fondamental est le calcul de  $I(\omega)$  puisqu'il est indépendant du nombre d'émetteurs.

L'étude de  $I(\omega)$  constitue ainsi le point de départ de la théorie, l'élargissement des raies spectrales.

Deux problèmes distincts se dégagent : (VAN REGMORTER. 1972)

- Le problème statistique qui constitue la prise en compte des interactions combinées des perturbations sur l'émetteur.

- L'approximation du perturbateur le plus proche (One perturber approximation).

### II.3.3. Problème statistique

Ce problème est celui de la combinaison des effets d'un nombre très grand de perturbateurs et la prise de la moyenne sur toutes les positions et les vitesses de ces perturbateurs.

Ce problème est central dans la théorie de l'élargissement par pression des raies spectrales.

Les deux questions suivantes se posent :

Sachant le type d'interaction entre un atome et un seul perturbateur, qu'elle en sera de l'interaction entre l'atome émetteur et tous les perturbateurs. Ceci dépend alors du type d'interaction par exemple pour des interactions de VAN DER WAALS le potentiel total est une somme des interactions de VAN DER WAALS. On dit que l'interaction de VAN DER WAALS s'additionne scalairement. Dans le cas de l'effet STARK, les champs électriques des différents ions s'additionnent vectoriellement, on dit les interactions STARK s'additionnent vectoriellement. Ces cas sont les seuls où

l'approximation des impacts est applicable.

Dans le but de résoudre ce problème statistique dans les cas les plus simples, le théorème mathématique suivant a été introduit par BARANGER.

Si on considère N variables stochastiques indépendantes  $\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4, \dots, \omega_n$ , avec une distribution de probabilité égale à  $f(\omega_i)$ .

La distribution de probabilité  $F(\Omega)$  de  $\Omega$  tel que :

$\Omega = \omega_1 + \omega_2 + \dots + \omega_n$  s'obtient en prenant la transformé de Fourier  $\varphi(s)$  de  $f(\omega_i)$ .

$$\varphi(s) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega s} f(\omega) d\omega. \tag{II-32}$$

Pour N variables on a :

$$\Phi(s) = [\varphi(s)]^N$$

kkkgjkumkupoipo

$$\Phi(s) = \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega s} f(\omega) d\omega \right]^N \tag{II-33}$$

Ainsi la transformée de FOURIER inverse donne

$$F(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega s} \Phi(s) ds \tag{II-34}$$

c est fonction d'autocorrélation.

La relation ci-dessus donnant  $\Phi(s)$  se démontre en supposant  $F(\omega)$  connu et on cherche

$$\Phi(s) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega s} F(\omega) d\omega \tag{II-35}$$

En remplaçant la variable d'intégration  $\omega$  par les variables  $\omega_1, \omega_2, \omega_3, \dots, \omega_n$  par conséquent  $F(\omega)$  par  $f(\omega_1) \cdot f(\omega_2) \cdot f(\omega_3) \cdot f(\omega_4) \dots f(\omega_n)$ .

On trouve ainsi

$$\Phi(s) = \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(\omega_1 + \omega_2 + \omega_3 + \dots + \omega_n) s} f(\omega_1) \dots f(\omega_n) \cdot d(\omega_1) \dots d\omega_n \tag{II-36}$$

et on trouve

$$\Phi(s) = [\varphi(s)]^N$$

Ce théorème reste important même si son applicabilité a été mise en cause par certains auteurs de la théorie unifiée.

### II.3.4. " One perturber approximation " :

#### Approximation du perturbateur le plus proche

Il est supposé ici qu'un seul perturbateur interagit avec l'atome émetteur. Le problème de la superposition des perturbateurs est évité.

Les perturbateurs agissent l'un après l'autre ; on a une séparation de temps des collisions fortes. Cette hypothèse a été reprise dans la théorie des impacts. Le système quantique constitué par l'émetteur et le perturbateur peut être supposé isolé ce qui entraîne que l'interaction des perturbateurs environnants est supposée faible. Cette théorie reste valable dans les ailes d'une raie isolée mais aussi dans les ailes d'une composante STARK élargie par les électrons dans le cas des raies hydrogénoïdes.

Soit  $\Psi(t_0)$  la fonction d'onde du système isolé à l'instant  $t_0$ ,

$H$  l'hamiltonien du système est donc constant.

$\Psi(t)$  à un instant ultérieur s'écrit :

$$\Psi(t) = U(t, t_0) \Psi(t_0) \quad (\text{II-37})$$

L'opérateur évolution du système est :

$$U(t, t_0) = \exp[i/\hbar . H(t - t_0)] \quad (\text{II-38})$$

L'estimation des perturbateurs environnants a été faite par l'introduction d'un potentiel moyen  $\bar{V}$  par conséquent l'hamiltonien du système perd son caractère hermétique. L'énergie du système contient alors une partie  $\omega$  dont l'inverse  $\omega^{-1}$  représente la durée de vie collisionnel moyenne. La fonction d'onde est amortie par un facteur  $\exp[-\frac{1}{2}\omega(t - t_0)]$

$$\Psi'(t_0) = \exp[-\frac{1}{2}\omega(t - t_0)]\Psi(t_0) \quad (\text{II-39})$$

La prise en compte de l'effet d'écran des ions supposés quasi-statiques (GRIEM 1964) montre aussi que  $\Psi(t)$  devient :

$$\Psi(t) = \exp[-i\Delta\bar{\omega}(t - t_0)]\Psi(t_0) \quad (\text{II-40})$$

$\Delta\bar{\omega}$  est le déplacement moyen de l'énergie dû au champ des particules à une distance égale à  $n^{-1/3}$  ( $n$  est la densité des particules).

## II.4. Conclusion

Dans le sens de la résolution de ces problèmes, la théorie des impacts a été proposée pour la première fois par BARANGER en 1958 dans " New Development in the theorie of pressure broadening " Research Memorandum ".

**CHAPITRE III**  
**THEORIE DES IMPACTS**

*III.1 Temps caractéristiques*

*III.2 Conditions de validité de la théorie des impacts*

*III.3 Expression de la raie émise pour les électrons dans le cadre de l'approximation des impacts et pour les ions dans l'approximation quasi-statique.*

*III.4 Conclusion*

### III-Théorie des impacts

Avant d'aborder la théorie des impacts proprement dite, nous allons définir les temps caractéristiques importants pour la compréhension de cette théorie.

#### III -1 Les temps caractéristiques

- Temps d'intérêt

L'expression du profil peut se mettre sous la forme suivante :

$$I = \frac{1}{\pi} Re \int_0^\infty e^{i\Delta\omega s} \Phi(s) \quad (III-1)$$

$Re$  est la partie réelle de l'intégrale.

$\omega_0$  est la fréquence non perturbée et  $\omega$  la fréquence perturbée.

$s$  représente le temps d'intérêt, important pour le calcul du profil de la raie émise.

C'est le temps d'intérêt pour l'élargissement de la raie, il est l'ordre de  $\frac{1}{\Delta\omega}$

$$\tau \simeq \frac{1}{\Delta\omega} \quad (III-2)$$

- Temps de collision

C'est le temps durant lequel, l'interaction entre le perturbateur et l'émetteur peut être considérée comme effective. Si l'on suppose que le perturbateur suit une trajectoire classique (rectiligne) avec  $\rho$  un paramètre d'impact,  $v$  la vitesse relative du perturbateur, le temps de collision est :

$$\tau = \frac{\rho}{v} \quad (III-3)$$

La section efficace de choc est défini par  $S = \pi\rho_{eff}$ ,  $\rho_{eff}$  est calculé à partir du rayon de collision forte (le rayon de WEISSKOPF[1930]).

La condition des collisions complètes s'écrit :

$$\rho_{eff} \ll n^{-1/3} \Rightarrow n\rho_{eff} \ll 1 \quad (III-4a)$$

Le temps d'intérêt est très grand par rapport à la durée de la collision.

- Temps séparant deux collisions :

C'est le temps moyen de l'ordre de  $\frac{1}{\omega}$ ,  $\omega$  étant la demi-largeur de la raie.

On montre par ailleurs que si  $n^{-1/3}$  est la distance moyenne entre les perturbateurs ( $n$  est la densité des perturbateurs),

$$\rho_{eff} \ll n^{-1/3} \text{ et}$$

$$n\rho_{eff} \ll 1 \quad (\text{III-4b})$$

Le volume de collision est petit devant le volume moyen occupé par un seul perturbateur. L'interprétation physique est que les perturbateurs ne peuvent agir qu'individuellement et durant le temps d'intérêt la collision est complète.

### III -2 Conditions de validité de la théorie des impacts

L'approximation des impacts est basée sur le concept de la collision binaire (COOPER), c'est-à-dire, l'interaction entre l'atome émetteur et un seul perturbateur (du moins pour les collisions fortes, les collisions faibles pouvant être traitées par la théorie des perturbations. Cette condition s'exprime par la relation suivante :

$$\rho_{eff} \ll n^{-1/3} \quad (\text{III.4c})$$

Le second aspect de la théorie des impacts exige que le temps d'intérêt soit supérieur

au temps de collisions, ce qui implique que chaque interaction est complète, on a alors la condition :

$$\tau_c = \frac{1}{\Delta\omega} = \tau \quad (\text{III.5})$$

L'analyse théorique de la raie prouve qu'au centre de la raie et jusqu'au point de

l'ordre de la demi-largeur, le problème statistique est résolu (BARANGER 1958) dans les conditions de validité de l'approximation des impacts. Dans les ailes  $\Delta\omega \gg \omega$  c'est la théorie du plus proche voisin (perturbateur) qui est valable.

Avec l'introduction de la fréquence de WEISSKOPF  $\omega_c$ , il existe une zone de recouvrement de la théorie des impacts et de l'approximation du perturbateur le plus proche.

$$0 \leq \Delta\omega \leq \Delta\omega_c \quad (\text{III-6})$$

$$\omega_c = \frac{3kT a_0}{2\hbar R_0} \quad (\text{III-7})$$

$$a_0 = \frac{\hbar}{me^2} \quad (\text{III-8})$$

$$R_0 = \frac{3n^2 a_0}{2} \quad (\text{III-9})$$

$n$  est le nombre quantique principal,  $a_0$  rayon de la première orbite de BOHR.

- En général  $\Delta\omega \gg \omega_c$

Si  $\tau_c \gg \frac{1}{\Delta\omega}$ , les perturbateurs peuvent être supposés quasi-statiques et à partir de la fonction de distribution des champs de ces perturbateurs obtient la raie émise (Théorie de HOLTSMARK 1919, HOOPER [1966]).

Seule l'approximation du plus proche voisin reste valable dans les ailes lointaines.

### III -3 Expression du profil de la raie calculée pour les électrons dans le cadre de l'approximation des impacts et pour les ions dans l'approximation quasi-statique. (GRIEM (1974, 1964), SHAMEY (1969) ; GREM et al (1962))

Dans le spectre du visible, les transitions se font souvent entre 2 groupes de niveaux avec une séparation entre les niveaux plus grande que celle qui existe entre les sous-niveaux.

Soit le (a) niveau composé de sous-niveaux  $|\alpha\rangle, |\alpha'\rangle, |\alpha''\rangle..$

(b) le niveau composé de sous-niveaux  $|\beta\rangle, |\beta'\rangle, |\beta''\rangle..$

Du fait de l'espacement relative des niveaux énergétiques, on peut supposer pour les calculs du profil de la raie émise que l'opérateur évolution du système n'a d'éléments matriciels qu'entre les sous-niveaux (a) ou seulement entre les états (b) mais pas entre (a) et (b). La fonction d'autocorrélation du système peut s'écrire :

$$\Phi(s) = \sum_{\alpha\alpha'\beta\beta'} d_{\alpha\beta} \langle \alpha | \langle \beta | \{ U_b(s,0) U_a^*(s,0) \}_{av} | \alpha' \rangle | \beta' \rangle . d_{\alpha'\beta'}^* \times \exp[i(E_\alpha - E_\beta)s/\hbar] \quad (\text{III-10})$$

'av' est la moyenne d'ensemble faite sur les perturbateurs.

$U_a(s,0)$  est l'opérateur évolution du système dans l'état (a),  $U_b(s,0)$  l'opérateur évolution du système dans l'état (b).

$E_\alpha$  est l'énergie du niveau  $\alpha$ ,  $E_\beta$  est l'énergie du niveau  $\beta$ .

$d_{\alpha\beta}$  est l'élément matriciel de l'opérateur moment dipolaire du système entre les états  $\alpha$  et  $\beta$ .

$$d_{\alpha\beta} = \langle \alpha | d | \beta \rangle \quad (\text{III-11a})$$

$$d_{\alpha\beta}^* = \langle \beta | d^+ | \alpha \rangle \quad (\text{III-11b})$$

La sommation est fait sur tous les états initiaux et finals du système.

Le calcul de la moyenne  $\{ U_b(s,0) U_a^*(s,0) \}_{av}$  nous permet d'avoir une expression de  $\Phi(s)$  plus explicite, pour cela calculons la variation de cette moyenne dans l'intervalle de temps  $\Delta s$ .

$$\Delta \{ U_b(s,0) U_a^*(s,0) \}_{av} = \{ U_b(s + \Delta s, 0) U_a^*(s + \Delta s, 0) - U_b(s,0) U_a^*(s,0) \}_{av} \quad (\text{III-12})$$

$$\Delta \{ U_b(s,0) U_a^*(s,0) \}_{av} = \{ [ U_b(s + \Delta s, s) U_a^*(s + \Delta s, s) - I ] [ U_b(s,0) U_a^*(s,0) ] \}_{av} \quad (\text{III-13})$$

avec

$$U(s + \Delta s, s) = I - \frac{i}{\hbar} \int_s^{s+\Delta s} v''(s') ds' + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_s^{s+\Delta s} v'(s') \int_s^{s'} v''(s'') ds'' ds' + \dots \quad (\text{III-14})$$

Des transformations directes de l'expression  $U(s, s + \Delta s)$  permettent d'écrire que :

$$U(s + \Delta s, s) = e^{iHs/\hbar} \left[ I - i/\hbar \int_0^{\Delta s} v'(t') dt' + \dots \right] e^{-iHs/\hbar} \quad (\text{III-15})$$

$$U(s + \Delta s, s) = e^{iHs/\hbar} [U(\Delta s, 0)] e^{-iHs/\hbar} \quad (\text{III-16})$$

avec

$$U(\Delta s, 0) = I - i/\hbar \int_0^{\Delta s} v'(t') dt' + \dots \quad (\text{III-17a})$$

Dans le sens de l'évaluation de  $\Delta\{U_b U_a^*\}_{av}$  on évoque l'approximation des impacts :

- Les collisions sont séparées dans le temps.

- Si les collisions sont faibles alors les termes de degré inférieur se comportent comme si les perturbateurs agissaient de façon indépendantes.

- Si les collisions sont fortes, elles sont également séparées dans le temps et on ne tient pas compte des collisions faibles qui se produisent en même temps que les collisions fortes.

L'approximation des impacts peut être appliquée si :

1-  $\Delta s$  est grand ( $\Delta s > tc$ , le temps de collision) telle que les deux facteurs dans la relation

donnant  $\Delta\{U_b U_a^*\}_{av}$  soient statistiquement indépendants de sorte qu'ils puissent être moyennés séparément.

2-  $\Delta s$  est si petit que la moyenne du premier facteur de  $\Delta\{U_b U_a^*\}_{av}$  est petit comparé à l'unité, ce qui permet de remplacer  $\Delta s$  et  $\Delta\{U_b U_a^*\}_{av}$  par des différentielles.

En utilisant  $U_b(s + \Delta s, s)$  et  $U_a(s + \Delta s, s)$  on a :

$$\Delta\{U_b(s + \Delta s, s) U_a^*(s + \Delta s, s) - I\} = \{e^{iH_b s/\hbar} U_b(\Delta s, 0) e^{-iH_b s/\hbar} \dots e^{iH_a s/\hbar} [U_a^*(\Delta s, 0) e^{-iH_a s/\hbar} - I]\}_{av} \quad (\text{III-17b})$$

$$\frac{\Delta}{\Delta s} \{U_b U_a^*\}_{av} = \frac{1}{\Delta s} \{e^{i(H_b - H_a)s/\hbar} U_b(\Delta s, 0) U_a^*(\Delta s, 0) e^{-i(H_b - H_a)s/\hbar} - I\} \{U_b U_a^*\}_{av} \quad (\text{III-18})$$

En passant des différences au différentielles, on obtient la relation suivante :

$$\frac{d}{ds} \{U_b U_a^*\}_{av} = e^{i(H_b - H_a)s/\hbar} \Phi_{ab} e^{-i(H_b - H_a)s/\hbar} \{U_b(s, 0) U_a^*(s, 0)\} \quad (\text{III-19})$$

avec



$$\Phi_{ab} = \frac{1}{\Delta s} \{U_b(\Delta s, 0)U_a^*(\Delta s, 0) - I\} \quad (\text{III-20})$$

La solution de cette équation différentielle est :

$$\{U_b(s, 0)U_a^*(s, 0)\} = e^{i[(H_b-H_a)s/\hbar + \Phi_{ab}s]} \quad (\text{III-21})$$

Ainsi, la fonction d'autocorrélation devient :

$$\Phi(s) = \sum_{\alpha\alpha'\beta\beta'} d_{\alpha\beta} \langle \alpha | \langle \beta | \exp[-i(H_a - H_b)s/\hbar + \Phi_{ab}s] | \alpha' \rangle | \beta' \rangle d_{\alpha'\beta'}^* \quad (\text{III-22})$$

Le profil de la raie est obtenu par transformation de Fourier inverse

$$L(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Re} \sum_{\alpha\alpha'\beta\beta'} d_{\alpha\beta} \langle \alpha | \langle \beta | [i\omega - i(H_a - H_b)/\hbar + \Phi_{ab}]^{-1} | \alpha' \rangle | \beta' \rangle d_{\alpha'\beta'}^* \quad (\text{III-23})$$

*Re* est la partie réelle de l'expression de  $L(\omega)$ , est un opérateur qui contient la matrice de collision  $S$ .

Le mouvement des ions étant plus lent que celui des électrons du fait de leur masse, ceux-ci peuvent être considérés comme quasi-statiques sur une période de l'ordre du temps de collision des électrons : c'est pourquoi dans l'approximation quasi - statique l'élargissement électronique est calculé à partir de  $L(\omega)$  pour chaque champ ionique constant et le résultat est ensuite moyenné sur une distribution  $W(E)$  du champ des ions  $E$ . Dans le calcul du profil, 3 étapes sont suivies :

1- Appliquer le champ et trouver les fonctions d'ondes appropriées telle que les valeurs propres de l'hamiltonien dépendent de  $E$ .

2- Diagonaliser la matrice  $H$  qui est fonction de  $E$ .-ite moyenner sur la distribution de probabilité  $W(E)$ . On a ainsi :

$$L(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty W(E) dE \times \text{Re} \sum_{\alpha\alpha'\beta\beta'} d_{\alpha\beta} \langle \alpha | \langle \beta | [i\omega - i(H_a(E) - H_b(E))/\hbar + \Phi_{ab}(E)]^{-1} | \alpha' \rangle | \beta' \rangle d_{\alpha'\beta'}^* \quad (\text{III-24})$$

La condition de l'approximation des impacts exige que :

$$\Delta t \simeq \frac{1}{\Delta \omega} \gg t_c(\rho/v) \quad (\text{III-25})$$

$\Delta t$  plus grand que la plus grande valeur possible de  $t_c$  qui est  $\frac{\lambda_D}{v}$  ( $\lambda_D$  est la longueur de DEBYE).

$$\frac{\lambda_D}{v} = \frac{1}{\omega_p} \quad (\text{III-26})$$

$$\omega_p = \left( \frac{4\pi n e^2}{m} \right)^{1/2}, \Delta\omega \ll \omega_p \quad (\text{III-27})$$

$\omega_p$  est la fréquence plasma,  $n$  la densité des particules.

Les 2 conditions de la théorie des impacts peuvent se résumer ainsi :

$$\Delta s \gg t_c = \frac{\rho}{v} \quad (\text{III-28})$$

$$\Phi_{ab} \cdot \Delta s \ll 1 \quad (\text{III-29})$$

$$\frac{1}{\omega_p} \ll t_c \ll \Delta s \ll \frac{1}{\omega} \quad (\text{III-30})$$

L'approximation quasi-statique (pour les ions) s'exprime par :

$$\Delta\omega \gg \frac{1}{t_c} (v/\rho) \quad (\text{III-31})$$

### III-4 Conclusion

Sous les hypothèses de la théorie des impacts, l'expression du profil engendre principalement le calcul des éléments matriciels de l'opérateur  $\Phi_{ab}$  qui contient l'information sur l'interaction entre l'atome, l'émetteur et les perturbateurs. Par ailleurs, le calcul des éléments matriciels de l'opérateur, moment dipolaire et de l'hamiltonien du système doivent se faire pour achever le calcul du profil de la raie émise.

**CHAPITRE IV**  
**ETUDE CRITIQUE DE LA CONTRIBUTION**  
**DES ELECTRONS DANS LE CADRE DE LA THEORIE DES IMPACTS**

*IV.1 Expression de l'opérateur  $\Phi_{ab}$*

*IV.2 Calcul des éléments matriciels de l'opérateur  $\Phi_{ab}$*

*IV.3 Etude des fonctions caractéristiques  $A(z_1, z_2)$  et  $B(z_1, z_2)$ .*

*IV.4 Conclusion*

## IV-Etude critique de la contribution des électrons dans le cadre de la théorie des impacts

La contribution électronique à l'élargissement des raies spectrales dans le cadre de la théorie des impacts s'obtient à partir des éléments matriciels de dans l'expression du profil de la raie émise  $L(\omega)$ .

Avant le calcul de ces éléments matriciels, nous allons d'abord analyser et donner l'expression de  $\Phi_{ab}$  sous certaines conditions énoncées en cours de calcul.

### IV-1 Expression de $\Phi_{ab}$

$$\Phi_{ab} = \frac{1}{\Delta s} \{U_b(\Delta s, 0)U_a^*(\Delta s, 0) - I\}_{av} \quad (IV-1a)$$

Inclut une moyenne d'ensemble sur tous les perturbateurs. On peut calculer cette moyenne en le faisant d'abord sur un seul perturbateur et ensuite multiplier par le nombre de collisions qui se produisent dans l'intervalle de temps.

Ce nombre est  $\Delta s.dv$  ou  $\nu$  est la fréquence de collision. Cette méthode se justifie par le fait que dans la théorie des impacts, les collisions sont séparées dans le temps et sont statistiquement indépendantes (Baranger, 1962).

Le potentiel  $V'(s)$  dans l'intégrande de l'opérateur évolution  $U_b(\Delta s, 0)$  ou  $U_a(\Delta s, 0)$  est négligeable en dehors de l'intervalle  $(0, \Delta s)$ , c'est pourquoi il est possible d'étendre les limites d'intégration à  $(-\infty$  à  $+\infty)$ .

En tenant compte du mouvement de l'électron, on introduit une moyenne angulaire ('ang') ainsi  $\Phi_{ab}$  s'écrit :

$$\Phi_{ab} = \int \{U_b(+\infty, -\infty)U_a^*(+\infty, -\infty) - I\}_{ang} dv \quad (IV-1b)$$

$$U(\infty, -\infty) \equiv S = \xi \exp(-i/\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} v'(t) dt) \quad (IV-2)$$

$$dv = 2\pi n \rho d\rho v f(v) dv \quad (IV-3)$$

$\xi$  est l'opérateur de chronologie qui gère l'ordre chronologique des opérateurs  $V'(t)$  dans le développement en série de l'opérateur  $S$ .

$f(v)$  est la fonction de distribution Maxwellienne des vitesses,  $\rho$  le paramètre d'impact,  $n$  la densité des particules (électrons).

Une remarque simplification importante se fait quand l'élargissement des niveaux inférieurs est négligé  $\Phi_{ab}$  devient alors :

$$\Phi_{ab} = \Phi_a = \int \{S_a^* - 1\}_{ang_{av}} dv \quad (IV-4)$$

$$U_b = S_b = 1 \quad (IV-5)$$

On rappelle que :  $S = \zeta \exp(-i/\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} v'(t) dt)$ .

$$S_a^* - 1 = -1 + \left[ \zeta \exp(-i/\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} v'(t) dt) \right]$$

$$S_a^* - 1 = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} v'(t) dt - \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} v'(t_1) v'(t_2) dt_1 dt_2 + \dots \quad (IV-6)$$

$\zeta$  est l'opérateur de chronologie.

$S_a^*$  est la matrice de collision conjugué à l'état (a) du système.

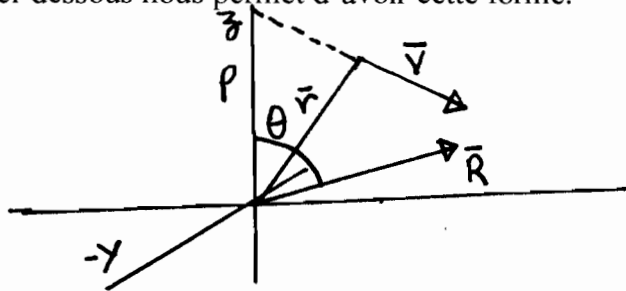
## IV-2 Calcul des éléments matriciels de $\Phi_{ab}$ ou $\Phi_a$

Nous allons d'abord calculer les éléments matriciels de  $S_a^* - 1$  en ne tenant pas compte pour le moment de l'intégrale sur la fréquence.

Au premier ordre du développement de  $S_a^* - 1$

$$\langle \Psi_1 | \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} v'(t) dt | \Psi_2 \rangle = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar} \{ \langle \Psi_1 | V_{cl}(t) | \Psi_2 \rangle \}_{ang_{av}} \quad (IV-7)$$

L'expression du potentiel d'interaction est calculée à partir du procédé suivant : la figure ci-dessous nous permet d'avoir cette forme.



Dans cette figure,  $R$  est le vecteur position de l'électron atomique (émetteur),  $r$  le vecteur position de l'électron perturbateur,  $v$  la vitesse de l'électron ayant un paramètre d'impact  $\rho$  mesuré à partir de l'axe des  $z$  (voir figure)

$$\vec{r} = \vec{\rho} + \vec{v}t \quad (IV-8)$$

Où  $\vec{\rho}$  est le vecteur dans la direction des  $z$  et  $\vec{v}$  vecteur vitesse dans la direction des  $x$ .

Le potentiel scalaire au point  $r$  dû au dipôle  $\vec{d} = e\vec{r}$  calculé à partir de l'origine est :

$$U(r) = \frac{\vec{d} \cdot \vec{r}}{|\vec{r}|^3} = \frac{e\vec{R} \cdot \vec{r}}{|\vec{r}|^3} \quad (\text{IV-9})$$

$$U(r) = e\vec{R} \cdot (\vec{\rho} + \vec{v}t) \cdot (\rho^2 + v^2t^2)^{3/2}$$

$e$  est la de l'électron.

$$\vec{R} \cdot \vec{v} = Rv \cos \alpha \quad (\text{IV-10})$$

$$\vec{R} \cdot \vec{\rho} = R\rho \cos \theta \quad (\text{IV-11})$$

$\alpha$  est l'angle entre  $R$  et  $v$ ,  $\theta$  et  $\phi$  sont les angles sphériques  $R$ .

$$\cos \alpha = \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos(\phi - \phi') \quad (\text{IV-12})$$

$$\cos \alpha = \sin \theta \cos \phi$$

alors, l'énergie d'interaction s'écrit :

$$V_{cl}(t) = eU(r)$$

$$\begin{aligned} V_{cl}(t) &= e^2(R\rho \cos \theta + Rvt \sin \theta \cos \phi) / (\rho^2 + v^2t^2)^{3/2} \\ &= \frac{e^2R}{(\rho^2 + v^2t^2)^{3/2}} [\rho \cos \theta + vt \sin \theta \cos \phi] \end{aligned} \quad (\text{IV-13})$$

En utilisant les harmoniques sphériques  $Y_{kq}$  et en définissant  $C_q^k$

$$C_q^k = \left( \frac{4\pi}{2k+1} \right)^{1/2} \cdot Y_{kq} \quad (\text{IV-14})$$

$$\text{avec } C_0^{(1)} = \cos \theta, C_1^{(1)} = -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{i\phi}, C_{-1}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{-i\phi} \quad (\text{IV-15})$$

$$V_{cl}(t) = \frac{e^2R}{\rho^3(1 + \frac{v^2t^2}{\rho^2})^{3/2}} \left[ \rho C_0^{(1)} + \frac{vt}{\sqrt{2}} (C_{-1}^{(1)} - C_1^{(1)}) \right] \quad (\text{IV-16})$$

Les éléments matriciels de  $V_{cl}(t)$  entre les états de l'électron atomique sont calculables à l'aide du théorème WIGNER-ECKART (voir Edmonds 1960 équation 5.4.1).

Soit  $j_1, j_2$  les moments angulaires du système à l'état 1 et 2,  $m_1$  et  $m_2$  respectivement des moments  $j_{1z}$  et  $j_{2z}$ , si  $T_q^{(k)}$  un opérateur tensoriel, le théorème de WIGNER-ECKART permet d'écrire :

$$\langle j_1 m_1 | T_q^k | j_2 m_2 \rangle = (-1)^{j_1 - m_1} \begin{pmatrix} j_1 & k & j_2 \\ -m_1 & q & m_2 \end{pmatrix} \langle j_1 || T^k || j_2 \rangle \quad (\text{IV-17})$$

$$\text{On a } \langle j_1 m_1 | V_{cl}(t) | j_2 m_2 \rangle = \sum_{\mu} a_{\mu} \begin{pmatrix} j_1 & 1 & j_2 \\ -m_1 & \mu & m_2 \end{pmatrix} \cdot (-1)^{j_1 - m_1} \quad (\text{IV-18})$$

$$a_0 = \frac{\rho e^2}{(\rho^2 + v^2t^2)^{3/2}} \langle j_1 || RC^{(1)} || j_2 \rangle \quad (\text{IV-19a})$$

$$a_1 = \frac{vte^2}{\sqrt{2}(\rho^2 + v^2t^2)^{3/2}} \langle j_1 \| RC^{(1)} \| j_2 \rangle \quad (IV-19b)$$

$$a_{-1} = \frac{-vte^2}{\sqrt{2}(\rho^2 + v^2t^2)^{3/2}} \langle j_1 \| RC^{(1)} \| j_2 \rangle \quad (IV-19c)$$

$\Psi_1$  et  $\Psi_2$  sont les états propres qui diagonalisent l'hamiltonien H du système.

$$H = H_0 + ezE \quad (IV-20a)$$

$$\langle \Psi_1 | \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} v'(t) dt \right\} | \Psi_2 \rangle = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar} \{ \langle \Psi_1 | V_{cl}(t) | \Psi_2 \rangle \}_{ang_{av}} dt$$

$$= \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar} \sum_{j_1 m_1 j_2 m_2} \langle \Psi_1 | j_1 m_1 \rangle \langle j_1 m_1 | \{ V_{cl}(t) \}_{ang_{av}} | j_2 m_2 \rangle \langle j_2 m_2 | \Psi_2 \rangle \quad (IV-20b)$$

Les états  $|j_1 m_1\rangle$  et  $|j_2 m_2\rangle$  diagonalisent seulement l'hamiltonien  $H_0$  (l'hamiltonien non perturbé par les champs des ions).

$\langle j_1 \| RC^{(1)} \| j_1 \rangle, \langle j_2 \| RC^{(2)} \| j_2 \rangle$  sont les éléments matriciels réduits de  $RC^{(k)}$

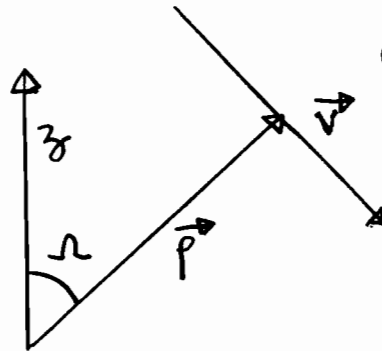
$$\begin{pmatrix} j_1 & 1 & j_2 \\ -m_1 & \mu & m_2 \end{pmatrix} \quad (IV-21)$$

est symbole 3j.

Si on suppose une rotation des axes initiaux (définie par la direction z du champ ionique) par rapport aux axes de collisions (définie par le paramètre d'impact  $\rho$  sur l'axe z), on peut définir 3 angles.

$$\Omega = (\alpha, \beta, \gamma)$$

$$D(\Omega) |jm\rangle = \sum_{m'} D_{mm'}^{(j)} |jm'\rangle \quad (IV-22)$$



$v$  est la vitesse de l'électron perturbant.

$D_{mm'}$  est l'élément matriciel de  $D(\Omega)$  entre les états  $jm$  et  $jm'$ ,  $D(\Omega)$  étant l'opérateur de rotation qui transforme les états  $jm$  en  $jm'$  à partir d'une rotation d'angle  $\Omega$ .

Le calcul de la moyenne angulaire se fait en supposant que les collisions électroniques se produisent suivant des orientations aléatoires. Pour rendre compte de tous ces orientations on intègre sur  $\Omega = (\alpha, \beta, \gamma)$ . on a ainsi :

$$\{ \langle j_1 m_1 | V_{cl}(t) | j_2 m_2 \rangle \}_{ang_{av}} = \frac{1}{8\pi^2} \sum_{m_1' m_2'} \int D_{m_1' m_1}^{(j_1)} \cdot D_{m_2' m_2}^{(j_2)} \times \langle j_1 m_1 | V_{cl}(t) | j_2 m_2 \rangle d\Omega \quad (IV-23)$$

$8\pi^2$  est un facteur de normalisation.

$$\langle j_1 m_1 | V_{cl}(t) | j_2 m_2 \rangle \}_{ang_{av}} = \frac{1}{(2j_1 + 1)} \sum_{m'_1 m'_2} \delta_{m'_1 m'_2} \delta_{m_1 m_2} \delta_{j_1 j_2} \times \langle j_1 m'_1 | V_{cl}(t) | j_2 m'_2 \rangle$$

$$= \frac{1}{(2j_1 + 1)} \sum_{m'_1} \delta_{m_1 m_2} \delta_{j_1 j_2} \langle j_1 m_1 | V_{cl}(t) | j_1 m'_1 \rangle \quad (IV-24)$$

car

$$\int d\Omega D_{\mu_1 m_1}^{(j_1)} \cdot D_{\mu_2 m_2}^{(j_2)} = \frac{8\pi^2}{(2j_1 + 1)} \delta_{\mu_1 \mu_2} \delta_{m_1 m_2} \delta_{j_1 j_2} \quad (IV-25)$$

(voir EDMONDS 1960)

$$\langle \Psi_1 | \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} v'(t) dt \right\} | \Psi_2 \rangle = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar} \sum_{j_1 m_1 m'_1} \langle j_1 m'_1 | V_{cl}(t) | j_1 m_1 \rangle \times \langle j_1 m_1 | \Psi_2 \rangle \quad (IV-26)$$

Seuls les termes pour lesquels  $\mu = 0$  contribuent .

$$\langle j_1 m_1 | V_{cl}(t) | j_2 m_2 \rangle = a_0 \begin{pmatrix} j_1 & 1 & j_2 \\ -m_1 & 0 & m_2 \end{pmatrix} \cdot (-1)^{j_1 - m_1} \quad (IV-26a)$$

$$\begin{aligned} \sum_{m'_1} \langle j_1 m'_1 | V_{cl}(t) | j_1 m'_1 \rangle &= \sum_{m'_1} a_0 (-1)^{j_1 - m'_1} \begin{pmatrix} j_1 & 1 & j_2 \\ -m'_1 & 0 & m'_1 \end{pmatrix} \\ &= a_0 \sum_{m'_1} \frac{m'_1}{[(2j_1 + 1)(j_1 + 1)]^{1/2}} = 0 \end{aligned} \quad (IV-26b)$$

car  $\sum_{m'_1} m'_1 = 0$

$\delta_{m_2 m'_2} \delta_{j_2 j'_2}$  sont les deltas de CRONECKER

on a utilisé la propriété

$$\begin{pmatrix} J & 1 & J \\ -M & 0 & M \end{pmatrix} = (-1)^{J-M} \frac{M}{[(2J+1)(J+1)]^{1/2}} \quad (IV-27)$$

(voir Edmonds [1960] page 125)

$J$  est le moment angulaire total,  $J = j_1 + j_2$  et  $M = m_1 + m_2$

les éléments matriciels de  $\Phi_a$  sont nuls au premier ordre donc pas de contribution électronique à cet ordre. Le calcul des éléments matriciels de  $\&$  au second degré se fait suivant le même procédé.

$$\begin{aligned} \langle \Psi_1 | \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} v'(t_1) dt_1 \int_{-\infty}^{+\infty} v'(t_2) dt_2 \right\} | \Psi_2 \rangle &= \\ \sum_n \left( -\frac{1}{\hbar^2} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 e^{i[(E_1 - E_n)t_1/\hbar + (E_n - E_2)t_2/\hbar]} &\times \{ \langle \Psi_1 | V_{cl}(t_1) | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | V_{cl}(t_2) | \Psi_2 \rangle \} \\ = \sum_{n, j_1 m_1, j_2 m_2, j_3 m_3, j_4 m_4} \left( -\frac{1}{\hbar^2} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 e^{i[(E_1 - E_n)t_1/\hbar + (E_n - E_2)t_2/\hbar]} &\times \\ \langle \Psi_2 | j_1 m_1 \rangle \langle \Psi_n | j_3 m_3 \rangle^* \langle \Psi_n | j_4 m_4 \rangle \langle \Psi_2 | j_2 m_2 \rangle^* &\times \\ \{ \langle j_1 m_1 | V_{cl}(t_1) | j_3 m_3 \rangle \langle j_4 m_4 | V_{cl}(t_2) | j_2 m_2 \rangle \}_{av} &\quad (IV-28) \end{aligned}$$



Les états  $|\Psi_n\rangle$  sont des états propres de l'hamiltonien  $H_0 +$  l'interaction du champ ionique qui se fait le long de l'axe  $z$ .  $|jm\rangle$  les états propres de  $H_0$  uniquement. La moyenne angulaire est calculée de la même manière qu'avant : c'est-à-dire, en supposant que les collisions se font suivant des orientations aléatoires  $\Omega$  du système.

Les kets  $|jm\rangle$  passent à  $|j'm'\rangle$  par une rotation suivant  $\Omega$ . Les éléments matriciels résultant sont moyennés par une intégration sur  $\Omega$ .

$$\begin{aligned} & \{ \langle j_1 m_1 | V_{cl}(t) | j_3 m_3 \rangle \langle j_4 m_4 | V_{cl}(t) | j_2 m_2 \rangle \}_{av} = \\ & \frac{1}{8\pi^2} \sum_{m'_1, m'_2, m'_3, m'_4} \int D_{m'_1 m_1}^{*(j_1)} D_{m'_3 m_3}^{*(j_3)} D_{m'_4 m_4}^{*(j_4)} D_{m'_2 m_2}^{*(j_2)} \langle j_1 m'_1 | V_{cl}(t_1) | j_3 m'_3 \rangle \langle j_4 m'_4 | V_{cl}(t_2) | j_2 m'_2 \rangle d\Omega \\ & = \frac{1}{8\pi^2} \sum \int (2J+1) (-1)^{m'_1 - m_1 M' - m'_4 - m_4} D_{-m'_4 - m_4}^{*(j_4)} D_{m'_2 m_2}^{*(j_2)} D_{-M' - M}^{*(J)} \times \\ & \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ -m'_1 & m'_3 & M' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_3 & J \\ m_1 & m_3 & M \end{pmatrix} \langle j_1 m'_1 | V_{cl}(t_1) | j_3 m'_3 \rangle \langle j_4 m'_4 | V_{cl}(t_2) | j_2 m'_2 \rangle d\Omega \\ & = \sum_{m'_1 m'_3 m'_4 J M M'} (-1)^{m'_2 - m_1 + M' - M + m'_4 - m_4} (2J+1) \begin{pmatrix} j_4 & j_2 & J \\ -m'_4 & m'_2 & -M' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_4 & j_2 & J \\ -m_4 & m_2 & M \end{pmatrix} \times \\ & \begin{pmatrix} j_1 & j_3 & J \\ -m'_1 & m'_3 & M' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_3 & J \\ m_1 & m_3 & M \end{pmatrix} \langle j_1 m'_1 | V_{cl}(t_1) | j_3 m'_3 \rangle \langle j_4 m'_4 | V_{cl}(t_2) | j_2 m'_2 \rangle \quad (IV-29) \end{aligned}$$

L'intégrale sur  $D_{m'm}(j)$  a été calculée selon les relations utilisées antérieurement (voir Edmonds 1960). Les éléments matriciels de  $V_{cl}(t)$  peuvent se calculer en utilisant la relation :

$$\langle j_1 m_1 | V_{cl}(t) | j_2 m_2 \rangle = \sum_{\mu} a_{\mu} \begin{pmatrix} j_1 & 1 & j_2 \\ -m_1 & \mu & m_2 \end{pmatrix} (-1)^{j_1 - m_1} \quad (IV-30)$$

Le calcul des sommes sur les paires  $3j$  fait que la relation à droite devient

$$\sum_M (-1)^{(j_1 - m_1) + (j_4 - m_4) - M} \begin{pmatrix} j_1 & j_3 & J \\ -m_1 & M & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_4 & 1 & j_1 \\ -m_4 & -M & m_2 \end{pmatrix} \times \sum_{\mu} \frac{1}{3} (-1)^{\mu} a_{\mu}(t_1) a_{\mu}(t_2) \quad (IV-31)$$

En faisant une conversion aux éléments de la matrice dipolaire on a :

$$\langle j_1 m_1 | d_M | j_3 m_3 \rangle = (-1)^{j_1 - m_1} \begin{pmatrix} j_1 & 1 & J \\ -m_1 & M & m_3 \end{pmatrix} \times \langle j_1 || RC || j_3 \rangle \quad (IV-32)$$

La moyenne devient alors :

$$\begin{aligned} & \{ \langle j_1 m_1 | V_{cl}(t_1) | j_3 m_3 \rangle \langle j_4 m_4 | V_{cl}(t_2) | j_2 m_2 \rangle \}_{av} = \sum_M (-1)^M \langle j_1 m_1 | d_M | j_3 m_3 \rangle \times \\ & \langle j_4 m_4 | d_{-M} | j_2 m_2 \rangle \times \frac{e^4 (v^2 t_1 t_2 + \rho^2)}{3(v^2 t_1^2 + \rho^2)^{3/2} (v^2 t_2^2 + \rho^2)^{3/2}} \quad (IV-33) \end{aligned}$$

La substitution de (IV-33) dans ( IV.28) et la somme sur  $j_1m_1, j_2m_2, j_3m_3, j_4m_4$ , permet d'écrire finalement les éléments matriciels du second ordre de  $\Phi_a$

$$\langle \Psi_1 | \left\{ -\frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{t_1} dt_1 dt_2 v'(t_1) v'(t_2) \right\} | \Psi_2 \rangle = \sum_{n,M} (-1)^M \langle \Psi_1 | d_M | \Psi_n \rangle \times \langle \Psi_n | d_{-M} | \Psi_2 \rangle \frac{e^4}{3\hbar^2} \times \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{t_1} \frac{dt_1 dt_2 (\rho^2 + v^2 t_1 t_2) e^{i[(E_1 - E_n)t_1/\hbar + (E_n + E_1)t_2/\hbar]}}{(v^2 t_1^2 + \rho^2)^{3/2} (v^2 t_2^2 + \rho^2)^{3/2}} \quad (\text{IV-34a})$$

Les éléments matriciels de  $\Phi_a$  s'écrivent aussi :

$$\langle \Psi_1 | \Phi_a | \Psi_2 \rangle = - \int dv \sum_{n,M} (-1)^M \langle \Psi_1 | d_M | \Psi_n \rangle \times$$

$$\langle \Psi_n | d_{-M} | \Psi_2 \rangle \frac{e^4}{3\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{t_1} \frac{dt_1 dt_2 (\rho^2 + v^2 t_1 t_2) e^{i[(E_1 - E_n)t_1/\hbar + (E_n + E_1)t_2/\hbar]}}{(v^2 t_1^2 + \rho^2)^{3/2} (v^2 t_2^2 + \rho^2)^{3/2}} \quad (\text{IV-34b})$$

$$\langle \Psi_1 | \Phi_a | \Psi_2 \rangle = - \int dv \sum_{n,M} (-1)^M \langle \Psi_1 | d_M | \Psi_n \rangle \times \langle \Psi_n | d_{-M} | \Psi_2 \rangle \frac{e^4}{3\hbar^2} I \quad (\text{IV-34c})$$

$$\text{avec } I = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{t_1} \frac{dt_1 dt_2 (\rho^2 + v^2 t_1 t_2) e^{i[(E_1 - E_n)t_1/\hbar + (E_n + E_1)t_2/\hbar]}}{(v^2 t_1^2 + \rho^2)^{3/2} (v^2 t_2^2 + \rho^2)^{3/2}} \quad (\text{IV-35})$$

En faisant un changement de variables :

$$x_1 = \frac{vt_1}{\rho} ; x_2 = \frac{vt_2}{\rho} \quad (\text{IV-36})$$

$$Z_{ij} = (E_i - E_j) \cdot \frac{\rho}{v\hbar} = \omega_{ij} \frac{\rho}{v} \quad (\text{IV-37})$$

$$I = \frac{2}{\rho^2 v^2} I' \quad \text{avec } I' = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{x_1} \frac{dx_2 (1 + x_1 x_2) e^{i(z_{1n} x_1 - z_{2n} x_2)}}{(1 + x_1^2)^{3/2} (1 + x_2^2)^{3/2}} \quad (\text{IV-38})$$

$$I = \frac{2}{\rho^2 v^2} [A(z_{1n}, z_{2n}) + iB(z_{1n}, z_{2n})] \quad (\text{IV-39})$$

Les fonctions  $A$  et  $B$  étant les parties réelles et imaginaires de  $I$ .

Les éléments matriciels de  $\Phi_a$  deviennent :

$$\langle \Psi_1 | \Phi_a | \Psi_2 \rangle = - \int \int 2\pi n \rho d\rho f(v) dv \cdot \sum_{n,M} (-1)^M \langle \Psi_1 | d_M | \Psi_n \rangle \times \langle \Psi_n | d_{-M} | \Psi_2 \rangle \times \frac{2e^4}{(3\hbar^2 \rho^2 v^2)} [A(\omega_{1n} \rho/v, \omega_{2n} \rho/v) + B(\omega_{1n} \rho/v, \omega_{2n} \rho/v)] \quad (\text{IV-40})$$

Si les éléments matriciels du dipole sont exprimés en unités atomiques alors l'équation ci-dessus peut être multipliée par le carré du rayon de Bhor  $\frac{\hbar^4}{m^2 e^4}$

$$|\Psi_1\rangle = |\alpha\rangle, |\Psi_2\rangle = |\beta\rangle \quad (\text{IV-41})$$

$$\langle \alpha | \Phi_a | \alpha' \rangle = -\frac{4\pi n}{3} \left( \frac{\hbar}{m} \right)^2 \iint \frac{d\rho}{\rho} \frac{f(v)}{v} dv \sum_{n,M} (-1)^M \langle \alpha | d_M | n \rangle \langle n | d_{-M} | \alpha' \rangle \times$$

$$[A(\omega_{an}\rho/v, \omega_{\alpha'n}\rho/v) + B(\omega_{an}\rho/v, \omega_{\alpha'n}\rho/v)] \quad (\text{IV-42})$$

On peut noter que ces éléments matriciels dépendent du champ des ions  $E$  quasi-statique à travers les éléments matriciels du dipôle mais aussi, à travers les fonctions  $A(\omega_{an}\rho/v, \omega_{\alpha'n}\rho/v)$  et  $B(\omega_{an}\rho/v, \omega_{\alpha'n}\rho/v)$ .

On montre que les éléments matriciels de  $\Phi_a$  sont symétriques on a :

$$\langle \alpha | \Phi_a | \alpha' \rangle = \langle \alpha' | \Phi_a | \alpha \rangle \quad (\text{IV-43})$$

Ceci réduit le nombre de calculs.

### IV-3 Etude des fonctions $A(z_1, z_2)$ , $B(z_1, z_2)$

Ces fonctions représentent une généralisation des fonctions utilisées par GRIEM, BARANGER, KOLB, OERTEL (1962).

En posant que  $Z_i = \frac{\omega_i \rho}{v}$

$$A(z) \equiv A(z, z) = z^2 [k_0^2(|z|) + k_1^2(|z|)] \quad (\text{IV-44})$$

$$B(z) \equiv B(z, z) = \frac{2z}{\pi} \int_0^\infty \frac{A(z')}{z^2 - z'^2} dz' \quad (\text{IV-45})$$

$K_0$  et  $K_1$  étant les fonctions de Bessel modifiées. Lorsque  $z_1 = z_2$  on utilise les fonctions  $A(z_1, z_2)$  et  $B(z_1, z_2)$ .

On rappelle que :

$$A(z_1, z_2) + iB(z_1, z_2) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{x_1} dx_2 \frac{(1 + x_1 x_2) e^{i(x_1 z_1 - x_2 z_2)}}{(1 + x_1^2)^{3/2} (1 + x_2^2)^{3/2}} \quad (\text{IV-46})$$

$A(z_1, z_2)$  est la partie réelle de l'expression et  $B(z_1, z_2)$  la partie imaginaire.

$$A(z_1, z_2) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \frac{\cos(z_1 x_1)}{(1 + x_1^2)^{3/2}} \int_{-\infty}^{x_1} dx_2 \frac{\cos(z_2 x_2)}{(1 + x_2^2)^{3/2}} +$$

$$\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \frac{\sin(z_1 x_1)}{(1 + x_1^2)^{3/2}} \int_{-\infty}^{x_1} dx_2 \frac{\sin(z_2 x_2)}{(1 + x_2^2)^{3/2}} + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \frac{x_1 \cos(z_1 x_1)}{(1 + x_1^2)^{3/2}} \int_{-\infty}^{x_1} dx_2 \frac{x_2 \cos(z_2 x_2)}{(1 + x_2^2)^{3/2}}$$

$$\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \frac{x_1 \sin(z_1 x_1)}{(1 + x_1^2)^{3/2}} \int_{-\infty}^{x_1} dx_2 \frac{x_2 \sin(z_2 x_2)}{(1 + x_2^2)^{3/2}} \quad (\text{IV-47})$$

$$B(z_1, z_2) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{x_1} dx_2 \frac{\sin(z_1 x_1)}{(1 + x_1^2)^{3/2}} \frac{\cos(z_2 x_2)}{(1 + x_2^2)^{3/2}} +$$

$$\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{x_1} dx_2 \frac{\cos(z_2 x_2)}{(1 + x_2^2)^{3/2}} \frac{\sin(z_1 x_1)}{(1 + x_1^2)^{3/2}} x_1 x_2 - \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \frac{\cos(z_1 x_1)}{(1 + x_1^2)^{3/2}} \int_{-\infty}^{x_2} dx_2 \frac{\sin(z_2 x_2)}{(1 + x_2^2)^{3/2}}$$

$$\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \frac{x_1 \sin(z_1 x_1)}{(1 + x_1^2)^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_2 \frac{x_2 \cos(z_2 x_2)}{(1 + x_2^2)^{3/2}} \quad (\text{IV-48})$$

Du fait de la parité des intégrandes on montre que :

$$\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \frac{\cos(z_1 x_1)}{(1+x_1^2)^{3/2}} \int_{-\infty}^{x_1} dx_2 \frac{\cos(z_2 x_2)}{(1+x_2^2)^{3/2}} = \int_0^{+\infty} dx_1 \frac{\cos(z_1 x_1)}{(1+x_1^2)^{3/2}} \int_0^{+\infty} dx_2 \frac{\cos(z_2 x_2)}{(1+x_2^2)^{3/2}}$$

(IV-49a)

$$\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \frac{x_1 \sin(z_1 x_1)}{(1+x_1^2)^{3/2}} \int_{-\infty}^{x_1} dx_2 \frac{x_2 \sin(z_2 x_2)}{(1+x_2^2)^{3/2}} = \int_0^{+\infty} dx_1 \frac{x_1 \sin(z_1 x_1)}{(1+x_1^2)^{3/2}} \int_0^{+\infty} dx_2 \frac{\cos(z_2 x_2)}{(1+x_2^2)^{3/2}}$$

(IV-49b)

Les autres intégrales étant nulles l'expression de  $A(z_1, z_2)$  s'écrit :

$$A(z_1, z_2) = \int_0^{+\infty} dx_1 \frac{\cos(z_1 x_1)}{(1+x_1^2)^{3/2}} \int_0^{+\infty} dx_2 \frac{\cos(z_2 x_2)}{(1+x_2^2)^{3/2}} + \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \frac{\sin(z_1 x_1)}{(1+x_1^2)^{3/2}} \int_{-\infty}^{x_1} \frac{x_2 \sin(z_2 x_2)}{(1+x_2^2)^{3/2}} dx_2$$

(IV-50)

$$\int_0^{+\infty} dx_1 \frac{\cos(zx)}{(1+x^2)^{3/2}} = |z| k_1(|z|), \int_0^{+\infty} dx_1 \frac{x \sin(zx)}{(1+x^2)^{3/2}} = z k_0(|z|) \quad (IV-51)$$

Voir handbook [ABRAMOVITZ, page 374-375] (fonctions spéciales).  
Finalement on a :

$$A(z_1, z_2) = |z_1| |z_2| k_1(|z_1|) k_1(|z_2|) + z_1 z_2 k_0(|z_1|) k_0(|z_2|) \quad (IV-52)$$

Si  $z_1 = z_2$  on retrouve les expressions utilisées par G.B.K.O. [1962].

On montre à partir de la parité des fonctions de BESSEL que  $B(z_1, z_2)$  s'écrit :

$$B(z_1, z_2) = [|z_1| |z_2| k_0(|z_1|) I_0(|z_2|) - z_1 z_2 k_1(|z_1|) I_1(|z_2|)] \pi \quad (IV-53)$$

$$D'une manière générale  $I_n(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi e^{z \cos \theta} \cos(n\theta) d\theta \quad (IV-54)$$$

$$I_0(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi e^{z \cos \theta} d\theta \quad (IV-55a)$$

$$I_1(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi e^{z \cos \theta} \cos(\theta) d\theta \quad (IV-55b)$$

En posant que :

$$r = \frac{\omega_1}{\omega_2}, A(z_1, z_2) = A(z_1, rz_1) \text{ et } B(z_1, z_2) = B(z_1, rz_1)$$

Signalons que ces fonctions ont des propriétés de symétrie et de parité qui permettent soit de réduire le nombre de calculs soit de l'augmenter.

$$A(z, z') = A(z', z) \quad (\text{IV-56a})$$

$$B(z, z') = B(z', z) \quad (\text{IV-56b})$$

$$A(-z, -z') = -A(z, z') \quad (\text{IV-56c})$$

$$B(-z, -z') = -B(z, z') \quad (\text{IV-56d})$$

Les signes de  $z$  et  $z'$  sont opposés quand le niveau intermédiaire  $i''$  de l'atome émetteur se trouve entre les deux niveaux  $i$  et  $i'$  par lequel les éléments matriciels de  $\Phi_a$  sont calculés.

Leurs signes sont les mêmes autrement, c'est-à-dire que  $z$  et  $z'$  peuvent être calculés à partir des relations suivantes :

$$Z = \pm[(E_i - E_{i''})/h\nu]\rho \text{ et } Z' = \pm[(E_{i'} - E_{i''})/h\nu]\rho \quad (\text{IV. 57})$$

Où  $E_i, E_{i'}$  et  $E_{i''}$  sont les énergies respectives des niveaux  $i, i'$  et  $i''$ ,  $h$  la constante de PLANK,  $\rho$  et  $v$  le paramètre d'impact et la vitesse des perturbateurs.

Pour des valeurs grandes de  $z$  une expansion asymptotique a été proposée par BARNARD A. J. [non publié] et s'exprime par la relation :

$$B(z, z') = \pi e^{-|\Delta z|} \sum_{n=1}^{\infty} a_n z^{-n}, \quad \Delta z = z - z' \quad (\text{IV-58})$$

$$a_1 = \frac{1}{4}(1 + |\Delta z|), a_2 = \frac{1}{8}\Delta z(1 + |\Delta z|) \quad (\text{IV-59a})$$

$$a_2 = \frac{3}{32}(3 + 3|\Delta z| + 2|\Delta z|^2 + |\Delta z|^3) \quad (\text{IV-59b})$$

$$a_3 = \frac{\Delta z}{64}(27 + 27|\Delta z| + 14|\Delta z|^2 + 5|\Delta z|^3) \quad (\text{IV-59c})$$

...etc.....

L'intégrale des fonctions  $A$  et  $B$  par rapport au paramètre d'impact  $\rho$  donne des intégrales de la forme suivante.

$$\int_c^{\rho_{\max}} \frac{A(\rho')}{\rho'} d\rho' = \int_{\rho_{\min}}^{\infty} \frac{A(\rho')}{\rho'} d\rho' - \int_{\rho_{\min}}^{\infty} \frac{A(\rho')}{\rho'} d\rho' = a(\rho_{\min}) - a(\rho_{\max}) \quad (\text{IV-60})$$

$$a(\rho) = \int_{\rho}^{\infty} \frac{A(\rho')}{\rho'} d\rho' \quad (\text{IV-61})$$

On a  $a(\rho)$  vérifie l'équation différentielle suivante :

$$\frac{da(\rho)}{d\rho} = -\frac{A(\rho')}{\rho'} \quad (\text{IV-62})$$

Les bornes d'intégration  $\rho_{\min}$  et  $\rho_{\max}$  sont définies par des hypothèses physiques.

Du point de vue analytique l'opérateur  $S = \xi \exp(-i/\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} v'(t) dt$

oscille rapidement vers zéro quand  $\rho$  tend vers zéro (car  $v'(t)$  décroît rapidement) ainsi  $S_a^* - 1$  diverge. La région où  $S$  oscille est traitée séparément de celle où  $S$  est monotone. On définit ainsi le paramètre d'impact pour lequel si décroît alors  $S_a$  tend vers zéro.

$$0 < \rho < \rho_{\min} \quad (\text{IV-63})$$

On a donc pour les éléments diagonaux

$$|\langle \alpha | (S_a^* - 1) | \alpha \rangle| = 1 \quad (\text{IV-64})$$

La contrainte physique dans ce cas est relative à la validité de l'approximation de la trajectoire classique qui exige que le paramètre d'impact ne soit pas plus petite que la longueur d'onde de Broglie  $\lambda_0$ .

Le paramètre d'impact minimum est pris parfois égal à . Cette région est celle des collisions fortes, l'autre région où  $S$  est monotone c'est-à-dire  $\rho_{\min} < \rho < \rho_{\max}$

est caractérisé par une limite supérieure au delà de laquelle on peut considérer que le phénomène d'écran devient important ; c'est la zone des collisions faibles  $\rho_{\max}$

est de l'ordre  $1.12\rho_D$ .

Cette valeur varie selon les auteurs ainsi pour G.B.K.O. (1962)

$$\rho_{\max} = 1.12\rho_D.$$

mais selon CHAPPELL et al. [publication en cours].

$$\rho_{\max} = 1.65\rho_D$$

pour Shamey  $\rho_{\max} = 0.68\rho_D$ . L'intégration de  $A(\rho)$  entre  $\rho_{\max}$  et  $\rho_{\min}$  se fait à l'aide

de la propriété suivante.

$$a(z, z') = \int_z^{\infty} \frac{dy}{y} A(z, z' \frac{y}{z}) \quad z > z' > 0 \quad (\text{IV-65})$$

$$a(z, z') = \left[ \frac{zz'}{(z + z')} \right] [k_0(|z|)k_1(|z'|) + k_0(|z'|)k_1(|z|)] \quad (\text{IV-66})$$

$$b(z, z') = \pi \left[ \frac{zz'}{(z + z')} \right] [k_0(|z|)I_0(|z'|) - k_0(z)I_1(z')] \quad (\text{IV-67})$$

On montre aussi que si  $z_i = \frac{\rho}{v} \omega_i$

$$a(\rho) = \frac{\pi \rho}{v(\omega_1 + \omega_2)} [|\omega_1 \omega_2| k_0\left(\frac{\rho}{v} |\omega_1|\right) k_1\left(\frac{\rho}{v} |\omega_2|\right) + |\omega_1 \omega_2| k_1\left(\frac{\rho}{v} |\omega_1|\right) k_0\left(\frac{\rho}{v} |\omega_2|\right)] \quad (\text{IV-68})$$

$$b(\rho) = \frac{\pi \rho}{v(\omega_1 + \omega_2)} [\omega_1 \omega_2 k_1\left(\frac{\rho}{v} |\omega_1|\right) I_0\left(\frac{\rho}{v} |\omega_2|\right) - \omega_2 |\omega_1| k_0\left(\frac{\rho}{v} |\omega_1|\right) I_1\left(\frac{\rho}{v} \omega_2\right)] \quad (\text{IV-69})$$

Autre expression de a (z, z') et b (z, z')

$$a(z, rz) = \frac{r}{1+r} z [k_0(z)k_1(rz) + k_1(z)k_0(rz)] \quad (\text{IV-70})$$

$$b(z, rz) = \frac{r}{1+r} z [I_0(rz)k_1(z) - k_0(z)I_1(rz)] \quad (\text{IV-71})$$

Quelques propriétés importantes des fonctions de Bessel modifiées sont les formes asymptotiques.

Quand  $\omega_1 = 0$  ou  $\omega_2 = 0$  ou  $\omega_1 = \omega_2 = 0$  les formes des fonctions modifiées de Bessel sont utilisées :

$$k_0(z) = -\ln(z) \text{ quand } z \text{ tend vers zéro}$$

$$k_1(z) = 1/z \text{ quand } z \text{ tend vers zéro}$$

En utilisant les relations ci-dessous on obtient :

$$z_1 \lim_{z_2 \rightarrow 0} A(z_1, z_2) = |z_2| k_1(|z_2|) \quad (\text{IV-72a})$$

$$z_2 \lim_{z_1 \rightarrow 0} A(z_1, z_2) = |z_1| k_1(|z_1|) \quad (\text{IV-72b})$$

$$z_1 \lim_{z_2 \rightarrow 0} A(z_1, z_2) = 1 \quad (\text{IV-72c})$$

$$\omega_1 \lim_{\rho \rightarrow 0} a(\rho) = k_0\left(\frac{\rho}{v} |\omega_1|\right) \quad (\text{IV-72d})$$

$$\omega_2 \lim_{\rho \rightarrow 0} a(\rho) = k_0\left(\frac{\rho}{v} |\omega_1|\right) \quad (\text{IV-72e})$$

Si  $\omega_1$  et  $\omega_2$  tendent en même temps vers zéro  $a(\rho)$  diverge cependant  $a(\rho_{\min}) - a(\rho_{\max})$  a une limite fini.

$$\omega_{1,\omega_2} \lim_0 [a(\rho_{\min}) - a(\rho_{\max})] = \ln\left(\frac{\rho_{\min}}{\rho_{\max}}\right) \quad (\text{IV-73})$$

La connaissance donc des valeurs de  $a(z_{\max})$  ou  $a(\rho_{\max})$ ,  $b(\rho_{\max})$ ,  $b(\rho_{\min})$  nous permet de calculer définitivement l'intégrale de ces fonctions. Ces fonctions intégrées sont souvent appelées fonction largeur pour  $a(z, z')$  et fonction déplacement pour  $b(z, z')$ . Quelques cas particuliers importants sont celui des valeurs petites de  $z$ . En effet, pour celles-ci, les calculs montrent que :

$$a(z, rz) \simeq \ln(z^{-1}) + \ln(r^{-\frac{r}{r+1}}) \rightarrow \ln(z^{-1}) \quad (\text{IV-74a})$$

[GRIEM 1974]

$$b(z, rz) \simeq \frac{\pi r}{1+r} + \frac{(rz)^2}{4(1+r)} \ln(r) \rightarrow \frac{\pi r}{1+r} \quad (\text{IV-74b})$$

[GRIEM 1974]

Si on néglige les derniers termes des deux expressions, on retrouve pratiquement les mêmes relations données par Griem 1974]. Ainsi pour les petites valeurs de  $z$  et  $z'$ ,  $A$  et  $B$  approche les valeurs des fonctions relatives à l'atome d'hydrogène, c'est-à-dire :  $A = 1$  et  $B = 0$ .

Dans ce cas, la raie émise n'est pas déplacée  $b(z, z')$  et la fonction élargissement est égale à :

$$a(z, z') = \ln\left(\frac{\rho_{\max}}{\rho_{\min}}\right)$$

\*\* En general, si pour les raies hydrogémoïdes l'approximation est bonne à 10 % ou mieux (GRIEM 1974).

\*\*  $a(z, z')$  est bien représenté à 5 % pour les petites valeurs de  $z$  et  $z'$

$|z| < 0.2$ ,  $|z'| < 0.2$  par :

$a(z, z') = \ln(z_1^{-1})$  avec  $z_1$  la plus grande valeur entre  $z$  et  $z'$ . Dans ces conditions,  $b(z, z')$  est inférieur à  $\pi/2$  mais en général  $b(z, pz)$  tend vers  $\pi p/(1+p)$

## IV-4 Conclusion

Cette étude a permis d'obtenir les expressions de toutes les fonctions caractéristiques qui interviennent dans le calcul de la largeur et du déplacement de la raie émise. Pour savoir les intervalles dans lesquels des prévisions peuvent être faites, des tableaux de valeurs numériques des fonctions caractéristiques  $A, B, a, b$ , calculés sont donnés mais aussi ceux de SHAMEY (1969) et de GRIEM (1974) ainsi une étude comparative peut être faite. De même, un réseau de courbes de  $A(z, rz)$  et  $B(z, rz), a, b$  est donné en particulier ces mêmes fonctions sont tracées pour chaque type de raie de l'hélium neutre  $HeI$  considéré comme atome émetteur.



**Table 1 : Valeurs numériques de la fonction caractéristique A(z, rz) dans le cas d'une trajectoire classique rectiligne pour les raies de HeI**

$r \backslash z$	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0
0.2	0.999	0.9589	0.8919	0.8086	0.7224
0.4	1.0197	0.9859	0.9119	0.8144	0.7128
0.6	1.0307	0.9900	0.8993	0.7832	0.6668
0.8	1.0353	0.9802	0.8689	0.73445	0.6035
1.0	1.0348	0.9601	0.8280	0.6756	0.5399
1.2	1.0311	0.9357	0.7821	0.6183	0.4746
1.4	1.0242	0.9060	0.7327	0.5593	0.4143
1.6	1.0148	0.8733	0.6832	0.5026	0.3546
1.8	1.0035	0.8387	0.6338	0.4494	0.3085
2.0	0.9898	0.8009	0.5853	0.3959	0.2646
2.5	0.9528	0.7128	0.4746	0.2950	0.1769
3	0.9096	0.6248	0.3796	0.2131	0.1164
3.5	0.8640	0.5440	0.3001	0.1540	0.0758
4	0.8151	0.4657	0.2347	0.1012	0.0494
5	0.7224	0.3457	0.1427	0.0549	0.0199
6	0.6316	0.2495	0.0852	0.0248	0.0080
7	0.5486	0.1798	0.0501	0.0137	0.0032
8	0.4698	0.1196	0.0274	-0.0097	0.0023
9	0.4059	0.0903	0.017	0.0031	$4.9415 \cdot 10^{-4}$
10	0.3471	0.0640	0.0098	-0.0819	$1.8869 \cdot 10^{-4}$
11	0.2954	0.0442	$8.8545 \cdot 10^{-4}$	$2.4972 \cdot 10^{-4}$	$7.587 \cdot 10^{-5}$
12	0.2502	0.0292	0.0034	-0.0034	$3.2927 \cdot 10^{-4}$
13	0.2124	0.02141	0.0018	$1.449 \cdot 10^{-4}$	0.00253
14	0.1799	0.0158	0.0010	0.0017	$2.669 \cdot 10^{-5}$
15	0.1515	0.0104	$5.9164 \cdot 10^{-4}$	$3.75 \cdot 10^{-5}$	$1.2047 \cdot 10^{-5}$

**Table 2 : Valeurs numériques de la fonction caractéristique B(z, rz) dans le cas d'une trajectoire classique rectiligne pour les HeI**

z \	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0
0.2	0.0416	0.0785	0.1107	0.1385	0.1617
0.4	0.1029	0.1891	0.2596	0.3150	0.3558
0.6	0.1585	0.2850	0.3823	0.4523	0.4966
0.8	0.1986	0.3491	0.4574	0.5275	0.5618
1.0	0.2294	0.3966	0.5115	0.5806	0.6074
1.2	0.2442	0.3491	0.5253	0.5855	0.5987
1.4	0.2506	0.4145	0.5247	0.5785	0.5834
1.6	0.2377	0.4191	0.4690	0.4947	0.4633
1.8	0.2388	0.3867	0.4762	0.5157	0.5069
2.0	0.2269	0.3652	0.4463	0.4835	0.4753
2.5	0.1855	0.2920	0.3550	0.3863	0.3760
3.0	0.1433	0.2230	0.2752	0.33087	0.3055
3.5	0.1062	0.1653	0.2107	0.2483	0.2536
4.0	0.0802	0.1313	0.1897	0.2747	0.3931
5.0	0.0375	0.0622	0.0954	0.1409	0.1662
6.0	0.0175	0.0319	0.0583	0.1033	0.1373
7.0	0.0079	0.0164	0.0362	0.0767	0.1118
8.0	0.0261	0.1577	0.9117	5.1027	27.9088
9.0	0.0015	0.0041	0.0119	0.0253	-0.0548
10	$5.461 \cdot 10^{-4}$	$8.7934 \cdot 10^{-4}$	-0.0041	-0.0819	-0.9024
11	$-9.7781 \cdot 10^{-4}$	-0.004	-0.0531	-0.5941	-6.2370
12	$-7.3337 \cdot 10^{-4}$	-0.0133	-0.867	-2.4193	-30.1256
13	1.8113	33.2877	543.8479	$8.418910^{-3}$	$1.2642 \cdot 10^{-5}$
14	$1.4487 \cdot 10^{-5}$	-0.0023	-0.0606	-1.2858	-25.0795
15	$2.0629 \cdot 10^{-4}$	0.0043	0.0945	2.0697	44.8754

**Table 3 : Valeurs numériques de la fonction caractéristique  $B(z, rz)$  dans le cas d'une trajectoire classique rectiligne pour les HeI (obtenues par Shamey L.J. dans « Stark broadening of important HeI lines and their forbidden components 1969»)**

$z$	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0
0.2	0.042	0.078	0.109	0.137	0.161
0.4	0.102	0.188	0.259	0.316	0.359
0.6	0.157	0.284	0.382	0.452	0.496
0.8	0.198	0.349	0.458	0.538	0.581
1.0	0.226	0.393	0.507	0.576	0.606
1.2	0.237	0.412	0.523	0.585	0.592
1.4	0.241	0.414	0.518	0.57	0.589
1.6	0.245	0.404	0.51	0.563	0.564
1.8	0.236	0.385	0.48	0.536	0.518
2.0	0.222	0.36	0.455	0.492	0.467
2.5	0.181	0.287	0.347	0.382	0.375
3.0	0.14	0.217	0.27	0.304	0.303
3.5	0.104	0.162	0.206	0.24	0.253
4.0	0.074	0.117	0.158	0.208	0.215
5.0	0.035	0.059	0.093	0.139	0.165
6.0	0.015	0.03	0.054	0.1	0.134
7.0	0.005	0.015	0.036	0.08	0.115

**Table 4 : Valeurs numériques de la fonction « largeur », caractéristique a(z, rz) dans le cas d'une trajectoire classique rectiligne pour les HeI**

	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0
0.1	2.6295	2.6802	2.6677	2.5914	2.4942	2.3915
0.2	1.9385	1.9845	1.9595	1.8769	1.7765	2.3915
0.4	1.2699	1.3002	1.2582	1.1694	1.0697	1.6709
0.6	0.9099	0.9270	0.8744	0.7865	0.6942	0.9688
0.8	0.6693	0.6775	0.6217	0.5406	0.4601	0.3856
1.0	0.5103	0.5109	0.4537	0.3811	0.3110	0.2336
1.2	0.3898	0.3864	0.3329	0.2693	0.2126	0.1657
1.4	0.3019	0.2956	0.2463	0.1919	0.1459	0.1096
1.6	0.2292	0.2222	0.1793	0.1348	0.0987	0.0701
1.8	0.1830	0.1746	0.1358	0.0982	0.0691	0.048
2.0	0.1436	0.1348	0.1009	0.0706	0.0471	0.0319
2.5	0.079	0.0715	0.049	0.031	0.0191	0.0115
3.0	0.044	0.0382	0.0239	0.0137	0.0076	0.0042
3.5	0.0247	0.0206	0.0117	0.0061	0.0031	0.0015
4.0	0.0141	0.0112	0.0058	0.0027	0.0011	0.00057
5.0	0.0045	0.0033	0.014	0.00054137	0.000205	0.0000746
6.0	0.0015	0.00096762	0.00033844	0.000108	0.00003027	0.00001
7.0	0.00047	0.0002883	0.00008350	0.0000217	0.0000059	0.0000135
8.0	$3.504 \cdot 10^{-4}$	$1.8452 \cdot 10^{-4}$	$4.0948 \cdot 10^{-5}$	$8.6840 \cdot 10^{-6}$	$-9.105110^{-7}$	$5.4816 \cdot 10^{-7}$
9.0	$50116 \cdot 10^{-4}$	$2.5675 \cdot 10^{-6}$	$5.014 \cdot 10^{-6}$	$8.7773 \cdot 10^{-5}$	$1.6156 \cdot 10^{-7}$	$2.4574 \cdot 10^{-8}$
10	$1.6824 \cdot 10^{-5}$	$7.6897 \cdot 10^{-6}$	$1.2467 \cdot 10^{-6}$	$1.7683 \cdot 10^{-3}$	$5.1002 \cdot 10^{-8}$	$3.3251 \cdot 10^{-9}$
11	$5.5103 \cdot 10^{-6}$	$2.3073 \cdot 10^{-6}$	$3.0254 \cdot 10^{-5}$	$-8.7696 \cdot 10^{-9}$	$1.6986 \cdot 10^{-10}$	$4.474 \cdot 10^{-10}$
12	$1.6982 \cdot 10^{-6}$	$6.6869 \cdot 10^{-7}$	$6.3242 \cdot 10^{-8}$	$8.4778 \cdot 10^{-9}$	$-1.7856 \cdot 10^{-8}$	$2.535 \cdot 10^{-11}$
13	0.0021	$6.6055 \cdot 10^{-4}$	$5.6146 \cdot 10^{-5}$	$4.3754 \cdot 10^{-6}$	$3.5292 \cdot 10^{-7}$	$-4.963 \cdot 10^{-6}$
14	$1.2958 \cdot 10^{-6}$	$4.0326 \cdot 10^{-7}$	$3.1756 \cdot 10^{-8}$	$1.8885 \cdot 10^{-9}$	$4.1737 \cdot 10^{-9}$	$4.6295 \cdot 10^{-11}$
15	$5.4237 \cdot 10^{-7}$	$1.5075 \cdot 10^{-7}$	$8.8977 \cdot 10^{-9}$	$4.756 \cdot 10^{-10}$	$2.7103 \cdot 10^{-11}$	$9.482 \cdot 10^{-12}$

**Table5 : Valeurs numériques de la fonction « déplacement », caractéristique b(z, rz) dans le cas d'une trajectoire classique rectiligne pour les Hel**

	0.1	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0
0.1	0.2811	0.5147	0.8805	1.1533	1.3645	1.5326
0.2	0.2718	0.4967	0.8462	1.1046	1.3030	1.4602
0.4	0.2471	0.4489	0.7574	0.9811	1.1511	1.2858
0.6	0.2195	0.3961	0.6613	0.8506	0.9946	0.1114
0.8	0.1921	0.3445	0.5697	0.7295	0.8534	0.9591
1.0	0.1663	0.2961	0.4849	0.6186	0.7257	0.8229
1.2	0.1429	0.2529	0.4109	0.5242	0.6197	0.7130
1.4	0.1221	0.2145	0.3461	0.4423	0.5285	0.6205
1.6	0.1040	0.1821	0.2939	0.3799	0.4640	0.5620
1.8	0.0879	0.1526	0.244	0.3160	0.3909	0.4838
2.0	0.0741	0.1280	0.2042	0.2670	0.3376	0.4310
2.5	0.048	0.0818	0.1309	0.1781	0.2418	0.3384
3.0	0.0307	0.0518	0.0839	0.1206	0.1785	0.2764
3.5	0.0194	0.0325	0.0540	0.0833	0.1357	0.2334
4.0	0.0122	0.0201	0.0337	0.0551	0.0973	0.1830
5.0	0.0048	0.0079	0.0150	0.0303	0.0676	0.1598
6.0	0.0018	0.0031	0.0067	0.0165	0.0455	0.1323
7.0	0.00070	0.0012	0.0031	0.0094	0.0318	0.1134
8.0	-6.355.10 <sup>-5</sup>	-0.001	-0.0096	-0.0566	-0.3002	-1.5317
9.0	1.0342. 10 <sup>-4</sup>	1.9126. 10 <sup>-4</sup>	7.1836. 10 <sup>-4</sup>	0.0034	0.0177	0.0957
10	4.1815. 10 <sup>-5</sup>	8.625. 10 <sup>-5</sup>	4.4288. 10 <sup>-4</sup>	0.0028	0.0187	0.1282
11	2.2152. 10 <sup>-5</sup>	6.1031. 10 <sup>-5</sup>	5.1435. 10 <sup>-4</sup>	0.0046	0.0406	0.3599
12	1.8826. 10 <sup>-5</sup>	7.3164. 10 <sup>-5</sup>	9.2071. 10 <sup>-4</sup>	0.0107	0.1202	1.3269
13	-0.0145	-0.0908	-1.6481	-24.4642	-342.601	-4.6775.10 <sup>3</sup>
14	6.7735. 10 <sup>-6</sup>	2.2095. 10 <sup>-5</sup>	3.1866. 10 <sup>-4</sup>	0.0050	0.0799	1.2747
15	-1.3618. 10 <sup>-6</sup>	1.821. 10 <sup>-7</sup>	-7.7298. 10 <sup>-5</sup>	-0.0022	-0.0022	-1.0618

TABLE I

CLASSICAL "DIPOLAR" FUNCTIONS  $A(z)$  AND  $B(z)$  FOR VALUES OF IMAGINARY PARTS OF THE STRONG CLASSICAL PATH  $S(z)$  AND CORRESPONDING FUNCTIONS  $A_0(z)$  AND  $B_0(z)$  FOR THE WIDTHS AND SHIFTS OF ISOLATED NEUTRAL ATOM LINES\*

$\eta$	$A(z)$	$a(z)$	$B(z)$	$b(z)$	$A_0(z)$	$a_0(z)$	$B_0(z)$	$b_0(z)$
0	1.000	$\pi$	0	1.571	1.000	$\pi$	0	0.7854
0.1	1.000	0.92	$0.003 + 0.001i$	1.571	1.000	$0.000$	$0.000 + 0.000i$	0.7854
0.2	0.999	0.79	$0.012 + 0.001i$	1.571	1.000	$0.000$	$0.000 + 0.000i$	0.7854
0.3	0.997	0.75	0.028	1.571	1.000	$0.000$	$0.000 + 0.000i$	0.7854
0.4	0.993	0.70	0.050	1.571	1.000	$0.000$	$0.000 + 0.000i$	0.7854
0.5	0.987	0.64	0.078	1.571	1.000	$0.000$	$0.000 + 0.000i$	0.7854
0.6	0.979	0.57	0.112	1.571	1.000	$0.000$	$0.000 + 0.000i$	0.7854
0.7	0.969	0.49	0.152	1.571	1.000	$0.000$	$0.000 + 0.000i$	0.7854
0.8	0.957	0.40	0.198	1.571	1.000	$0.000$	$0.000 + 0.000i$	0.7854
0.9	0.943	0.30	0.250	1.571	1.000	$0.000$	$0.000 + 0.000i$	0.7854
1.0	0.927	0.20	0.308	1.571	1.000	$0.000$	$0.000 + 0.000i$	0.7854
1.1	0.909	0.10	0.372	1.571	1.000	$0.000$	$0.000 + 0.000i$	0.7854
1.2	0.889	0.00	0.442	1.571	1.000	$0.000$	$0.000 + 0.000i$	0.7854
1.3	0.867	0.00	0.518	1.571	1.000	$0.000$	$0.000 + 0.000i$	0.7854
1.4	0.843	0.00	0.600	1.571	1.000	$0.000$	$0.000 + 0.000i$	0.7854
1.5	0.817	0.00	0.688	1.571	1.000	$0.000$	$0.000 + 0.000i$	0.7854
1.6	0.789	0.00	0.782	1.571	1.000	$0.000$	$0.000 + 0.000i$	0.7854
1.7	0.759	0.00	0.882	1.571	1.000	$0.000$	$0.000 + 0.000i$	0.7854
1.8	0.727	0.00	0.988	1.571	1.000	$0.000$	$0.000 + 0.000i$	0.7854
1.9	0.693	0.00	1.100	1.571	1.000	$0.000$	$0.000 + 0.000i$	0.7854
2.0	0.657	0.00	1.218	1.571	1.000	$0.000$	$0.000 + 0.000i$	0.7854
2.5	0.477	0.00	1.668	1.571	0.854	0.46	$0.000 + 0.000i$	0.640
3.0	0.374	0.00	1.89	1.571	0.720	$4.16 \times 10^{-2}$	$0.8600$	$0.000 + 0.000i$
3.5	0.290	0.00	0.577	1.571	0.577	—	0.5770	$0.000 + 0.000i$
4.0	0.220	0.00	0.367	1.571	0.367	$0.000 + 0.000i$	0.3670	$0.000 + 0.000i$
4.5	0.160	0.00	0.235	1.571	0.235	—	0.2350	$0.000 + 0.000i$
5.0	$4.4 \times 10^{-2}$	$0.00$	$0.155$	$0.155$	0.155	$0.000 + 0.000i$	0.1550	$0.000 + 0.000i$
6.0	$7.3 \times 10^{-3}$	$0.00$	0.103	0.103	0.103	$0.000 + 0.000i$	0.1030	$0.000 + 0.000i$
7.0	—	—	0.1058	0.1042	—	—	0.3313	$0.000 + 0.000i$
8.0	—	—	0.1181	0.1181	—	—	0.2730	$0.000 + 0.000i$
9.0	—	—	0.1061	$0.878 \times 10^{-2}$	—	—	0.2344	$0.000 + 0.000i$
10.0	—	—	$8.859 \times 10^{-3}$	$8.703 \times 10^{-3}$	—	—	0.2077	$8.289 \times 10^{-3}$
10.0	—	—	$7.947 \times 10^{-3}$	$7.854 \times 10^{-3}$	—	—	0.1828	$6.012 \times 10^{-3}$

\* From Griem *et al.* [51a], Cooper and Oertel [72], and Elarsfeld [76a]. In the last four columns are the equivalent "quadrupole" functions [from Cooper and Oertel [72] and Elarsfeld [76a]] but multiplied by a factor  $\frac{1}{2}$  to achieve  $A_0(0) = 1$ . For all functions, values at larger  $z$  than tabulated here can be estimated from asymptotic formulas, i.e., Eqs. (145), (146), (150a), and (150b) or their integrals over  $dz/z$  for the dipole functions and over  $dz/z^2$  for the quadrupole functions.

JOURNAL OF QUANTUM SPECTROSCOPY AND RADIATION TRANSFER

TABLE III

CHARACTERISTIC "DIPOLE" FUNCTIONS A(δ, ε) AND B(δ, ε) FOR REAL AND IMAGINARY PARTS OF THE HYPERBOLIC CLASSICAL PATH S MATRIX AND CHARACTERISTIC FUNCTIONS a(δ, ε) AND b(δ, ε) FOR THE WIDTHS AND SHIFTS OF ISOLATED ION LINES\*

(a) A(ε, δ)													
CSI	.2	.4	.6	.8	1.0	1.2	1.4	1.6	1.8	2.0	3.0	4.0	5.0
DELTA													
.00	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
.10	.8544	.6849	.5864	.5215	.4750	.4396	.4116	.3867	.3696	.3533	.2974	.2636	.2403
.20	1.1619	1.0775	.9971	.9243	.8718	.8249	.7851	.7510	.7214	.6954	.6003	.5389	.4950
.30	1.2582	1.2772	1.2448	1.2050	1.1623	1.1220	1.0848	1.0509	1.0199	.9916	.8804	.8025	.7442
.40	1.2540	1.3440	1.3717	1.3667	1.3491	1.3261	1.3011	1.2766	1.2505	1.2262	1.1206	1.0386	.9737
.50	1.1978	1.3388	1.4067	1.4373	1.4476	1.4442	1.4381	1.4266	1.4113	1.3955	1.3128	1.2382	1.1745
.60	1.1149	1.2812	1.3854	1.4404	1.4761	1.4964	1.5064	1.5094	1.5078	1.5028	1.4548	1.3967	1.3412
.70	1.0105	1.1956	1.3146	1.3967	1.4528	1.4921	1.5190	1.5371	1.5487	1.5554	1.5464	1.5135	1.4717
.80	.9204	1.0959	1.2249	1.3209	1.3929	1.4474	1.4889	1.5204	1.5444	1.5624	1.5592	1.5203	1.4762
.90	.8228	.9912	1.1226	1.2266	1.3089	1.3747	1.4276	1.4703	1.5046	1.5329	1.5609	1.5306	1.4826
1.00	.7207	.8870	1.0163	1.1228	1.2108	1.2839	1.3450	1.3963	1.4394	1.4758	1.5090	1.5387	1.5659
1.20	.5614	.6938	.8092	.9106	.9996	1.0778	1.1467	1.2075	1.2612	1.3088	1.4744	1.5779	1.6358
1.40	.4249	.5303	.6265	.7153	.7967	.8712	.9391	1.0013	1.0581	1.1101	1.3121	1.4481	1.5373
1.60	.3100	.3985	.4755	.5492	.6190	.6850	.7469	.8051	.8596	.9108	1.1219	1.2759	1.3901
1.80	.2367	.2957	.3556	.4145	.4719	.5274	.5810	.6323	.6814	.7283	.9323	1.0924	1.2190
2.00	.1757	.2172	.2627	.3097	.3544	.3996	.4440	.4874	.5297	.5707	.7570	.9127	1.0422
2.20	.1265	.1583	.1923	.2274	.2630	.2989	.3347	.3702	.4054	.4400	.6032	.7472	.8726
2.40	.0907	.1145	.1396	.1661	.1934	.2212	.2493	.2777	.3062	.3343	.4730	.6013	.7175
2.60	.0662	.0824	.1009	.1204	.1410	.1622	.1840	.2063	.2286	.2516	.3666	.4769	.5810
2.80	.0486	.0570	.0675	.0786	.0912	.1051	.1194	.1341	.1491	.1643	.2499	.3374	.4141
3.00	.0333	.0420	.0517	.0623	.0735	.0855	.0980	.1110	.1245	.1383	.2120	.2891	.3564
3.20	.0216	.0293	.0369	.0444	.0527	.0615	.0709	.0806	.0909	.1015	.1591	.2217	.2803
3.40	.0166	.0212	.0261	.0316	.0376	.0441	.0510	.0583	.0659	.0739	.1106	.1495	.2016
3.60	.0118	.0149	.0185	.0224	.0266	.0314	.0365	.0418	.0476	.0536	.0877	.1272	.1701
3.80	.0083	.0105	.0131	.0158	.0189	.0223	.0260	.0299	.0342	.0387	.0575	.0852	.1295
4.00	.0068	.0093	.0119	.0148	.0180	.0215	.0254	.0294	.0338	.0387	.0542	.0790	.1190
4.20	.0041	.0052	.0064	.0077	.0094	.0111	.0131	.0152	.0175	.0199	.0344	.0525	.0737
4.40	.0039	.0036	.0045	.0055	.0067	.0078	.0092	.0108	.0124	.0142	.0249	.0387	.0551
4.60	.0020	.0025	.0032	.0038	.0046	.0056	.0065	.0076	.0087	.0101	.0160	.0284	.0410
4.80	.0014	.0018	.0022	.0028	.0032	.0038	.0046	.0053	.0062	.0071	.0133	.0207	.0303
5.00	.0010	.0012	.0016	.0019	.0022	.0027	.0032	.0038	.0044	.0051	.0093	.0150	.0223

(b) B(δ, ε)													
CSI	.2	.4	.6	.8	1.0	1.2	1.4	1.6	1.8	2.0	3.0	4.0	5.0
DELTA													
.10	-.3071	-.3699	-.3826	-.3419	-.3768	-.3701	-.3632	-.3563	-.3497	-.3434	-.3170	-.2971	-.2915
.20	-.1843	-.3385	-.4130	-.4529	-.4754	-.4884	-.4958	-.4996	-.5012	-.5012	-.4012	-.4765	-.4619
.30	.0024	-.1761	-.2887	-.3631	-.4143	-.4509	-.4777	-.4977	-.5128	-.5244	-.5523	-.5580	-.5556
.40	.1782	.0148	-.1083	-.2006	-.2709	-.3257	-.3691	-.4040	-.4326	-.4562	-.5283	-.5616	-.5770
.50	.3256	.1940	.0792	-.0158	-.0942	-.1590	-.2132	-.2589	-.2979	-.3313	-.4442	-.5044	-.5437
.60	.4420	.3468	.2506	.1633	.0863	.0191	-.0396	-.0911	-.1363	-.1763	-.3209	-.4001	-.4671
.70	.5301	.4694	.3962	.3229	.2538	.1903	.1324	.0700	.0324	-.0107	-.1755	-.2844	-.3604
.80	.5936	.5632	.5136	.4572	.3998	.3441	.2912	.2416	.1953	.1522	-.0214	-.1442	-.2344
.90	.6364	.6313	.6035	.5647	.5209	.4755	.4303	.3862	.3439	.3036	.1317	.0018	-.0990
1.00	.6626	.6777	.6690	.6469	.6170	.5830	.5470	.5104	.4739	.4382	.2766	.1461	-.0413
1.20	.6774	.7197	.7403	.7459	.7414	.7290	.7135	.6937	.6717	.6484	.5254	.4096	.3076
1.40	.6595	.7156	.7540	.7790	.7937	.8008	.8017	.7981	.7908	.7809	.7079	.6211	.5352
1.60	.6235	.6846	.7322	.7687	.7963	.8167	.8310	.8403	.8457	.8477	.8246	.7720	.7110
1.80	.5791	.6398	.6906	.7329	.7678	.7964	.8198	.8385	.8533	.8647	.8850	.8683	.8333
2.00	.5323	.5897	.6398	.6836	.7218	.7549	.7835	.8082	.8293	.8473	.9016	.9158	.9071
2.20	.4865	.5390	.5866	.6294	.6679	.7025	.7336	.7613	.7862	.8083	.8865	.9267	.9401
2.40	.4438	.4911	.5347	.5751	.6122	.6464	.6778	.7066	.7331	.7574	.8506	.9083	.9455
2.60	.4049	.4469	.4865	.5235	.5582	.5900	.6213	.6497	.6764	.7012	.8022	.8724	.9198
2.80	.3701	.4072	.4426	.4762	.5081	.5384	.5670	.5942	.6200	.6443	.7476	.8250	.8823
3.00	.3395	.3722	.4036	.4337	.4626	.4902	.5168	.5422	.5665	.5898	.6913	.7710	.8351
3.20	.3124	.3412	.3691	.3959	.4218	.4470	.4712	.4946	.5172	.5389	.6363	.7167	.7828
3.40	.2888	.3142	.3388	.3627	.3860	.4086	.4305	.4519	.4725	.4926	.5842	.6624	.7280
3.60	.2681	.2905	.3123	.3336	.3544	.3747	.3944	.4138	.4326	.4510	.5361	.6107	.6758
3.80	.2499	.2697	.2891	.3082	.3268	.3449	.3628	.3802	.3972	.4139	.4923	.5625	.6251
4.00	.2339	.2516	.2688	.2858	.3025	.3189	.3349	.3506	.3661	.3812	.4529	.5182	.5776
4.20	.2197	.2356	.2511	.2663	.2813	.2959	.3104	.3246	.3385	.3523	.4177	.4781	.5338
4.40	.2072	.2215	.2354	.2491	.2626	.2758	.2888	.3017	.3144	.3268	.3865	.4421	.4938
4.60	.1961	.2090	.2215	.2339	.2461	.2581	.2699	.2815	.2929	.3043	.3587	.4097	.4577
4.80	.1861	.1977	.2092	.2204	.2315	.2424	.2531	.2636	.2741	.2844	.3340	.3800	.4252
5.00	.1770	.1877	.1981	.2084	.2185	.2284	.2381	.2478	.2573	.2668	.3121	.3551	.3960

\* The numerical values were kindly provided by Dr. S. Klarsfeld, calculated according to his work [99a] but with the usual variable of this and related work as summarized by Sahal-Brechot [68] replaced by δ = (ε - 1)ε. Beyond the range of the table, various expansions as given by Klarsfeld [99a] are useful. Of these, the uniform expansion has been extended [99b] by one more term to give

$$A + iB \approx [(\epsilon^2 - 1)/\epsilon^2] \pi^{1/2} \epsilon^{1/2} [2 \exp(-i\pi/3) \xi^{2/3} G_1(\xi) - \{[(1/8\epsilon) - 2/3] G_0(\xi) - 1/6 G_1(\xi) - 1/30 \xi^2 G_2(\xi)\}],$$

$$a + ib \approx \pi^{1/2} \epsilon^{1/2} [G_0(\xi) + \frac{1}{3} \exp(i\pi/3) \xi^{-2/3} (\xi_0^2 - (3/4)\epsilon) \xi G_0(\xi) + 1/30 \xi^2 G_1(\xi) + (\xi_0^2 + (3/4)\epsilon) G_2(\xi)]$$

$$\text{with } \xi = 2 \exp(2\pi i/3) (\epsilon - 1) \epsilon^{2/3} \quad \text{and} \quad G_n(\xi) = \int_0^\infty dt t^{n+1/2} \exp(\xi t - \frac{1}{2} t^2).$$

## Discussions et commentaires sur les tables

L'analyse comparative des valeurs numériques des fonctions  $A(z, rz)$  et  $B(z, rz)$  montre que celles-ci sont sensiblement les mêmes que les valeurs obtenues par SHAMEY [1969] avec une erreur relative variant entre 1 % et 2 % pour la fonction  $B(z, rz)$  ; ceci est vérifié si l'on parcourt les tableaux du début jusqu'au milieu.

Par contre, la différence entre les valeurs devient de plus en plus importante pour des valeurs de  $z$  assez élevées.

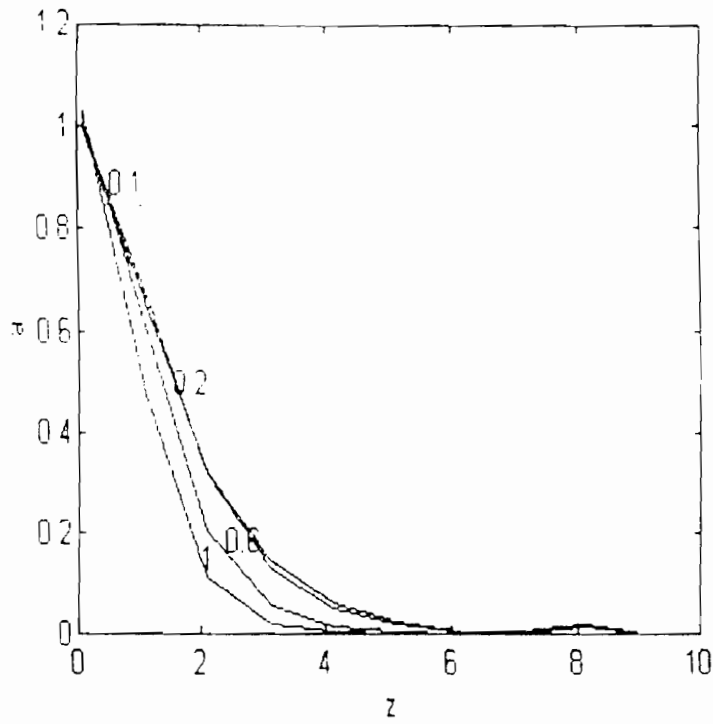
Pour ce qui est de la comparaison avec les résultats de GRIEM [1974], elle a été possible seulement pour la colonne correspondant à  $r = 1$  car nous constatons que le tableau de valeurs données par l'auteur est fait pour  $A(z)$  et  $B(z)$  qui représente un cas particulier par rapport à nos calculs, ainsi  $B(z, rz) = B(z)$ . On obtient des erreurs relatives qui varient entre 2 % et 3 %.

Par ailleurs pour la fonction  $A(z, rz) = A(z)$ , les erreurs sont beaucoup plus importantes, elles sont de l'ordre de 30 % et pour des valeurs de  $z$  assez élevées ces erreurs deviennent importantes.

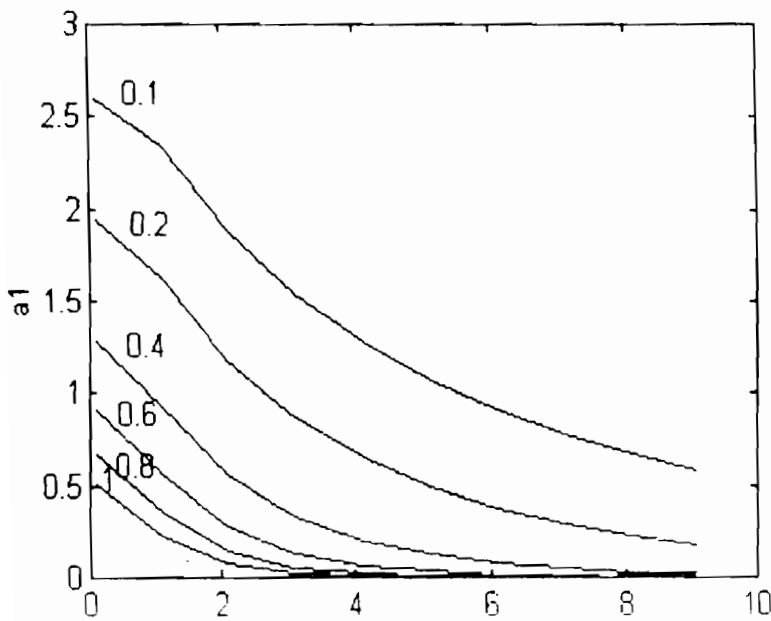
La comparaison avec les valeurs de Griem (1974) dans l'hypothèse de la trajectoire hyperbolique du perturbateur montre qu'il existe des écarts importants qui varient entre 30 % et 40 % et pour des grandes valeurs de  $z$  ces écarts sont plus importants.

Par contre, l'analyse de  $A(z, rz)$  nous donne des écarts non négligeables qui prouvent que l'exploitation analytique de cette fonction demeure problématique (pour notre cas :  $HeI$ ) surtout pour des valeurs assez grandes de  $z$  et donc présage de l'utilisation d'autres fonctions spéciales appropriées. L'aide des fonctions intégrales de  $A$  et  $B$  sont les plus importantes car ils rendent compte de la largeur de la raie à la fonction  $a(z, rz)$  et du déplacement avec la fonction  $b(z, rz)$ . La comparaison avec les valeurs de GRIEM (1974) dans le cas de l'hélium neutre  $HeI$  montre qu'il existe un accord entre les valeurs car l'écart n'est de 0.02 % environ pour  $a(z, rz)$  et  $b(z, rz)$ . On peut donc dire que les valeurs numériques calculées peuvent rendre compte de la largeur et du déplacement de la raie émise par un plasma si l'on réfère aux calculs de SHAMEY (1969) et de GRIEM (1974).

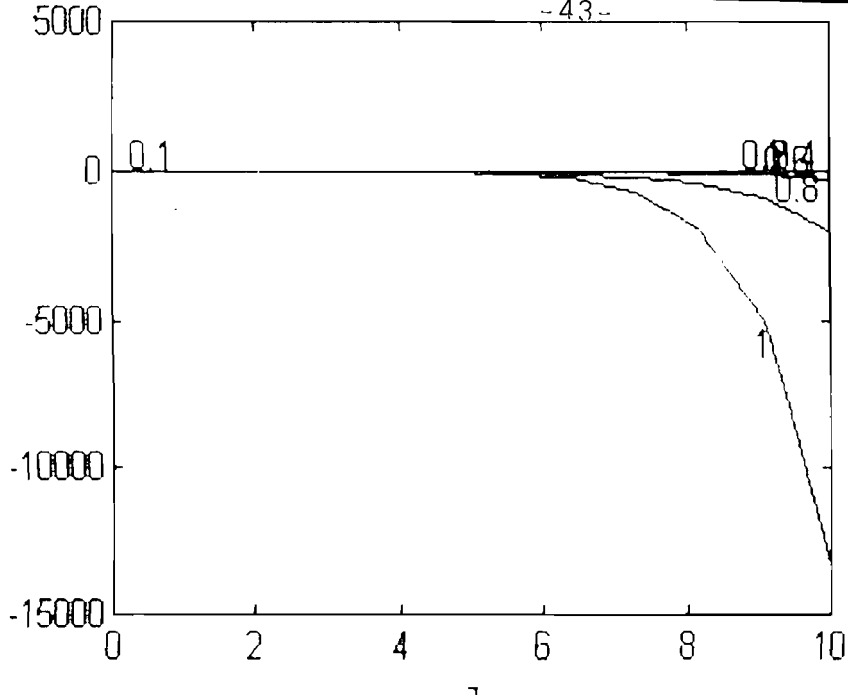




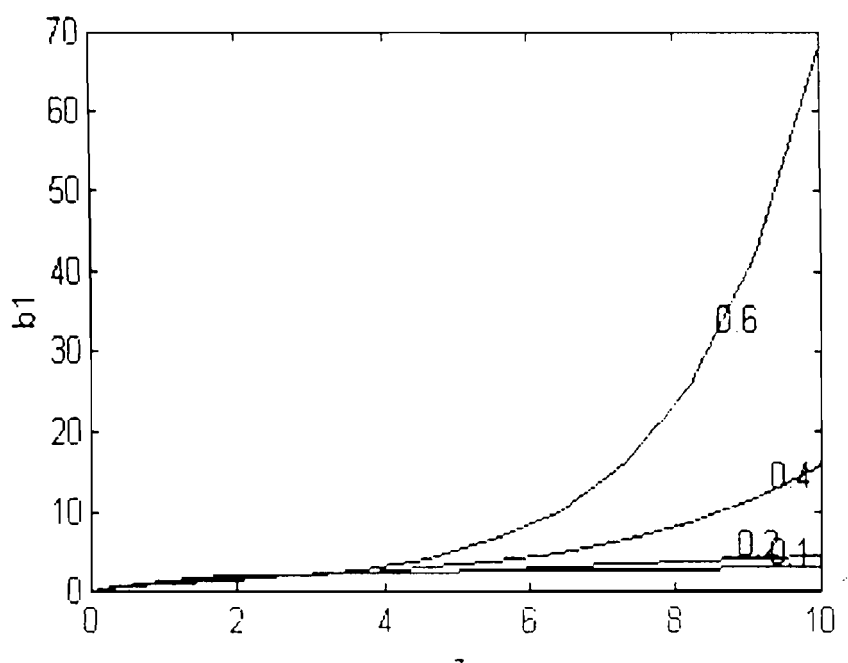
Réseau de courbes pour la fonction  $A(z, rz)$ ,  $r$  prend les valeurs suivantes : 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1. c'est le rapport d'énergie correspondant à deux niveaux d'une transition.  $z = [(E_I - E_{I'}) / hv] \rho$  où  $E_I$  et  $E_{I'}$  sont les énergies des sous-niveaux I et I' du niveau haut,  $v$  est la vitesse,  $h$  constante de Boltzman,  $\rho$  le paramètre d'impact.



Réseau de courbes pour la fonction  $a(z, rz)$ ,  $r$  prend les valeurs suivantes : 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1. c'est le rapport d'énergie correspondant à deux niveaux d'une transition.  $z = [(E_I - E_{I'}) / hv] \rho$  où  $E_I$  et  $E_{I'}$  sont les énergies des sous-niveaux I et I' du niveau haut ( $v$  est la vitesse,  $h$  constante de Boltzman,  $\rho$  le paramètre d'impact).

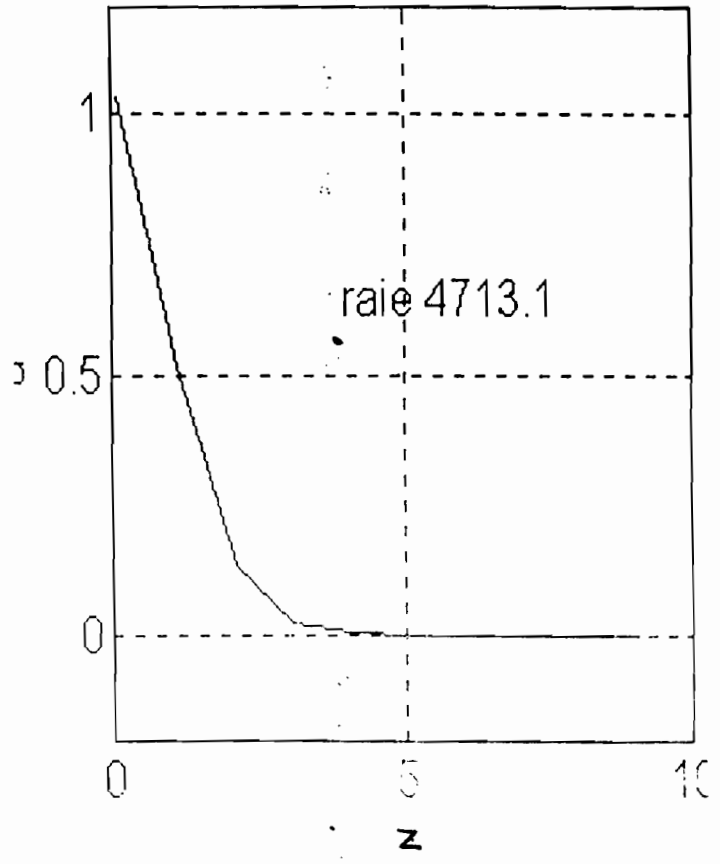
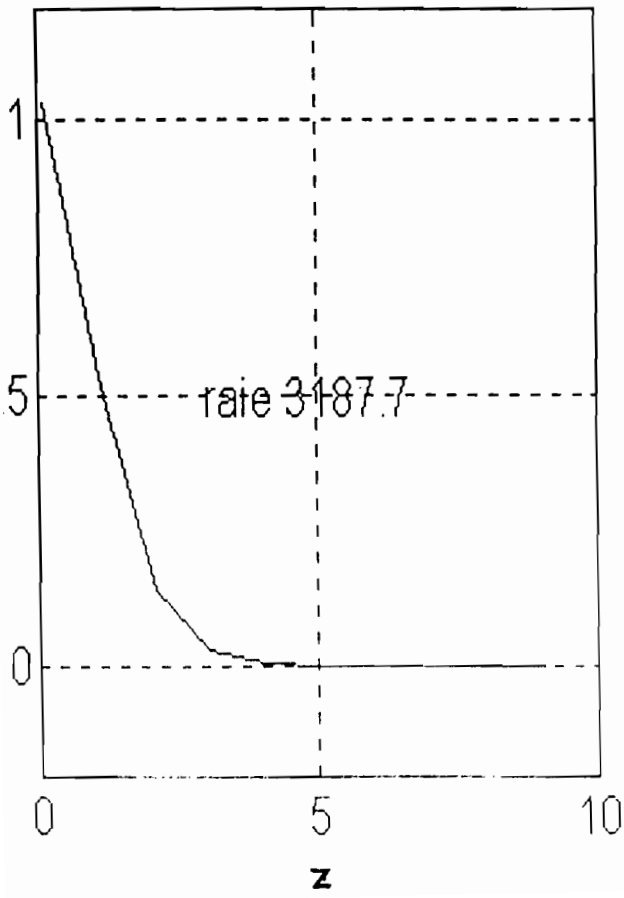
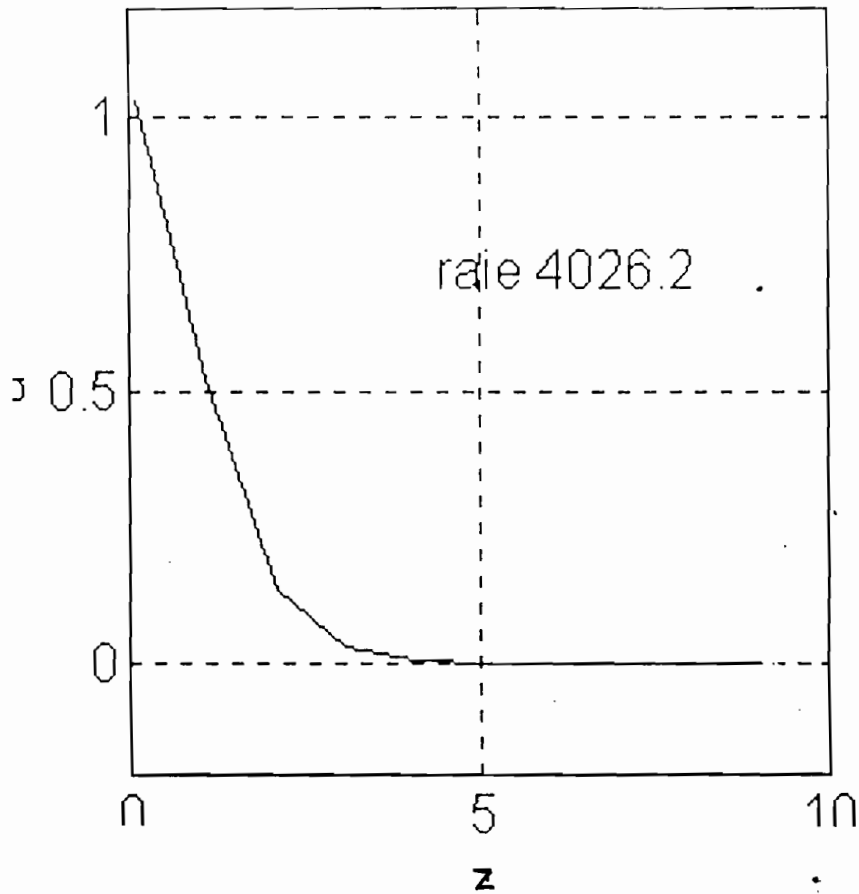


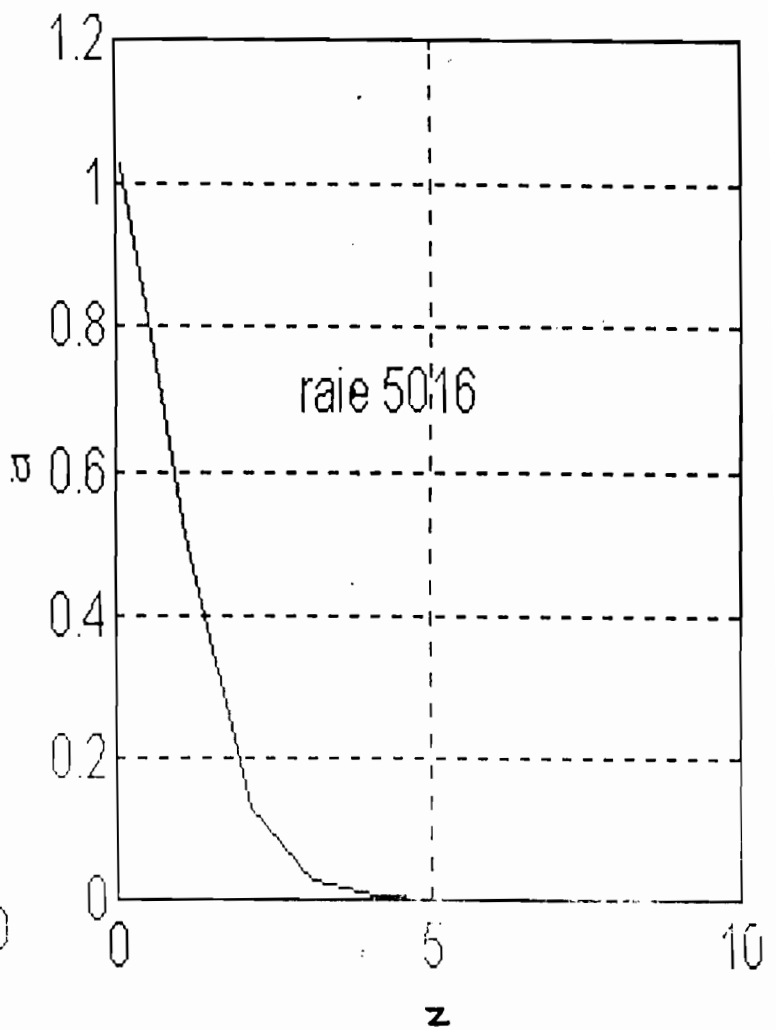
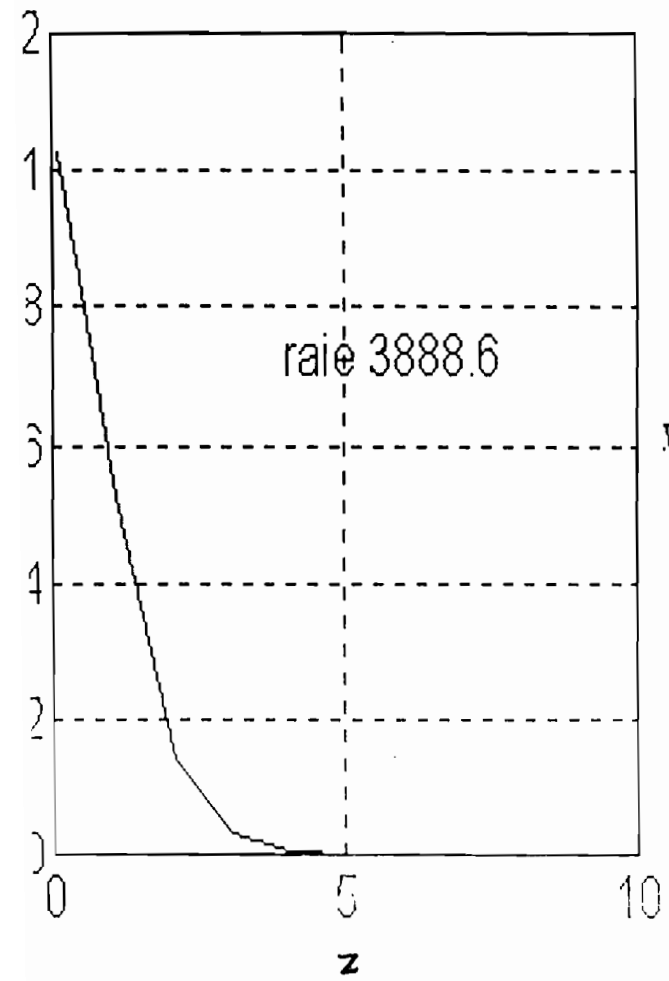
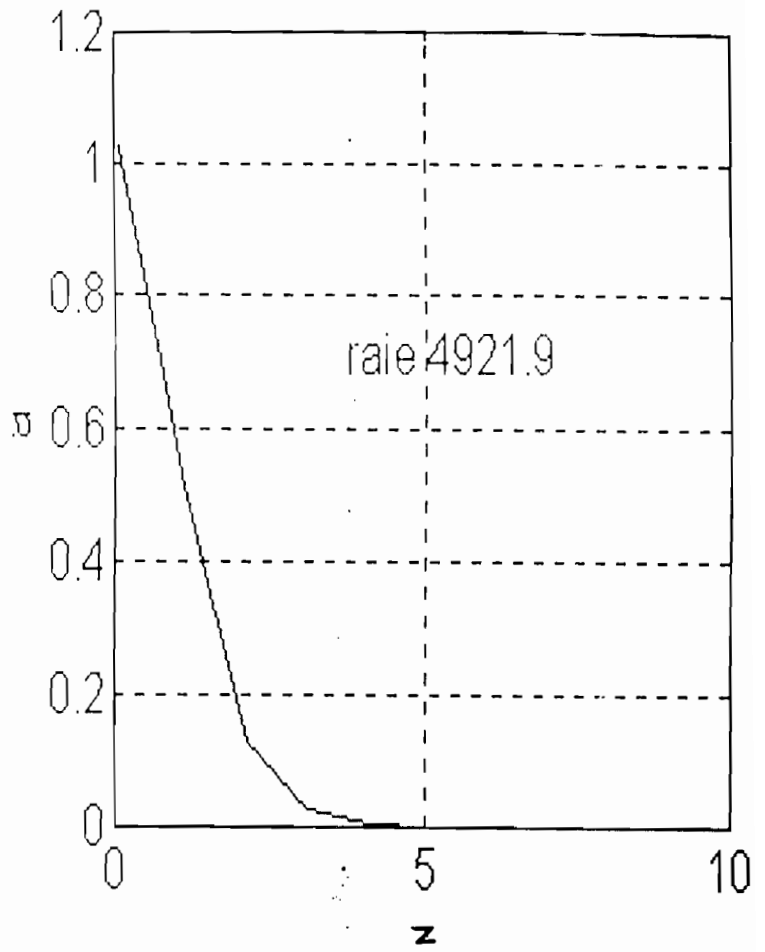
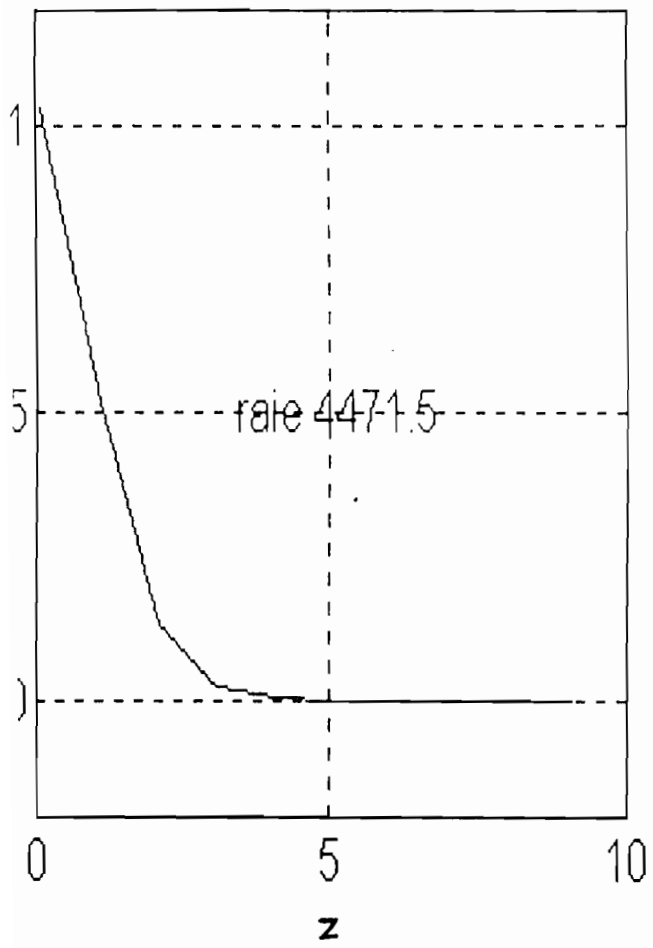
Réseau de courbes correspondant à la fonction  $B(z, rz)$ .  $r$  prend les valeurs suivantes : 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1, c'est le rapport d'énergie entre les niveaux de transition  $z = [(E1-E1')/hv] \rho$  où  $E1$  et  $E1'$  sont les énergies des sous-niveaux de l'état haut,  $v$  est la vitesse,  $h$  constante de Boltzman,  $\rho$  le paramètre d'impact.



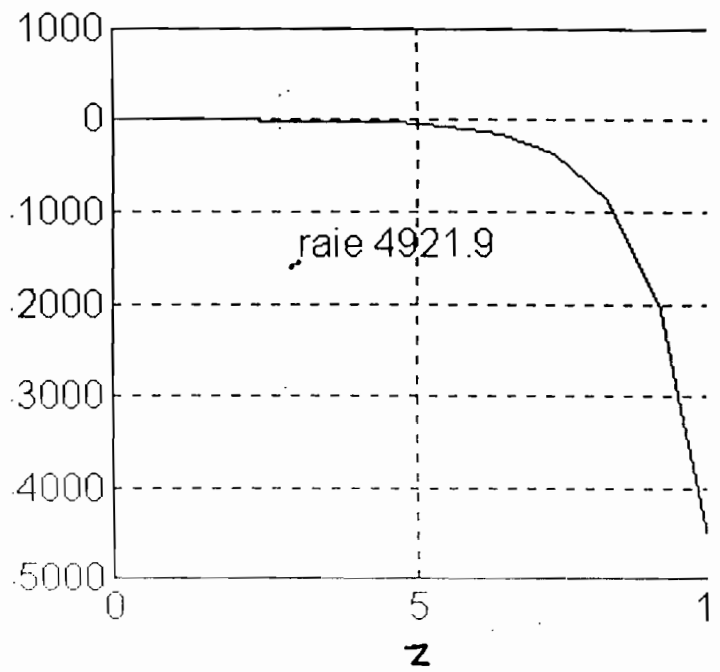
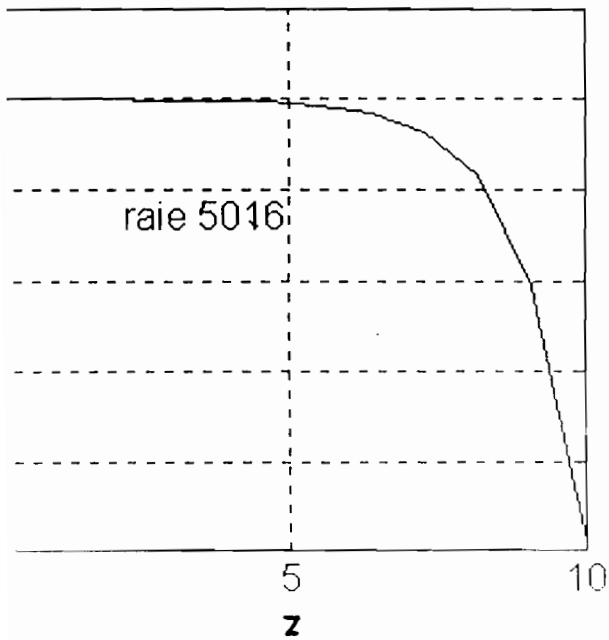
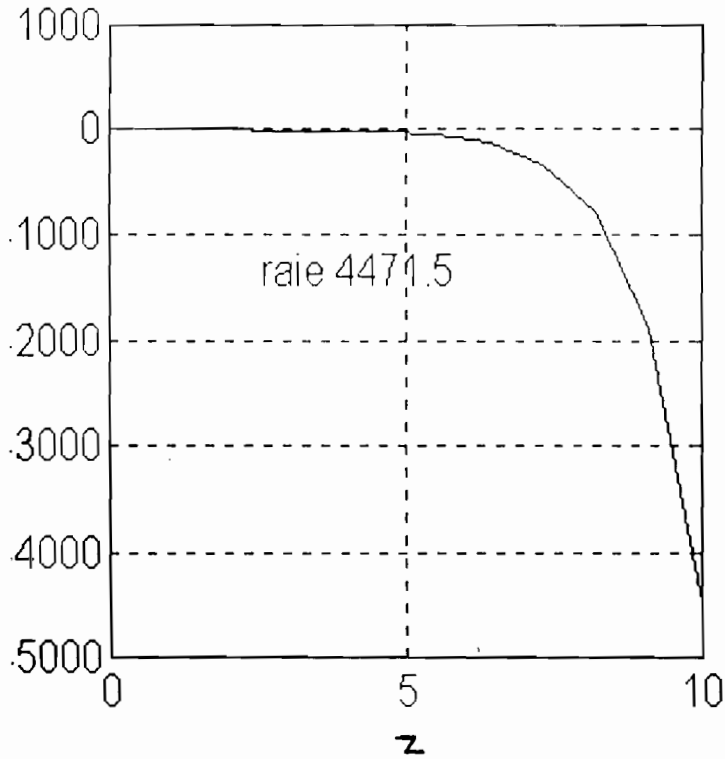
Réseau de courbes correspondant à la fonction  $b(z, rz)$ .  $r$  prend les valeurs suivantes : 0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1, c'est le rapport d'énergie entre les niveaux de transition  $z = [(E1-E1')/hv] \rho$  où  $E1$  et  $E1'$  sont les énergies des sous-niveaux de l'état haut,  $v$  est la vitesse,  $h$  constante de Boltzman,  $\rho$  le paramètre d'impact.

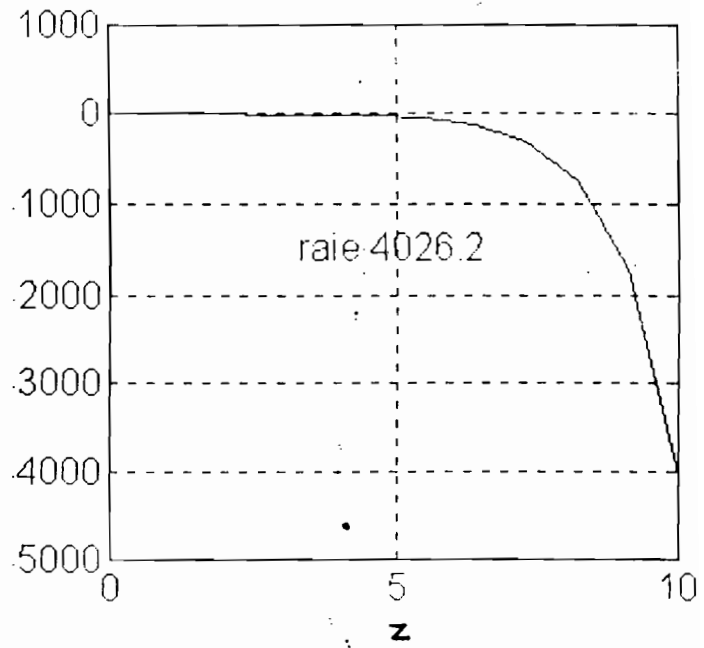
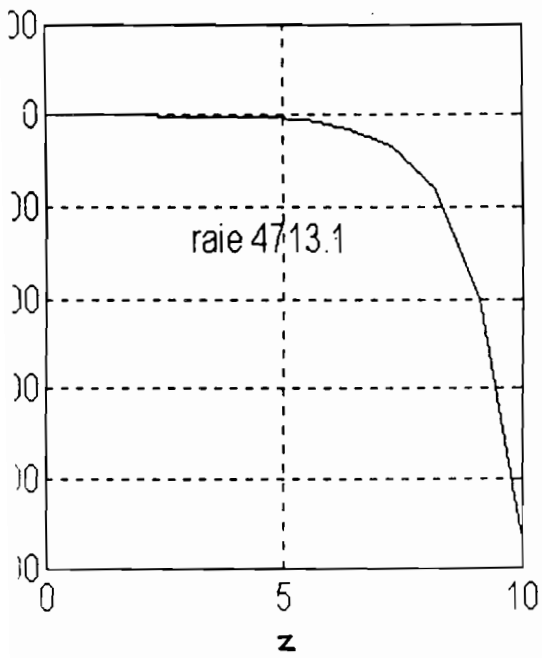
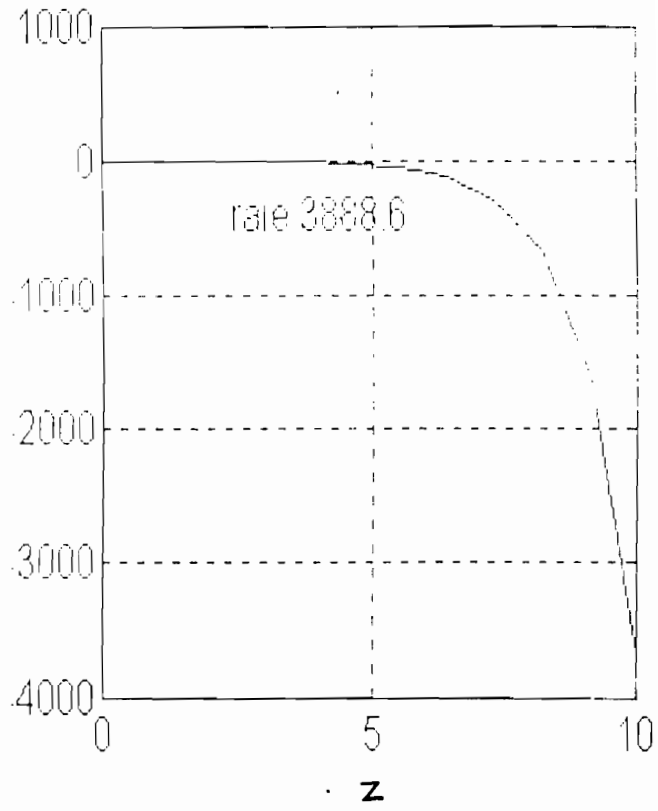
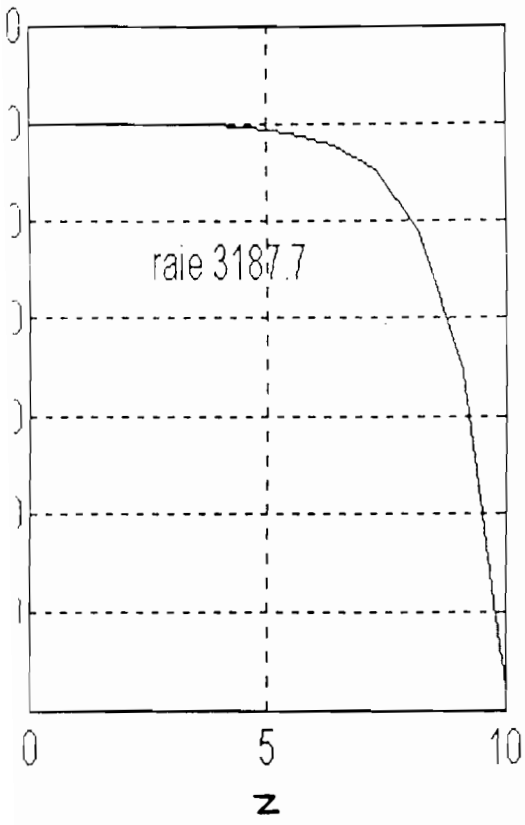
TRACES DE LA FONCTION CARACTERISTIQUE  
 $A(z, RZ)$  POUR LES RAIES DE L'HELIUM NEUTRE HeI  
SUIVANTES :  $4026.2 \text{ \AA}$ ,  $3187.7 \text{ \AA}$ ,  $4713.1 \text{ \AA}$ ,  $4471.5 \text{ \AA}$ ,  $4921.9 \text{ \AA}$ ,  
 $3888.6 \text{ \AA}$ ,  $5016 \text{ \AA}$ .





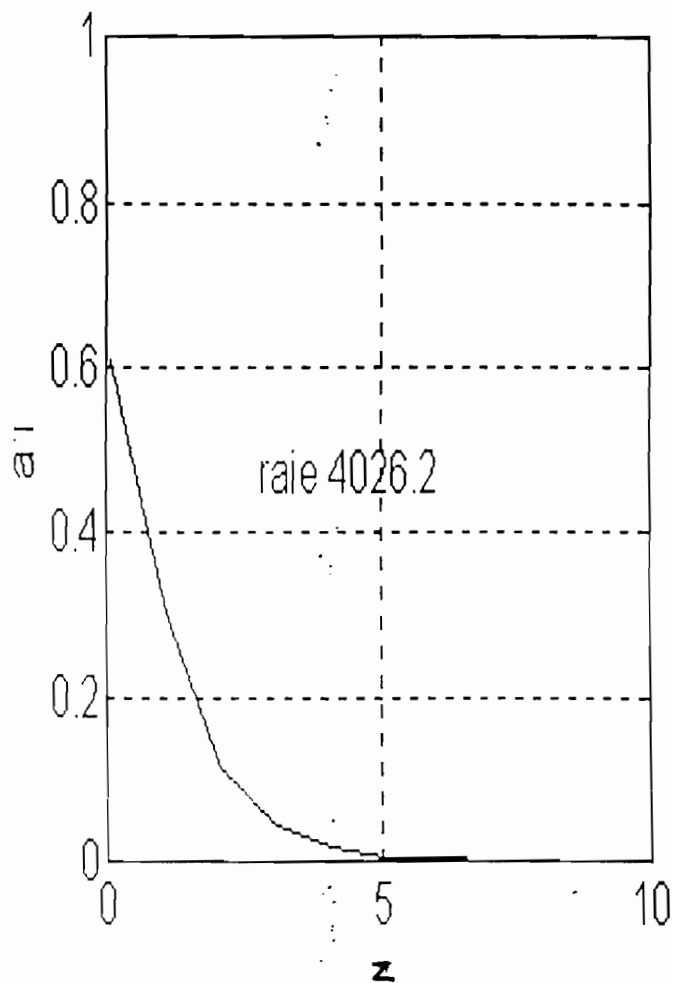
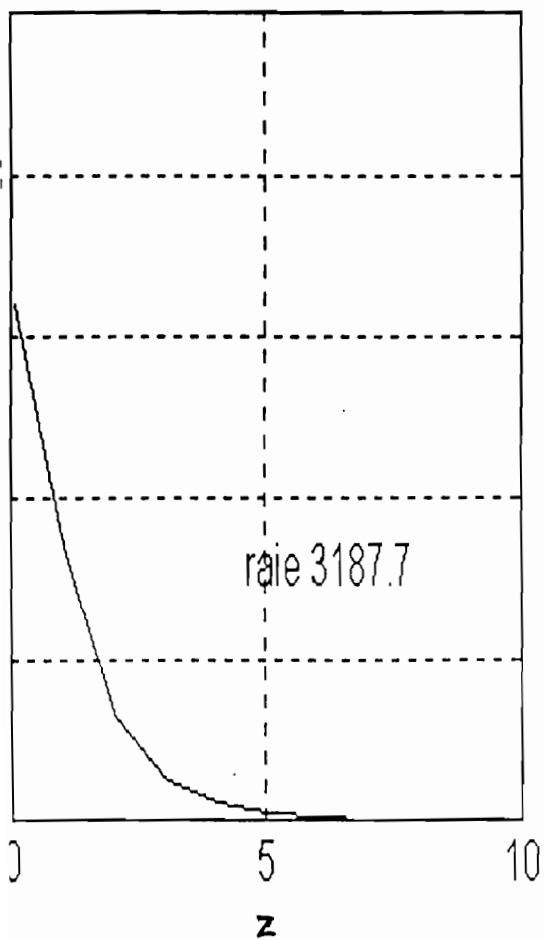
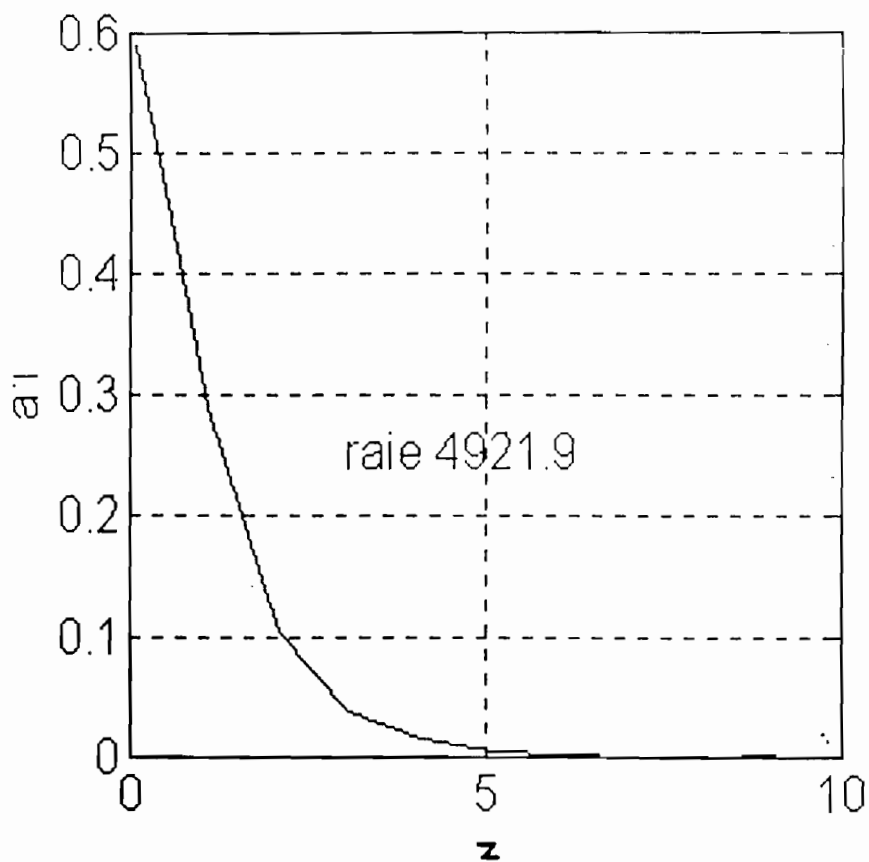
Tracés des fonctions  $B(z, rz)$  pour les différentes raies de l'hélium neutre HeI suivantes :  
4471.5 Å<sup>0</sup>, 5016 Å<sup>0</sup>, 4921.9 Å<sup>0</sup>, 3888.6 Å<sup>0</sup>, 4026.2 Å<sup>0</sup>, 4713.1 Å<sup>0</sup>, 3187.7 Å<sup>0</sup>.

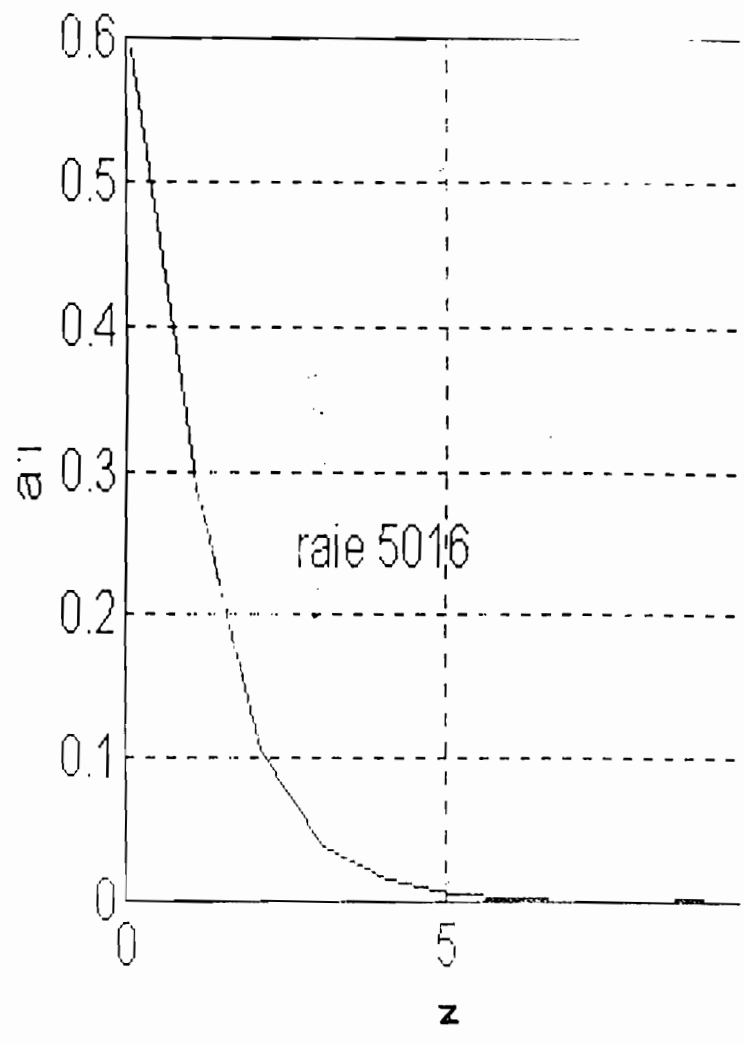
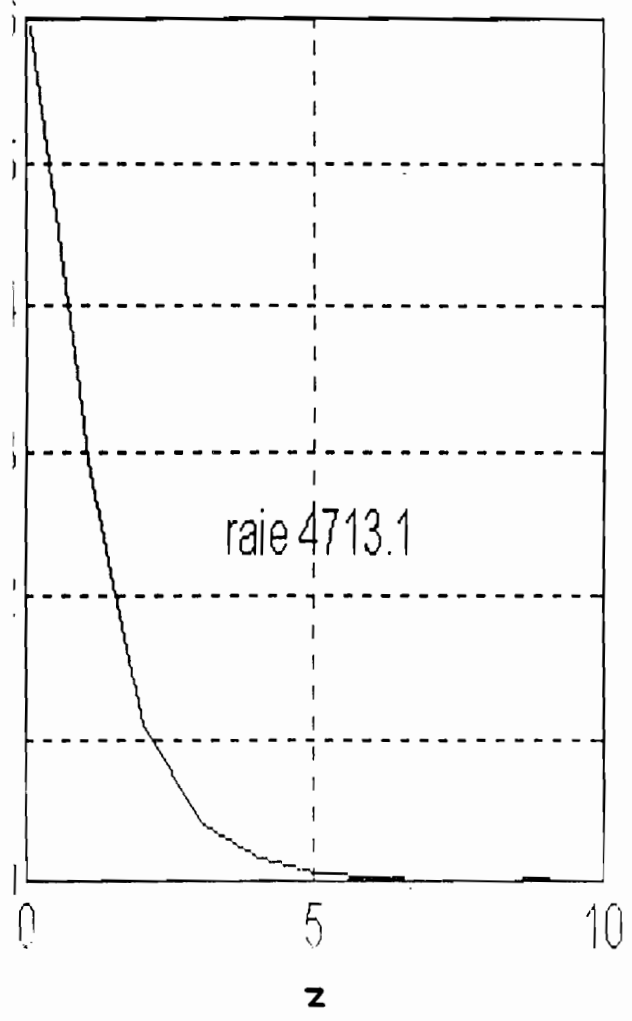
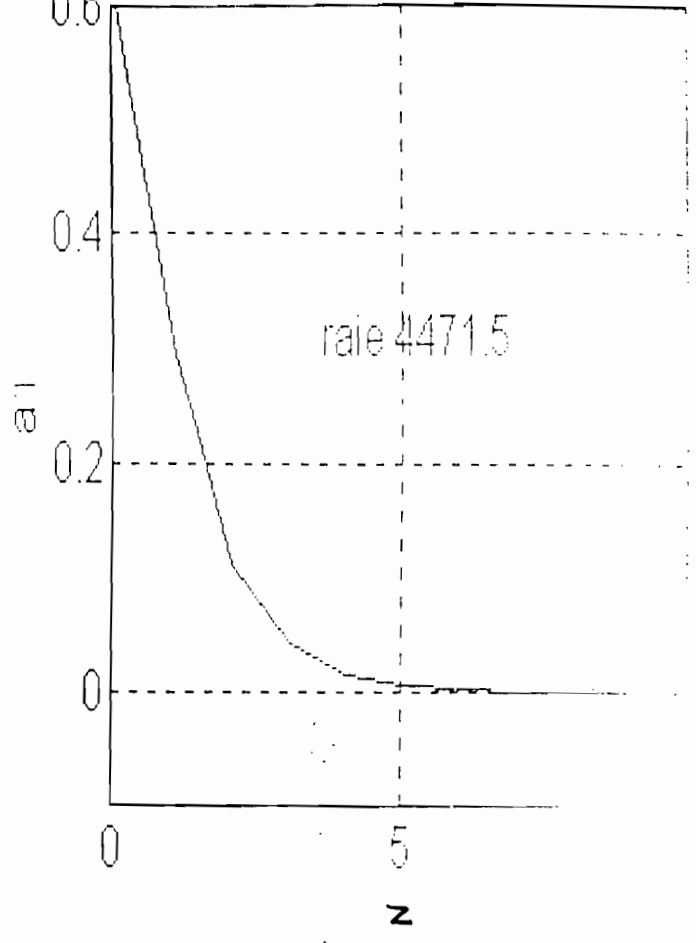
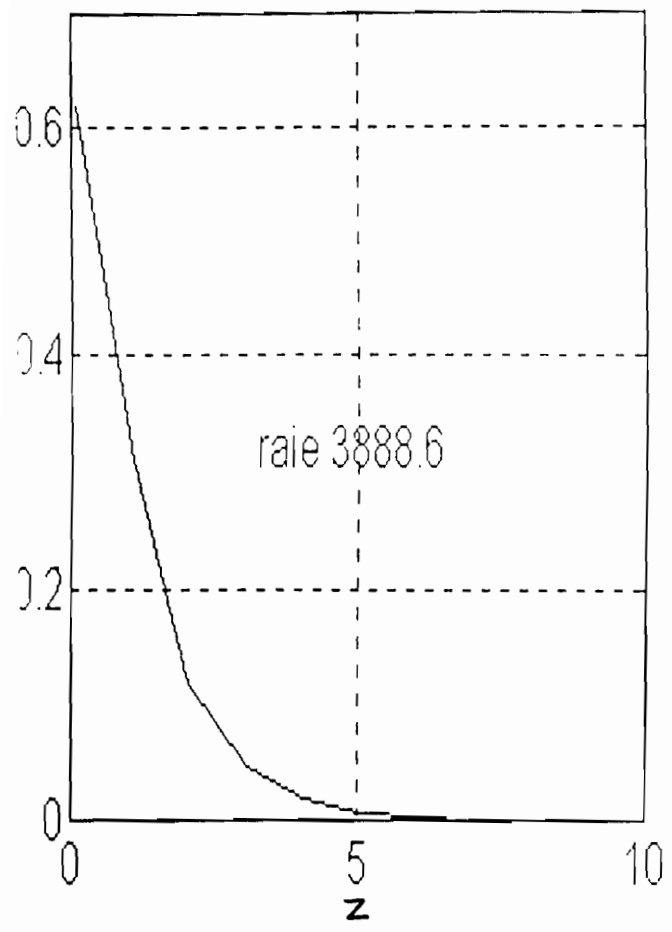




TRACES DE LA FONCTION  $a(Z, RZ)$  POUR LES RAIES DE L'HELIUM  
SUIVANTES :

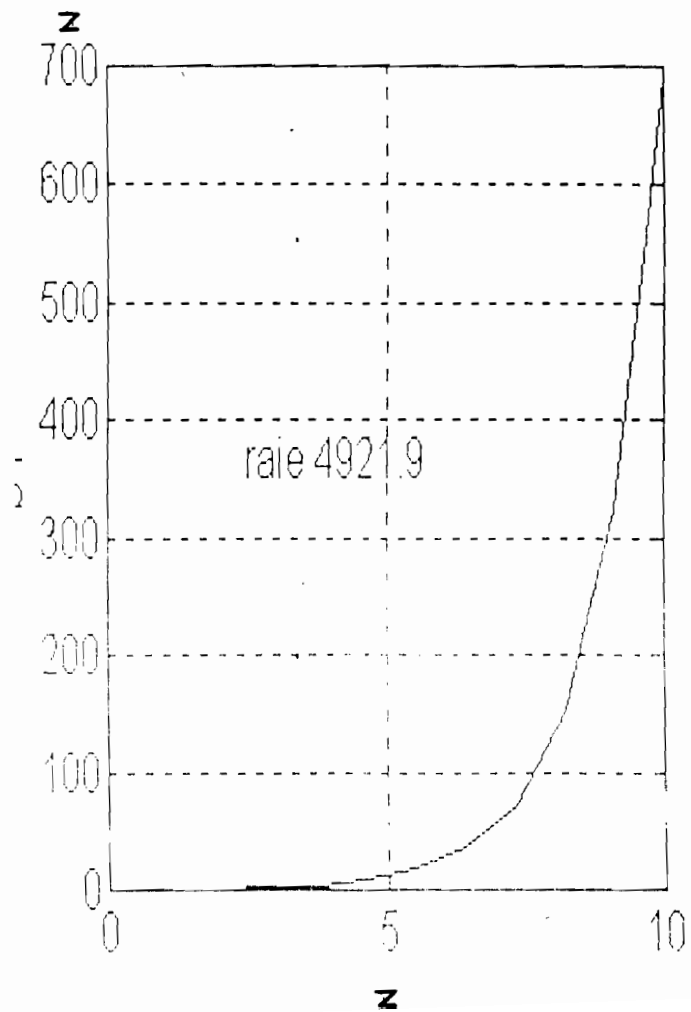
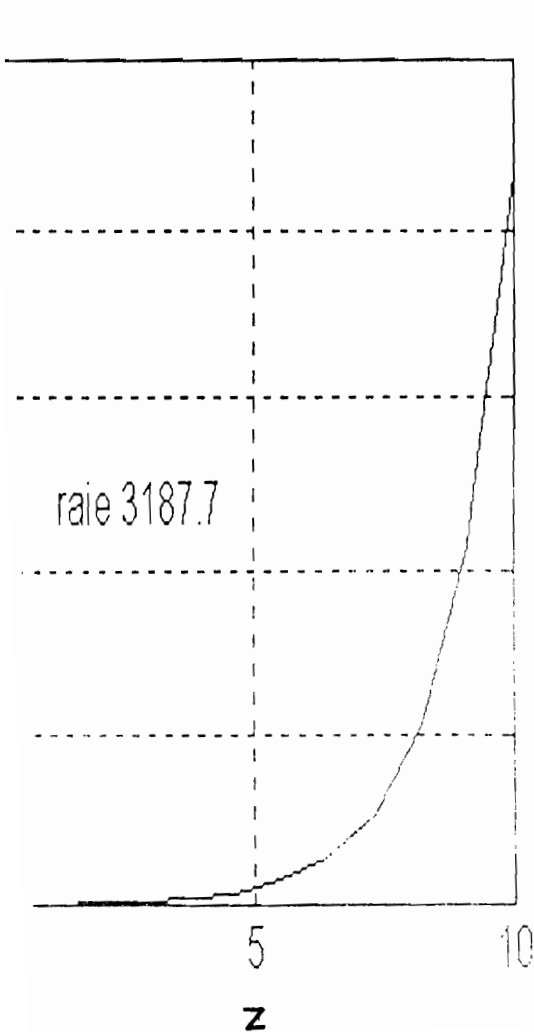
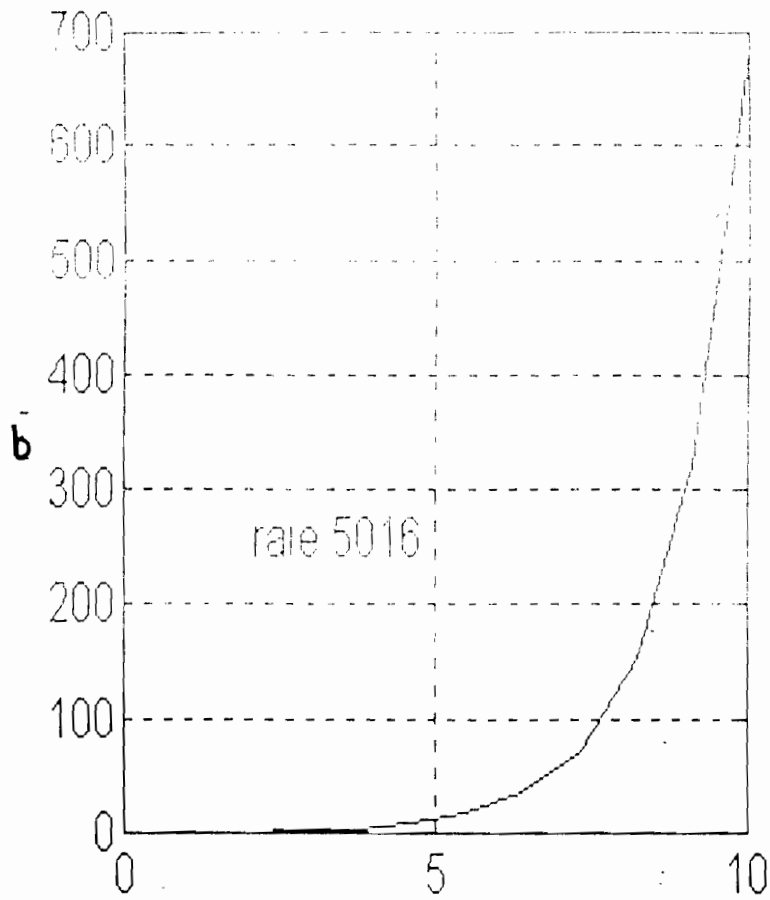
$4921.9 \text{ \AA}$ ,  $3187.7 \text{ \AA}$ ,  $4026.2 \text{ \AA}$ ,  $3888.6 \text{ \AA}$ ,  $4417.5 \text{ \AA}$ ,  $4713.1 \text{ \AA}$ ,  $5016 \text{ \AA}$ .

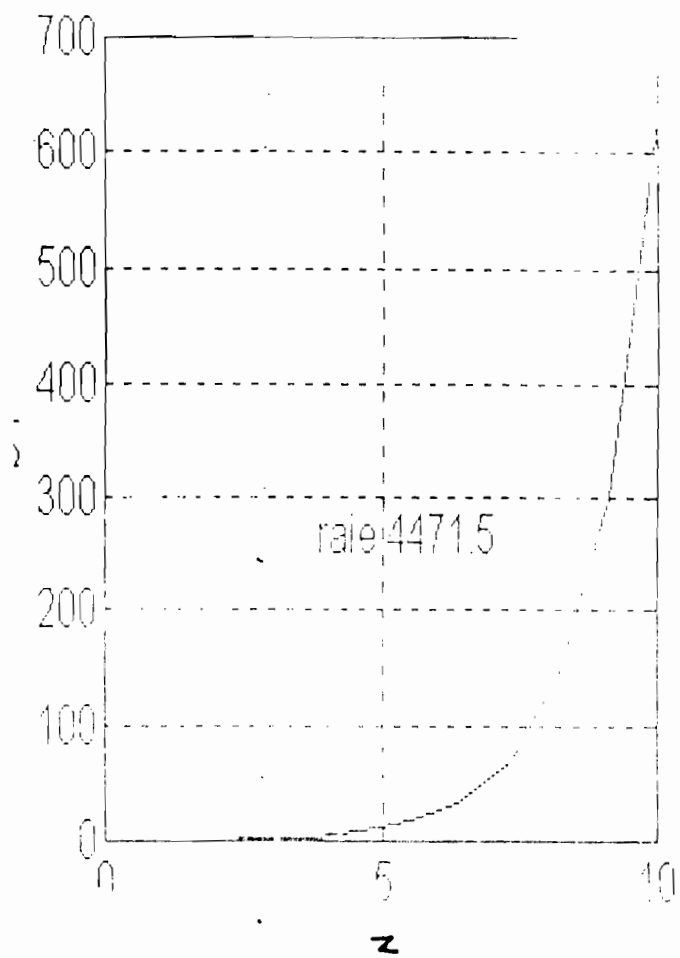
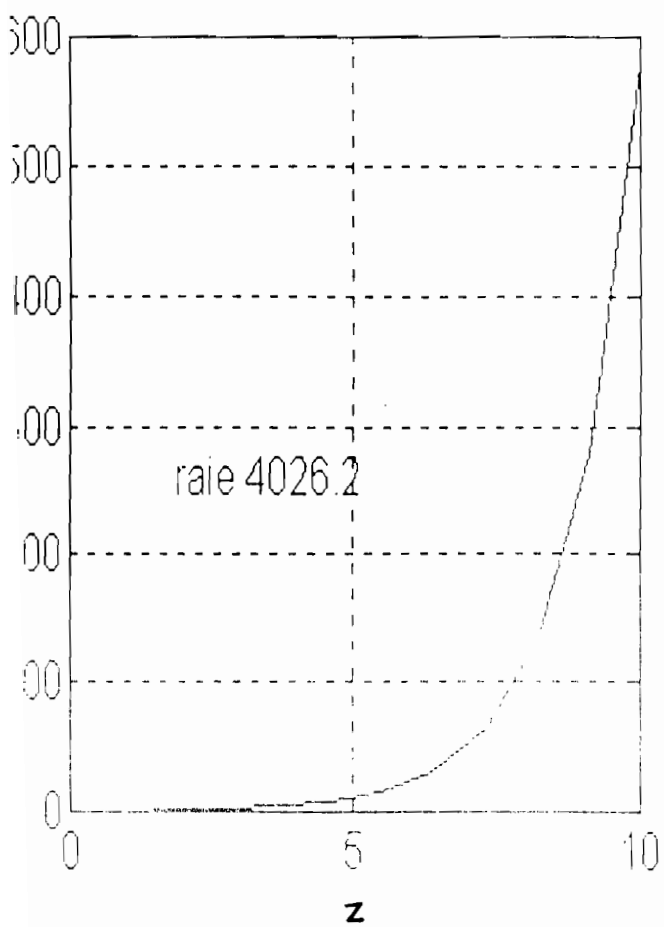
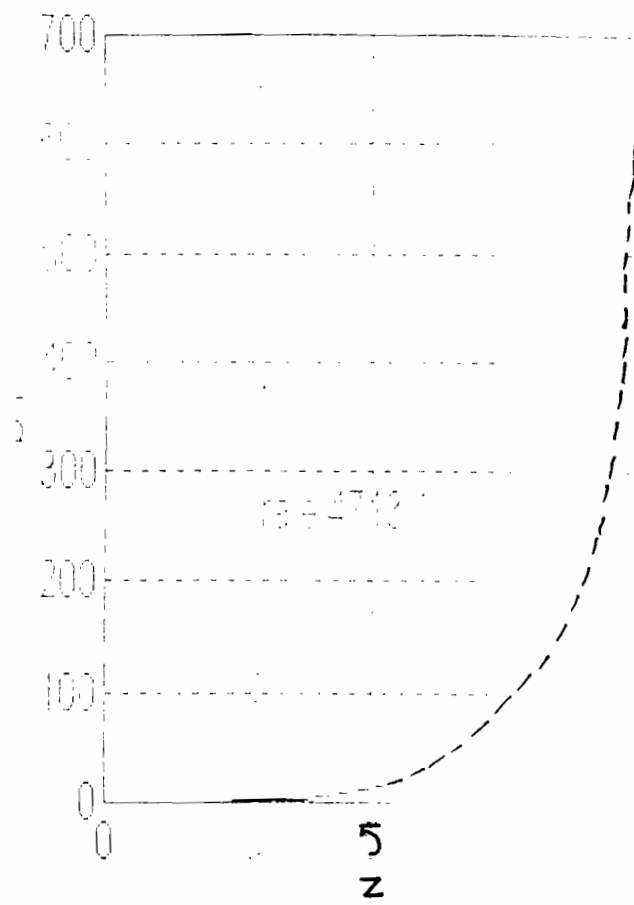
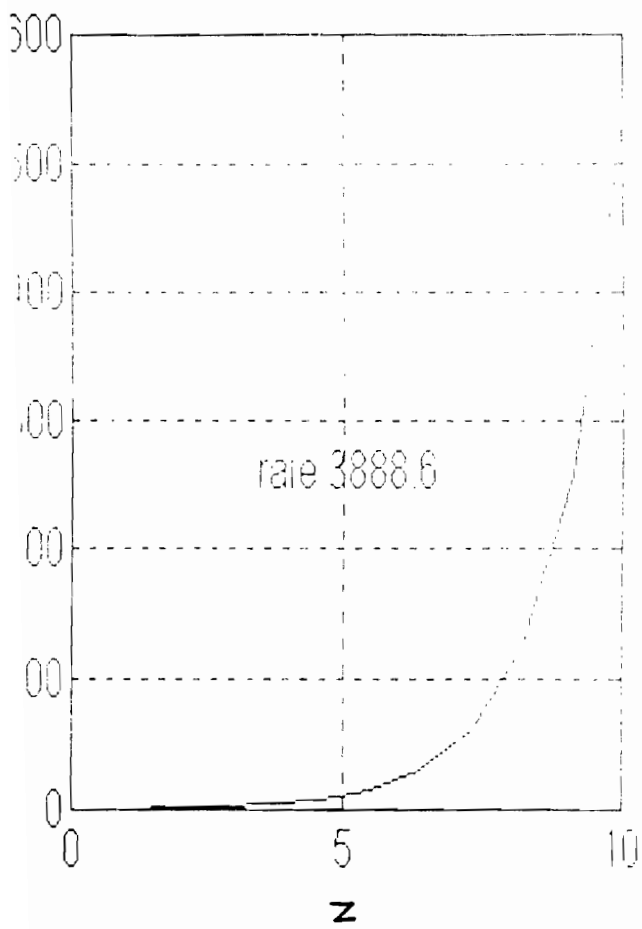






TRACES DE LA FONCTION  $b(z, rz)$  POUR LES RAIES  
DE L'HELIUM HeI SUIVANTES :  $5016 \text{ \AA}^0$ ,  $3187.7 \text{ \AA}^0$ ,  
 $4921.9 \text{ \AA}^0$ ,  $3888.6 \text{ \AA}^0$ ,  $4713.1 \text{ \AA}^0$ ,  $4026.2 \text{ \AA}^0$ ,  $4471.5 \text{ \AA}^0$ .





## Analyses et commentaires

### sur les courbes de $A(z, rz)$ , $B(z, rz)$ , $a(z, rz)$ et $b(z, rz)$ pour les raies de l'hélium neutre $HeI$ .

Les courbes correspondant aux fonctions caractéristiques  $B(z, rz)$  pour les différentes raies de l'hélium neutre  $HeI$  ( $3888.6\text{\AA}$ ,  $4026.2\text{\AA}$ ,  $3187.7\text{\AA}$ ,  $5016\text{\AA}$ ,  $4471.5\text{\AA}$ ,  $4713.1\text{\AA}$ ,  $4921.9\text{\AA}$ ) sont obtenues pour un même paramètre  $r$  de l'ordre de 0.8, ce qui entraîne que les courbes sont pratiquement les mêmes. On peut ainsi faire une analyse globale pour les 7 courbes. Pour  $0.1 < z < 5$   $B(z, rz) = 0$  et pour  $5 < z < 10$   $B(z, rz)$  décroît et devient négatif de plus en plus. Deux zones sont donc déterminées : La zone des petites valeurs de  $z$  et de celle des grandes valeurs de  $z$ . On rappelle que l'expression de  $z$  s'écrit :  $z = [(E - E')/h\nu]\rho$  où  $E$  et  $E'$  sont les énergies respectives des sous-niveaux  $i$  et  $i'$ ,  $h$  est la constante de PLANCK,  $\rho$  le paramètre d'impact des perturbateurs et  $\nu$  la vitesse des perturbateurs. Si  $z$  est petit c'est-à-dire : la différence d'énergie entre les sous-niveaux d'un même état est pratiquement nulle (cas des états non dégénérés d'un atome) on a alors,  $B(z, rz) = 0$ , le déplacement de la raie nulle. La raie reste centrée autour de la fréquence nominale de l'atome. On peut dire que l'effet des  $\&$  qui serait de déplacer la raie est nulle dans cette zone. Par contre dans la zone où  $z$  est grand devient négatif,  $z$  grand correspondrait à une différence d'énergie entre les niveaux importants donc à une transition entre des états d'énergies élevées. On peut ainsi prévoir sur  $r$  la zone des petits  $z$  une absence de déplacement de la raie émise par le plasma et dans la zone des  $z$  grands un déplacement qui est négatif. Pour la fonction  $A(z, rz)$ , il existe de même une zone des valeurs de  $z$  petits définie par :  $0.1 < z < 5$  et une zone des valeurs de  $z$  élevées définie par  $5 < z < 10$ . Dans la zone des  $z$  petits  $A(z, rz)$  varie entre 0 et environ 1 et  $A(z_{min})$  sensiblement égale à 1 et dans des  $z$  grands  $A(z, rz)$  est nulle.

L'interprétation physique ayant été faite antérieurement sur la signification de ces zones, on peut faire la synthèse suivante :

Dans la zone des petites valeurs de  $z$  on a  $A = 1$  pour  $z_{min}$  et  $B = 0$  ceci confirme les résultats obtenus par GRIEM (1974) dans le cas particulier de l'atome d'hydrogène.

Dans la zone des valeurs assez élevées de  $z$ , on  $A = 0$  et  $B < 0$ .

On peut s'attendre avec l'étude de ces fonctions à des valeurs comprises entre 0 et 1 pour  $A$  et 0 pour  $B$  lorsqu'on a des transitions dont les différences d'énergie entre niveaux sont faibles et des valeurs négatives pour  $B$  et nulles pour  $A$  dans le cas des transitions dont les différences d'énergie entre les niveaux d'énergie sont élevées.

L'observation des courbes  $a(z, rz)$  et  $b(z, rz)$  montre qu'elles sont identiques pour les différentes raies et que pour  $z$  compris entre 0.1 et 5  $a$  varie entre 0 et 0.6 alors que pour  $z$  variant entre 5 et 10  $a$  est nulle ce qui confirme les remarques faites  $A(z, rz)$ . Si  $z$  varie entre 0.1 et 5,  $b(z, rz)$  est nulle et si  $z$  varie entre 5 et 10,  $b(z, rz)$  devient important et varie entre 0 et 400.

L'analyse des tracés de ces fonctions largeurs ( $a(z, rz)$ ) et déplacement ( $b(z, rz)$ ) montre que les transitions correspondant aux valeurs des  $z$  petits entraîne que déplacement de la raie est nul alors que la largeur est non nulle. L'atome émetteur a des niveaux dont la différence d'énergie faible. Pour les grandes valeurs de  $z$  c'est le déplacement de la raie qui est non nul alors que la largeur est nulle. On peut dès lors,

faire un parallèle entre les valeurs de  $z$  et le type de collisions ( $z = [\Delta E/h\nu]\rho$ ,  $z = [\Delta E/h\nu]\rho \cdot t_c$ ,  $t_c$  est le temps de collision).

- Pour une collision faible,  $z$  est grand du fait que  $t_c$  est grand.
- Pour une collision forte,  $z$  est petit du fait que  $t_c$  est petit.

L'étude des fonctions  $a(z, \nu z)$  et  $b(z, \nu z)$  nous permet ainsi de déterminer le domaine de calcul de la largeur et du déplacement de la raie selon qu'on a une collision faible ou forte.

Pour une collision faible on peut s'attendre à ce que la raie émise soit seulement déplacée et non élargie et le domaine d'étude est celui des valeurs de  $z$  élevées.

Pour une collision forte la raie émise est élargie et non déplacée et le domaine d'étude est celui des valeurs de  $z$  petites.

Toutes ces conclusions sont faites en supposant que les seuls paramètres qui interviennent dans le calcul de l'élargissement et du déplacement des raies spectrales émises par les plasmas ( $\rho$  et  $\nu$ ).

NB : Toutes ces courbes sont tracées avec une erreur absolue de 0.01 (cf. programme MATLAB.)

## CHAPITRE V

### APPLICATION AU SPECTRE DE L'HELIUM Hel

*V.1 Caractérisation de la raie  $\lambda=3888.6\text{\AA}$*

*V.2 Développement en série de l'expression  $\langle \alpha | \langle \beta | [i\omega - i(H_a - H_b)h - \phi_a]^{-1} | \alpha' \rangle | \beta' \rangle$*

*V.3 Expression de  $W_{\alpha\beta}$*

*V.4 Eléments matriciels du dipôle*

*V.5 Calcul de largeur et du déplacement de la raie*

*V.6 Conclusion*

## V-Application au spectre de l'Hélium Hel

La théorie des impacts nous a permis d'avoir une expression du profil de la raie émise par le plasma. Cependant l'application à un atome émetteur déterminé demande principalement 3 étapes :

1- Mise en forme plus adéquate de  $L(\omega)$  par l'utilisation du développement en série de l'expression ;

2- Calcul des éléments matriciels du moment dipolaire :  $d$  ;

3- Calcul des valeurs propres de la matrice Hamiltonien  $H_{total} = H_0 + H_{interaction}$

Le calcul des éléments matriciels de  $\Phi_a$  ayant été fait nous donnerons enfin la répartition des fréquences autour de la fréquence centrale (non perturbée) de l'atome émetteur. Nous nous intéresserons particulièrement à la raie de HeI 3888.6Å élargie et déplacée par effet STÄRK.

### V-I Caractérisation de la raie 3888.6Å de l'hélium Hel

Pour caractériser cette raie, rappelons d'abord que pour un atome à plusieurs électrons, chaque atome est caractérisé par les nombres quantiques  $n, l, s, j$ .  $n$  est le nombre quantique principal,  $l$  le moment angulaire orbital dont la projection sur un axe peut prendre des valeurs comprises entre  $-l$  et  $+l$  (soit  $2l + 1$  valeurs).  $l$  varie entre 0 et  $n - 1$ . A ce moment angulaire s'ajoute  $s$  le spin de l'électron qui est le moment de rotation axiale de l'électron caractérisé par un vecteur dont la valeur est  $\sqrt{s(s + 1)} \frac{h}{2\pi}$

Et dont la projection sur un axes prend les valeurs  $-1/2$  et  $+1/2$ .

L'interaction du moment magnétique de spin avec le champ magnétique dû au moment orbital produit un couplage des deux moments angulaires et obtient un moment cinétique total caractérisé par un vecteur  $j$  dont la projection sur un axe peut prendre les valeurs comprises entre  $+j$  et  $-j$  (soit  $2j + 1$  valeurs).

La valeur de ce moment donnée par la mécanique ondulatoire est :

Tous ces nombres quantiques permettent d'avoir la structure fine des raies. Les vecteurs correspondant aux nombres quantique  $(n, l, s, j)$  ne sont donc pas indépendants car des interactions dû aux répulsions électriques, aux moments magnétiques, etc ont lieu entre les électrons d'une même couche. Les interactions spin-orbite ( $l, s$ ) sont d'origine magnétique, au contraire les interactions orbite-orbite ( $l_1, l_2$ ) et spin-spin sont principalement dues à des forces électrostatiques.

Il s'agira donc pour un atome déterminé de savoir quelles sont les interactions les plus fortes et comment les différents moments se couplent pour donner les termes spectroscopiques relatifs à cette couche et pouvoir ainsi caractériser le type de transition.

Si les forces électrostatiques entre les différents électrons sont les plus forts, le couplage est dit serré (couplage  $L, S$  ou de Russel-Saunders), les  $l_i$  ne sont pas indépendants et seules leur somme  $L$  a un sens et est quantifié.

Pour le cas de l'atome de l'hélium neutre (donc deux électrons) on a :

$(l_1, l_2) = L$  qui se projette sur un axe suivant toutes les valeurs comprises entre  $l_1 + l_2$  et  $l_1 - l_2$ .

Chaque valeur correspond à un état.

Sous l'action des forces électrostatiques, les différents spins se couplent pour donner

$S$  (spin total à qui sera quantifié  $S = (s_1, s_2)$ ).

Enfin  $L$  et  $S$  se couplent pour donner le moment angulaire total  $J$  qui sera caractéristique d'un terme étudié  $J = (L, S)$ .  $J$  est vecteur quantifié de grandeur, il est compris entre  $L + S$  et  $L - S$ . On obtiendra au plus  $2S + 1$  valeurs de  $J$ ,  $2S + 1$  caractérise la multiplicité d'un terme c'est-à-dire le nombre de composantes en lesquelles un terme de  $L$  donné peut être séparé.

Pour un atome ayant deux électrons :

$S = 0, 2S + 1 = 1$  les termes sont des singulets

$S = 1, 2S + 1 = 3$  les termes sont des triplets.

Un terme spectroscopique caractériser par  $L, S, J$  s'écrit :  $^{2S+1}L_J$ , un indice  $o$  en haut et à droite est mis si la somme des  $l_i$  est impaire sinon aucun.

En application à cette étude de la structure fine de l'atome, retrouvons les premiers termes spectroscopiques de *Hel* en faisant faire des sauts optiques successifs à l'un des deux électrons, l'autre restant dans l'état fondamental.

*Hel* (2 électrons  $Z = 2$ )

Etat fondamental

$n_1 = 1 \quad l_1 = 0 \quad s_1 = 1/2$

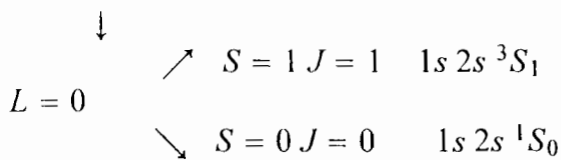
$$L = 0 \quad S = 0 \quad J = 0 \quad \Rightarrow \quad 1s^2 \quad {}^1S_0$$

$n_2 = 1 \quad l_2 = 0 \quad s_2 = 1/2$

1 électron sauté sur  $n = 2, l = 0$

$n_1 = 1 \quad l_1 = 0 \quad s_1 = 1/2$

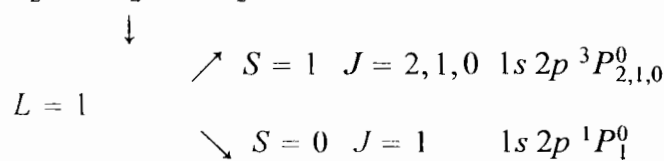
$n_2 = 2 \quad l_2 = 0 \quad s_2 = 1/2$



1 électron saute sur  $n = 2, l = 1$

$n_1 = 1 \quad l_1 = 0 \quad s_1 = 1/2$

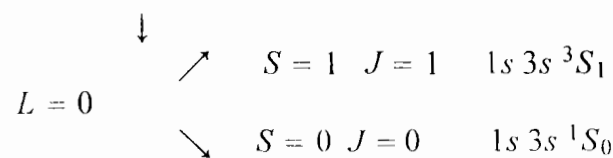
$n_2 = 2 \quad l_2 = 1 \quad s_2 = 1/2$



1 électron saute sur  $n = 3, l = 0$

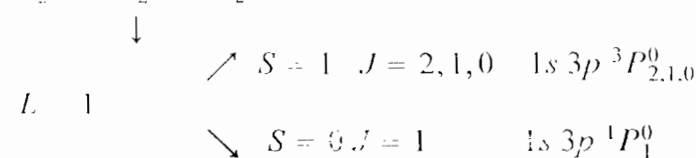
$n_1 = 1 \quad l_1 = 0 \quad s_1 = 1/2$

$n_2 = 3 \quad l_2 = 1 \quad s_2 = 1/2$



$n_1 = 1 \quad l_1 = 0 \quad s_1 = 1/2$

$n_2 = 2 \quad l_2 = 1 \quad s_2 = 1/2$



$$n_1 = 1 \quad l_1 = 0 \quad s_1 = 1/2$$

$$n_2 = 2 \quad l_2 = 1 \quad s_2 = 1/2$$

$$\begin{array}{l}
 \downarrow \\
 \nearrow \quad S = 1 \quad J = 3, 2, 1 \quad 1s 3d \quad {}^3D_{3,2,1} \\
 L = 2 \\
 \searrow \quad S = 0 \quad J = 2 \quad 1s 3d \quad {}^1D_2
 \end{array}$$

Une raie spectrale correspond à une transition entre deux niveaux d'énergie. Elle est représentée par la différence des 2 termes spectraux caractérisant le niveau de départ et le niveau d'arrivée. Toutes les transitions ne sont pas permises, il existe des règles de sélection dont la plus importante est la règle De Laporte. Cette règle donne les conditions dans lesquelles le rayonnement émis dans une transition peut être assimilés à un rayonnement de dipôle électrique.

$$\Delta l = \pm 1, 0$$

$\Delta J = \pm 1, 0$  les conditions de validité en couplage  $L.S$ .

$S$  ne doit pas changer (transition entre termes de même multiplicité)

$\Delta L = \pm 1, 0$  la raie  $3888.6\text{\AA}$  est une transition entre le niveau  $3p \quad 3P^0$  et le niveau  $2s \quad 3S$ . Au premier niveau on a  $J = 2, 1, 0$  et au deuxième  $J = 1$ .

On a ainsi le schéma de la transition correspondant à la raie  $3888.6\text{\AA}$  suivant :

Etat1 :  $n = 3$

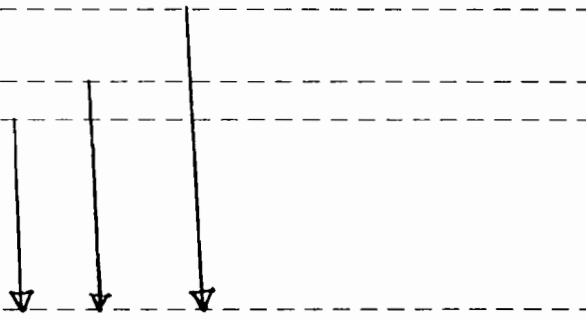
$J = 2$  -----

$J = 1$  -----

$J = 0$  -----

Etat2 :  $n = 2$

$J = 1$  -----



Un état est donc caractérisé par les paramètres suivants :  $[J, L, S, M_J, l_2, l_1]$  où  $l_1$  est le moment angulaire orbital de l'électron 1 et  $l_2$  celui de l'électron 2,  $M_J$  est tel qu'il est compris entre  $-J$  et  $+J$ ,  $S$  le spin total,  $L$  le moment angulaire orbital total et  $J = S + L$

## V-2 Développement en série de

$$\langle \alpha | \langle \beta | [i\omega - i(H_a(E) - H_b(E))/\hbar + \Phi_{ab}(E)]^{-1} | \alpha' \rangle | \beta' \rangle$$

Ce développement en série permet d'avoir un aperçu de la forme du profil dû à l'élargissement de l'électron.

$$\Phi_a = \Phi_a^d + \Phi_a^0 \tag{V-1}$$

$\Phi_a^d$  est la partie diagonale de  $\Phi_a$ ,  $\Phi_a^0$  est la partie non diagonale.

$$[i\omega - i(H_a(E) - H_b(E))/\hbar + \Phi_a(E)]^{-1} \equiv (D - \Phi_a^0)^{-1} \tag{V-2}$$

$$D = [i\omega - i(H_a - H_b)/\hbar \quad \Phi_a^d] \tag{V-3}$$



Le développement de  $(D - \Phi_a^0)^{-1}$  donne:

$$(D - \Phi_a^0)^{-1} = \frac{1}{D - \Phi_a^0} = \frac{1}{D} + \frac{1}{D} \Phi_a^0 \frac{1}{D} + \frac{1}{D} \Phi_a^0 \frac{1}{D} \Phi_a^0 \frac{1}{D} + \dots \quad (V-4)$$

$$\begin{aligned} \text{On a alors } \langle \alpha | \langle \beta | [D - \Phi_a^0]^{-1} | \alpha' \rangle | \beta' \rangle &= \frac{\delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\beta\beta'}}{i(\omega - \omega_{a\beta}) - \langle \alpha | \Phi_a | \beta \rangle} + \\ &\frac{\delta_{\beta\beta'} \langle \alpha | \Phi_a | \alpha' \rangle}{[i(\omega - \omega_{a\beta}) - \langle \alpha | \Phi_a | \alpha \rangle][i(\omega - \omega_{a\beta}) - \langle \alpha' | \Phi_a | \alpha \rangle]} + \dots \end{aligned} \quad (V-5)$$

Si l'on s'intéresse au plasma de faible densité c'est-à-dire  $n \leq 10^{14} \text{cm}^{-3}$ , le second terme est négligé du fait de la présence du terme  $\langle \alpha | \Phi_a | \alpha' \rangle$  mais aussi du fait que la différence de niveau entre  $\alpha$  et  $\alpha'$  est plus grande que  $\langle \alpha | \Phi_a | \alpha' \rangle$ .

$$\langle \alpha | \langle \beta | [i\omega - i(H_a(E) - H_b(E))/\hbar + \Phi_{ab}(E)]^{-1} | \alpha' \rangle | \beta' \rangle = \frac{\delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\beta\beta'}}{i(\omega - \omega_{a\beta}) - \langle \alpha | \Phi_a | \alpha \rangle} \quad (V-6)$$

Le profil s'écrit:

$$L(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Re} \sum_{\alpha\alpha', \beta\beta'} d_{\alpha\beta} \frac{\delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\beta\beta'}}{i(\omega - \omega_{a\beta}) - \langle \alpha | \Phi_a | \alpha \rangle} d_{\alpha'\beta'}^* \quad (V-7)$$

La prise en compte de la distribution du champ des ions quasi-statiques se fait en moyennant sur une distribution de probabilité  $W(E)$  normalisée.

Le profil s'écrit :

$$L(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty W(E) dE \text{Re} \sum_{\alpha\alpha', \beta\beta'} d_{\alpha\beta} \frac{\delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\beta\beta'}}{i(\omega - \omega_{a\beta}) - \langle \alpha | \Phi_a | \alpha \rangle} d_{\alpha'\beta'}^* \quad (V-8)$$

si  $\alpha = \alpha'$  et  $\beta = \beta'$

$$\sum_{\alpha\alpha', \beta\beta'} d_{\alpha\beta} \frac{\delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\beta\beta'}}{i(\omega - \omega_{a\beta}) - \langle \alpha | \Phi_a | \alpha \rangle} d_{\alpha'\beta'}^* = \sum_{\alpha\beta} \frac{|d_{\alpha\beta}|^2}{i(\omega - \omega_{a\beta}) - \langle \alpha | \Phi_a | \alpha \rangle} \quad (V-9)$$

Posons  $\langle \alpha | \Phi_a | \alpha \rangle = l + id$ , l'expression dans la somme s'écrit :

$$|d_{\alpha\beta}|^2 \frac{(-l - i(\omega - \omega_{a\beta}))}{[l^2 + (\omega - \omega_{a\beta} - d)^2]} \quad (V-10)$$

Le profil s'écrit :

$$L(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty W(E) dE \cdot \text{Re}(L_1(\omega)) \quad (V-11)$$

avec  $L_1(\omega) = \sum_{\alpha\beta} \frac{-l|d_{\alpha\beta}|^2}{l^2 + (\omega - \omega_{\alpha\beta} - d)^2}$

### V-3 Expression de $\omega_{\alpha\beta}$

L'expression de  $\omega_{\alpha\beta}$  est équivalente à la détermination des valeurs propres de l'hamiltonien total  $H$  du système (atome émetteur et perturbateurs).

Cette expression de  $\omega_{\alpha\beta}$  est fonction du champ ionique  $E$ .

Nous nous mettons dans le cas simple d'un système à deux niveaux ( $i$ ) et ( $f$ ).

$H = H_0 + H_p$ ,  $H_0$  est l'hamiltonien non perturbé,  $H_p$  l'hamiltonien de perturbation.

La matrice  $H$  s'écrit alors :

$$H = \begin{pmatrix} E_{0i} + \langle i|ez|i\rangle E & \langle i|ez|f\rangle E \\ \langle f|ez|i\rangle E & E_{0f} + \langle f|ez|f\rangle E \end{pmatrix} \quad (V-12)$$

$$\langle i|H_0|i\rangle = E_{0i} \quad (V-13a)$$

$$\langle f|H_0|f\rangle = E_{0f} \quad (V-13b)$$

La règle de sélection  $\Delta l = \pm 1$  entraîne que :  $\langle i|ez|i\rangle E = 0, \langle f|ez|f\rangle E = 0$  (V-14)

$$H = \begin{pmatrix} E_{0i} & \langle i|ez|i\rangle E \\ \langle f|ez|i\rangle E & E_{0f} \end{pmatrix} \quad (V-15)$$

Les valeurs propres de  $H$  sont altérées par les éléments off-diagonaux de la matrice.

Calcul des valeurs propres de  $H$

Posons :  $H = \begin{pmatrix} A & C \\ C & B \end{pmatrix}$  (V-16)

Soit  $\Psi$  la fonction d'onde propre du système  $\Psi \begin{vmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{vmatrix}$

Si  $E$  est la valeur propre de  $H$  alors

$$H\Psi = E\Psi \quad (V-17)$$

$$\begin{pmatrix} A & C \\ C & B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} \quad (\text{V-18})$$

$$\begin{vmatrix} A-E & C \\ C & B-E \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow E^2 - (A+B)E + AB - C^2 = 0 \quad (\text{V-19})$$

On obtient ainsi une équation séculaire du système et la résolution de cette équation permet d'avoir 2 solutions.

$$E^{\pm} = \frac{A+B}{2} \pm C \left[ \left( \frac{A-B}{2C} \right)^2 + 1 \right]^{1/2}; E^{-} = \frac{A+B}{2} - C \left[ \left( \frac{A-B}{2C} \right)^2 + 1 \right]^{1/2} \quad (\text{V-20})$$

Par identification on a :

$$A = E_{0i}, B = E_{0f}, C = \langle f|ez|i\rangle E \quad (\text{V-21})$$

$$E^{+} = \frac{E_{0i} + E_{0f}}{2} + \langle f|ez|i\rangle E \left[ \left( \frac{E_{0i} - E_{0f}}{2\langle f|ez|i\rangle E} \right)^2 + 1 \right]^{1/2} \quad (\text{V-22a})$$

$$E^{-} = \frac{E_{0i} + E_{0f}}{2} - \langle f|ez|i\rangle E \left[ \left( \frac{E_{0i} - E_{0f}}{2\langle f|ez|i\rangle E} \right)^2 + 1 \right]^{1/2} \quad (\text{V-22b})$$

$$\text{Soit } \Delta = \frac{C}{A-B}$$

$$\Delta = \frac{\langle f|ez|i\rangle E}{E_{0i} - E_{0f}} \text{ si } |\Delta| \ll 1 \Rightarrow \langle f|ez|i\rangle E \ll E_{0i} - E_{0f}$$

Ainsi l'effet du champ des ions E est faible par rapport à la différence d'énergie entre les états final et initial. Les états propres du système deviennent :

$$E^{+} = E_{0i} + (\langle i|ez|f\rangle)^2 E^2 / (E_{0i} - E_{0f}) \quad (\text{V-23a})$$

$$E^{-} = E_{0f} + (\langle i|ez|f\rangle)^2 E^2 / (E_{0i} - E_{0f}) \quad (\text{V-23b})$$

Si  $|\Delta| \gg 1$

$$E^{+} = (E_{0i} + E_{0f})/2 + \langle i|ez|f\rangle E \quad (\text{V-24a})$$

$$E^{-} = (E_{0i} + E_{0f})/2 - \langle i|ez|f\rangle E \quad (\text{V-24b})$$

Dans ce cas,  $\langle i|ez|f\rangle E \gg E_{0i} - E_{0f}$ , la théorie des perturbations n'est plus valable, les corrections de l'énergie sont alors du premier ordre.

En conclusion on dira que les énergies déplacées par effet STARK sont des fonctions quadratiques du champ des ions  $E$  pour champs des faibles. Les énergies déplacées par effet STARK sont des fonctions linéaires de  $E$  pour les champs forts.

On a l'expression de  $\omega_{\alpha\beta}$  dans les deux cas :

$$\text{Si } |\Delta| \ll 1 \quad \omega_{\alpha\beta} = \frac{2(\langle i|ez|f\rangle)^2 E^2}{h(E_{0i} - E_{0f})} + \omega_0 \quad (\text{V-25})$$

$$\omega_0 = \frac{E_{0i} - E_{0f}}{h} \quad (\text{V-26})$$

$$\text{Si } |\Delta| \gg 1 \quad \omega_{\alpha\beta} = \frac{2\langle i|ez|f\rangle E}{h} \quad (\text{V-27})$$

$$\omega_{\alpha\beta} = \frac{1}{h}(E_\alpha - E_\beta) \quad (\text{V-28})$$

## V-4 Éléments matriciels du moment dipolaire

Au regard de l'expression de  $L(\omega)$ , les éléments matriciels du dipôle doivent être calculés entre les états  $\langle \alpha|$  et  $\langle \beta|$  mais aussi entre les états supérieurs  $\langle \alpha'|$  et  $\langle \alpha''|$ .

Pour calculer les éléments matriciels du moment dipolaire entre les états de l'électron atomique, on utilise le théorème de Wigner-Eckart qui permet d'exprimer ceux-ci en fonction des éléments réduits du dipôle.

Soit l'état  $\langle Jm|$  et l'état  $\langle J'm'|$ ,  $T_q^{(k)}$  un opérateur tensoriel,  $J$  est le moment angulaire de l'électron,  $m$  la valeur propre à un axe  $0z$ ). Le théorème de Wigner-Eckart permet d'écrire :

$$\langle Jm|T_q^{(k)}|J'm'\rangle = (-1)^{J-J'}(2J'+1)^{-1/2}C(JkJ';m-qm') \times \langle J||T^k||J'\rangle \quad (\text{V-27})$$

$C(JkJ';m-qm')$  est le coefficient de Clebs-Gordon,  $\langle J||T^k||J'\rangle$  sont les éléments matriciels réduits.

L'opérateur tensoriel est ici l'opérateur moment dipolaire de l'atome émetteur à deux électrons, cas de *HeI*. On a deux opérateurs  $eR_1$  et  $eR_2$ . On appelle  $T_{q(1)}^k$  le tenseur qui dépend des coordonnées de l'électron 1.  $U_{q(2)}^{(k)}$  le tenseur qui dépend des coordonnées de l'électron 2. Dans la base couplée avec  $J_1$  le moment de l'électron 1,  $J_2$  le moment de l'électron 2,  $J = J_1 + J_2$ .

Les éléments matriciels de  $U_2^{(k)}$  s'écrivent :

$$\langle J_1J_2J||U_2^{(k)}||J_1'J_2'J'\rangle = (-1)^{J_1+k-J_2}(2J+1)^{1/2}(2J'+1)^{1/2}W(J_2JJ_2'J',J_1k) \times \langle J_1||T_q^k||J_1'\rangle \quad (\text{V-28})$$

$W(J_2JJ_2'J',J_1k)$  est le coefficient de Racah.

On rappelle que le coefficient de RACAII est lié au coefficient 6J par la relation :

$$\left\{ \begin{array}{ccc} J_1 & J_2 & J \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{array} \right\} = (-1)^{J_1+J_2+l_1+l_2} W(J_1, J_2, l_2, l_1, J_3, l_3) \quad (\text{V-29})$$

$$\text{de même } \langle l_1 J_2 J \| T_q^k \| J'_1 J'_2 J' \rangle = (-1)^{J_1+k-J_2} (2J+1)^{1/2} (2J'+1)^{1/2} W(J_2, J J'_2, J', J, k) \times \langle J_1 \| T_q^k \| J'_1 \rangle \quad (\text{V-30})$$

Le vecteur propre tenant compte du couplage spin-orbite est noté :

$$\langle (1/2 \ 1/2) S(l_1 l_2) L J M_J | \quad (\text{V-31})$$

Les éléments matriciels du moment dipolaire relatif à l'électron entre les états couplés de l'électron s'écrit :

$$I_q = \langle (1/2 \ 1/2) S(l_1 l_2) L J M_J | r_q^1 | (1/2 \ 1/2) S'(l'_1 l'_2) L' J' M'_J \rangle \quad (\text{V-31a})$$

$$II_q = \langle (1/2 \ 1/2) S(l_1 l_2) L J M_J | r_q^2 | (1/2 \ 1/2) S'(l'_1 l'_2) L' J' M'_J \rangle \quad (\text{V-31b})$$

Le théorème de Wigner-Eckart permet d'écrire :

$$I_q = (-1)^{J-J'+q} (2J'+1)^{-1/2} C(J1J', M_J - qM'_J) \times$$

$$\langle (1/2 \ 1/2) S(l_1 l_2) L J \| r_1^1 \| (1/2 \ 1/2) S'(l'_1 l'_2) L' J' \rangle \quad (\text{V-32a})$$

$$II_q = (-1)^{J-J'+q} (2J'+1)^{-1/2} C(J1J', M_J - qM'_J) \times$$

$$\langle (1/2 \ 1/2) S(l_1 l_2) L J \| r_1^2 \| (1/2 \ 1/2) S'(l'_1 l'_2) L' J' \rangle \quad (\text{V-32b})$$

$$I_q = (-1)^{J-J'+q} (2J'+1)^{-1/2} C(J1J', M_J - qM'_J) \delta_{SS'} (-1)^{S+1-L-J'} (2J'+1)^{1/2} \times W(LJL'J', S1) \times \langle (l_1 l_2) L \| r_1^1 \| (l'_1 l'_2) L' \rangle \quad (\text{V-33a})$$

$$II_q = (-1)^{J-J'+q} (2J'+1)^{-1/2} C(J1J', M_J - qM'_J) \delta_{SS'} (-1)^{S+1-L-J'} (2J'+1)^{1/2} \times W(LJL'J', S1) \times \langle (l_1 l_2) L \| r_1^2 \| (l'_1 l'_2) L' \rangle \quad (\text{V-33b})$$

Finalement on aboutit à :

$$I_q = (-1)^{J-2J'-2L+S+l_2-l_1+q} C(J1J', M_J - qM'_J) (2J+1)^{1/2} (2L+1)^{1/2} (2L'+1)^{1/2} \times W(LJL'J', S1) W(l_1 L l'_1 L', l_2 1) \times \langle (l_1 l_2) L \| r_1^1 \| (l'_1 l'_2) L' \rangle \delta_{SS'} \delta_{l_2 l'_2} \quad (\text{V-34a})$$

$$I_q = (-1)^{J-2J'-2L+S+l_2-l_1+q} C(J1J', M_J - qM'_J) (2J+1)^{1/2} (2L+1)^{1/2} (2L'+1)^{1/2} \times$$

$$W(LJL'J', S1) W(l_1 L l'_1 L', l_2 1) \times \langle l_1 \| r_1^1 \| l'_1 \rangle \delta_{SS'} \delta_{l_2 l'_2} \quad (\text{V-34b})$$

$$H_q = (-1)^{J-2J'+2L+S+l_2-l_1+q} C(J_1 J', M_J - q M_{J'}) (2J+1)^{1/2} (2L+1)^{1/2} (2L'+1)^{1/2} \times \\ W(L_1 J L' J', S_1) W(l_2 L L', L', l_1 1) \times \langle l_2 \| r^q \| l_2' \rangle \delta_{SS'} \delta_{l_1 l_1'} \quad (V-34c)$$

Le tenseur moment dipolaire est un tenseur sphérique à 3 composantes et d'ordre 1, on a donc une composante pour chaque valeur de  $q(1, -1, 0)$ . D'une façon générale un tenseur d'ordre  $k$  à  $2k + 1$  composantes.

Les règles de sélection sont :

$$l_2 - l_2' = \pm 1, |\Delta l_2| = 1$$

- les éléments matriciels réduits qui ne s'annulent pas sont tels que :

- les coefficients  $W$  non nuls sont tels que  $L - L' = 0$  ou  $L - L' = \pm 1$

- les coefficients  $C$  non nuls sont tels que :

$$M_J - M_{J'} = q$$

Par ailleurs, les éléments matriciels réduits s'écrivent :

$$\langle l \| r^1 \| l+1 \rangle = \sqrt{(l+1)(2l+1)(2l+3)} \delta \quad (V-35a)$$

$$\langle l \| r^1 \| l-1 \rangle = \sqrt{l(2l-1)(2l+1)} \delta \quad (V-35b)$$

$$\langle l \| r^1 \| l-1 \rangle = -\langle l-1 \| r^1 \| l \rangle \quad (V-35c)$$

$$\delta = \frac{1}{\sqrt{4l^2-1}} \int_0^\infty r P(n, l) P(n', l') dr \quad (V-35d)$$

$P(n, l)$  et  $P(n', l')$  sont les parties radiales des fonctions d'onde de l'électron respectivement à l'état  $n$ , et  $n', l'$ .  $l$  est la plus grande valeur entre  $l$  et  $l'$ .

La caractérisation de la raie  $\lambda = 3888.6\text{\AA}$  du spectre de  $HeI$  en faisant faire à l'un des électrons des sauts optiques successifs, l'autre restant dans l'état fondamental, montre que la transition correspondant se fait entre les états de termes spectroscopiques suivants.

Etat 1 :  $[L = 1, S = 1, J = 0, 1, 2, l_2 = 1, l_1 = 0]$

Etat 2 :  $[L = 0, S = 1, J = 1, l_2 = 0, l_1 = 0]$

Le premier électron restant toujours dans l'état fondamental.

La raie  $\lambda = 3888.6\text{\AA}$  correspond à la transition  $3^3P - 2^3S$ . On montre que

$$p(n, l) = P_{3p}(r) = \frac{32}{27\sqrt{3}} r^2 (1 - \frac{r}{3}) e^{-\frac{2}{3}r} \quad (V-36a)$$

$$p(n', l') = P_{2s}(r) = 2r e^{-r} (1 - r) \quad (V-36b)$$

(voir COWAN 1981 page 72)

L'élément matriciel à prendre est  $\langle l \| r^1 \| l-1 \rangle = \sqrt{l(2l-1)(2l+1)} \delta = \sqrt{2} \delta$

Les éléments matriciels du dipôle peuvent finalement s'écrire :

$$\langle \alpha | d_q | \beta \rangle = eH_q \quad (V-37)$$

Par ailleurs, les éléments matriciels du champ quasi-statique  $H_0 + ezE$  entraîne que  $q = 0$ .

Nous supposons que nos calculs se font dans les conditions où les différences d'énergie entre les sous-niveaux (entre les triplets du niveau le plus bas et entre les singulets) sont très grandes par rapport à l'énergie d'interaction dû au champ. L'élargissement de l'état bas peut ainsi être négligé, on a :

$$\Phi_{ab} = \Phi_a \quad (V-38)$$

Finalement ,

$$L_1(\omega) = \sum_{\alpha\beta} \frac{-|d_{\alpha\beta}|^2}{l^2 + (\omega - \omega_{\alpha\beta} - d)}, \quad (V-39)$$

$$d_{\alpha\beta} = eH_q \quad (V-40)$$

$$\omega_{\alpha\beta} = \frac{2(\langle i|ez|f \rangle)^2 E^2}{\hbar(E_{0i} - E_{0f})} + \omega_0 \quad (V-40a) \text{ cas quadratique.}$$

$$\omega_{\alpha\beta} = \frac{2\langle i|ez|f \rangle E}{\hbar} \quad (V-40b) \text{ cas linéaire}$$

Les calculs se feront pour  $q=0$

$d$  et  $i$  étant calculables.

comme signalé ci-dessus le profil  $L(\omega)$  est calculé à partir de l'intégrale de  $L_1(\omega)$  sur la distribution de champ  $W(E)$ .

On choisira la distribution des champs de Holsmark dont l'approximation essentielle est l'absence de la prise en compte des interactions mutuelles entre les ions et les perturbateurs. La correction à ce niveau a été faite par HOOPER dans la détermination de la distribution des champs  $E$ .

Pour nos calculs on utilise le distribution de Holsmark(1919) telle que:

$$H(\beta) = \frac{2}{\pi\beta} \int_0^\infty x \sin x \exp[-(\frac{x}{\beta})^{3/2}] dx \quad (V-41)$$

avec  $\beta = \frac{E}{E_0}$ ,  $E_0$  étant le champ normal.

Du fait que les éléments matriciels de  $\Phi_a$  sont fonction de la température et de la

densité, les profils tracés doivent varier en fonction de ces paramètres.

## V-5 Calcul de la largeur et du déplacement de la raie

Ce calcul de la largeur et du déplacement des raies spectrales permet de tracer la raie émise à l'aide de la programmation des relations analytiques, l'application de la théorie

des impacts à l'atome de l'hélium s'achève ainsi. Le calcul de la largeur à mi-hauteur se fait alors directement.

Rappelons que les éléments matriciels de l'opérateur  $\Phi_a$  entre les sous états  $\alpha$  et  $\alpha'$  de l'état supérieur ( $a$ ) de l'atome émetteur s'écrivent :

$$\langle \alpha | \Phi_a | \alpha' \rangle = -\frac{4\pi n}{3} \left( \frac{\hbar}{m} \right)^2 \iint \frac{d\rho f(v) dv}{\rho v} \sum_{n,M} (-1)^M \langle \alpha | d_M | n \rangle \times \langle n | d_{-M} | \alpha \rangle \times [A(\omega_{an} \frac{\rho}{v}, \omega_{a'n} \frac{\rho}{v}) + iB(\omega_{an} \frac{\rho}{v}, \omega_{a'n} \frac{\rho}{v})] \quad (V-42)$$

Si  $\alpha = \alpha'$ ,  $n$  la densité

$$\langle \alpha | \Phi_a | \alpha \rangle = -\frac{4\pi n}{3} \left( \frac{\hbar}{m} \right)^2 \iint \frac{d\rho f(v) dv}{\rho v} \sum_{n,M} (-1)^M \langle \alpha | d_M | n \rangle \langle n | d_M | \alpha \rangle \times [A(\omega_{an} \frac{\rho}{v}, \omega_{a'n} \frac{\rho}{v}) + iB(\omega_{an} \frac{\rho}{v}, \omega_{a'n} \frac{\rho}{v})] \quad (V-43)$$

En supposant que la distribution des vitesses est Maxwellienne (on suppose que le plasma est en équilibre thermodynamique) pour le calcul de l'intégrale sur les vitesses.

$$\int \frac{f(v)}{v} dv = \int_0^\infty \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} 4\pi^2 v^2 dv = 4\pi \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \int_0^\infty e^{-\frac{mv^2}{2kT}} v dv \quad (V-44)$$

Tenant compte de la relation suivante

$$\int_0^\infty \exp(-av^2) v^r dv = \frac{1}{2} a^{-(r+1)/2} \left( \frac{r-1}{2} \right)! \quad (V-45)$$

Dans notre cas,  $r$  est impair ( $r=1$ ), on obtient finalement :

$$\int_0^\infty \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right) v dv = \frac{kT}{m} \quad , \quad \int_0^\infty \frac{f(v)}{v} dv = \left( \frac{2m}{\pi kT} \right)^{1/2} \quad (V-46)$$

Par ailleurs, le calcul de l'intégrale par rapport au paramètre d'impact  $\rho$  suppose la détermination des paramètres d'impacts maximum et minimum ( $\rho_{max}$  et  $\rho_{min}$ ).

Ces paramètres varient selon les auteurs, c'est ainsi que pour Shamey (1969) :

$$\rho_{max} = 0.68 \rho_d \text{ où } \rho_d \text{ est la longueur de Debye}$$

Griem, Baranger, Kolb et Oertel

$$\rho_{max} = 1.12 \rho_d$$

Chapel et al

$$\rho_{max} = 1.65 \rho_d$$

On note que : la longueur de Debye peut s'exprimer par :

$$\rho_d = \left( \frac{kT}{4\pi e^2 N} \right)^{1/2}$$

$N$  est la densité de particule,  $T$  la température du milieu la charge de l'électron et  $k$  la constante de Boltzmann.



L'intégrale sur les fonctions  $A$  et  $B$  se fait alors par :

$$\int_{\rho_{\min}}^{\rho_{\max}} (A + iB) \frac{d\rho}{\rho} = [a(\rho_{\min}) - a(\rho_{\max}) + i(b(\rho_{\min}) - b(\rho_{\max}))] \quad (V-47)$$

L'élément matriciel se présente sous forme de deux parties l'une réelle et l'autre imaginaire.

$$X = \text{Re}\{\langle \alpha | \Phi_a | \alpha \rangle\}, Y = \text{Im}\{\langle \alpha | \Phi_a | \alpha \rangle\} \quad (V-48)$$

$$\text{Posons } S_{n,M} = \sum_{n,M} (-1)^M |\langle \alpha | d_M | n \rangle|^2$$

La largeur est donnée par l'expression :

$$l = -X = -\text{Re}\{\langle \alpha | \Phi_a | \alpha \rangle\} = \frac{4\pi n}{3} (\hbar/m)^2 \left(\frac{2m}{\pi kT}\right)^{1/2} S_{n,M} [a(\rho_{\min}) - a(\rho_{\max})] \quad (V-49)$$

Le déplacement par :

$$Y = \text{Im}\{\langle \alpha | \Phi_a | \alpha \rangle\} = \frac{4\pi n}{3} (\hbar/m)^2 \left(\frac{2m}{\pi kT}\right)^{1/2} S_{n,M} [b(\rho_{\min}) - b(\rho_{\max})] \quad (V-50)$$

Nous remarquons donc que la largeur et le déplacement de la raie sont des fonctions de deux paramètres qui sont la température et la densité de particule du milieu. La connaissance du paramètre  $r = \frac{\omega_1}{\omega_2}$  est donc insuffisante pour la détermination de la largeur et du déplacement.

Le calcul numérique de ces fonctions requiert la précision des conditions dans lesquelles le système se trouve. Par exemple : on peut se mettre dans le cas des valeurs  $\rho$  très petits et en se référant aux calculs déjà faits sur les fonctions "largeur"( $a$ ) et fonction "déplacement"( $b$ ) on a :

$$a(\rho_{\max}) = 0 \text{ et } b(\rho_{\max}) = 0$$

l'expression de la largeur devient :

$$l = \frac{4\pi n}{3} (\hbar/m)^2 \left(\frac{2m}{\pi kT}\right)^{1/2} S_{n,M} \cdot a(\rho_{\min}) \quad (V-51)$$

Dans ce cas particulier, le déplacement de la raie est nul. La connaissance de la densité et de la température du milieu nous permet d'avoir le profil de la raie émise à partir des expressions trouvées antérieurement.

On obtient une forme plus explicite du profil au premier ordre du développement en série de  $L(\omega)$ .

$$L(\omega) = \sum_{\alpha\beta} \text{Re}(L_1(\omega)) \quad (V-52)$$

avec

$$L_1(\omega) = \frac{|d_{\alpha\beta}|^2}{i(\omega - \omega_{\alpha\beta}) - \langle \alpha | \Phi_a | \alpha \rangle} \quad (\text{V-53})$$

La partie réelle de  $L(\omega)$  qui représente le profil de la raie s'écrit :

$$\text{Re}(L_1(\omega)) = \frac{-l|d_{\alpha\beta}|^2}{l^2 + (\omega - \omega_{\alpha\beta} - d)^2} \quad (\text{V-54})$$

$H_q$  représente les éléments matriciels de l'opérateur moment dipolaire de l'atome émetteur le profil a pour expression :

$$L(\omega) = \frac{1}{\pi} \sum_{\alpha\beta} \frac{-l|d_{\alpha\beta}|^2}{l^2 + (\omega - \omega_{\alpha\beta} - d)^2} |d_{\alpha\beta}|^2 = \frac{1}{\pi} \sum_{\alpha\beta} \frac{-l|d_{\alpha\beta}|^4}{l^2 + (\omega - \omega_{\alpha\beta} - d)^2}$$

$$= \frac{e^4}{\pi} \sum_{\alpha\beta} \frac{-l|H_q|^4}{l^2 + (\omega - \omega_{\alpha\beta} - d)^2} \quad (\text{V-55})$$

$$\text{avec } \omega_{\alpha\beta} = \omega_0 + \frac{2(\langle i|ez|f \rangle)^2 E^2}{\hbar(E_{0f} - E_{0i})} = \omega_0 + \frac{2e^2 H_q^2 E^2}{\hbar(E_{0f} - E_{0i})} \quad (\text{V-56})$$

$$L(\omega) = \frac{e^4}{\pi} \sum_{\alpha\beta} \frac{-l|H_q|^4}{l^2 + (\omega - \omega_0 - \frac{2e^2 H_q^2 E^2}{\hbar(E_{0f} - E_{0i})} - d)^2} \quad (\text{V-57})$$

Le profil ainsi déterminé exprime la dépendance à la température du milieu, à la densité de particule mais aussi au champ des ions  $E$  qui prend en compte l'effet Stärk (on est dans le cas de l'effet Stärk quadratique)

## V-6 Conclusion

L'expression analytique du profil de la raie déterminée à partir de la théorie des impacts permet de tracer la raie de l'atome d'hélium neutre HeI considéré comme atome émetteur. Ceci est possible si la densité de particules, la température du plasma, les coefficients qui déterminent les coupures ( $a(z_{\min}), a(z_{\max}), b(z_{\min}), b(z_{\max})$ ) sont connus. Les spectres correspondant à la raie 3888.6Å sont données en fonction de ces différents paramètres et permettent un calcul direct de la largeur de la raie. Nous nous plaçons dans le cas particulier où le déplacement de la raie est négligeable et où le champ  $E$  (quasi-statique) le plus probable est obtenu à partir de la distribution de HOLTSMARK.

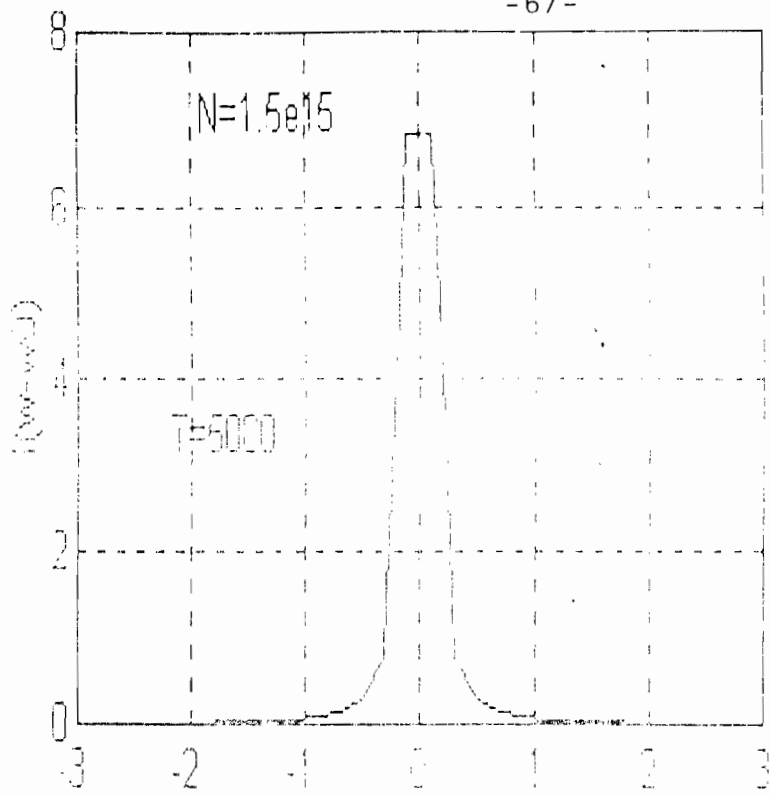


Figure N°1 . profil de la raie  $3888.6\text{\AA}^0$  de HeI en fonction de  $\omega-\omega_0$  .  $\Delta\lambda=0.033\text{\AA}^0$   
Pour une température  $T=5000\text{K}$  et une densité de particules  $N=1.5 \cdot 10^{15}\text{cm}^{-3}$

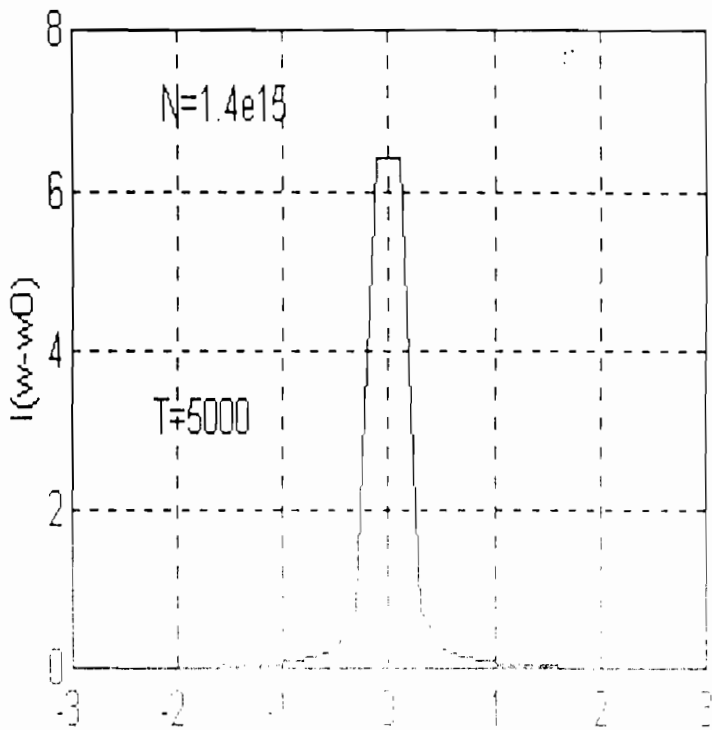


Figure N°2. profil de la raie  $3888.6\text{\AA}^0$  de HeI en fonction de  $\omega-\omega_0$  .  $\Delta\lambda=0.033\text{\AA}^0$   
Pour une température  $T=5000\text{K}$  et une densité de particules  $N=1.5 \cdot 10^{15}\text{cm}^{-3}$

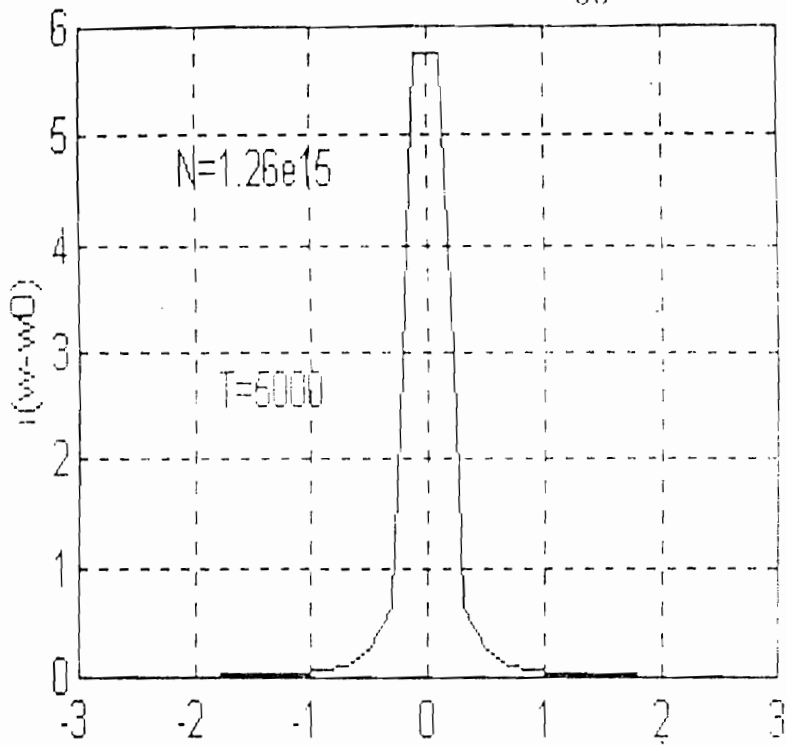


Figure N<sup>o</sup>3 . profil de la raie 3888.6Å<sup>o</sup> de HeI en fonction de  $\omega-\omega_0$  .  $\Delta\lambda=0.033\text{\AA}^o$   
Pour une température  $T=5000\text{K}$  et une densité de particules  $N=1.26.10^{15}\text{cm}^{-3}$

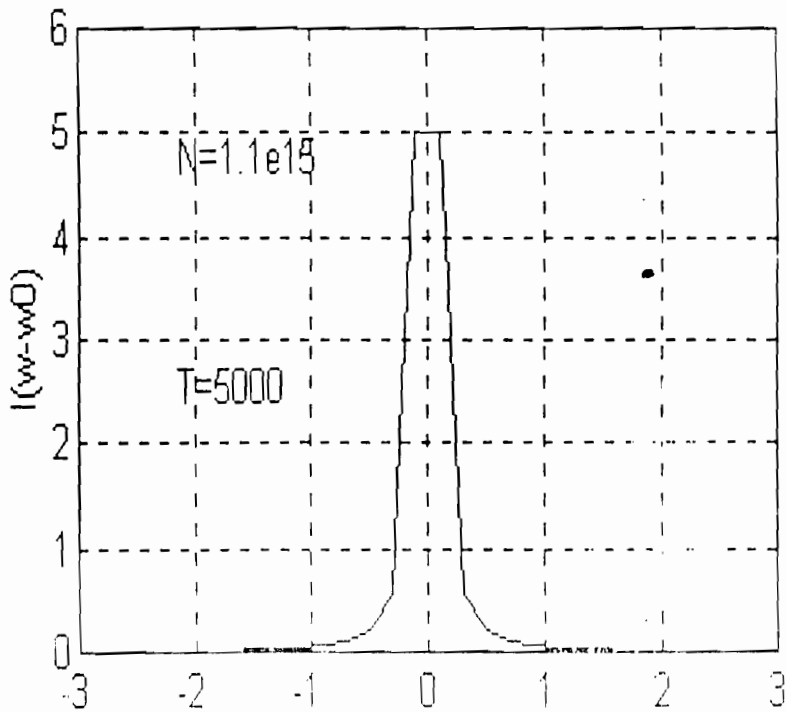


Figure N<sup>o</sup>4 .profil de la raie 3888.6Å<sup>o</sup> de HeI en fonction de  $\omega-\omega_0$  .  $\Delta\lambda=0.033\text{\AA}^o$   
pour une température  $T=5000\text{K}$  et une densité de particules  $N=1.1.10^{15}\text{cm}^{-3}$

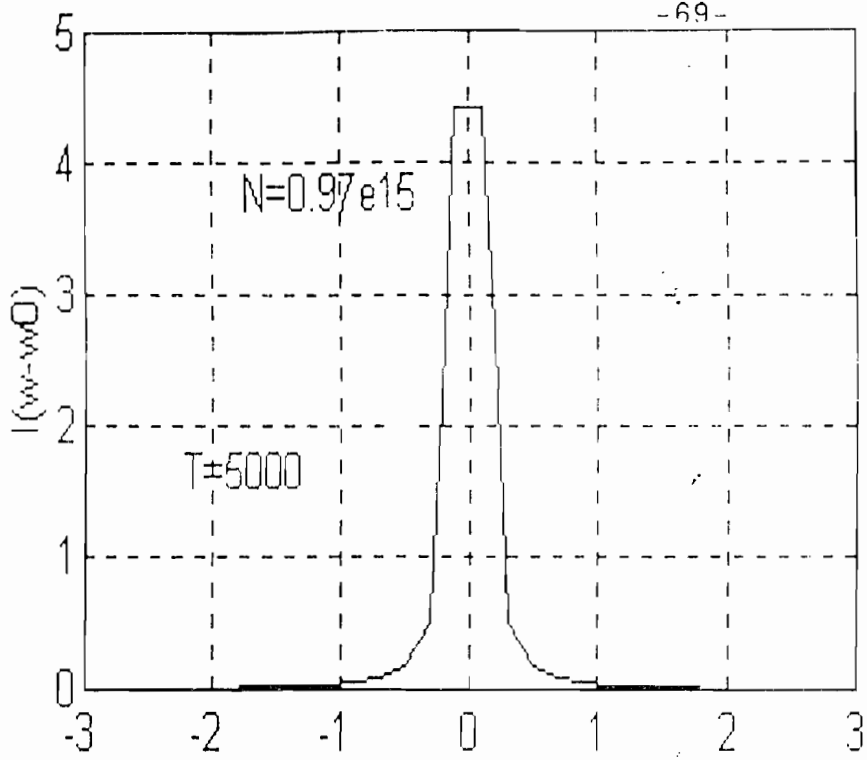


Figure N° 5. Profil de la raie  $3888.6\text{\AA}^0$  de HeI en fonction de  $\omega-\omega_0$  .  $\Delta\lambda= 0.033\text{\AA}^0$  pour une température  $T=5000\text{K}$  et une densité de particules  $N=0.97.10^{15}\text{ cm}^{-3}$

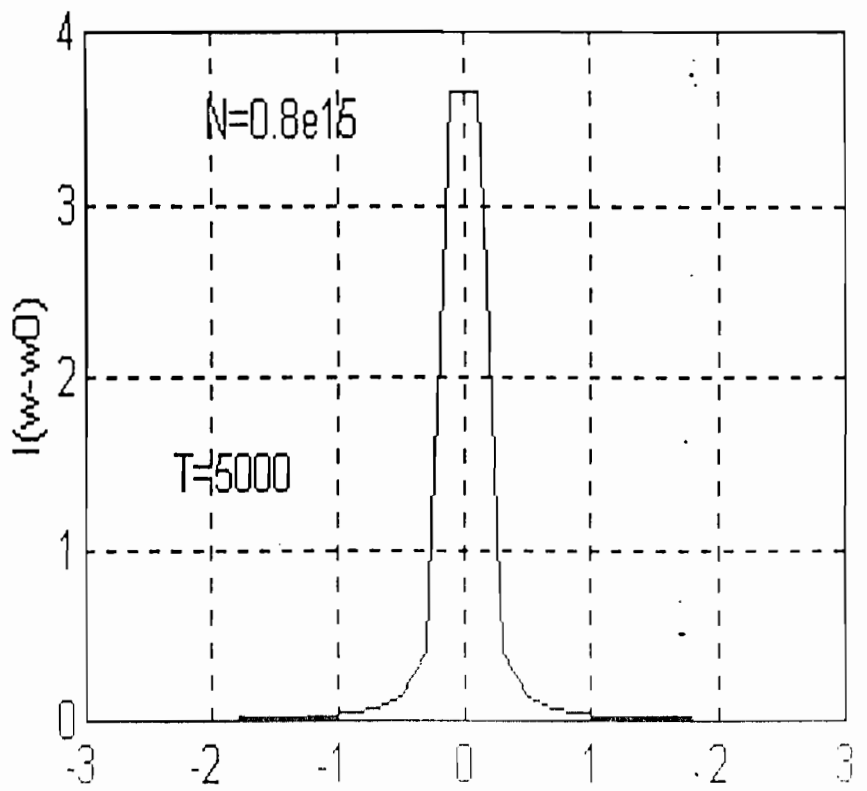


Figure N° 6. Profil de la raie  $3888.6\text{\AA}^0$  de HeI en fonction de  $\omega-\omega_0$  .  $\Delta\lambda= 0.033\text{\AA}^0$  pour une température  $T=5000\text{K}$  et une densité de particules  $N=0.8.10^{15}\text{ cm}^{-3}$

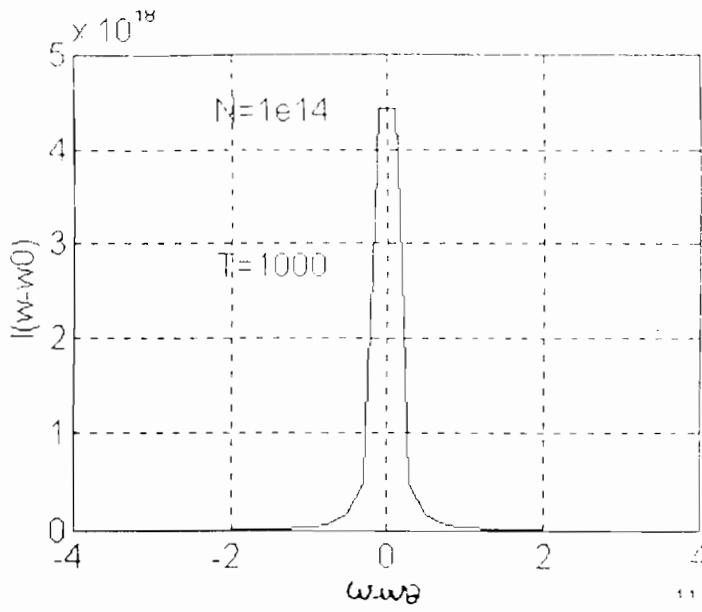


Figure N° 7 .Profil de la raie 3888.6 en fonction de  $\omega-\omega_0$  pour  $T=1000$ K et pour une densité fixée à  $N=10^{14} \text{ cm}^{-3}$ .  
 $\Delta\lambda=0.032\text{\AA}$

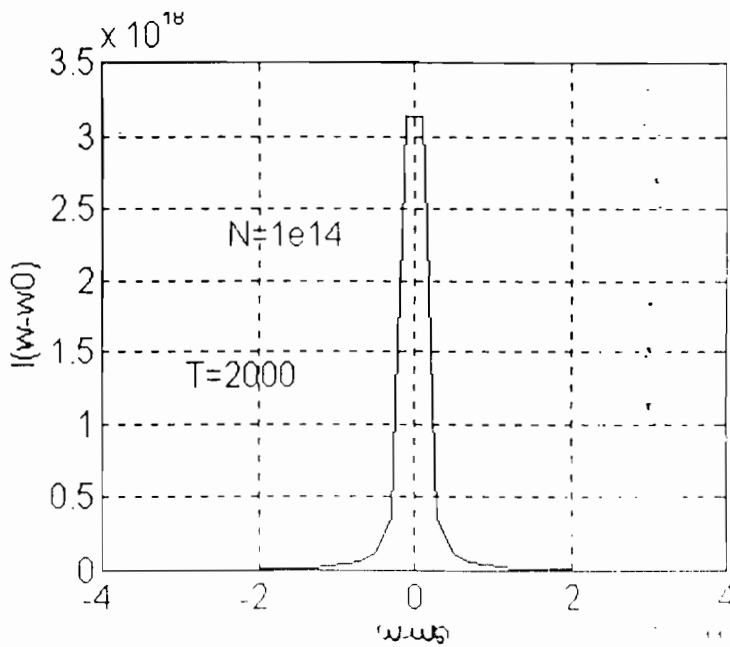


Figure N° 8 .Profil de la raie 3888.6 en fonction de  $\omega-\omega_0$  pour  $T=2000$ K et pour une densité fixée à  $N=10^{14} \text{ cm}^{-3}$ .  
 $\Delta\lambda=0.034\text{\AA}$

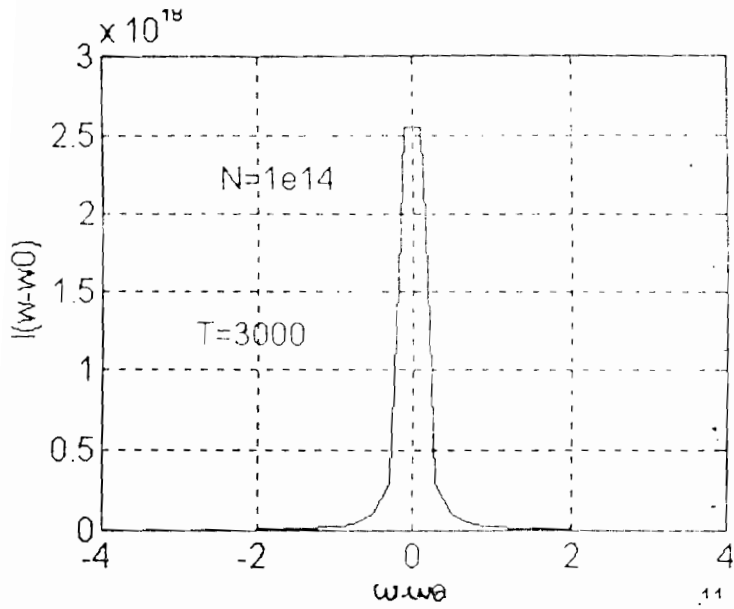


Figure N° 9 . Profil de la raie 3888.6 en fonction de  $\omega-\omega_0$  pour  $T=3000K$  et pour une densité fixée à  $N=10^{14} \text{ cm}^{-3}$ .  $\Delta\lambda = 0.032\text{\AA}$

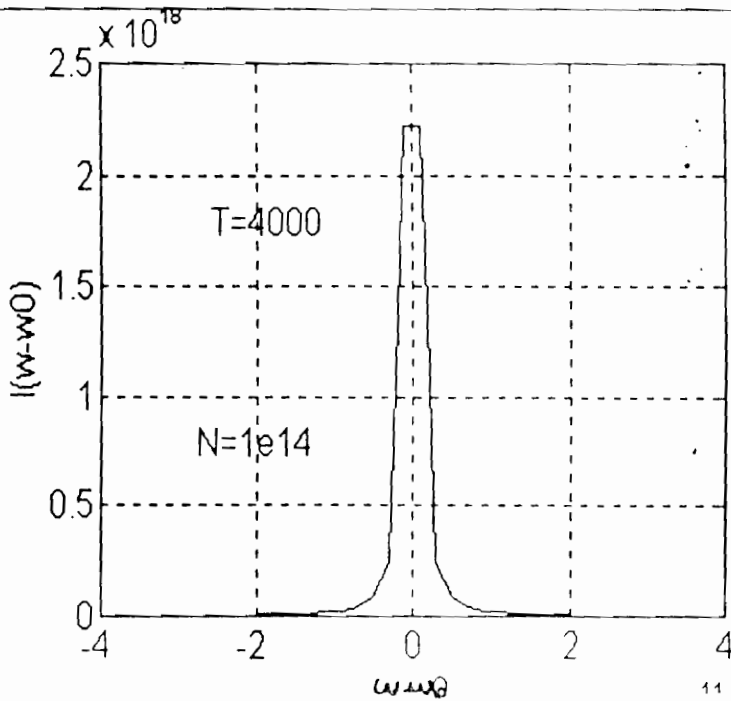


Figure N° 10 . Profil de la raie 3888.6 en fonction de  $\omega-\omega_0$  pour  $T=4000K$  et pour une densité fixée à  $N=10^{14} \text{ cm}^{-3}$ .  $\Delta\lambda = 0.032\text{\AA}$

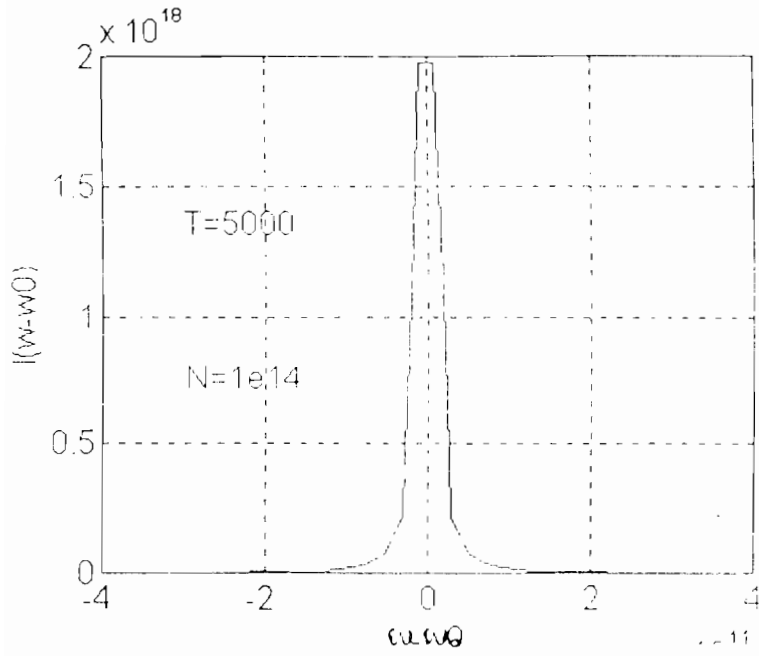


Figure N° 11 .Profil de la raie 3888.6 en fonction de  $\omega-\omega_0$  pour  $T=5000K$  et pour une densité fixée à  $N=10^{14} \text{ cm}^{-3}$ .  
 $\Delta\lambda = 0.030 \text{ \AA}$

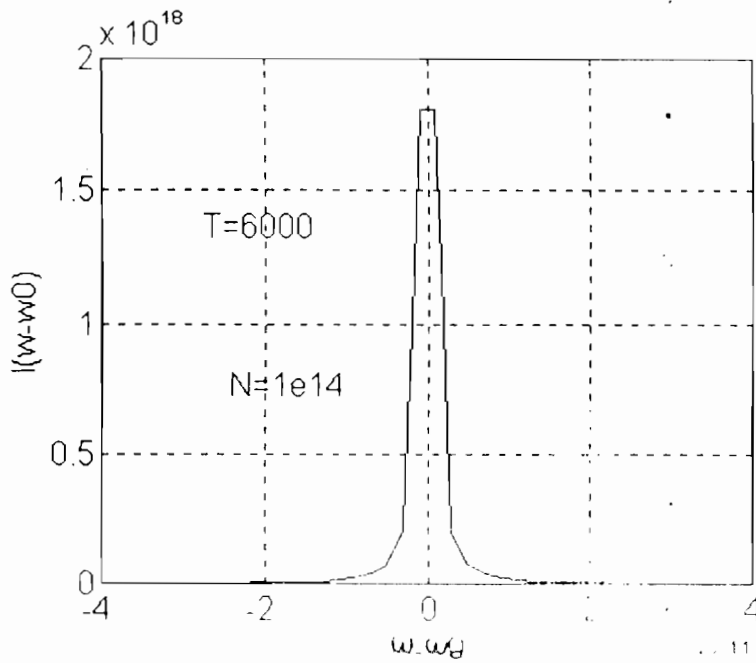


Figure N° 12 .Profil de la raie 3888.6 en fonction de  $\omega-\omega_0$  pour  $T=6000K$  et pour une densité fixée à  $N=10^{14} \text{ cm}^{-3}$ .  
 $\Delta\lambda = 0.030 \text{ \AA}$



VARIATION DES COUPEURES

$a(z_{\min}) = 6, 5, 4$ .

$a(z_{\max})$  est fixé à 3.  $b(z_{\min})$  et  $b(z_{\max})$  sont fixés

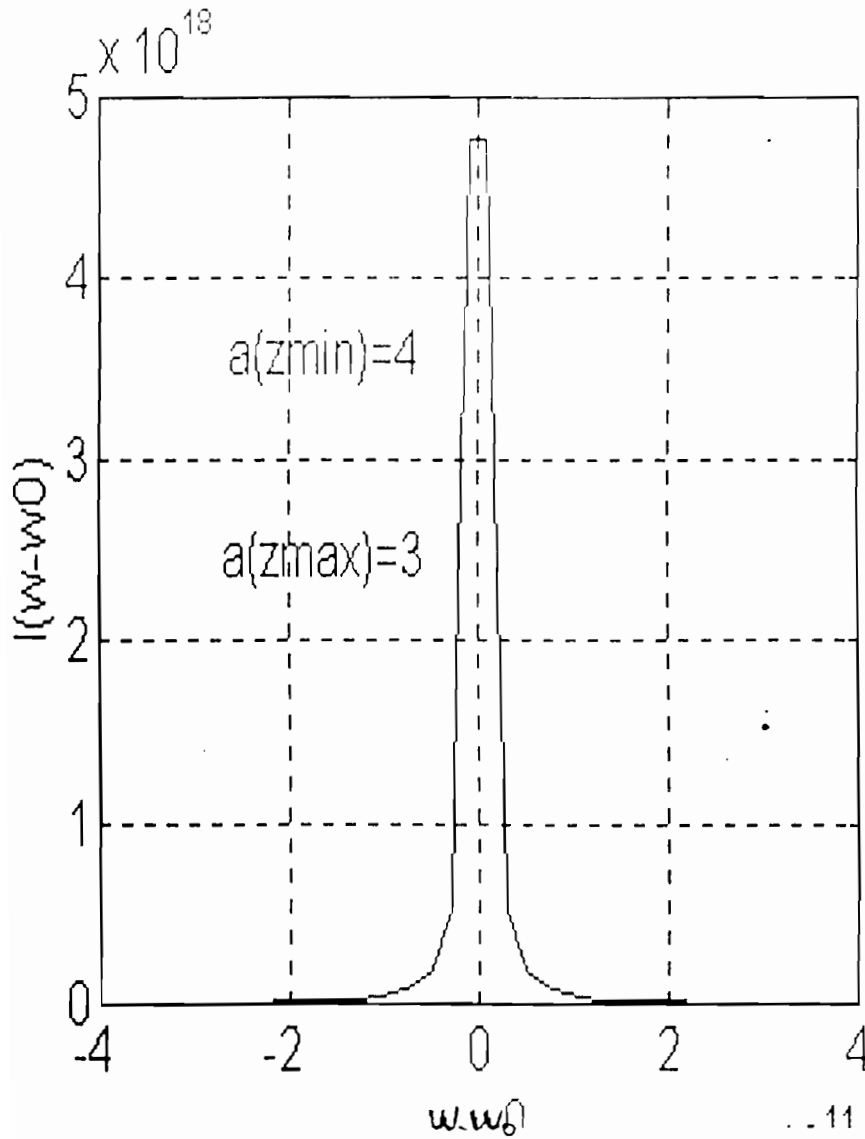


Figure N° 1 raie  $3888.6\text{\AA}$  pour une température  $T$  fixée à 5000, une densité  $N = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  et pour une coupure correspondant  $a(z_{\min}) = 4$  et  $a(z_{\max}) = 3$ .  
 $\Delta\lambda = 0.033\text{\AA}$

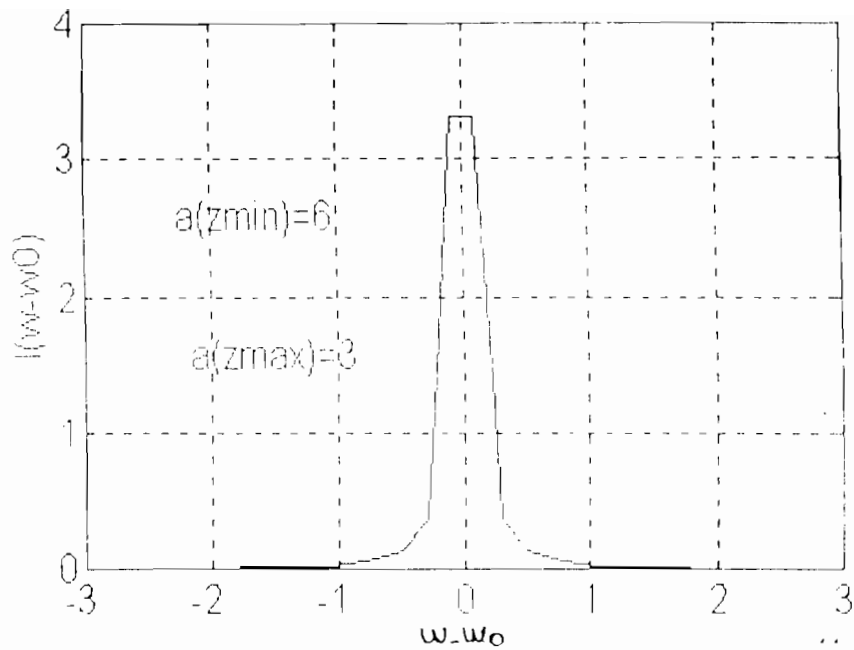
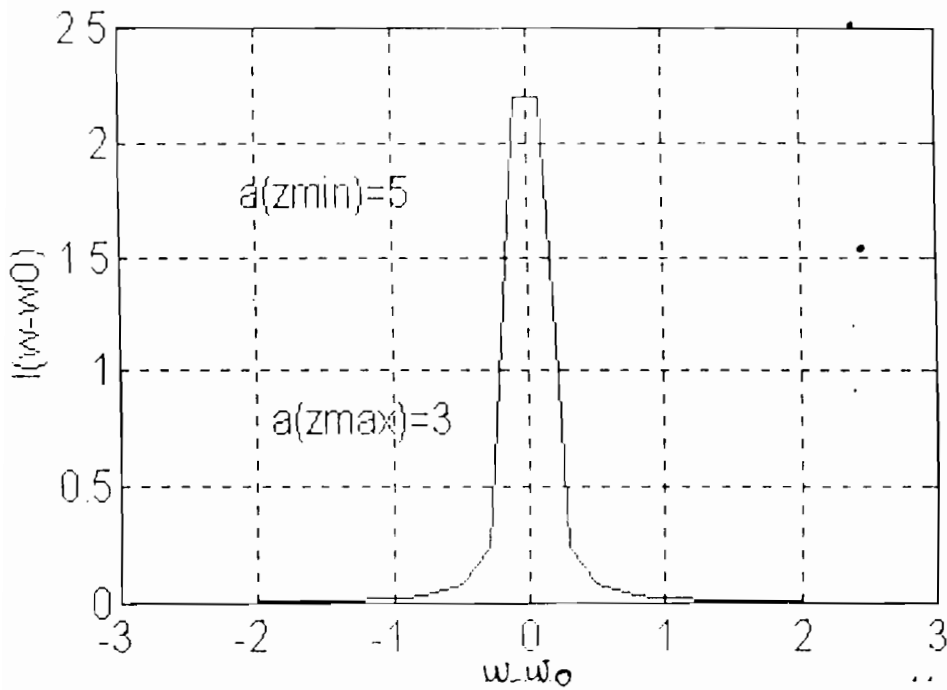
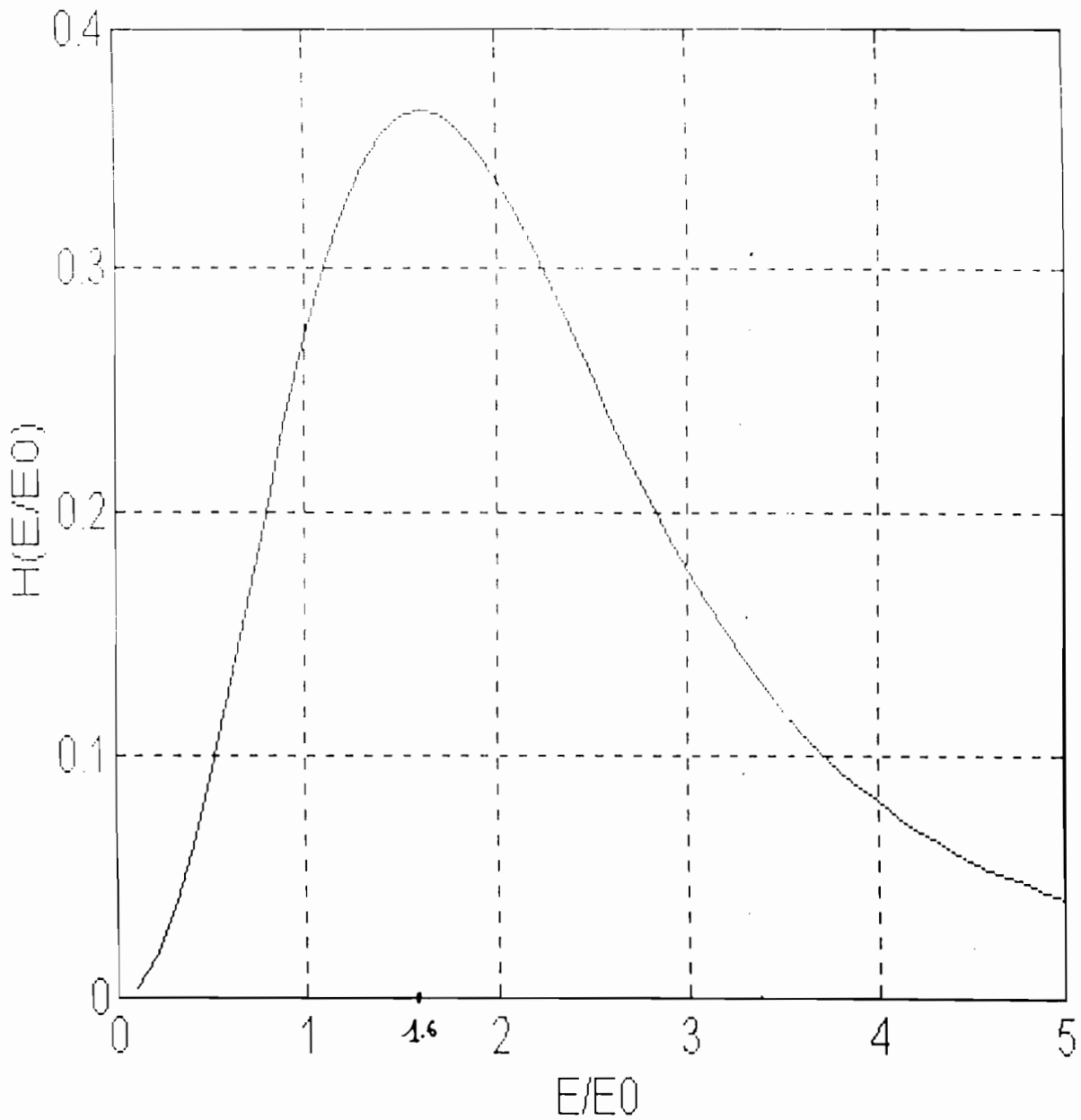


Figure N° 2 Raie  $3888.6\text{\AA}$  pour une température  $T$  fixée à 5000, une densité  $N = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  et pour une coupure correspondant à  $a(z_{\min}) = 6$  et  $a(z_{\max}) = 3$ .  
 $\Delta\lambda = 0.034\text{\AA}$



Raie  $3888.6\text{\AA}$  pour une température  $T = 5000\text{K}$ , une densité  $N = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$   
 Pour une coupure correspondant à  $a(z_{\min}) = 5$  et  $a(z_{\max}) = 3$ .  
 $\Delta\lambda = 0.035\text{\AA}$   
 Figure N° 3



Tracé de la Fonction de distribution des champs de HOLTSMARK.  $H(\beta)$

La variable est  $\beta = E / E_0$ , c'est un rapport entre le champ  $E$  des ions et du champ normal  $E_0$ .

$E_0 = 2.6031ZeN^{2/3}$  où  $N$  est la densité des ions,  $Ze$  la charge des particules perturbatrices.

Le maximum de la fonction est obtenu pour  $\beta = 1.607$ , donc pour  $E = 1.607 \times 2.6031ZeN^{2/3}$

$\beta$	$H(\beta)$	$\beta$	$H(\beta)$	$\beta$	$H(\beta)$
0	0	2.4	0.272	6.8	0.0165
0.1	0.042	2.5	0.2382	7	0.0152
0.2	0.0157	2.8	0.2056	7.2	0.0140
0.3	0.0366	3	0.1761	7.4	0.0129
0.4	0.0631	3.2	0.1502	7.6	0.0120
0.5	0.0946	3.4	0.1281	7.8	0.0111
0.6	0.1296	3.6	0.1094	8	0.0103
0.7	0.1664	3.8	0.0938	9	0.0074
0.8	0.2032	4	0.0807	10	0.0056
0.9	0.2386	4.2	0.0698	11	0.0043
1	0.2712	4.4	0.0607	12	0.0034
1.1	0.2999	4.6	0.0530	13	0.0025
1.2	0.3238	4.8	0.0466	14	0.0022
1.3	0.3425	5	0.0412	15	0.0019
1.4	0.3557	5.2	0.0366	17	0.0013
1.5	0.3636	5.4	0.0326	20	$8.5165 \cdot 10^{-4}$
1.6	0.3663	5.6	0.0293	24	$1.2834 \cdot 10^{-4}$
1.7	0.3645	5.8	0.0263	28	-0.0018
1.8	0.3585	6	0.0238	33	-0.0079
1.9	0.3491	6.2	0.0216	38	-0.0194
2	0.3369	6.4	0.0197	43	-0.0357
2.2	0.3068	6.6	0.018	48	-0.0552767

Tableau de valeurs de la fonction de distribution de HOLLSTEINER selon les valeurs de  $\beta$ ,  
 étant le rapport de champ  $E/E_0$ .  $E_0$  est le champ normal

## Commentaires et discussions sur la raie 3888.6Å de l'Hélium neutre HeI

Pour cette raie, la largeur est calculée pour une densité de particules variant entre  $1.5 \cdot 10^{15} \text{cm}^{-3}$  et  $1.5 \cdot 10^{15} \text{cm}^{-3}$  et pour une température fixée à  $5000^\circ\text{C}$ , on trouve une variation de longueur d'onde  $\Delta\lambda = 0.033\text{Å}$ .

L'observation que l'on peut faire est que pour cette gamme de densité la raie ne varie pratiquement pas, on peut cependant dire qu'elle est faiblement élargie si l'on se réfère à la longueur d'onde nominale de l'hélium neutre  $\lambda = 3888.6\text{Å}$ .

D'après la littérature cette raie est en général très faiblement élargie surtout pour des densités de particules assez faibles.

Par ailleurs, cette même raie a été tracée pour une densité fixée à  $10^{14} \text{cm}^{-3}$  mais pour une température variant entre  $1000\text{K}$  et  $6000\text{K}$  on obtient encore une variation de la largeur de raie très faible. Le calcul donne  $0.034 \text{Å}$  pour les températures  $T = 1000\text{K}$  et  $T = 2000\text{K}$ ,  $0.032 \text{Å}$  pour les températures  $T = 3000\text{K}$  et  $T = 4000\text{K}$  enfin pour les températures  $T = 5000\text{K}$  et  $T = 6000\text{K}$  on a une largeur de raie égale à  $0.03\text{Å}$ . On a donc une diminution de la largeur de la raie au fur et à mesure que la température augmente ceci peut s'interpréter par le fait pour des températures élevées les particules du système deviennent de plus en plus en agitation et les hypothèses posées sur les ions deviennent de moins en moins respectées, les ions ne sont plus quasi-statiques et l'élargissement Stark est moins important. C'est un autre phénomène dans ce cas qui devient important, c'est l'élargissement Doppler.

Le tracé de la raie 3888.6 en fonction des valeurs des fonctions  $a(z, rz)$  ;  $a(z_{max})$  donne des variations de largeur du même ordre que celles observées pour la variation de température, c'est ainsi qu'on a :

$\Delta\lambda = 0.034\text{Å}$  pour  $a(z_{max}) = 6$ ,  $\Delta\lambda = 0.035\text{Å}$  pour  $a(z_{max}) = 5$  et enfin  $\Delta\lambda = 0.033\text{Å}$  pour  $a(z_{max}) = 4$ .

On constate que ces largeurs de raie varie en fonction de ces coefficients de la même manière qu'avec la température, ce qui prouve l'importance des coupures faites en général dans l'étude de l'élargissement des raies dans les plasmas.

Les calculs sur les déplacements des raies n'ont pas été fait car nous supposons comme prévu qu'on se limite à la zone des  $z$  faibles correspondant à des déplacements négligeables.

Les résultats de Diatta (thèse d'état 1974) obtenus sur les plasmas d'arc pour une variation de la densité de  $1.5 \cdot 10^{15} \text{cm}^{-3}$  à  $0.8 \cdot 10^{15}$  donnent pour la raie 3888.6 de l'Hélium une largeur de raie variant entre  $0.15\text{Å}$  et  $0.148$  donc pratiquement sensible légèrement à la variation de la densité de particules. Cependant, les écarts sont importants par rapport à nos calculs et peuvent s'expliquer par plusieurs raisons, car notre objectif n'est pas d'étudier particulièrement cette raie nous citerons quelques unes de ces raisons :

Le profil utilisé dans nos calculs n'est pas intégré par rapport à la distribution des champs ioniques de Holtsmark qui du reste est une approximation, c'est la valeur la plus probable du champ qui a été utilisée dans le calcul de cette raie.

Pour nos calculs  $a(z_{max}) = a(0.1) = 2.46$  et  $a(10^{-5}) = 6.6$  ;  $b(z_{min}) = 1.4544$   
 $b(z_{max}) = 1.4206$ .

Les résultats expérimentaux ont donné des profils intégrés sur une distribution radiale de la densité électronique et une distribution radiale de température ce qui ne correspond pas au type de variation de température et densité utilisée pour nos calculs

théoriques.

Par ailleurs le calcul de la raie dans le cas des densités faibles incluse à travers un paramètre  $a$  définie en termes de coefficient  $Ca$ , a varie comme  $n^{1/4}$  et le profil total aux faibles densités est décrit la largeur et le déplacement totale donnée par (GRIEM 1974) :

$$W_{total} = [1 + 1.75a(1 - 0.75r)]w \text{ largeur total}$$

$$D_{total} = [d/w + 2a(1 - 0.75r)]w \text{ déplacement total}$$

Où  $r$  est le rapport entre la distance moyenne interparticulaire et le rayon de Debye.

On peut dire en dernière analyse sur la comparaison théorie - expérience, que la raie 3888.6Å aux faibles densités électroniques obtenue expérimentalement est en réalité un produit de convolution du profil Döppler et du profil Lorentzien dû à l'élargissement par pression. C'est donc un profil de Voigt. En conséquence, une comparaison de la largeur expérimentale et théorique ne peut être faite avec rigueur que dans les conditions suivantes :

- calculer le profil de Voigt et le comparer au profil expérimental.
- Choisir un domaine de densités électroniques élevées  $N_e > 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  pour s'assurer de la possibilité de négliger la contribution de l'effet Doppler.

CHAPITRE VI  
REVUE DES THEORIES D'ELARGISSEMENT  
DES RAIES SPECTRALES

*VI.1 Approximations des impacts pour les électrons et l'approximation quasi-statique pour les ions (GRIEM 1974)*

*VI.2 Formalisme de SAHAL-BRECHOT*

*VI.3 Correction à la dynamique des ions (COOPER, BARNARD, SMITH 1974)*

*VI.4 Théorie unifiée de l'élargissement Stark des raies spectrales  
GREENE, COOPER et SMITH [1974]*

*VI.4.1 Equation de la théorie unifiée*

*VI.4.2 Approximations simplificatrices*

*VI.5 Conclusion*

## VI- Revue des théories d'élargissement des raies spectrales

Plusieurs formalismes ont été adoptés pour la résolution du problème de l'élargissement des raies spectrales émises par les plasmas. Ainsi, la théorie des impacts fut appliquée pour l'élargissement dû aux ions (GRIEM 1974). Le formalisme de Sahal-Brechot (1969) applique la théorie des impacts à la fois aux ions et aux électrons. Ces 2 formalismes sont souvent utilisés pour le traitement des raies isolées. Pour les raies à composantes interdites, le formalisme sans correction à la dynamique des ions de Griem et al (1962), Griem (1969), Banger (1958 b), Barnard, Cooper et Shamey (1969) peut être utilisé. Le formalisme avec correction dynamique des ions est fait par Barnard, Cooper et Smith (1974).

Il existe cependant d'autres théories telles que la théorie unifiée mais aussi celle du microchamp modèle (Frish et Brissaud 1974).

Nous donnerons une présentation résumée des différents formalismes cités ci-dessus.

### VI-1 Approximation des impacts pour les électrons et approximation quasi-statique pour les ions

(Griem 1974).

Dans ce cadre, le profil électronique s'écrit :

$$L_e(\omega) = -\frac{\hbar}{\pi} \text{Re Trace} \{ \Delta_d [i\omega - \frac{i}{\hbar} (H_i(0) - H_j(0)) + \Phi]^{-1} \} \quad (\text{VI-1})$$

ù  $\Phi$  est l'opérateur de collision, il est parfois remplacé par l'opérateur,  $\Delta_d$  est opérateur dipolaire qui agit dans " l'espace raie " dans lequel la fonction d'onde de l'un des états supérieurs de la raie est associé dans un produit direct avec le complexe conjugué d'une fonction d'onde de l'état bas.  $\Delta_d$  est telle que (Baranger 1958) :

$$\langle c | d | \beta \rangle, \langle \alpha | d | a \rangle = \langle \langle c | \beta^+ | \Delta_d | a \alpha^+ \rangle \rangle \quad (\text{VI-2})$$

$\Delta_d$  agit dans l'espace des doublets de Baranger. La prise en compte des ions se fait en moyennant sûr la distribution du champ ionique  $E$ . Le profil s'écrit alors :

$$L(\omega) = -\frac{\hbar}{\pi} \int dFW(E), \text{Re Trace} \{ \Delta_d [i\omega - \frac{i}{\hbar} (H_i(E) - H_j(E)) + \Phi]^{-1} \} \quad (\text{VI-3})$$

### VI-2 Formalisme de Sahal-Bréchot

Sahal-Bréchot montre que la largeur  $\omega$  et le déplacement  $\Lambda$  de la raie s'obtiennent par les formules suivantes :



$$\omega = \text{Re} N \int v f(v) \int 2\pi b db [1 - S_{ii} S_{jj}^*] \quad (\text{VI-4})$$

$$\Delta = \text{Im} N \int v f(v) \int 2\pi b db [1 - S_{ii} S_{jj}^*] \quad (\text{VI-5})$$

Re représente la partie réelle et Im la partie imaginaire.  $N$  la densité des perturbateurs,  $f(v)$  est la fonction de distribution des vitesses de Maxwell,  $b$  le paramètre d'impact et  $S$  l'opérateur diffusion  $S_{ii}$  est l'opérateur diffusion pour les états supérieurs  $i$  et  $S_{jj}$  l'opérateur diffusion pour les états inférieurs  $j$ .

### VI-3 Correction à la dynamique des ions (Barnard, Cooper et Smith 1974)

C'est une méthode d'inclusion de la dynamique des ions dû à Cooper, Smith et Chapell (1974) qui est utilisé. Cette méthode est par ailleurs utilisée par ces autres dans le cadre de la théorie unifiée. Le profil résultant est un produit de convolution entre le profil dû aux ions et le profil dû aux électrons -

Le profil dû aux électrons s'écrit :

$$L_e(\omega) = \frac{\omega_e}{\pi} \cdot \frac{1}{(\omega - \Delta_e)^2 + \omega_e} \quad (\text{VI-6})$$

Le profil ionique s'écrit :

$$L_i(\omega) = -\frac{1}{\pi} \left| \langle f | \vec{d} | i \rangle \right|^2 \text{Im} \langle f | [\Delta\omega_{op} - \mathcal{L}(\Delta\omega_{op})]^{-1} | f \rangle \quad (\text{VI-7})$$

$|i\rangle$  et  $|f\rangle$  sont les états initiaux et finals.

$$\Delta\omega_{op} = \omega - H_0 + \omega_0 \quad (\text{VI-8})$$

$$\omega_0 = \frac{E_0}{\hbar}, \quad E_0 \text{ est l'énergie du niveau } (i)$$

Le profil final est donc :

$$L(\Delta\omega_{op}) = iN\Delta\omega_{op} \int_0^{\infty} \exp[-i\Delta\omega_{op}t] \langle U_i(t) - 1 \rangle_{av} \Delta\omega_{op} dt \quad (\text{VI-9})$$

$\langle \dots \rangle_{av}$  est une moyenne sur les paramètres de collision

$$\langle f|U_i(t)|f\rangle = e^{i\omega_f t} \langle f|T_i(\theta)|f\rangle, \quad \omega_f = \frac{E_f}{\hbar}, \quad E_f \text{ est l'énergie du niveau } f.$$

Bernard, Cooper, Smith (1974) indiquent cependant que cette théorie n'est valable que pour de fortes densités, la raie interdite et la permise se recouvrant très fortement.

## VI-4 Théorie unifiée de l'élargissement par effet Stark des raies spectrales.

### GREENE , COOPER et SMITH (1972)

Le formalisme de la théorie unifiée est une extension de la théorie unifiée de la trajectoire classique de SMITH et AL (1969) qui permet d'inclure les effets chronologiques dans le calcul du développement de l'opérateur évolution.

En outre, les trajectoires classiques hyperboliques sont prises en compte. La théorie est valide pour les ions hydrogénoïdes mais aussi pour les trajectoires classiques rectilignes (par exemple l'atome d'hydrogène neutre). Elle permet le calcul des profils Stark complets à partir de l'élargissement des impacts du centre de la raie jusqu'aux ailes quasi-statiques Vidal et AL (1970) ont fait des calculs unifiés à l'aide des techniques de LISITA et SHOLIN (1972) pour plusieurs raies de l'atome d'hydrogène.

Jusque là, les calculs se faisaient en négligeant l'ordre chronologique du temps. Nous allons d'abord présenter le formalisme général de la théorie unifiée pour les atomes hydrogénoïdes (et les ions) qui prennent en compte l'ordre chronologique à tous les ordres dans le développement de l'opérateur évolution et ensuite voir quelques approximations simplificatrices.

#### VI-4.1. La théorie unifiée

le plasma est considéré comme constitué de cellule, chacun contenant un émetteur + des perturbateurs (ions et électrons).

Les ions sont quasi-statiques, l'axe z est la direction du champ électrique statique de l'ion.

Pour une cellule, on peut écrire l'hamiltonien

$$H = H_a + eZE_i + V_e \quad (VI-10)$$

$H_a$  est l'hamiltonien de l'émetteur,  $eZ$  le moment dipolaire de l'émetteur,  $E_i$  le champ de l'ion et  $V_e$  le potentiel d'interaction entre les perturbateurs et l'émetteur en plus des interactions entre les perturbateurs eux-mêmes.

Soient  $|a\rangle, |b\rangle$  les états propres initiaux de  $H_a$ ,  $|a'\rangle, |b'\rangle$  les états propres finals de  $H_b$ .

La forme de la raie dans la théorie unifiée s'écrit :

$$I(\omega, \varepsilon_i) = \sum \langle a|\vec{d}|a'\rangle \langle b'|\vec{d}|b\rangle \langle a|\rho^{(0)}|a\rangle \langle b'|b| [\Delta\omega_{op} - \mathcal{E}(\Delta\omega_{op})]^{-1} |aa'\rangle \quad (VI-11)$$

En utilisant le formalisme tétradique de Vidal et al (1970) pour introduire l'élargissement des états bas, l'opérateur  $\Delta\omega_{op}$  de l'équation (VI-11) est donnée par :

$$\Delta\omega_{op} = \omega - (U^{up})^{-1} H_a^{low} U_a^{up} - e(z^{up} - z^{low})E_i \quad (VI-12)$$

*up* et *low* sont mis respectivement pour le niveau supérieur et le niveau inférieur. L'opérateur qui rend compte de l'élargissement électronique est défini par :

$$L(\Delta\omega_{op}) = -iN \int_0^{\infty} e^{i\Delta\omega_{op}t} \overline{\{V_1(t)\mu_1(t,0)V_1(0)\}}_{av} dt \quad (VI-13)$$

$\overline{\{..\}}_{av}$  est la moyenne sur les positions et les moments de l'électron (voir Smith et al (1969) pour le détail des calculs).

$\overline{V_1(t)}$  l'interaction tétradique est donnée par la relation :

$$\overline{V_1(t)} = \overline{V_1(t)}^{up} - \overline{V_1(t)}^{low} \quad (VI-14)$$

$$\overline{V_1(t)} = e^{ih(H_a + ezE_r)t} V_1(t) e^{ih(H_a + ezE_r)t} \quad (VI-15)$$

$V_1(t)$  représente l'interaction entre le perturbateur et l'émetteur, l'opérateur évolution tétradique est défini par :

$$\overline{\mu_1(t,0)} \equiv U_1^{low}(t,0).U_1^{up}(t,0) \quad (VI-16)$$

et il vérifie l'équation de Schrodinger

$$i\hbar \frac{\delta \overline{\mu_1(t,0)}}{\delta t} = \overline{V_1(t)} \overline{\mu_1(t,0)} \quad (VI-17)$$

## VI-4.2. Approximations simplificatrices

Deux approximations simplificatrices standards simplifient le calcul de  $U_1(t,0)$  et de  $L(\Delta\omega_{op})$ .

1- La théorie de la non extinction de la radiation, suppose qu'il n'y a pas de transitions radiatives entre les états dont les  $n$  sont différents ( $n$  est le nombre quantique principal) ; les collisions sont supposées élastiques.

En particulier, on considère seulement les éléments matriciels de  $V_1(t)$  entre les états de même nombre quantique principal. La validité de cette approximation a été examinée pour les ions des émetteurs neutres, elle est raisonnable pour les émetteurs chargées.

2- L'autre simplification vient du fait qu'on néglige la décomposition des niveaux d'énergie dû au champ ionique (level splitting).

On montre que cette approximation est bonne pour l'hydrogène et aussi pour les hydrogénoïdes car, les champs ioniques sont petits dû fait de la répulsion ions-ions (Hooper 1966).

Pour un champ donné l'effet Stark est petit, puisque les éléments matriciels du dipôle sont petits et proportionnels à  $1/Z$  ( $Z$  est la charge de l'émetteur) qui devient grand pour les ions.

Le temps de collision entre un électron et un émetteur chargé positivement est généralement plus que pour un émetteur neutre, la vitesse étant grande à cause de l'interaction coulombienne. En négligeant l'effet du champ ionique on a :

$$e^{(i\hbar)ezEt} \approx 1 \quad t \ll t_c \quad (\text{VI-18})$$

$$\overbrace{\{V_1(t)\mu_1(t,0)V_1(0)\}}_{av} \approx \{V_1(t)\mu_1(t,0)V_1(0)\}_{av} \quad (\text{VI-19})$$

$$i\hbar \frac{\delta\mu_1(t,0)}{\delta t} = V_1(t) \mu_1(t,0) \quad (\text{VI-20})$$

Par ailleurs  $e^{i\Delta\omega_{op}} \approx e^{i\Delta\omega}$ ,  $\Delta\omega = \omega - (H_a^{up} - H_b^{ow})$  est indépendant du champ ionique.

L'opérateur d'élargissement électronique devient :

$$L(\Delta\omega) = -iN \int_0^\infty e^{i\Delta\omega t} \{ \mu_1(t) V_1(t) V_1(0) \}_{av} dt \quad (\text{VI-21})$$

En faisant des intégrations par parties, on trouve la forme simplifiée du profil qui est :

$$L(\Delta\omega) = -iN\Delta\omega \int_0^\infty e^{i\Delta\omega t} \{ \mu_1(t,0) - 1 \}_{av} dt \quad (\text{VI-22})$$

$$\mu_1(t,0) = \odot e^{-i\hbar} \int_0^t V_1(t') dt' \quad (\text{VI-23})$$

$\odot$  est l'opérateur de chronologie.

## VI-5. Théorie stochastique du micro champ modèle

d'après Baranger (1962), GRIEM (1974), dans les conditions de la théorie semi-classique dipolaire, la fonction d'autocorrélation correspondant à un plasma s'écrit :

$$C(s) = Tr \{ \vec{d} \langle T(s,0) \vec{d} T^\dagger(s,0) \rho \rangle \}_{av} \quad (\text{VI-24})$$

$Tr$  représente la trace sur les états de l'émetteur,  $\{ \}$  une moyenne sur les positions et les trajectoires des perturbateurs,  $d$  le moment dipolaire de l'émetteur,  $T(s,0)$  l'opérateur évolution de l'émetteur et  $\rho$  la matrice densité de l'émetteur.

Cette équation montre que l'élargissement Stark est réduit au calcul de la moyenne de

$$\langle T(s,0) T^\dagger(s,0) \rangle .$$

Ou plus simplement, dans le cas où la perturbation du niveau bas est négligée, au calcul de la moyenne de l'opérateur d'évolution  $T(s,0)$ . Cet opérateur satisfait à l'équation différentielle (BARANGER 1962)

$$i \frac{dT(s, s')}{dt} = [H_0 + V(t)]T(s, s'), T(s, s) = I \quad (\text{VI-25})$$

$I$  est l'opérateur identité.

Au premier ordre du développement multipolaire, le potentiel d'interaction s'écrit :

$$V(t) = -\overrightarrow{E}(t) \cdot \overrightarrow{d} \quad (\text{VI-26})$$

Où  $E(t)$  est le microchamp électrique du plasma. La théorie du micro champ modèle exposée par FRISCH et BRISSAUD (1974), repose sur l'hypothèse que les atomes émetteurs d'un plasma sont plongés dans ce micro champ électrique  $E(t)$  et que le calcul théorique du profil des raies émises revient au calcul de la moyenne de l'opérateur d'évolution  $T$ .

L'approximation posée par ce formalisme est que le champ électrique peut être traité comme une variable aléatoire indépendant du temps : c'est le problème statistique. La solution exacte qui prend en compte la dynamique des perturbateurs n'existant pas, certains auteurs comme FRISCH et BRISSAUD (1971) obtiennent une solution exacte d'une équation maîtresse d'une théorie unifiée en faisant certaines modifications de celle-ci. Cette équation contient des quantités moyennes. Ils obtiennent alors une solution statistique exacte permettant de traiter à la fois les collisions faibles et les collisions fortes séparées, son domaine d'application est donc plus large.

Cette solution permet également de traiter correctement les fluctuations temporelles du champ des ions.

Un paramètre caractéristique de l'écoulement d'un fluide a été introduit : c'est le nombre de REYNOLDS qui mesurent l'importance des termes non linéaires dans l'équation de NAVIER-STOCKES.

$$R = 12 \left( \frac{1}{m_e r_0 v} \right)^3, r_0 = \left( \frac{4\pi N}{3} \right)^{1/3} \quad (\text{VI-27})$$

$r_0$  est la distance moyenne entre les perturbateurs,  $N$  et  $v$  sont respectivement la densité et la vitesse des perturbateurs.  $R$  est une quantité indépendante de l'émetteur et de la transition. Il varie suivant les perturbateurs considérés (ions et électrons).

Trois régions ont été délimitées suivant qu'on considère un champ des ions fort, faible ou intermédiaire. Ce champ est fonction du nombre  $R$ .

Le domaine du champ faible est celui où  $R$  tend vers 0. FRISCH et BRISSAUD (1971) montrent que l'approximation des impacts est valable pour toute la raie. La propriété statistique qui joue un rôle principal dans l'élargissement STARK est la covariance des champs.

$$\Gamma(t) = \langle \overrightarrow{E}(t) \cdot \overrightarrow{E}_0 \rangle \quad (\text{VI-28})$$

$E(t)$  étant le champ ionique. D'autre part, pour les champs forts,  $R$  tend vers l'infini. C'est l'approximation quasi statique qui est valable pour l'ensemble du profil, dans ce cas les champs peuvent être traités comme statiques et indépendants du temps.

l'interaction entre l'émetteur et le perturbateur. Seule la distribution de probabilité instantanée  $P(\vec{E}(t))$  permet de prendre en compte les propriétés statistiques du champ.

Le cas des valeurs intermédiaires de  $R$  constitue le cas le plus général, le calcul de l'opérateur évolution est déterminé pour les temps courts par  $P(\vec{E}(t))$  et pour les temps longs par la covariance. Par rapport à cette conclusion, un processus aléatoire nommé "Processus Kangourou" (K.P) a été défini et étudié. Ce processus contient l'essentiel des propriétés du vrai champ. Le calcul de l'opérateur évolution moyen  $T(t,0)$  est ainsi possible sans approximation  $P(\vec{E}(t))$  et  $\Gamma(t)$  sont disponibles. La transformée de LAPLACE de l'opérateur évolution moyen  $\langle \tilde{T}(\omega) \rangle_{K.P}$  satisfait à l'équation suivante :

$$\langle \tilde{T}(\omega) \rangle_{K.P} = \langle \tilde{T} \rangle_{Q,S} + \langle v\tilde{T} \rangle_{Q,S} \langle \{v(I - v\tilde{T})\}^{-1} \rangle_{Q,S} \langle v\tilde{T} \rangle_{Q,S} \quad (VI-29)$$

$v = v(\xi)$ ,  $\xi$  est le champ fixe puis pour  $z = \omega + iv(\xi)$   
 $\tilde{T}$  l'opérateur évolution dans le champ  $\xi$ .

$$\tilde{T} = \{ -i(\omega + iv(\xi)) - M(\xi) \}^{-1} \quad (VI-30)$$

$\langle \dots \rangle_{Q,S}$  indique la moyenne statistique sur les configurations du plasma, c'est-à-dire la moyenne sur  $P(\vec{E})$ .

Approximativement

$$v(\xi) \simeq \omega_p \sqrt{3} + \int^{|\xi|} F^2 P(F) dF \quad (VI-31)$$

$\Gamma(t)$  a le même comportement aux temps courts, le même temps caractéristique de décroissance aux temps longs donc est proche d'une covariance réelle.

Cette méthode permet de traiter de la même façon les électrons et les ions (BRISSAUD et FRISCH 1974). Il permet également de calculer l'opérateur évolution moyen total. Dans un champ K.P. électronique en présence d'un champ ionique fixé  $E_i$

$$\langle \tilde{T}(\xi_i, \omega) \rangle_{K.P} = \langle \tilde{T} \rangle_{Q,S_e} + \langle v\tilde{T} \rangle_{Q,S_e} \langle \{v(I - v\tilde{T})\}^{-1} \rangle_{Q,S_e} \langle v\tilde{T} \rangle_{Q,S_e} \quad (VI-32)$$

$$\tilde{T} = \tilde{T}(\xi_i + \xi_e, \omega + iv(\xi_e)) \quad (VI-33)$$

$$v = v(\xi_e) \quad (VI-33')$$

Opérateur évolution dans le champ statique  $E_i, E_e, \dots \}_{Q,S_e}$  est une moyenne prise sur la  $P(\vec{E})$ , l'opérateur total moyen s'écrit :

$$\langle \tilde{T}(\omega) \rangle = \langle \tilde{T} \rangle_{Q,S_i} + \langle v\tilde{T} \rangle_{Q,S_i} \langle \{v(I - v\tilde{T})\}^{-1} \rangle_{Q,S_i} \langle v\tilde{T} \rangle_{Q,S_i} \quad (VI-34)$$

$$\tilde{T} = \langle \tilde{T}(\xi_i, \omega + iv(\xi_i)) \rangle_{K.P.} \quad (VI-35)$$

$$v = v(\xi_i) \quad (VI-35')$$

$\langle \dots \rangle_{Q.S.}$  indique une moyenne prise sur la loi de probabilité  $P(\vec{E})$ .

Pour illustrer la méthode *K.P.* par une expression du profil, nous allons l'appliquer à un modèle à deux niveaux. L'opérateur évolution  $T$  satisfait à l'équation suivante :

$$\frac{dT(\vec{\xi}, t)}{dt} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{A} \cdot \vec{E} \\ \vec{A} \cdot \vec{E} & -i\omega \end{pmatrix} T(\vec{\xi}, t) \quad , \quad T(\vec{\xi}, t) = T \quad (VI-36)$$

La transformée de FOURIER de  $T$  est notée  $T(\vec{\xi}, t)$ . Après calcul, le profil s'écrit :

$$I(\omega) = \text{Re}[\langle \vec{T}(\omega) \rangle_{K.P.}] \quad (VI-37)$$

$$\langle \vec{T}(\omega) \rangle_{K.P.} = \langle \frac{1}{-i\omega + vQ} \rangle_S + [\langle \frac{1}{-i\omega + vQ} \rangle_S]^2 / v \langle \frac{-i\omega + v(Q-1)}{-i\omega + vQ} \rangle_S \quad (VI-38)$$

avec

$$Q = 1 + \frac{\vec{A} \cdot \vec{E}}{v(v + i\Omega - i\omega)} \quad (VI-39)$$

$\vec{A}$  est l'opérateur moment dipolaire correspondant au processus *K.P.* ,  $\Omega$  la différence

de fréquence propre entre  $P(t)$  et  $Q(t)$

$$P(t) = \langle i|T(t)|i \rangle \quad (VI-39a)$$

$$Q(t) = \langle i|T(t)|f \rangle \quad (VI-39b)$$

$$\Omega = \omega_i - \omega_f \quad (VI-40)$$

On se place dans le cas où l'élargissement du niveau inférieur est négligeable. Au premier ordre du développement du nombre de KUBO on a :

$$\langle \vec{T}(\omega) \rangle_{K.P.} = [-i\omega + \langle \frac{(\vec{A} \cdot \vec{E})^2}{v + i\Omega} \cdot \frac{1}{1 + \frac{(\vec{A} \cdot \vec{E})^2}{v(v + i\Omega)}} \rangle_S]^{-1} \quad (VI-41)$$

qui donne un profil Lorentzien. Par ailleurs, le traitement de la convolution des

profils ionique et électronique se fait en additionnant le champ électronique et ionique K.P. Ainsi, l'équation différentielle devient :

$$\frac{dI(\vec{\xi}, t)}{dt} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{A}(\vec{\xi}_i + \vec{\xi}_e) \\ \vec{A}(\vec{\xi}_i + \vec{\xi}_e) & -i\Omega \end{pmatrix} T(\vec{\xi}_i + \vec{\xi}_e, t) \quad (\text{VI-42a})$$

$$T(\vec{\xi}_i + \vec{\xi}_e, 0) = I \quad (\text{VI-42b})$$

Le profil complet s'écrit :

$$I(\omega) = \text{Re}\{\langle \vec{T}(\xi, \omega) \rangle\} \quad (\text{VI-43})$$

$$\text{avec } \langle \vec{T}(\omega, \xi) \rangle = \langle \vec{T} \rangle_{Q.S} + \langle v\vec{T} \rangle_{Q.S} \{ \langle v(I - v\vec{T}) \rangle \}^{-1} \langle v\vec{T} \rangle_{Q.S}$$

Cette théorie K.P. ne manque pas de critiques par exemple pour ne citer que celles-ci, le traitement des collisions. En effet, l'équation de base qui exprime la puissance émise à la fréquence a pour origine un traitement en perturbation de l'hamiltonien d'interaction matière - rayonnement. Il est clair par ailleurs que le traitement semi-classique qui ne conserve que le terme dipolaire, n'est pas approprié pour ces collisions.

Cependant, la méthode K.P. représente une théorie semi-classique dipolaire complètement unifiée. Elle peut remplacer les équations fondamentales par des équations plus simples à résoudre, le potentiel dans l'équation de SCHRODINGER étant indépendant du temps. L'un des principaux avantages de cette méthode est qu'il permet de calculer la moyenne de l'opérateur évolution dans un champ statique, de calculer les propriétés statistiques du champ dans un plasma et enfin de calculer le profil de la raie émise.

## VI.6 Conclusion

Toutes ces théories ont pour base l'équation différentielle de SCHRODINGER par rapport à l'opérateur évolution U, les différences apparaissent simplement au niveau de traitement de cette équation, de la résolution et de l'interprétation physique du problème posé.

La particularité dans l'interprétation physique vient des théoriciens de la théorie unifiée qui considèrent que le plasma est constitué d'atomes émetteurs soumis à un champ fluctuant dans le temps. Cependant, il existe encore des écarts importants entre les résultats théoriques et les résultats expérimentaux même dans les régions de densités et de température où les ions peuvent obéir aux critères de la théorie quasi-statique.

Par ailleurs, l'estimation des effets de dynamique des ions ne fait pas l'unanimité des diverses approches théoriques. A cet effet, une approche quantique fine du problème d'élargissement a été proposée récemment par un groupe de chercheurs de Meudon (Paris - France).



**CONCLUSION GENERALE**

## CONCLUSION GENERALE

Ce travail nous a permis dans un premier temps de revoir la théorie des impacts qui est l'une des théories les plus utilisées pour le calcul de l'élargissement des raies spectrales émises par les plasmas. Cette théorie nous a permis d'avoir une expression analytique du profil de la raie émise ainsi on peut tracer cette raie connaissant tous les paramètres qui constituent cette expression.

D'autre part, d'un point théorique, cette théorie exprime certaines limites qui se manifestent par la validité de cette approximation dans une région et pas dans une autre, particulièrement dans la région intermédiaire entre la région de validité de la théorie des impacts et de la théorie quasi-statique.

Les profils théoriques et expérimentaux trouvés dans la littérature montrent qu'un désaccord d'environ 30 % (GRIEM 1974), d'environ — selon les travaux de DIATTA (thèse d'état 1977).

C'est ainsi que certains auteurs comme BARNARD, COOPER et SMITH (1974) ont estimé que l'une des causes de ces écarts pouvait provenir de la dynamique des ions qui est souvent occultés par la théorie quasi statique même dans son domaine de validité, tant d'autre hypothèses pourraient faire l'objet de critique dans le sens des désaccords souvent observés.

Le second volet de ce travail et celui qui nous a le plus intéressé est l'étude des fonctions  $A(z, rz)$  et  $B(z, rz)$  qui apparaissent naturellement dans le calcul des éléments matriciels de l'opérateur  $\Phi_{ab}$  contenu dans l'expression analytique du profil de la raie émise par le plasma. L'analyse théorique et numérique des fonctions  $A(z, rz)$  et  $B(z, rz)$  dans le cas de l'atome *HeI* (atome d'intérêt astrophysique car se trouvant entre l'atome d'hydrogène et les hydrogénéoïdes) prouvent que les calculs s'avèrent cohérents avec ceux de GRIEM et de SHAMEY dans le cas de l'approximation de la trajectoire rectiligne du perturbateur. Des tableaux de valeurs ont montré que le calcul des fonctions  $B(z, rz)$  donnait des valeurs fiables si l'on réfère SHAMEY (1969) et de GRIEM (1974) alors qu'ils donnaient des écarts importants pour la fonction  $A(z, rz)$ .

Si l'on compare les résultats de GRIEM (1974) dans le cas de la trajectoire hyperbolique des déviations notoires apparaissent et nous permet de constater à juste raison les différences entre les raies émises par les ions et celles émises par les atomes neutres.

Par ailleurs, le programme de calcul des valeurs numériques des différentes fonctions  $A, B, a, b$ , offre une possibilité d'extension des calculs pour des valeurs de  $z$  important en module.

Les tracés de ces fonctions caractéristiques  $A, B, a, b$ , pour les raies d'un même atome *HeI* montre qu'il n'existe pratiquement pas de différence entre les courbes ce qui nous poussent à dire que ces fonctions restent insensibles au paramètre  $r$  (rapport d'énergie entre les niveaux d'énergie de la transition concernée). Les résultats les plus importants restent ceux qui ont été obtenus avec les fonctions largeur  $a$  et déplacement  $b$ , ils sont sensiblement les mêmes que ceux de GRIEM (1974) et SHAMEY (1969) pour le *HeI* et dans l'approximation de la trajectoire classique du perturbateur.

Ces fonctions  $a$  et  $b$  ont retenu particulièrement notre attention car c'est à partir de celles-ci que le problème de choix des coupures se pose. C'est ainsi que des domaines où il est supposé comprendre des collisions faibles ou fortes sont déterminées. Des

limites supérieures et inférieures d'intégration peuvent alors être faites pour  $a$  et  $b$ .

Notre analyse théorique montre que pour les petites valeurs numériques de  $z$  :

$$a(z, rz) \rightarrow \ln(z^{-1}) + \ln\left(r \frac{r}{1+r}\right)$$

$$b(z, rz) \rightarrow \frac{\pi r}{1+r} + \frac{(rz)^2}{4(1+r)} \ln z$$

Pour GRIEM (1974), ces petites valeurs de  $z$  sont telles que :  $|z_{\min}| < 0.1$

et on a :  $b(z, rz) \rightarrow \frac{\pi r}{1+r}$  ,  $a(z, rz) \rightarrow \ln(z_1^{-1})$   $z_1$  étant la plus grande valeur entre  $z$  et  $z'$ .

Dès lors, de petites différences entre les valeurs numériques peuvent se justifier. Nos calculs donnent :

pour  $z_{\min} = 0.1$ ,  $a(z_{\min}) = 2.4626$

pour  $z_{\min} = 0.1$ ,  $b(z_{\min}) = 1.42.06$

Alors que GRIEM trouve :  $a(z_{\min}) = 2.3026$ ,  $b(z_{\min}) = 0.2856$

L'importance réelle de ces valeurs n'apparaît qu'au dernier voler de notre étude qui est le tracé du profil de la raie 3888.6Å de l'hélium neutre *HeI* à l'aide d'un programme du logiciel Matlab (tous les calculs ont été faits à partir de ce logiciel).

Les programmes informatiques suivants :

- % calcul des coefficients de RACAH et CLEBS-GORDON.
- % calcul des élément matriciels du moment dipolaire correspondant à la transition.
- % calcul des fonctions  $A, B, a, b$ ;
- % programme de la fonction de distribution des champs de HOLTSMARK.
- La diagonalisation de la matrice hamiltonien

permettent globalement de tracer la raie émise par le plasma. C'est pourquoi, cette tentative de tracer la raie 3888.6Å nous permet d'avoir un outil de calcul de largeur et de déplacement des raies spectrales émises par les plasmas dans le cadre de la théorie des impacts et présage pour un travail futur d'une étude complète et minutieuse sur toute raie déterminée. Cette étude permet ainsi d'avoir un diagnostic pour les plasmas de laboratoires et des plasmas stellaires.

## ANNEXE

### PROGRAMMES MATLAB POUR LE CALCUL NUMERIQUE ET LE TRACE DES DIFFERENTES FONCTIONS

% fonction nécessaires au calcul numérique de la fonction B(z)et b(z)

```
function y=i1(z)
```

```
global Z;Z=z;
```

```
y=quad8('g',0,pi);
```

```
////////////////////////////////////
```

```
function y=i0(z)
```

```
global Z;
```

```
Z=z;
```

```
y=quad8('g1',0,pi)
```

```
////////////////////////////////////
```

```
function y=g(teta)
```

```
global Z;
```

```
y=(1/pi).*exp(Z.*cos(teta)).*cos(teta);
```

```
////////////////////////////////////
```

```
function y=g1(teta)
```

```
global Z;
```

```
y=(1/pi).*cosh(Z.*cos(teta));
```

```
////////////////////////////////////
```

Programme Matlab pour le calcul numérique et le tracé de B(z,rz)et b(z,rz).

% fonction B(z,rz)

```
function y=b(r,z,infini)
```

```
y=(pi.*r.*z.^2).*(k0(z,infini).*i0(r.*z)-k1(z,infini).*i1(r.*z));
```

```
////////////////////////////////////
```

% fonction b(z,rz)

```
function y=B1(r,z,infini)
```

```
y1=pi.*r.*z/(1+r);
```

```
y2=i0(r*z).*k1(z,infini)-k0(z,infini).*i1(r*z);
```

```
y=y1.*y2;
```

```
////////////////////////////////////
```

% tracé de B(z,rz)

```
function tb(r,infini)
```

```
z=0.1:0.9:10;
```

```

for i = 1:12,
y(1,i) = b(z(1,i),r,infini);
end
plot (z,y);
xlabel('z');
ylabel('b');
grid;
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% tracé de b(z,rz)
function y=tb1(r,infini)
z=0.1:0.9:10;
for i=1:12,
y(1,i)=b1(z(1,i),r,infini);
end;
plot(z,y);
xlabel('z');
ylabel('b1');
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

% Programme Matlab des fonctions de Bessel réduits K0(z)et K1(z)
function y = k0(z,infini)
global Z;
Z = z;
y = 1 ./ z .* (quad8('fk0',0,infini));
%y=(quad8('fk0',0,infini));
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% programme de la fonction fk0
function y = fk0(x,z)
global Z;
y = ( x.* sin(Z.*x) ) ./ ( (1 + x.^2).^ (3/2) );
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
function y = k1(z,infini)
global Z;
Z = z;
y = 1 ./ Z .* (quad8('fk1',0,infini));
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
function y = fk1(x,z)
global Z;
y = ( cos(Z.*x) ) ./ ( (1 + x.^2).^ (3/2) );
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

%programme Matlab pour le calcul numérique et le tracé de A(z,rz)et
a(z,rz)

```



```
function y=delta(a,b,c)
% programme de la fonction delta
y=sqrt(fact(a+b-c).*fact(a-b+c).^fact(-a+b+c)/fact(a+b+c+1));
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
function y=delta4(j1,j2,j3,l1,l2,l3)
% programme de la fonction produit de delta
% delta(j1j2j3)*delta(j1l2l3)*delta(l1j2l3)*delta(l1l2j3)
y=delta(j1,j2,j3).*delta(j1,l2,l3).*delta(l1,j2,l3)*delta(l1,l2,j3)
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
function y=somme(j1,j2,j3,l1,l2,l3)
y1=max(j1+j2+j3,j1+l2+l3);
y2=max(l1+l2+j3,l1+j2+l3);
kmini=max(y1,y2);disp('kmini=');disp(kmini);
z1=min(j1+j2+l1+l2,j2+j3+l2+l3);
kmaxi=min(z1,j3+j1+l3+l1);disp('kmaxi=');disp(kmaxi);
somme=0;
for k=kmini:kmaxi,
somme=somme+s(j1,j2,j3,l1,l2,l3,k),
end;
y=somme;
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
function y=somme1(j1,j2,j3,l1,l2)
y1=max(0,j2-j3-l1);
y2=max(y1,j1-j3+l2);
kmini=y2;disp('kmini=');disp(kmini);
z1=min(j1+j2-j3);
z2=min(z1,j2+l2);
kmaxi=z2;disp('kmaxi=');disp(kmaxi);
somme1=0;
for k=kmini:kmaxi,
somme1=somme1+s1(j1,j2,j3,l1,l2,k);
end;
y=somme1;
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
function y=sommeq(etat1,etat2,q)
% programme de la somme des éléments matriciels sur MJ et n
somme=0;J1=etat1(1);e=4.803242e-10;
for i=1:J1=-J1:J1,
for J2=1,
for L2=0,
for S2=1,
for MJ2=-J2:J2,
for l22=0,
```





```
y=(-1).^(j1-j2-  
l3).*delta(j1,j2,j3).*jm(j1,j2,j3,l1,l2,l3).*somme1(j1,j2,j3,l1,l2);  
////////////////////////////////////
```

```
% calcul des coefficients de RACAH  
function y=rakah(j1,j2,j3,l1,l2,l3)  
y=delta4(j1,j2,j3,l1,l2,l3).*somme(j1,j2,j3,l1,l2,l3);  
////////////////////////////////////
```

```
% programme de calcul des éléments matriciels du moment dipolaire  
pour une transition permise
```

```
function y=deuxq(etat1,etat2,q)  
J1=etat1(1);L1=etat1(2);S1=etat1(3);MJ1=etat1(4);  
l21=etat1(5);l11=etat1(6);  
J2=etat2(1);L2=etat2(2);S2=etat2(3);MJ2=etat2(4);  
l22=etat2(5);l12=etat2(6);  
a=k(J1,J2,L1,L2,S1,l11,l21);  
b=c(J1,1,J2,-MJ1,q,(MJ1-q));  
c=w2(L1,J1,L2,J2,S1,l21,l22,l11);  
y=a.*b.*c.*sqrt(3).*(quad8('fi',0,10)).^2;  
  
////////////////////////////////////
```

```
% distribution de Holtsmark  
% infini= 100  
function y=holzmark(b,infini)  
global B;  
B=b;  
y=quad8('holz',0, infini);  
////////////////////////////////////  
function y=holz(x,b)  
global B;  
y=(2./(pi.*B)).*x.*sin(x).*exp(-(x./B).^(3/2));  
////////////////////////////////////
```

```
% programme pour le tracé du spectre l(w)  
function y=lw(etat1,etat2,q,N,T,amin,amax,bmin,bmax)  
v=qa(etat1,etat2,q,N);  
h=1.054589e-27;  
l=-larg(etat1,etat2,q,N,T,amin,amax);  
d=-deplac(etat1,etat2,q,N,T,bmin,bmax);  
p=-0.25e12:0.1e12/5:0.25e12;  
e=4.863242e-10;
```

```
dab=(e.^4./pi).*(abs(deuxq(etat1,etat2,q))).^4;
y1=-l./(i.^2+(p-v-d).^2);
y=1e101.*y1.*dab;
plot(p,y);xlabel('w-w0');ylabel('l(w-w0)');grid;
% on a un facteur multiplicatif e119 sur y
%p=w-w0
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% fonction qui trace L(w-w0)
function y=somlw(etat1,etat2,q,N,T,amin,amax,bmin,bmax)
somlw=0;
for J1=0;          for J2=1;
for L=1;          for L2=0;
for S1=1;        for S2=1;
for MJ1=0;      for MJ2=0;
for l21=1;      for l22=0;
for l11=0;      for l12=0;
y=somlw+lw(etat1,etat2,q,N,T,amin,amax,bmin,bmax);
end; end; end; end; end; end;
end; end; end; end; end; end; % programme Matlab pour la matrice
hamiltonien total H ou (valeurs propres de H)
function y=wq(etat1,etat2,q,N)
% effet stark quadratique q=0
h=1,054589e-27;e=4,803242e-10;E0f=159850.318e4;E0i=185558.92;
E=1.607.*2.603.*2.*e.*(N).^2/3);

y=(E0i-E0f)/h      +2.*e.^2.*((deuxq(etat1,etat2,q)).^2.*(E).^2)/(h.*(E0i-
E0f));
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% programme de calcul qui donne la largeur de raie
function y=larg(etat1,etat2,q,N,T,amin,amax)
% largeur de la raie dans le cas des z petits
e=4.803242e-10;
h=1.054589e-27;
k=1.3804e-16;
m=9.109534e-28;
y=1.0638.*N.*h.^2.*sommeq(etat1,etat2,q).*(amin-
amax)/(m.^3/2).*sqrt(k.*T));
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% programme de calcul qui donne le déplacement de la raie
function y=deplac(etat1,etat2,q,N,T,bmin,bmax)
% déplacement de la raie dans le cas des z petits
e=4.803242e-10;
h=1.054589e-27;
```

```
k=1.3804e-16;  
m=9.1085e-28;  
y=(1.0638.*N.*h.^2).*sommeq(etat1,etat2,q).*(bmin-  
bmax)./(m(2/3).*(k.*T));
```

```
////////////////////////////////////
```

N=densité,T=température,amax=valeur correspondant à la valeur maximale de z. idem pour bmax.

amin=valeur correspondant à la valeur minimale de z , idem pour bmin.

## BIBLIOGRAPHIE

- [1] ABRAMOWITZ, M., and Stegun, I. A. 1964, "Handbook of Mathematical functions" (AMS-55), U.S. Government printing office, Washington. Page 923.
- [2] BARANGER, M. (1958) a "New developments in the theorie of pressure broadening" Research Memorandum, R. M. - 2118 - A. E. C., ASTIA Document Number A. D. 150692.
- [3] BRISSAUD A. and al (1975) "Application à la méthode micro-champ modèle"
- [4] BARNARD, A. J. and J. COOPER (1969) "Computed profiles of HeI 5016 ÅO at high electrons densites". Physics department University of British Columbia.
- [5] BETHE, H. A. and SALPETER (1957) "Qantum mechanics of one and two-electron atoms"
- [6] CONDON, E. U. and SHORTLEY, G.H. "The theorie of atomic spectra" Cambridge at the university press.
- [7] COWAN, R. D. (1919) "The theorie of atomic structure and spectra" University of California Press Berkley. Los Angeles - London.
- [8] DIATTA, C. S. (1977) "Etude des profils des raies spectrales de l'atome de l'hélium élargies et déplacées par effet Stark dans les plasmas d'arc. Uer des sciences fondamentales et appliquées. Université d'Orléans.
- [9] EDMONDS, A. R. (1960) "Angular momentum in quantum mechanics". Princeton University press.
- [10] GRIEM, H. R., BARANGER, M., KOLB, A. and OERTEL G. (1962) "Stark broadening of a neutral lines in a plasma". Phys Rev. 125 : 177.
- [11] GRIEM, H. R. (1964) "Plasma spectroscopy" Mc Graw-Hill, New York.
- [12] GRIEM, H. R. (1974) "Spectral line broadening" Academi. Press New York and London.
- [13] MESSIAH. (1964) "Mécanique quantique" Tome 2 Dunod Paris.
- [14] MIHALAS, D. (1967) "Stellar atmospheres" High altitude observatory. National center for atmospheric research.
- [15] PECKER - WIMEL, C. (1966) "Introduction à la spectroscopie de splasmas" Institut d'astrophysique. Paris Gordon and Breach.
- [16] SAHAL-BRECHOT, (Octobre 1968) "Théorie de l'élargissement et du déplacement des raies spectrales sous l'effet des chocs avec les electrons et les ions dans l'approximation des impacts". Observatoire de Paris - Meudon.
- [17] SHAMEY, L. J. (1969) "Stark broadening of important HeI lines and their forbidden components. B. S. Loyola University of Los Angeles.
- SOBEL'MAN, I. I., VAINSHTEIN [18] L. A., YUKOV E. A., (1981) "Excitation of atoms and broadening of spectral lines". Springer-Verlag Beslin Heidelbergn New York.
- [19] STANLEY B. and STONER O. J. (1975) "Atomic energy levels and grotrain diagrams". Department of physics, University of Arisona, Tucson, Arizona 85721.
- [20] VAINSHTEIN L. A. and SOBEL'MAN I. I. (1959) "Opt. Spectrosc." (USSR)
- [21] VOLSLAMBER, D., (1970) J. Quant. Spectrosc. Radiation transfer 10, 939
- [22] VAN REGEMORTER. H. (1969) Phys. Lett. 30A, 365.