

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

UNIVERSITE BADJI MOKHTAR
BADJI MOKHTAR UNIVERSITY



جامعة باجي مختار - عنابة -

Faculté des Sciences
Département de Physique

Année 2011

THESE

Présentée en vue de l'obtention du diplôme de

DOCTORAT

**Phénomène d'élargissement de pression dans le
cœur et dans les ailes des atomes alcalino-terreux
perturbés par des gaz rares**

Option: Matière et rayonnement

par

Lamia REGGAMI

**Directeur de
Thèse:**

Moncef BOULEDROUA Professeur Université Badji Mokhtar, Annaba

Devant le Jury

Président:

Abdelazziz DOGHMANE Professeur Université Badji Mokhtar, Annaba

Examineurs:

Houria TRIKI Professeur Université Badji Mokhtar, Annaba

Nourredine MOUSSAOUI M.C. A U.S.T.H.B., Bab-Ezzoua, Alger

Salim HOUAMER M.C. A Université Ferhat Abbas, Sétif

Kamel ALIOUA M.C. A Centre Universitaire de Souk-Ahras
Souk-Ahras

Dédicace

Je dédie ce modeste travail à toute personne qui a contribué de près ou de loin à l'élaboration de cette thèse et particulièrement à mes très chers parents qui m'ont toujours aimé et se sont sacrifiés tout le long de mes études à ce jour.

A toute personne qui m'est chère notamment à :

☞ *Mon cher époux Nacer.*

☞ *Mes sœurs et frères: Aicha, Réda, Sonia, Nabil, Fatima, Mohamed Larbi.*

☞ *Mes belles sœurs: Radia et Lilia.*

☞ *Mes neveux et nièces: Ismail, Ilyes, Nour El Houda et Joumana.*

☞ *Tous mes amies: Sabrina, Fouzia, Moufida Bahroun, Raja, Laila, Amel, Moufida Trima, Wafia.*

☞ *Lamia* ☞

ملخص

الهدف من هذا العمل هو فحص آثار كمونات التأثير المتبادل ودرجة الحرارة على توسيع الخط الطيفي الناتج عن الضغط في قلب وأجنحة خط التجاوب للمغنيزيوم $Mg(3s3p-3s^2)$ المضطرب بذرات غاز الهليوم $He(1s^2)$. كمونات التأثير المتبادل - للحالة الأساسية $X^1\Sigma^+$ والحالتين المثارتين $A^1\Pi$ و $B^1\Sigma^+$ للنظام MgHe - المستعملة في حساب هذه المقادير المطيافية تم بناءها بتبني سلسلتين من المعطيات النظرية الحديثة. وبنفس الطريقة قمنا ببناء عزوم ثنائيات الأقطاب للانتقال. تمت الحسابات من أجل أطوال أمواج بين $\lambda=260$ nm و $\lambda=310$ nm ومن أجل درجات حرارة بين 100 K و 3000 K. في منطقة قلب الخط الطيفي، تم تبني النظرية الكمية المبسطة لبرانجي (Baranger) وذلك لحساب نسبي العرض w/n والانزياح d/n . حيث تمت معاينة تغير هاتين النسبتين مع درجة الحرارة من أجل السلسلتين المعتمدين. فيما يخص منطقة الجناحين، تم حساب معامل الامتصاص الطيفي المنخفض $k_r(\nu)$ وبينت الحسابات أن الانتقالات من النوع حرة-حرة لها مشاركة أعظمية في طيف الامتصاص للنظام MgHe. تحليل طيف الامتصاص بين أن هناك بنية قمرية في الجناح الأزرق من أجل درجة حرارة أكبر من $T\sim 1800$ K، حول طول موجة $\lambda=276$ nm عندما يتم استعمال السلسلة I وقرية من $\lambda=272$ nm لما تستعمل السلسلة II. نتائجن تبين أنها في اتفاق كبير مع نتائج أخرى تم نشرها.

Résumé

Le but de ce travail est d'examiner les effets des potentiels d'interaction et la température sur l'élargissement de pression dans le cœur et dans les ailes de la raie de résonance du magnésium $\text{Mg}(3s3p - 3s^2)$ perturbé par des atomes d'hélium $\text{He}(1s^2)$. Les potentiels d'interaction, de l'état fondamental $X\ ^1\Sigma^+$ et des deux états excités $A\ ^1\Pi$ et $B\ ^1\Sigma^+$ du système MgHe , utilisés dans le calcul de ces paramètres spectraux sont construits en adoptant deux séries de données théoriques récentes. De la même manière nous construisons les moments dipolaires de transition. Les calculs sont faits pour des longueurs d'onde entre 260 et 310 nm et pour des températures entre 100 et 3000 K. Dans la région du cœur de la raie, nous adoptons la théorie quantique simplifiée de Baranger pour calculer les taux d'élargissement w/n et de déplacement d/n . La variation de ces deux taux avec la température pour les deux séries des potentiels est examinée. Pour la région des ailes nous calculons le coefficient d'absorption réduit $k_r(\nu)$ et les calculs montrent que les transitions de type libre-libre ont une contribution majeure dans le spectre d'absorption du système MgHe . L'analyse de ce spectre d'absorption montre une structure satellitaire dans l'aile bleue au-delà d'une température $T \sim 1800$ K, au alentour de $\lambda = 276$ nm quand la série I est utilisée et proche à $\lambda = 272$ nm quand la série II est utilisée. Nos résultats montrent un bon agrément avec d'autres résultats déjà publiés.

Abstract

The aim of this work is to examine the potentials interaction and temperature effects on the pressure broadening line-core and line-wing of the resonance magnesium $\text{Mg}(3s3p - 3s^2)$ perturbed by helium atoms $\text{He}(1s^2)$. The used interaction potentials, of the ground state $X\ ^1\Sigma^+$ and two excited states $A\ ^1\Pi$ and $B\ ^1\Sigma^+$ of MgHe system, to calculate these spectral parameters are constructed in adopting two recent theoretical data sets. In the same way we construct the transition dipole moments. The calculations are carried out for a wavelength range 260 – 310 nm and temperatures between 100 and 3000 K. In the line-core region, we adopt the Baranger simplified quantum-mechanical theory to calculate line width w/n and line shift d/n rates. The variation of these rates with temperature is examined for two potential sets. For the line-wing region we calculate the reduced absorption coefficient $k_r(\nu)$ and the calculation show that the free-free transitions contribute most to the MgHe absorption spectra. The analysis of this spectra show a satellite structure in the blue wing, beyond a temperature $T \sim 1800$ K, around $\lambda = 276$ nm when the first set is used and close to $\lambda = 272$ nm when the second set is used. Our results are in good agreement with other results already published.

Remerciements

Ce travail a été réalisé dans le cadre des activités scientifiques du Laboratoire de Physique de Rayonnements, LPR, du Département de Physique de l'Université Badji Mokhtar d'Annaba.

J'exprime tous mes sentiments de gratitude à Monsieur **Moncef BOULEDROUA**, Professeur à la Faculté de Médecine, Université Badji Mokhtar, qui m'a proposé le sujet de cette thèse et m'a fait bénéficier de ses conseils bienveillants. Je dois lui présenter tous mes sentiments de reconnaissance pour tous ses soutiens et aides. Je le remercie sincèrement d'avoir toujours trouvé le temps pour faire avancer mon travail.

Je tiens à remercier Monsieur **Abdelazziz DOGHMANE**, Professeur à l'Université Badji Mokhtar d'Annaba, qui m'a fait l'honneur de présider le jury de ma thèse. Qu'il trouve ici l'expression de mes profonds respects.

J'exprime aussi mes remerciements à Mademoiselle **Houria TRIKI**, Professeur à l'Université Badji Mokhtar d'Annaba, qui m'a fait l'honneur de faire partie du jury de ma thèse. Qu'elle trouve ici l'expression de mes profonds respects.

J'adresse aussi mes sincères remerciements à Monsieur **Nouredine MOUSSAOUI**, Maître de conférences à l'USTHB de Bab-Ezzouar, pour avoir accepté de faire partie de mon jury de thèse. Qu'il reçoive de ma part mes remerciements les meilleurs.

Je remercie également Monsieur **Salim HOUAMER**, Maître de conférences à l'Université Ferhat Abbas de Sétif, pour avoir accepté de participer au jury de cette thèse. Qu'il trouve ici l'expression de mes vifs remerciements.

Je remercie profondément Monsieur **Kamel ALIOUA**, Maître de conférences au Centre Universitaire de Souk-Ahras, d'avoir accepté d'honorer par sa présence mon jury de thèse. Je n'oublie pas de le remercier et de lui présenter mes gratitudes pour toutes ses aides.

Je tiens aussi à témoigner ma profonde reconnaissance aux Drs **Ewa PAUL-KWIEK**,

Fausto CARGNONI et **Kevin LEHMANN** pour nous avoir fourni les données *ab initio* des courbes d'énergie potentielle et des moments dipolaires de transition relatifs au système MgHe.

Je n'oublie pas de remercier Pr **Jim MITROY**, de l'Université Charles Darwin en Australie, de nous avoir communiqué ses coefficients de dispersion avant leur publication.

J'adresse un remerciement particulier à Monsieur **Tahar BOUAZZA**, Maître de conférences à l'Université Badji Mokhtar d'Annaba, pour m'avoir aidé à accomplir la tâche des calculs.

Annaba, le 7 mai 2011.

Table des matières

Table des matières	1
Liste des tableaux	3
Table des figures	4
Introduction	7
1 Généralités sur les collisions	10
1.1 Diffusion par un potentiel	10
1.2 Section efficace élastique	11
1.3 Equation d'onde radiale	14
1.4 Déphasage élastique	16
1.4.1 Traitement quantique	16
1.4.2 Traitement semi-classique	17
2 Système MgHe	19
2.1 Potentiels d'interaction	19
2.1.1 Série de potentiel I	20
2.1.2 Série de potentiel II	20
2.1.3 Domaine des courtes distances	21
2.1.4 Domaine des grandes distances	22
2.1.5 Construction des potentiels	22
2.2 Moments dipolaires de transition	23
2.3 Vérification des constructions	28
2.3.1 Etats rovibrationnels	28
2.3.2 Intégrales de collision et coefficients de diffusion	30

2.3.3	Durées de vie	34
3	Elargissement de pression dans le cœur	36
3.1	Modèle de Baranger	36
3.1.1	Hypothèses et approximations	37
3.1.2	Forme de raie	38
3.1.3	Forme intégrale de $\varphi(s)$	41
3.1.4	Largeur et déplacement de raie	43
3.2	Sections efficaces	46
3.3	Largeur et déplacement de raie	47
4	Elargissement de pression dans les ailes	51
4.1	Théorie	51
4.2	Méthode de calcul	55
4.3	Résultats et comparaison	56
	Conclusion	62
A	Termes électroniques d'une quasi-molécule	64
B	Publications et communications	66
B.1	Articles	66
B.2	Communications	66
	Bibliographie	68

Liste des tableaux

2.1	Distances d'équilibre R_e et énergies de dissociation D_e fournies par notre construction des courbes d'énergie potentielle du système MgHe. Les résultats obtenus à travers la série I sont marqués par † et ceux obtenus à travers la série II sont marqués par ‡.	21
2.2	Paramètres des courtes et grandes distances en u.a. Les coefficients de dispersion sont tous de Mitroy et Zhang [47].	22
2.3	Paramètres constants adoptés dans notre construction des moments dipolaires de transition.	25
2.4	Energies des niveaux rovibrationnels, en cm^{-1} , des deux états $X^1\Sigma^+$ et $A^1\Pi$ du système MgHe.	30
2.5	Intégrales de collision $\bar{\Omega}_{1,1}$, en \AA^2 , pour quelques températures. Les résultats obtenus pour l'état $X^1\Sigma^+$ sont comparés avec les valeurs de Partridge, Stallcop et Levin [45].	32
2.6	Coefficients de diffusion, en $10^2 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$, à la pression $p = 1 \text{ torr}$ pour l'état $X^1\Sigma^+$ du système MgHe.	32
2.7	Coefficients de diffusion, en $10^2 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$, à la pression $p = 1 \text{ torr}$ pour le premier état excité du système MgHe.	33
2.8	Paramètres de lissage, qui apparaissent dans l'équation (2.19), des données du coefficient de diffusion en fonction de la température.	33
2.9	Durées de vie, en ns, de quelques niveaux rovibrationnels de l'état $A^1\Pi$ du système MgHe pour les deux séries I et II.	35
3.1	Comparaison des résultats des taux d'élargissement et de déplacement pour quelques températures avec ceux de Bottcher <i>et al.</i> [72].	49

Table des figures

1-1	Diffusion d'un faisceau incident par un potentiel $V(R)$ central. Le courant diffusé traverse un élément de surface ds sous un angle solide $d\Omega$, avec $\Omega \equiv (\theta, \varphi)$, et un détecteur D.	12
1-2	Diffusion d'une particule de paramètre d'impact b par un potentiel $V(R)$ central. Si $b > a$, la particule ne diffuse pas.	18
2-1	Courbes d'énergie potentielle de l'état fondamental $X \ ^1\Sigma^+$ du système MgHe construites à partir des séries de potentiel I et II.	24
2-2	Courbes d'énergie potentielle de l'état excité $A \ ^1\Pi$ du système MgHe construites à partir des séries de potentiel I et II.	24
2-3	Courbes d'énergie potentielle de l'état excité $B \ ^1\Sigma^+$ du système MgHe construites à partir des séries de potentiel I et II.	25
2-4	Représentation des trois courbes d'énergie potentielle, construites à partir de la série I, ainsi que les courbes représentant les différences de potentiel $\Delta V_{A-X}(R)$ et $\Delta V_{B-X}(R)$	26
2-5	Représentation des trois courbes d'énergie potentielle, construites à partir de la série II, ainsi que les courbes représentant les différences de potentiel $\Delta V_{A-X}(R)$ et $\Delta V_{B-X}(R)$	27
2-6	Représentation des courbes construites des moments dipolaires de transition qui lient l'état fondamental $X \ ^1\Sigma^+$ du système MgHe aux deux états excités $A \ ^1\Pi$ et $B \ ^1\Sigma^+$. Les données utilisées pour ces constructions proviennent de Réf. [27].	28
2-7	Représentation des coefficients de diffusion avec leurs courbes de lissage, pour les série I et II, en fonction de la température pour l'état fondamental $X \ ^1\Sigma^+$ du système MgHe.	33

2-8	Représentation des coefficients de diffusion avec leurs courbes de lissage, pour les séries I et II, en fonction de la température pour le premier état excité du système MgHe.	34
3-1	Variation avec l'énergie E des sections efficaces σ_w effectives dans l'élargissement en utilisant les deux séries de potentiel I et II.	48
3-2	Variation avec l'énergie E des sections efficaces σ_d effectives dans le déplacement en utilisant les deux séries de potentiel I et II.	48
3-3	Taux d'élargissement w/n en fonction de la température T calculés avec les séries de potentiel I et II.	50
3-4	Taux de déplacement d/n en fonction de la température T calculés avec les séries de potentiel I et II.	50
4-1	Représentation schématique des différentes transitions possibles entre un état moléculaire inférieur et un autre supérieur.	52
4-2	Coefficients d'absorption réduits $k_r(\nu)$ du système MgHe à la température $T = 1000$ K. La courbe représentée par une ligne continue est celle obtenue avec la série I et la courbe représentée par une ligne en pointillés est celle obtenue avec la série II.	58
4-3	Coefficients d'absorption réduits $k_r(\nu)$ du système MgHe pour la température $T = 2000$ K. La courbe représentée par une ligne continue est celle obtenue avec la série I et la courbe représentée par une ligne en pointillés est celle obtenue avec la série II.	58
4-4	Coefficients d'absorption réduits $k_r(\nu)$ du système MgHe pour la température $T = 3000$ K. La courbe représentée par une ligne continue est celle obtenue avec la série I et la courbe représentée par une ligne en pointillés est celle obtenue avec la série II.	59
4-5	Coefficients d'absorption réduits $k_r(\nu)$ du système MgHe pour trois températures distinctes : $T = 1000, 2000$ et 3000 K, générés par les deux séries de potentiel I et II.	60
4-6	Coefficients d'absorption réduits modifiés $k_r(\Delta\omega) \times (\Delta\omega)^2$ à $T = 800$ K en fonction de $\Delta\omega = \omega - \omega_0 $. Nos résultats sont représentés par des lignes continues et en pointillés pour les série I et II, respectivement. Ils sont comparés avec les valeurs théoriques de la Réf. [27] et expérimentales de la Réf. [33].	61

A-1 Projection Λ du moment cinétique orbital électronique total \mathbf{L} d'une molécule
diatomique sur l'axe internucléaire z 65

Introduction

L'étude du phénomène de l'élargissement de pression constitue une des méthodes très couramment utilisées en astrophysique et en spectroscopie moléculaire pour générer, identifier et vérifier les potentiels interatomiques. Les analyses et les mesures spectroscopiques réalisées jusqu'à maintenant ont effectivement prouvé la sensibilité de ces paramètres spectraux aux potentiels interatomiques et aux moments dipolaires de transition (TDMs) et ont établi l'existence d'une forte corrélation avec leurs détails microscopiques [1, 2]. D'un autre côté, le processus d'élargissement de pression peut être une source fiable d'informations dans le diagnostic de l'atmosphère des objets astronomiques. A titre d'exemple, le diagnostic des naines brunes et des exoplanètes, appelées aussi planètes extrasolaires, a permis l'examen des propriétés physico-chimiques de ces astres et, en particulier, la détermination de leur composition, densité et température [3, 4].

Durant ces dernières années, les études des spectres atomiques d'absorption des métaux alcalins [5, 6] et des métaux alcalino-terreux [7, 8], intégrés dans des groupements d'hélium, est l'une des méthodes utilisées pour explorer les potentiels d'interaction diatomique [9–11]. Beaucoup de travaux ont été consacrés ces dernières décennies à l'élargissement et au déplacement de pression des raies de résonance des atomes métaux alcalins perturbés par des gaz composés d'atomes de même espèce [12–18] ou d'espèce différente [3, 19–25]. Toutefois, moins d'attention est prêtée aux études théoriques ou expérimentales du phénomène d'élargissement de pression des raies des atomes alcalino-terreux perturbés par des gaz rares [26–29].

Ce travail s'intéresse au calcul d'élargissement de pression dans le cœur et dans les ailes de la raie de résonance du magnésium $\text{Mg}(3s3p - 3s^2)$ perturbé par l'hélium $\text{He}(1s^2)$. Les calculs seront faits pour deux séries de données et pour un intervalle de températures allant de 100 à 3000 K pour voir l'effet des potentiels d'interaction et de la température sur ces paramètres spectroscopiques.

Dans le premier Chapitre, nous présentons très brièvement des notions générales sur la

théorie des collisions atomiques où nous donnons l'essentiel de la diffusion d'une particule par un potentiel central $V(R)$ pour arriver à la notion du déphasage élastique. Cette grandeur est déduite du comportement asymptotique de la fonction d'onde stationnaire diffusée. Ceci devrait conduire, après un long traitement mathématique, aux sections efficaces de diffusion qui sont directement liées aux déphasages.

Le deuxième Chapitre comporte deux parties. La première est consacrée à la construction des potentiels d'interaction à travers lesquels un atome de magnésium, dans son état fondamental $\text{Mg}(3s^2)$ ou dans son premier état excité $\text{Mg}(3s3p)$, interagit avec un atome d'hélium $\text{He}(1s^2)$. L'absence pour de tel système de potentiels de type Rydberg-Klein-Rees (RKR), qui sont déduits d'observations spectroscopiques, nous oblige d'utiliser des données théoriques récentes de type *ab initio*, ce qui constitue après tout un vrai test des méthodes théoriques et aussi une vérification des données fournies [30]. Nous avons adopté pour construire chacune des courbes d'énergie potentielle deux séries de potentiels distinctes et les constructions sont faites dans les trois domaines de séparation internucléaire. La connexion entre ces trois intervalles doit être faite d'une manière lisse et convenable. Puis, nous construisons de la même manière les moments dipolaires de transition (TDMs) qui connectent l'état fondamental $3s^2\ ^1S_0$ avec l'état excité $3s3p\ ^1P_1$ du magnésium. Dans la deuxième partie, nous essayons de vérifier la qualité des potentiels d'interaction $V(R)$ et des moments dipolaires de transition $D(R)$ à travers le calcul de quelques paramètres physiques, tels que les intégrales de collision, les coefficients de diffusion, les niveaux rotationnels-vibrationnels et les durées de vie des états excités. Nos résultats seront comparés à d'autres valeurs publiées.

Le Chapitre 3 se consacre au calcul du taux d'élargissement w/n et de déplacement d/n dans le *cœur* de la raie de résonance du magnésium $\text{Mg}(3s3p - 3s^2)$ lorsqu'il est perturbé par l'hélium $\text{He}(1s^2)$. Pour calculer ces deux paramètres, nous avons choisi d'utiliser le modèle *simplifié*, basé sur un traitement purement quantique, établi par Baranger [31]. Ce modèle repose sur l'approximation d'impact, ou l'approximation de faible densité, ce qui conduit à une durée de collision très petite devant le temps entre deux collisions successives. Cette théorie est dite simplifiée car Baranger a adopté quelques hypothèses simplificatrices, telles que la non dégénérescence des états quantiques de l'atome radiateur et la prise en compte seulement des collisions élastiques. A la fin de ce chapitre, nous espérons établir la loi de variation de w/n et d/n en fonction de la température et comparer les quelques valeurs de l'élargissement avec d'autres résultats disponibles dans la littérature.

Dans le quatrième et dernier Chapitre, nous essayerons de voir l'effet des potentiels et de la température sur la position et l'intensité des *satellites* dans les deux *ailes* du profil d'absorption relatif au système MgHe. Pour accomplir cette tâche, nous adoptons le traitement théorique quantique décrit dans les Réfs. [13,32] pour arriver aux expressions du coefficient de photoabsorption réduit. Nous nous intéresserons aux transitions de type *libre-libre* seulement car la contribution des autres transitions, à savoir, *lié-lié*, *lié-libre* et *libre-lié*, est négligeable. Ceci est essentiellement dû à la qualité répulsive des potentiels d'interaction utilisés pour le calcul du coefficient d'absorption. La représentation du coefficient d'absorption en fonction de la température doit nous montrer l'effet des deux séries de potentiel d'interaction adoptées sur la position des satellites possibles et de la température sur l'intensité des pics satellitaires. Pour améliorer la qualité du profil de raie aux alentours des pics de faible intensité, nous avons choisi la modification proposée par quelques auteurs, dont Paul-Kwiek et Czuchaj [27] et Lyyra *et al.* [33]. Ceci est surtout le cas ici pour les satellites qui surviennent dans l'aile rouge

Enfin, cette thèse de doctorat s'achève par deux Annexes et les deux articles publiés qui résument le travail qui y est présenté. Sauf mention contraire, dans la plupart des calculs, les unités atomiques (a.u.) ont été utilisées.

Chapitre 1

Généralités sur les collisions

Le phénomène des collisions atomiques a une importance fondamentale dans la physique atomique et moléculaire et joue un rôle important dans d'autres domaines, telles que l'astrophysique, la physique des plasmas et la physique des lasers [34]. C'est pour cela, que nous allons dans ce Chapitre présenter quelques détails essentiels pour la bonne compréhension de ce phénomène.

1.1 Diffusion par un potentiel

Nous désignons par le nom *diffusion* les collisions dans lesquelles l'état final est constitué des mêmes particules que l'état initial [35]. Elle consiste aussi à l'étude de l'évolution de la fonction d'onde associée au système de la particule incidente de masse m_1 sous l'influence d'un potentiel d'interaction $V(\mathbf{R})$ d'une autre particule de masse m_2 , où $\mathbf{R} = \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2$ est la position relative des deux particules 1 et 2, respectivement. L'interaction est supposée *élastique*, i.e., où la structure interne éventuelle des particules ne change pas. Tout cela nous ramène, dans le référentiel du centre de masse des deux particules, à l'étude de la diffusion par un potentiel $V(\mathbf{R})$ d'une particule unique, appelée particule relative, dont la masse

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (1.1)$$

est la masse réduite. La particule libre se mouvant dans le sens positif de l'axe des z est décrite par une onde plane que nous écrivons sous la forme

$$\Psi_{\text{inc}}(\mathbf{R}) \sim \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}) \quad (1.2)$$

où \mathbf{k} est le vecteur d'onde et $\Psi_{\text{inc}}(\mathbf{R})$ est l'onde plane incidente. Les particules diffusées peuvent être décrites, loin du centre diffuseur, par une onde sphérique divergente

$$\Psi_{\text{sc}}(\mathbf{R}) \sim f(\theta, \varphi) \frac{\exp(ikR)}{R} \quad (1.3)$$

où $\Psi_{\text{sc}}(\mathbf{R})$ est l'onde sphérique diffusée et $f(\theta, \varphi)$ étant, comme l'indique la Figure 1-1, une certaine fonction de l'angle de diffusion θ , l'angle compris entre l'axe des z et la direction de la particule diffusée, et l'angle φ . Cette fonction $f(\theta, \varphi)$ est appelée *amplitude de diffusion* et k est le module du vecteur \mathbf{k} donné par $k = \sqrt{2\mu E}/\hbar$, avec E étant l'énergie cinétique de la particule relative. De ce fait, la fonction d'onde exacte $\Psi(\mathbf{R})$, solution de l'équation de Schrödinger

$$\left[\nabla_{\mathbf{R}}^2 + k^2 - \frac{2\mu}{\hbar^2} V(\mathbf{R}) \right] \Psi(\mathbf{R}) = 0 \quad (1.4)$$

avec l'énergie potentielle $V(\mathbf{R})$, doit avoir aux grandes distances la forme asymptotique

$$\Psi(\mathbf{R}) \underset{\mathbf{R} \rightarrow \infty}{\sim} A \left(e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} + f(\theta, \varphi) \frac{e^{ikR}}{R} \right) \quad (1.5)$$

avec A est une constante de normalisation. La fonction $f(\theta, \varphi)$, qui dépend du potentiel $V(\mathbf{R})$, représente l'amplitude de diffusion dans la direction $\Omega \equiv (\theta, \varphi)$ par rapport à la direction d'incidence. Par ailleurs, on peut trouver une relation entre l'amplitude de diffusion $f(\theta, \varphi)$ et l'élément de matrice $\langle \mathbf{k}' | V | \Psi_{\mathbf{k}}^+ \rangle$, où \mathbf{k}' est le vecteur d'onde relatif à l'onde diffusée, tel que $k' = k$, faisant les angles θ et φ avec lui [36]

$$f(\theta, \varphi) = - \left(\frac{\mu}{2\pi} \right) \langle \mathbf{k}' | V | \Psi_{\mathbf{k}}^+ \rangle. \quad (1.6)$$

1.2 Section efficace élastique

La distribution angulaire des particules, diffusées par l'interaction avec d'autres particules ou par un centre diffuseur, est décrite en terme de *section efficace* de diffusion.

Soit $d\sigma/d\Omega$ la section efficace différentielle définie comme étant le rapport entre le flux des particules diffusées sortant j_{sc} à travers la surface $ds = R^2 d\Omega$, pour $R \rightarrow \infty$, par unité d'angle solide et le flux incident j_{inc} , comme il est indiqué sur la Figure 1-1. Le détecteur D est placé en dehors du faisceau incident, de sorte qu'il détecte les particules diffusées seulement [34].

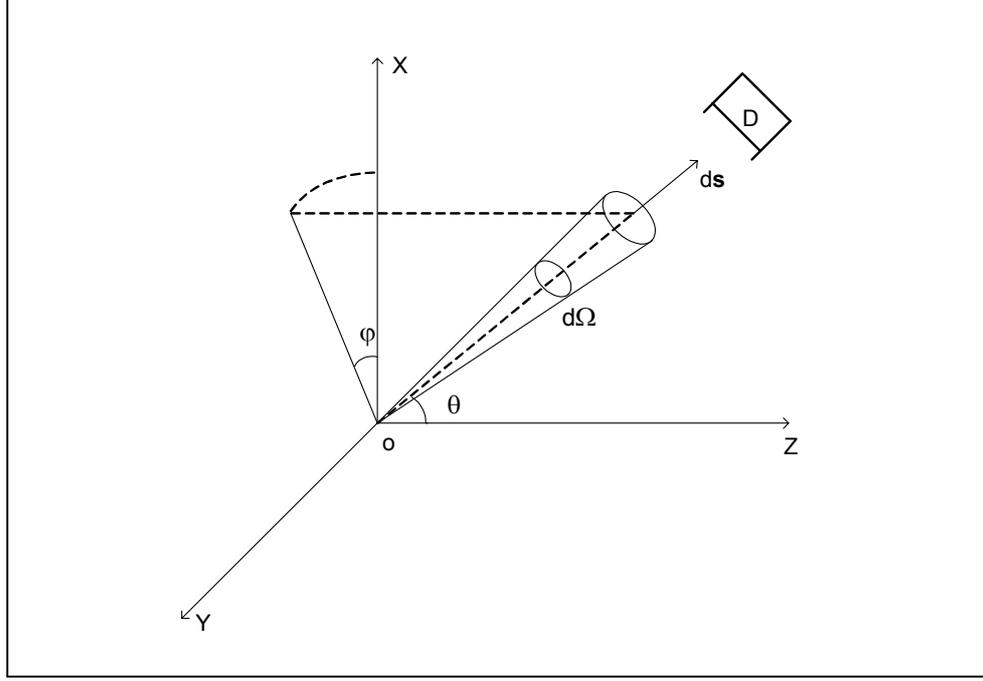


FIG. 1-1 – Diffusion d'un faisceau incident par un potentiel $V(R)$ central. Le courant diffusé traverse un élément de surface ds sous un angle solide $d\Omega$, avec $\Omega \equiv (\theta, \varphi)$, et un détecteur D.

Donc, le flux sortant correspondant peut être calculé à partir de

$$\Psi_{sc} = Af(\theta, \varphi) \frac{e^{ikR}}{R}. \quad (1.7)$$

Par contre, le flux incident est calculé à partir de la fonction d'onde des particules incidentes

$$\Psi_{inc} = A \exp(i\mathbf{kR}). \quad (1.8)$$

La probabilité de la densité de courant \mathbf{j} est donnée par [36]

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2\mu i} [\Psi^*(\nabla\Psi) - (\nabla\Psi^*)\Psi]. \quad (1.9)$$

L'opérateur ∇ dans les coordonnées sphériques est

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial R} \mathbf{u}_R + \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial \theta} \mathbf{u}_\theta + \frac{1}{R \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \mathbf{u}_\varphi \quad (1.10)$$

avec \mathbf{u}_R , \mathbf{u}_θ et \mathbf{u}_φ sont les vecteurs unitaires. Ainsi, le courant radial sera

$$\mathbf{j} \cdot \mathbf{u}_R = \frac{\hbar}{2\mu i} \left[\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial R} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial R} \Psi \right]. \quad (1.11)$$

Si nous substituons l'équation (1.5) dans cette dernière expression, on trouve pour les grandes valeurs de R le courant radial correspondant

$$\mathbf{j}_{\text{sc}} \cdot \mathbf{u}_R = j_{\text{sc}} = |A|^2 v \frac{|f(\theta, \varphi)|^2}{R^2}. \quad (1.12)$$

De la même façon, on trouve le courant radial incident

$$\mathbf{j}_{\text{inc}} \cdot \mathbf{u}_R = |A|^2 v \quad (1.13)$$

où v est la vitesse relative. Le flux sortant à travers la surface ds est par conséquent

$$\mathbf{j}_{\text{sc}} \cdot d\mathbf{s} = j_{\text{sc}} R^2 d\Omega. \quad (1.14)$$

Donc, la section efficace différentielle est tout simplement

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta, \varphi)|^2. \quad (1.15)$$

Nous avons en outre vu que, si le potentiel $V(R)$ est un potentiel central, l'amplitude de diffusion $f(\theta, \varphi)$ est indépendante de l'angle φ et sera donnée suite à un calcul simple par

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [\exp\{2i\eta_l(k)\} - 1] P_l(\cos\theta), \quad (1.16)$$

où l est le nombre quantique orbital. La section efficace différentielle devient

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l+1)(2l'+1) \exp[i\{\eta_l(k) - \eta_{l'}(k)\}] \\ \times \sin \eta_l(k) \sin \eta_{l'}(k) P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta). \end{aligned} \quad (1.17)$$

En utilisant les propriétés des polynômes de Legendre $P_l(\cos\theta)$, plus exactement

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{-1}^{+1} P_l(x) P_{l'}(x) dx = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'} \\ P_l(1) = 1 \text{ et } P_l(-1) = (-1)^l, \end{array} \right. \quad (1.18)$$

l'intégrale de $\sigma(\theta) = d\sigma/d\Omega$ sur une sphère nous conduit à la section efficace totale de diffusion

σ_{tot} . De ce fait, en utilisant l'Eq. (1.16), la section efficace élastique intégrée σ_{tot} est trouvée comme

$$\sigma_{\text{tot}} = 2\pi \int_0^\pi |f(\theta)|^2 \sin \theta d\theta. \quad (1.19)$$

Ce qui donne aisément après un calcul assez long

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \eta_l. \quad (1.20)$$

1.3 Equation d'onde radiale

Si on suppose que le potentiel d'interaction a une symétrie sphérique, nous pouvons supposer que $V(\mathbf{R})$ est une fonction de R seulement. Le potentiel est dit dans ce cas *central* et l'équation de Schrödinger (1.4) peut être écrite comme [34]

$$\left[\nabla_{\mathbf{R}}^2 + k^2 - \frac{2\mu}{\hbar^2} V(R) \right] \Psi(\mathbf{R}) = 0. \quad (1.21)$$

Nous adoptons le système des coordonnées sphériques avec l'axe des z le long de la direction d'incidence. Dans ce système, le Laplacien s'écrit [37]

$$\nabla_{\mathbf{R}}^2 = \frac{1}{R^2} \frac{\partial}{\partial R} \left(R^2 \frac{\partial}{\partial R} \right) - \frac{\mathbf{L}^2}{\hbar^2 R^2} \quad (1.22)$$

où \mathbf{L} est l'opérateur moment cinétique orbital défini par

$$\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{p}, \quad (1.23)$$

avec $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ étant l'impulsion linéaire de la particule à une position \mathbf{R} . Dans un traitement quantique du moment cinétique orbital [37], on montre que \mathbf{L} satisfait les règles de commutation fondamentales suivantes

$$[\mathbf{L}^2, L_x] = [\mathbf{L}^2, L_y] = [\mathbf{L}^2, L_z] = 0, \quad (1.24)$$

avec L_x , L_y et L_z étant ses composantes. De ces relations, nous pouvons conclure que les opérateurs \mathbf{L}^2 et la composante L_z sur l'axe des z ont les mêmes fonctions propres, notées

$Y_{lm}(\theta, \varphi)$ et appelées *harmoniques sphériques*. Ainsi,

$$\mathbf{L}Y_{lm}(\theta, \varphi) = l(l+1)\hbar Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (1.25)$$

$$L_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = m\hbar Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (1.26)$$

où m est le nombre quantique magnétique.

Par substitution de l'équation (1.22) dans l'Eq. (1.21), nous obtenons la nouvelle forme de l'équation de Schrödinger

$$\left[\frac{1}{R^2} \frac{\partial}{\partial R} \left(R^2 \frac{\partial}{\partial R} \right) - \frac{\mathbf{L}^2}{\hbar^2 R^2} + k^2 - \frac{2\mu}{\hbar^2} V(R) \right] \Psi(\mathbf{R}) = 0. \quad (1.27)$$

La fonction d'onde totale $\Psi(\mathbf{R})$ peut être développée en ondes partielles de moment angulaire l et de nombre magnétique m comme suit

$$\Psi(\mathbf{R}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} C_{lm}(k) F_l(R) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (1.28)$$

où $C_{lm}(k)$ sont des constantes et $F_l(R)$ sont les fonctions radiales. L'insertion de ce développement de $\Psi(\mathbf{R})$ dans l'équation de Schrödinger (1.27) ainsi que le recours à la relation (1.25) permettent d'obtenir pour toute fonction radiale l'équation [38]

$$\frac{1}{R^2} \frac{d}{dR} \left(R^2 \frac{dF_l(R)}{dR} \right) + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{R^2} - \frac{2\mu}{\hbar^2} V(R) \right] F_l(R) = 0. \quad (1.29)$$

Introduisons une nouvelle fonction radiale

$$\Phi_l(R) = R \cdot F_l(R), \quad (1.30)$$

qui satisfait maintenant l'équation simple

$$\left[\frac{d^2}{dR^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{R^2} - \frac{2\mu}{\hbar^2} V(R) \right] \Phi_l(R) = 0. \quad (1.31)$$

L'équation (1.31) est l'équation d'onde radiale de diffusion par un potentiel central. La forme asymptotique de la fonction $\Phi_l(R)$ est l'onde stationnaire

$$\Phi_l(R) \underset{R \rightarrow \infty}{\sim} \sin \left(kR - l\frac{\pi}{2} + \eta_l \right). \quad (1.32)$$

1.4 Déphasage élastique

Le comportement asymptotique des fonctions radiales (1.32) présente une différence de phase introduite par le potentiel $V(R)$ sur les particules diffusées. Ce déphasage η_l constitue la seule différence entre les comportements asymptotiques des fonctions d'onde. Ces déphasages sont obtenus par la résolution de l'équation d'onde de Schrödinger (1.31).

Généralement, le calcul des déphasages se fait quantiquement jusqu'à une certaine valeur $l = L$, au-delà de laquelle le problème peut être traité par une méthode semi-classique [38].

1.4.1 Traitement quantique

Si le potentiel varie pour les grandes valeurs de R comme $-C_n/R^n$, la solution asymptotique $\Phi_l(R)$ est donnée par

$$F_l(R) = \frac{\Phi_l(R)}{R} \quad (1.33)$$

$$= B_l(k)j_l(kR) + C_l(k)n_l(kR) \quad (1.34)$$

$$= B_l(k) [j_l(kR) - \tan \eta_l(k) \cdot n_l(kR)], \quad (1.35)$$

où $j_l(kR)$ et $n_l(kR)$ sont les fonctions sphériques de Bessel et Neumann [39], respectivement, et $B_l(k)$ et $C_l(k)$ sont des constantes réelles d'intégration. Elles sont indépendantes de R . En utilisant les expressions des fonctions sphériques de Bessel et Neumann pour les grandes valeurs de R

$$j_l(x) \longrightarrow +\frac{1}{x} \sin \left(x - \frac{1}{2}l\pi \right) \quad (1.36)$$

$$n_l(x) \longrightarrow -\frac{1}{x} \cos \left(x - \frac{1}{2}l\pi \right), \quad (1.37)$$

le déphasage peut donc être calculé par la formule

$$\tan \eta_l(k) = -\frac{C_l(k)}{B_l(k)}. \quad (1.38)$$

Afin de calculer les déphasages, nous résolvons en utilisant l'algorithme de Numérov [40] l'équation radiale (1.31). Supposons que le potentiel $V(R)$ a une portée finie jusqu'à $R = a$, i.e., $V(R \geq a) = 0$, comme le montre la Figure 1-2, avec $b = l/\sqrt{2\mu E}$ étant le paramètre d'impact. Nous pouvons scinder le domaine de R en deux régions, une interne ($R < a$) et

une autre externe ($R > a$). Pour $R = a$, il faut que la fonction =d'onde radiale $\Phi_l(R)$ et sa première dérivée $\frac{d\Phi_l(R)}{dR}$ soient continues; en d'autres termes, sa dérivée logarithmique $\frac{1}{\Phi_l(R)} \frac{d\Phi_l(R)}{dR}$ doit être continue [34, 36]. Ainsi, la fonction radiale $\Phi_l(R)$ est donnée dans la région externe par l'équation (1.35). Désignons par

$$\gamma_l(k) = \frac{1}{\Phi_l(R)} \frac{d\Phi_l(R)}{dR} \Big|_{R=a} \quad (1.39)$$

la valeur de la dérivée logarithmique de $\Phi_l(R)$ en $R = a$. Nous obtenons

$$\gamma_l(k) = k \frac{j_l'(ka) - \tan \eta_l(k) n_l'(ka)}{j_l(ka) - \tan \eta_l(k) n_l(ka)} \quad (1.40)$$

où on a

$$\begin{cases} j_l'(ka) = \left[\frac{dj_l(\rho)}{d\rho} \right]_{\rho=ka} \\ n_l'(ka) = \left[\frac{dn_l(\rho)}{d\rho} \right]_{\rho=ka} \end{cases} \quad (1.41)$$

De ce fait, le déphasage η_l est donné par

$$\tan \eta_l(k) = \frac{k j_l'(ka) - \gamma_l(k) j_l(ka)}{k n_l'(ka) - \gamma_l(k) n_l(ka)}. \quad (1.42)$$

1.4.2 Traitement semi-classique

Pour évaluer l'ordre de grandeur des déphasages $\eta_l(k)$ pour des l grands, nous utilisons le fait que le mouvement devient semi-classique pour ces valeurs de l . Dans ce cas, la théorie semi-classique montre que [41]

$$\eta_l(k) = -\frac{\mu}{\hbar^2} \int_{R_0}^{\infty} \frac{V(R)}{\sqrt{k^2 - \frac{(l+1/2)^2}{R^2}}} dR, \quad (1.43)$$

avec $R_0 \simeq l/k$. Nous avons déjà vu que le potentiel d'interaction pour les grandes distances internucléaires R varie comme $V(R) \sim -C_n/R^n$, avec $n > 2$ et C_n étant des constantes. Il est donc facile d'obtenir la formule approximative suivante [41]

$$\eta_l(k) \simeq \frac{\mu C_n k^{n-2}}{\hbar^2 (l + \frac{1}{2})^{n-1}} f(n) \quad (1.44)$$

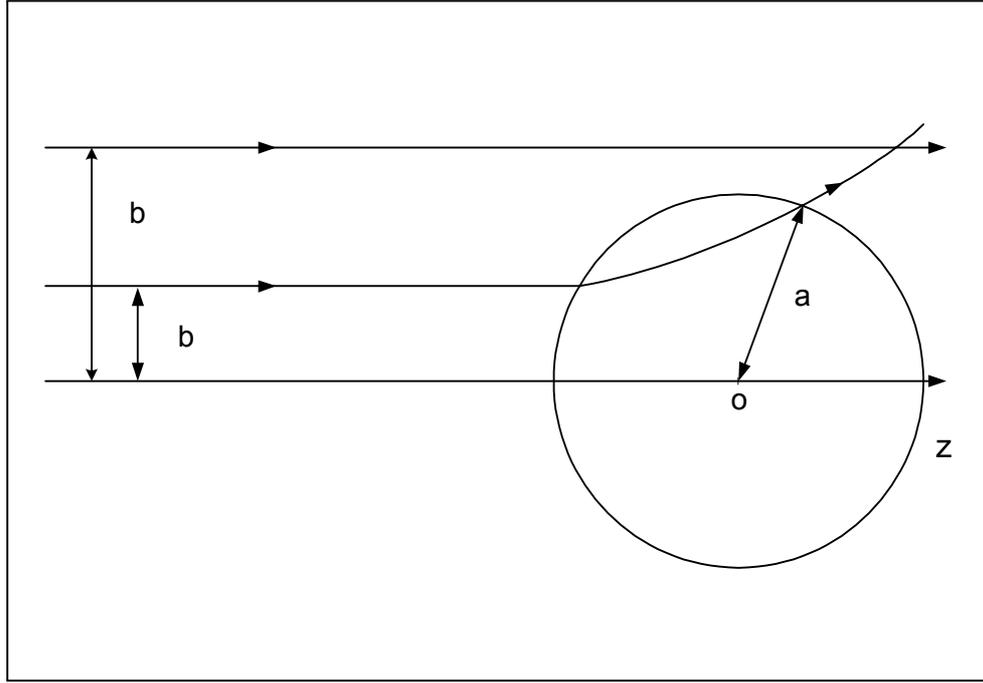


FIG. 1-2 – Diffusion d’une particule de paramètre d’impact b par un potentiel $V(R)$ central. Si $b > a$, la particule ne diffuse pas.

où la fonction $f(n)$ est définie par

$$f(n) = \begin{cases} \frac{(n-3)(n-5)\cdots 1}{(n-2)(n-4)\cdots 2} \frac{\pi}{2}, & \text{pour } n > 2 \text{ et paire} \\ \frac{(n-3)(n-5)\cdots 1}{(n-2)(n-4)\cdots 2}, & \text{pour } n > 3 \text{ et impaire} \\ \pi/2 & \text{pour } n = 2 \\ 1 & \text{pour } n = 3. \end{cases} \quad (1.45)$$

Par conséquent, la connaissance pour k fixé des déphasages $\eta_l(k)$ pour toute valeur de l doit être suffisante pour calculer les sections efficaces élastiques et thermophysiques.

Chapitre 2

Systeme MgHe

Le but de ce deuxième chapitre est de construire les courbes d'énergie potentielle $V(R)$ à travers lesquelles un atome de magnésium, dans son état fondamental $\text{Mg}(3s^2)$ ou dans son premier état excité $\text{Mg}(3s3p)$, interagit avec un atome d'hélium dans son état fondamental $\text{He}(1s^2)$. D'un autre côté, la construction des moments dipolaires de transition $D(R)$, utiles pour le calcul du coefficient de photoabsorption, sera également abordée. Dans une deuxième étape, nous essayerons de vérifier la qualité des potentiels et des moments dipolaires de transition construits à travers le calcul de quelques paramètres telles que la diffusion, les durées de vies des états, etc.

2.1 Potentiels d'interaction

Les potentiels d'interaction, ainsi que les moments dipolaires de transition, utilisés dans nos calculs n'ont pas des formes analytiques précises. Ils sont plutôt construits dans trois domaines de séparation internucléaires. La partie la plus importante est la partie intermédiaire, appelée aussi partie des données expérimentales, à partir de laquelle nous pouvons construire les différentes courbes d'énergie potentielle et moment dipolaire de transition dans toutes les régions. La connexion des données de la partie intermédiaire avec celles des deux autres parties, courtes et grandes distances, doit être faite d'une manière lisse et convenable. Ceci est réalisé en imposant la continuité du potentiel $V(R)$ et du moment dipolaire de transition $D(R)$ et de leurs dérivées aux points de connexions. De ce fait, le premier point des données, correspondant à $R = R_s$, sera le dernier point des courtes distances et le dernier point des données, correspondant à $R = R_l$, sera le premier point des grandes distances.

Nous avons utilisé, pour construire chaque courbe d'énergie potentielle, deux séries dis-

tinctes de points de potentiel, que nous désignons tout au long de ce travail comme *série I* et *série II*. Mais au préalable, il convient d’inviter le lecteur de consulter l’Annexe A pour l’introduction des états électroniques des molécules diatomiques.

2.1.1 Série de potentiel I

Pour cette première série, nous avons adopté les données de Hinde [42] pour l’état fondamental et de Mella *et al.* [43] et Reho *et al.* [44] pour les deux états excités.

Plus précisément, pour l’état $X^1\Sigma^+$, nous avons utilisé les données de Hinde [42] pour les distances internucléaires comprises dans l’intervalle $5.76 \leq R \leq 22.68$. La construction de ce potentiel nous a fourni une profondeur de puits $D_e = 4.73 \text{ cm}^{-1}$ correspondant à une distance d’équilibre $R_e = 9.7$.

Pour le premier état excité $A^1\Pi$, la construction de cette courbe d’énergie potentielle est basée sur les données de Mella *et al.* [43] dans le domaine de distance allant de $R = 5.67$ jusqu’à $R = 19.84$. Ces données sont également extrapolées, dans la partie des petites distances, par celles de Reho *et al.* [44] pour $3.8 \lesssim R \lesssim 5.3$. Dans ce cas, l’énergie de dissociation est trouvée $D_e = 39.64 \text{ cm}^{-1}$ et la distance d’équilibre est $R_e = 7.2$.

Enfin, concernant le deuxième état excité $B^1\Sigma^+$, il est construit exclusivement en utilisant les données de Mella *et al.* [43] dans le domaine des distances internucléaires $5.67 \leq R \leq 17.95$. Cette construction produit les valeurs $D_e = 0.77 \text{ cm}^{-1}$ et $R_e = 16.3$.

2.1.2 Série de potentiel II

Les potentiels d’interaction de cette deuxième série sont construits exclusivement à partir des données qui nous ont été fournies par Paul-Kwiek et publiées dans Paul-Kwiek et Czuchaj [27].

Pour la symétrie moléculaire $X^1\Sigma^+$, nous avons adopté les données pour $2.75 \leq R \leq 14$. Cette construction produit une profondeur de puits $D_e = 3.85 \text{ cm}^{-1}$ à la distance d’équilibre $R_e = 10.5$.

Pour les deux états excités, $A^1\Pi$ et $B^1\Sigma^+$, les constructions ont été faites en utilisant des données correspondant aux séparations internucléaires comprises entre $R = 2.75$ et $R = 18.0$. Ces constructions ont produit des énergies de dissociation, respectivement, de valeurs 19.5 cm^{-1} et 1.28 cm^{-1} , correspondant aux positions d’équilibre 8.1 et 16.5.

Enfin, pour plus d’indications, nous listons dans le Tableau 2.1 nos résultats des distances

TAB. 2.1 – Distances d'équilibre R_e et énergies de dissociation D_e fournies par notre construction des courbes d'énergie potentielle du système MgHe. Les résultats obtenus à travers la série I sont marqués par † et ceux obtenus à travers la série II sont marqués par ‡.

Symétrie moléculaire	Distance d'équilibre		Energie de dissociation	
	R_e (u.a.)		D_e (u.a.)	
$X \ ^1\Sigma^+$	9.70	Ce travail†	4.73	Ce travail†
	10.50	Ce travail‡	3.85	Ce travail‡
	9.62	[45]	4.76	[45]
	9.62	[46]	4.76	[46]
$A \ ^1\Pi$	7.20	Ce travail†	39.64	Ce travail†
	8.10	Ce travail‡	19.50	Ce travail‡
	7.22	[43]	39.58	[43]
$B \ ^1\Sigma^+$	16.30	Ce travail†	0.77	Ce travail†
	16.50	Ce travail‡	1.28	Ce travail‡
	16.29	[43]	0.81	[43]

†Série I.

‡Série II.

d'équilibre R_e et des énergies de dissociation D_e avec quelques comparaisons avec des données qui peuvent être disponibles dans la littérature.

2.1.3 Domaine des courtes distances

Les interactions dans cette région sont purement répulsives. Ceci est dû au recouvrement des nuages électroniques, qui se manifeste par une répulsion coulombienne entre les électrons.

Plusieurs formes analytiques ont été proposées pour décrire la variation du potentiel d'interaction dans cette région. Nous avons choisi la forme la plus convenable, proposée par Born et Mayer [34]

$$V(R) \sim A \exp(-BR), \quad (2.1)$$

où A et B sont deux paramètres constants qui peuvent être calculés à l'aide des propriétés de continuité du potentiel et de sa première dérivée, à savoir

$$B = - \frac{1}{V(R)} \frac{dV(R)}{dR} \Big|_{R=R_s} \quad (2.2)$$

et

$$A = V(R) \exp(+BR) \Big|_{R=R_s}, \quad (2.3)$$

TAB. 2.2 – Paramètres des courtes et grandes distances en u.a. Les coefficients de dispersion sont tous de Mitroy et Zhang [47].

Symétrie moléculaire	A		B		Coefficients de dispersion		
	Série I	Série II	Série I	Série II	C_6	C_8	C_{10}
$X \ ^1\Sigma^+$	4.32	03.87	1.28	1.38	21.45	884.00	3.933×10^4
$A \ ^1\Pi$	0.87	28.22	1.24	2.37	43.41	195.30	4.200×10^4
$B \ ^1\Sigma^+$	0.30	03.53	0.61	1.45	77.75	10520	1.445×10^6

au point $R = R_s$. Les valeurs obtenues des deux paramètres A et B , pour les deux séries I et II, sont tabulées dans le Tableau 2.2.

2.1.4 Domaine des grandes distances

Le potentiel d'interaction $V(R)$ aux grandes distances, qui correspond théoriquement aux séparations $R_l \leq R < \infty$, est déterminé par les interactions des moments multipolaires électriques et des forces d'induction et de dispersion. Dans ce domaine des distances, les interactions sont généralement attractives et les énergies potentielles, dépendantes de la distance interatomique R , ont la forme suivante

$$V(R) \sim \sum_{n=6,8,10} -\frac{C_n}{R^n} \quad (2.4)$$

où C_n sont des constantes, appelées *coefficients de dispersion*. Dans notre construction des potentiels, nous avons adopté les coefficients très récents de Mitroy et Zhang [47]. Ces valeurs sont listées dans le Tableau 2.2.

2.1.5 Construction des potentiels

Nos courbes d'énergie potentielle ainsi construites pour chaque symétrie moléculaire sont représentées sur les Figures 2-1, 2-2 et 2-3.

En particulier, sur les Figures 2-4 et 2-5, nous avons rassemblé les trois courbes de chaque série. Nous avons également représenté les courbes des différences de potentiel $\Delta V_{A-X}(R)$ et $\Delta V_{B-X}(R)$ où

$$\Delta V_{A-X}(R) = V_A(R) - V_X(R) \quad (2.5)$$

et

$$\Delta V_{B-X}(R) = V_B(R) - V_X(R). \quad (2.6)$$

La transformation de ces différences en terme de longueur d'onde λ montre en particulier l'existence d'extremums. Ceci signifie classiquement qu'il y a possibilité d'apparition de satellites dans l'aile bleue proche de la longueur d'onde $\lambda = 273$ nm, lorsque la série I est utilisée, et proche de $\lambda = 268$ nm, lorsque la série II est utilisée [48]. Tandis que dans l'aile rouge, et d'après la même figure, on peut espérer l'existence d'un satellite aux alentours de $\lambda = 413$ nm lorsque la série II est utilisée, mais aucun satellite n'est prévu avec la série I.

2.2 Moments dipolaires de transition

Comme nous l'avons déjà mentionné, la construction des moments dipolaires de transition $D(R)$ se fait d'une manière similaire à celle des courbes d'énergie potentielle. Pour cette raison, nous avons adopté les valeurs de Paul-Kwiek et Czuchaj [27] dans les intervalles de distance internucléaire $3.0 \leq R \leq 12.0$, pour la transition $X \ ^1\Sigma^+ \longrightarrow A \ ^1\Pi$, et $3.0 \leq R \leq 20.0$, pour la transition $X \ ^1\Sigma^+ \longrightarrow B \ ^1\Sigma^+$.

Toutes ces données sont connectées d'une manière lisse et convenable à la partie des grandes distances qui a la forme

$$D(R) \sim D_\infty + \frac{\zeta}{R^6} \quad (2.7)$$

avec $D_\infty = 2.343$ [27] et ζ est une constante obtenue par lissage. Pour les courtes distances, nous avons forcé les courbes des moments dipolaires de transition de prendre la forme linéaire

$$D(R) \sim a + bR \quad (2.8)$$

où les constantes a et b sont déterminées par les expressions de continuité

$$b = \left. \frac{dD(R)}{dR} \right|_{R=R_s} \quad (2.9)$$

et

$$a = D(R) - bR \Big|_{R=R_s}. \quad (2.10)$$

Les valeurs adoptées de ζ , a et b sont listées dans le Tableau 2.3 et les courbes des moments dipolaires de transition construites sont présentées sur la Figure 2-6.

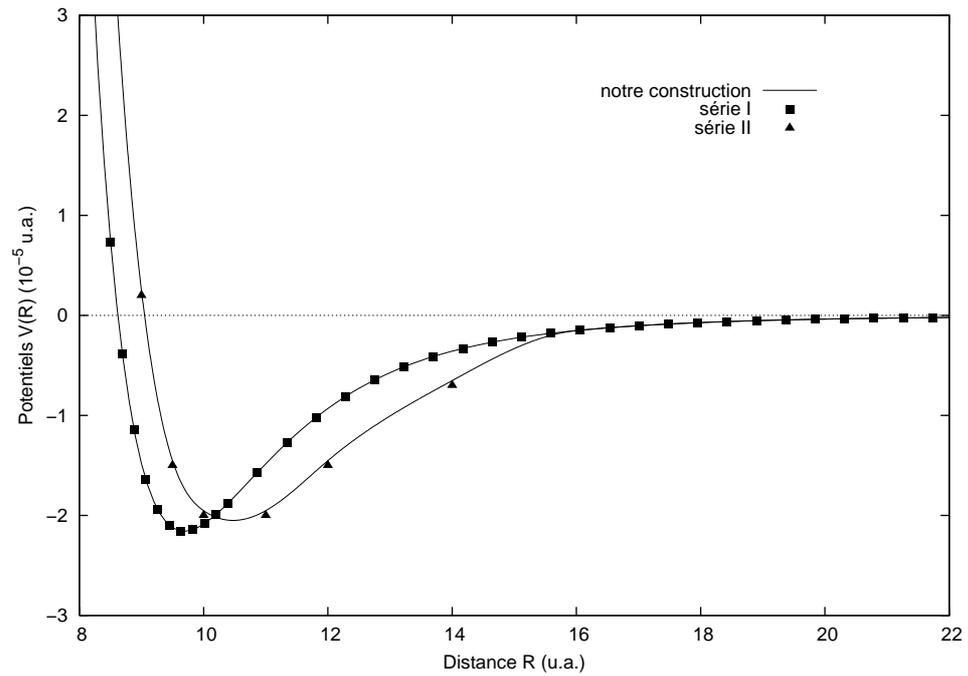


FIG. 2-1 – Courbes d'énergie potentielle de l'état fondamental $X \ ^1\Sigma^+$ du système MgHe construites à partir des séries de potentiel I et II.

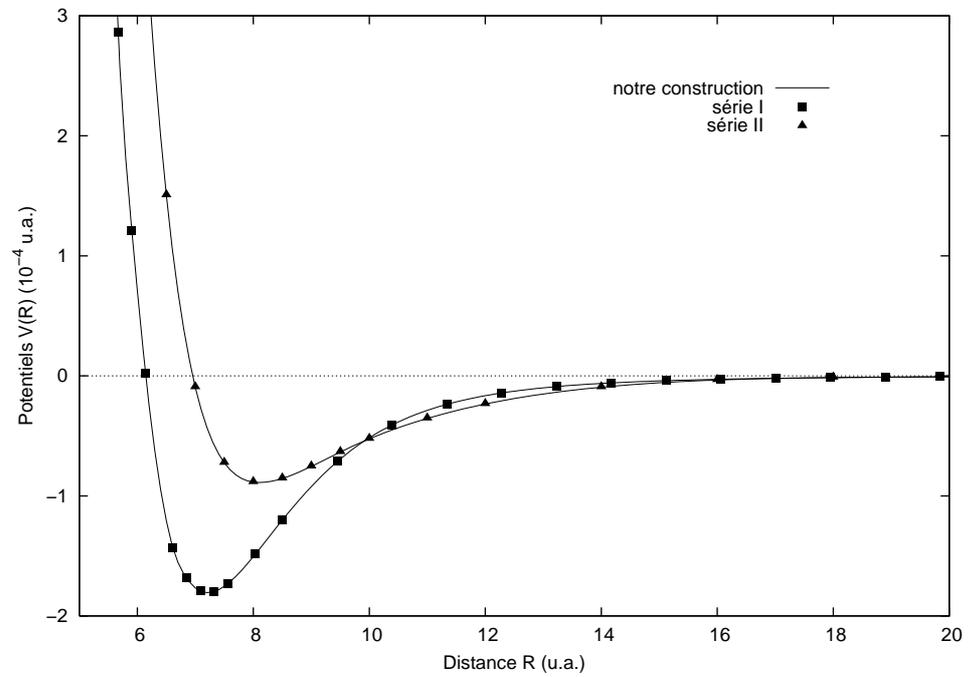


FIG. 2-2 – Courbes d'énergie potentielle de l'état excité $A \ ^1\Pi$ du système MgHe construites à partir des séries de potentiel I et II.

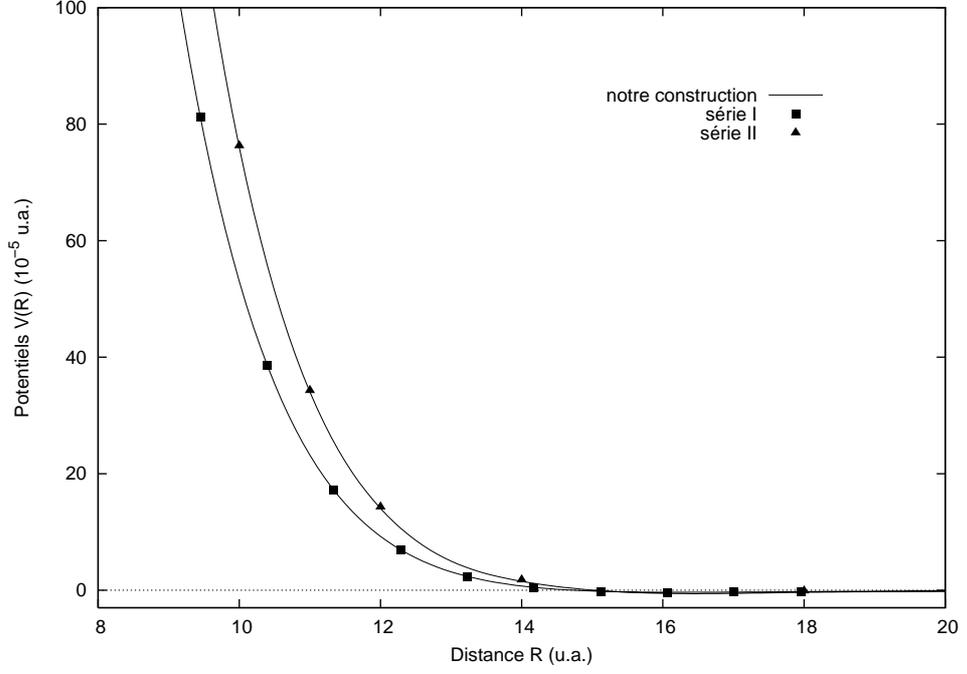


FIG. 2-3 – Courbes d'énergie potentielle de l'état excité $B^1\Sigma^+$ du système MgHe construites à partir des séries de potentiel I et II.

TAB. 2.3 – Paramètres constants adoptés dans notre construction des moments dipolaires de transition.

Transition	ζ	a	b
$\Sigma \rightarrow \Sigma$	$+1.31 \times 10^4$	+1.697	-0.123
$\Sigma \rightarrow \Pi$	-613.473	+2.065	+0.047

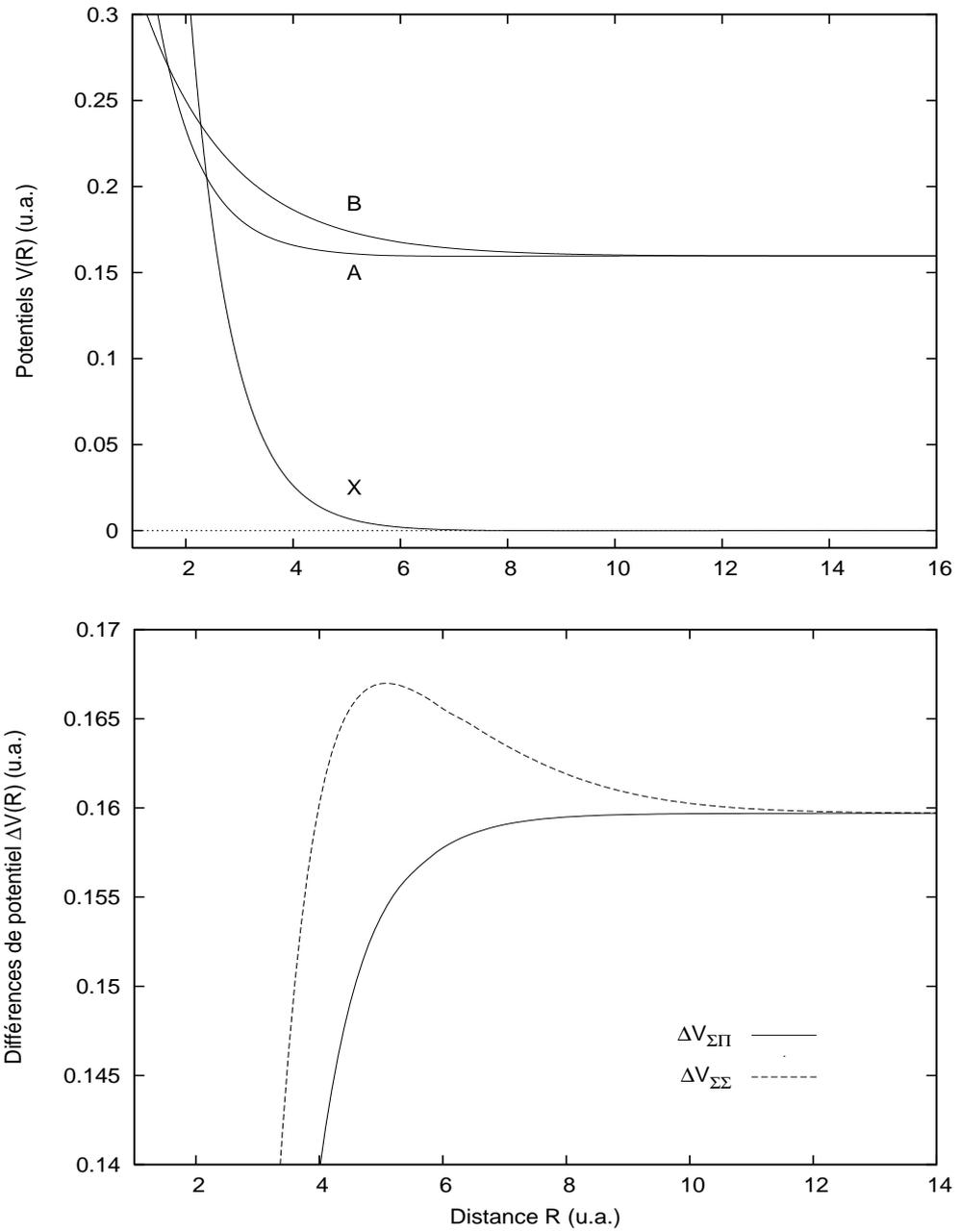


FIG. 2-4 – Représentation des trois courbes d'énergie potentielle, construites à partir de la série I, ainsi que les courbes représentant les différences de potentiel $\Delta V_{A-X}(R)$ et $\Delta V_{B-X}(R)$.

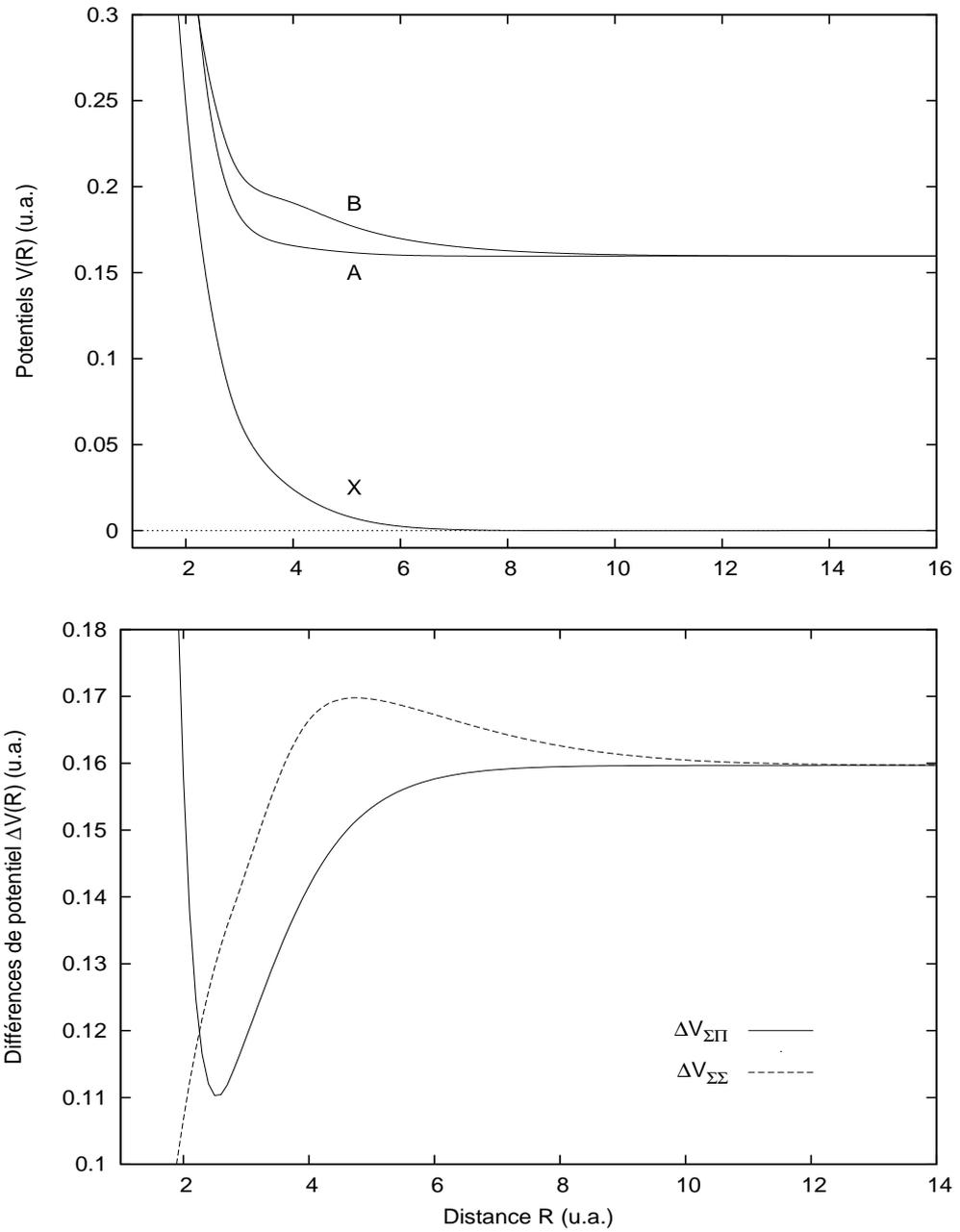


FIG. 2-5 – Représentation des trois courbes d'énergie potentielle, construites à partir de la série II, ainsi que les courbes représentant les différences de potentiel $\Delta V_{A-X}(R)$ et $\Delta V_{B-X}(R)$.

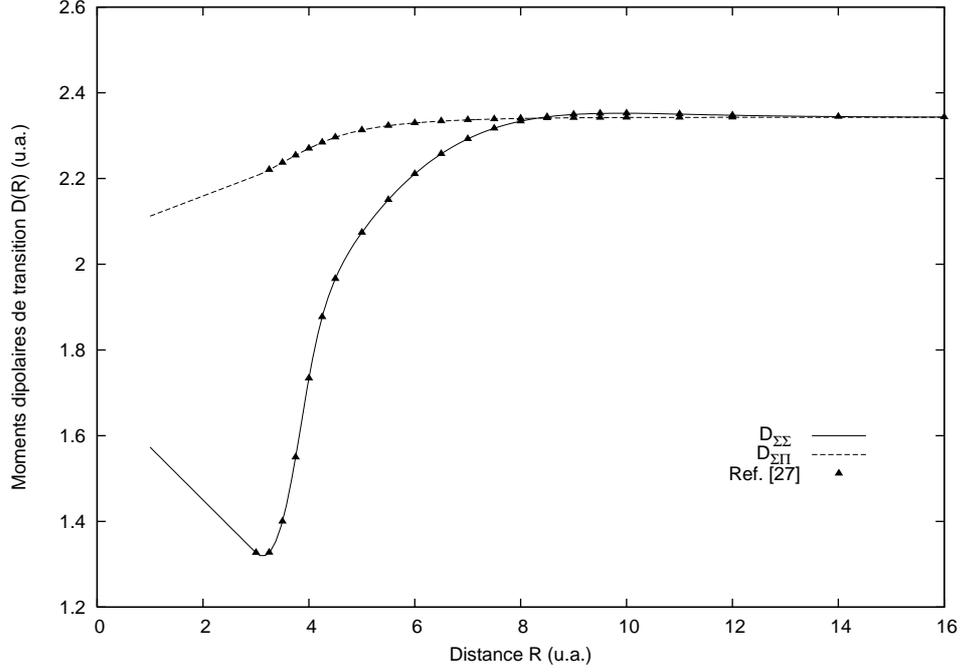


FIG. 2-6 – Représentation des courbes construites des moments dipolaires de transition qui lient l'état fondamental $X^1\Sigma^+$ du système MgHe aux deux états excités $A^1\Pi$ et $B^1\Sigma^+$. Les données utilisées pour ces constructions proviennent de Réf. [27].

2.3 Vérification des constructions

Pour vérifier la qualité des potentiels et des moments dipolaires de transition construits, qui vont être utilisés plus loin pour déterminer les paramètres d'élargissement de pression dans le cœur et dans les ailes, nous proposons d'examiner quelques grandeurs physiques, tels que les états rotationnels-vibrationnels, les coefficients thermophysiques et les durées de vie des états excités.

2.3.1 Etats rovibrationnels

L'une des méthodes utilisées pour évaluer la qualité des potentiels construits est la détermination de leurs états rovibrationnels et la comparaison des résultats obtenus avec d'autres valeurs publiées.

Dans l'étude théorique des molécules diatomiques, les énergies correspondantes $E_{v,J}$ et les fonctions radiales $\Phi_{v,J}(R)$ sont données par l'équation [35, 49]

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dR^2} + V(R) + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{J(J+1) - \Lambda^2}{R^2} \right] \Phi_{v,J}(R) = E_{v,J} \Phi_{v,J}(R), \quad (2.11)$$

où v est le nombre quantique de vibration, J est le nombre quantique de rotation et Λ est

la projection positive sur l'axe internucléaire du moment cinétique orbital. Les énergies de rotation-vibration $E_{v,J}$ sont données par la relation [49]

$$\begin{aligned}
E_{v,J} &= -D_e + G(v) + F(J) \\
&= -D_e + \omega_e \left(v + \frac{1}{2} \right) - \omega_e x_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 + \omega_e y_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^3 + \dots \\
&\quad + B_v J(J+1) - D_v [J(J+1)]^2 + \dots,
\end{aligned} \tag{2.12}$$

avec $\omega_e = \hbar \sqrt{\frac{k}{\mu}}$ est la fréquence de vibration et $\omega_e x_e$ et $\omega_e y_e$ sont les *coefficients d'anharmonicité*, B_v est la constante de rotation et D_v est la constante de distortion centrifuge.

Pour vérifier nos courbes d'énergie potentielle construites, nous avons utilisé, avec quelques modifications, l'algorithme ALF (Automatic Level Finder) du programme Level 7.4 de Le Roy [50]. Nos valeurs calculées pour les systèmes MgHe et Mg*He pour les deux séries I et II sont listées dans le Tableau 2.4. Malgré le caractère pratiquement répulsif des courbes d'énergie potentielle, nos calculs ont pu montrer l'existence d'un nombre limité de niveaux vibrationnels sans rotation, c'est-à-dire, correspondant à $J = 0$ ou $J = 1$. En effet, pour l'état $X^1\Sigma^+$, que ce soit pour la série I ou II, nous avons pu détecter un seul niveau vibrationnel. Par contre, pour l'état $A^1\Pi$, nous avons trouvé trois niveaux quand la série I est utilisée et deux niveaux seulement quand la série II est utilisée. Pour l'état $B^1\Sigma^+$, aucun niveau n'a été détecté avec les deux séries I ou II.

Le Tableau 2.4 représente aussi les niveaux rovibrationnels détectés avec l'état fondamental $X^1\Sigma^+$, où nos valeurs sont comparées avec celles de Lovallo et Klobukowski [30] et Funk *et al.* [51]. Malheureusement, nous n'avons trouvé pour l'état $A^1\Pi$ aucun résultat publié pour comparaison.

D'un autre côté, pour vérifier le nombre des niveaux vibrationnels détectés précédemment, nous avons utilisé une méthode semi-classique, qui a été développée par Gribakin et Flambaum [52]. Cette méthode est surtout utilisée pour trouver le nombre des états liés lorsque la rotation est négligée, i.e., $J = 0$ ou $J = 1$. D'après cette méthode semiclassique, si le potentiel interatomique $V(R)$ décroît pour les R grands comme $-C_n/R^n$, le nombre d'états liés N_b dans le potentiel est donné par la relation approximative

$$N_b^{(\text{GF})} \simeq \text{Int} \left[\frac{\Phi}{\pi} - \frac{n-1}{2(n-2)} \right] + 1, \tag{2.13}$$

avec $\text{Int}[\dots]$ est le plus grand entier plus petit ou égal à la valeur de l'expression entre les

TAB. 2.4 – Energies des niveaux rovibrationnels, en cm^{-1} , des deux états $X^1\Sigma^+$ et $A^1\Pi$ du système MgHe.

(v, J)	$X^1\Sigma^+$				$A^1\Pi$	
	Série I	Série II	Réf. [30]	Réf. [51]	Série I	Série II
(0, 0)	-0.795	-0.619	-0.769	-0.734		
(0, 1)	-0.557	-0.408	-0.531	-0.503	-23.958	-10.295
(0, 2)	-0.111	-0.019	-0.088	-0.074	-22.763	-9.379
(0, 3)					-20.981	-8.074
(0, 4)					-18.624	-6.365
(0, 5)					-15.711	-4.283
(0, 6)					-12.26	-1.875
(0, 7)					-8.324	+0.781
(0, 8)					-3.926	+3.518
(0, 9)					+0.864	
(1, 1)					-4.530	-1.152
(1, 2)					-3.751	-0.682
(1, 3)					-2.613	+0.038
(1, 4)					-1.164	
(1, 5)					+0.494	

crochets et Φ est la phase semiclassique relative au potentiel $V(R)$ donnée par

$$\Phi = \frac{1}{\hbar} \int_{R_0}^{\infty} dR \sqrt{-2\mu V(R)}, \quad (2.14)$$

où R_0 est le rayon pour lequel $V(R_0) = 0$.

2.3.2 Intégrales de collision et coefficients de diffusion

Pour évaluer l'exactitude de nos courbes d'énergie potentielle, nous avons aussi choisi d'analyser les propriétés thermophysiques des atomes de magnésium Mg diffusant dans un gaz d'hélium et, essentiellement, l'examen de la variation du coefficient de diffusion avec la température.

Selon l'approximation de Chapman-Enskog des gaz dilués, en supposant l'interaction entre un atome de magnésium Mg avec un autre atome d'hélium He à travers une courbe d'énergie potentielle, le coefficient de diffusion dépendant de la température $D(T)$ est exprimé, en

terme d'intégrale de collision $\Omega_{1,1}(T)$, par [53, 54]

$$D(T) = \frac{3}{8n} \sqrt{\frac{\pi k_B T}{2\mu}} \frac{1}{\Omega_{1,1}(T)}, \quad (2.15)$$

où n est la densité du gaz d'hélium, k_B est la constante de Boltzmann. $\Omega_{1,1}$ est défini par l'intégrale

$$\Omega_{1,1}(T) = \frac{1}{2(k_B T)^3} \int_0^\infty \sigma_D(E) \exp(-E/k_B T) E^2 dE, \quad (2.16)$$

avec $\sigma_D(E)$ étant la section efficace effective de diffusion. Celle-ci est donnée par [41, 55]

$$\sigma_D(E) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (l+1) \sin^2(\eta_{l+1} - \eta_l). \quad (2.17)$$

Etant donné que les atomes de magnésium Mg, lorsqu'ils sont dans leur premier état excité $3s3p$, interagissent avec l'hélium à travers les courbes d'énergie potentielle $A \ ^1\Pi$ ou $B \ ^1\Sigma^+$, la section efficace de diffusion totale est une section efficace pondérée [56]

$$\sigma_D(E) = \frac{2}{3}\sigma_D(A) + \frac{1}{3}\sigma_D(B). \quad (2.18)$$

Nous présentons dans le Tableau 2.5 nos résultats des intégrales de collision réduites $\bar{\Omega}_{1,1} = \Omega_{1,1}/\pi$ pour quelques températures T , où nous comparons nos valeurs pour l'état fondamental $X \ ^1\Sigma^+$ avec celles de Partridge et Stallcop [45]. Par ailleurs, nous listons dans le Tableau 2.6 nos valeurs des coefficients de diffusion, calculées pour une pression $p = 1$ torr. Nous avons comparé dans le même Tableau 2.6 nos résultats pour quelques températures avec des mesures de Redko *et al.* [57] et Aref'ev *et al.* [58] et aussi avec quelques autres valeurs calculées par Redko *et al.* en utilisant des potentiels de Barthelat *et al.* [59] et Czuchaj *et al.* [60]. Nos valeurs montrent une excellente concordance avec ces données publiées.

Par ailleurs, nous avons essayé de faire un lissage des données du coefficient de diffusion dépendant de la température avec le forme analytique

$$D(T) \sim \alpha T^\beta, \quad (2.19)$$

où α et β sont des paramètres constants générés par le lissage. Leurs valeurs sont listées dans le Tableau 2.8. La représentation de la variation du coefficient de diffusion D avec la température T est faite sur les Figures 2-7 et 2-8.

TAB. 2.5 – Intégrales de collision $\overline{\Omega}_{1,1}$, en \AA^2 , pour quelques températures. Les résultats obtenus pour l'état $X^1\Sigma^+$ sont comparés avec les valeurs de Partridge, Stallcop et Levin [45].

Température T (K)	$X^1\Sigma^+$			$A^1\Pi$		$B^1\Sigma^+$	
	Série I	Série II	Réf. [45]	Série I	Série II	Série I	Série II
50	15.44	16.62	15.20	16.60	14.80	32.59	35.43
200	11.61	12.34	11.45	8.52	8.97	22.82	25.20
1000	7.68	8.10	7.51	4.85	4.91	12.73	14.56
3000	5.47	5.55	5.05	3.01	3.03	7.24	8.15
6000	4.30	4.08	3.67	2.11	2.37	4.37	4.96
10000	3.47	3.11	2.83	1.57	2.03	2.76	3.34

TAB. 2.6 – Coefficients de diffusion, en $10^2 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$, à la pression $p = 1$ torr pour l'état $X^1\Sigma^+$ du système MgHe.

Température T (K)	Mg($3s^2$) + He				
	Série I	Série II	Expérience	Réf. [59]	Réf. [60]
300	3.74	3.53	3.40 ± 0.27 [57]	3.52	3.35
400	6.19	5.83		5.80	5.50
500	9.16	8.64		8.54	8.13
600	12.64	11.93		11.9	11.2
700	16.61	15.69		15.7	14.8
800	21.07	19.92		20.0	18.9
900	26.00	24.62	24.00 [58]	24.7	23.3
1000	31.39	29.76	28.90 [58]	29.9	28.3
1200	43.55	41.41	39.60 [58]	41.3	39.3
1400	57.49	54.84		54.4	51.7
1600	73.15	70.03		69.8	66.2
1800	90.51	86.98		87.2	82.3
2000	109.54	105.69		106	
2600	176.35	172.38		173	
3000	228.85	225.73		228	

TAB. 2.7 – Coefficients de diffusion, en $10^2 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$, à la pression $p = 1 \text{ torr}$ pour le premier état excité du système MgHe.

Température T (K)	Mg($3s3p$) + He	
	Série I	Série II
50	0.12	0.12
100	0.45	0.43
300	3.40	3.11
500	8.74	7.98
700	16.40	15.00
1000	32.23	29.64
1200	45.74	42.24
1600	80.04	74.45
2000	124.47	116.28
2600	211.28	197.54
3000	283.37	264.31

TAB. 2.8 – Paramètres de lissage, qui apparaissent dans l'équation (2.19), des données du coefficient de diffusion en fonction de la température.

Système moléculaire	$10^{+8} \times \alpha$		β	
	Série I	Série II	Série I	Série II
Mg($3s^2$) + He	148.8 ± 2.3	134.6 ± 2.5	1.775 ± 0.002	1.781 ± 0.003
Mg($3s3p$) + He	73.5 ± 1.6	63.7 ± 2.0	1.880 ± 0.003	1.889 ± 0.005

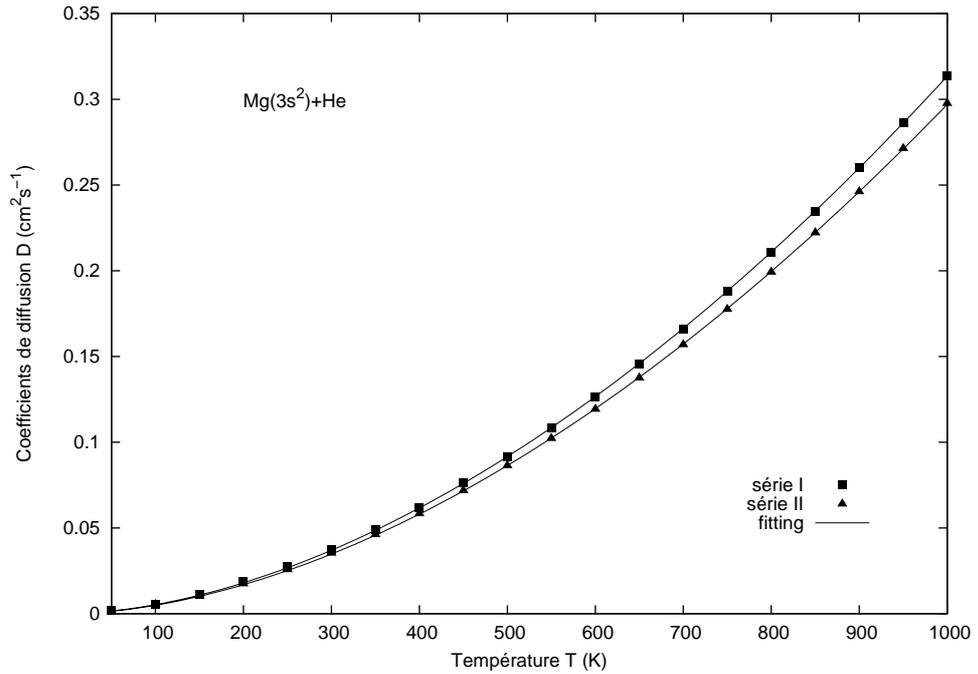


FIG. 2-7 – Représentation des coefficients de diffusion avec leurs courbes de lissage, pour les série I et II, en fonction de la température pour l'état fondamental $X^1\Sigma^+$ du système MgHe.

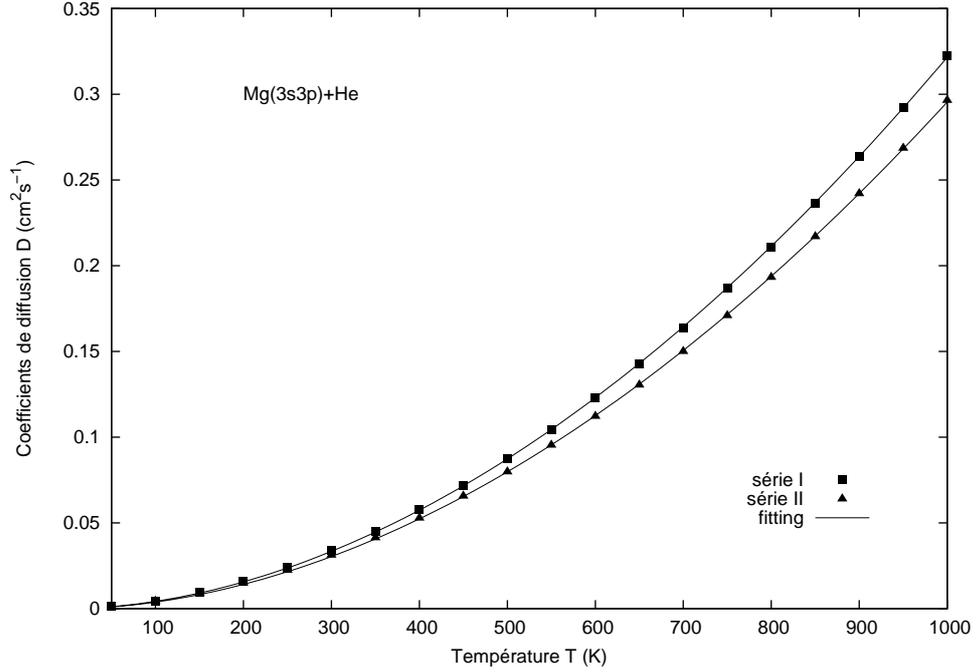


FIG. 2-8 – Représentation des coefficients de diffusion avec leurs courbes de lissage, pour les séries I et II, en fonction de la température pour le premier état excité du système MgHe.

2.3.3 Durées de vie

Une autre méthode, assez puissante, pour évaluer la qualité des courbes d'énergie potentielle et des moments dipolaires de transition consiste à calculer les durées de vie des états excités. Ici, elle consiste à déterminer la durée de vie de l'état excité $A\ ^1\Pi$ du système MgHe, car c'est le seul état des deux états excités qui peut supporter des niveaux vibrationnels ou, en d'autres termes, des états liés. La quasi-molécule passe d'un niveau d'énergie lié (v', J', Λ') de l'état excité $A\ ^1\Pi$ vers un autre niveau inférieur d'énergie libre ϵ'' , décrit par le terme $(\epsilon'', J'', \Lambda'')$, de l'état fondamental $X\ ^1\Sigma^+$ en émettant un photon.

D'après la théorie des spectres moléculaires [61], la durée de vie dépend inversement du taux de l'émission spontanée totale

$$\tau = \frac{1}{A(v', J', \Lambda')} \quad (2.20)$$

où le coefficient $A(v', J', \Lambda')$, en supposant que J est assez grand de sorte que $J' \simeq J'' = J$, est donné par

$$A(v', J, \Lambda') = \frac{64\pi^4\nu^3}{3hc^3} \frac{2 - \delta_{0,\Lambda'+\Lambda''}}{2 - \delta_{0,\Lambda'}} \int_0^\infty |\langle \Phi_{\epsilon',J} | D(R) | \Phi_{\epsilon'',J} \rangle|^2 d\epsilon''. \quad (2.21)$$

TAB. 2.9 – Durées de vie, en ns, de quelques niveaux rovibrationnels de l'état $A^1\Pi$ du système MgHe pour les deux séries I et II.

(v, J)		$J = 1$	$J = 3$	$J = 5$	$J = 7$
$v = 0$	Série I	2.109	2.147	2.106	2.104
	Série II	2.094	2.121	2.092	2.091
$v = 1$	Série I	2.096	2.094	2.091	
	Série II	2.089	2.088		

Dans cette dernière équation (2.21), δ représente le symbole de Kronecker, h est la constante de Planck et c est la vitesse de propagation de la lumière.

Le plus haut niveau vibrationnel de l'état de résonance $\text{Mg}(3s3p)$ coïncide avec le même état d'un atome de magnésium isolé. De ce fait, en utilisant la théorie décrite ci-dessus, nos calculs théoriques donnent les durées de vie

$$\tau = 2.096 \text{ ns}, \quad (2.22)$$

en utilisant les potentiels de la série I, et

$$\tau = 2.089 \text{ ns}, \quad (2.23)$$

avec les potentiels de la série II. Dans les deux cas, nos résultats sont en bon accord avec la valeur $\tau = 2.037 \text{ ns}$ recommandée par le NIST [62] où avec les valeurs mesurées $(1.99 \pm 0.08) \text{ ns}$ de Lurio [63] et $(2.2 \pm 0.2) \text{ ns}$ de Anderson *et al.* [64]. Cependant, des calculs récents ont fourni la valeur 2.14 ns [65, 66].

Par ailleurs, Morton [67] a mentionné au moins dix valeurs mesurées pour la durée de vie de l'état $\text{Mg}(3s3p)$, allant de 1.9 à 2.2 ns , dont la moyenne est $(2.00 \pm 0.03) \text{ ns}$. Nous rassemblons dans le Tableau 2.9 quelques valeurs des durées de vie des niveaux rovibrationnels de l'état $A^1\Pi$ du système MgHe relatifs aux deux séries I et II.

Chapitre 3

Elargissement de pression dans le cœur

Les raies spectrales atomiques ne sont pas vraiment étroites et symétriques ceci est causé par plusieurs phénomènes d'élargissement, tels que l'élargissement naturel, l'élargissement Doppler et l'élargissement collisionnel [1]. Ce dernier phénomène, qui fait l'objet de ce travail, est également appelé élargissement de pression.

Ce Chapitre consiste à traiter la région du cœur de la raie de résonance du système considéré dans cette étude. En d'autres termes, nous essayerons de calculer la largeur à mi-hauteur w et le déplacement d de la raie de résonance d'un atome de magnésium $\text{Mg}(3s3p - 3s^2)$ perturbé par l'hélium $\text{He}(1s^2)$. Pour accomplir ce calcul, nous avons adopté le modèle théorique de Baranger [31] qui utilise la mécanique quantique pour traiter le mouvement des atomes *perturbateurs*. Ces atomes forment le voisinage gazeux des atomes *émetteurs*. Pour cela, nous allons au début de ce chapitre exposer l'essentiel du traitement quantique de Baranger qui aboutit à des expressions simples de la largeur et du déplacement de raie en fonction des propriétés microscopiques des particules en interaction. Enfin, il est utile de mentionner que la description théorique du modèle de Baranger que nous présentons ici est extraite du papier de Baranger [31] et que nous avons résumé dans notre mémoire de magister, soutenu en 2006.

3.1 Modèle de Baranger

La région du cœur de la raie est décrite par l'approximation d'impact [68]. C'est l'approximation de faible densité qui consiste à supposer que la moyenne des collisions est faible. En d'autres termes, le temps entre deux collisions est plus important que la durée de la collision

même

$$\tau_{\text{coll}} \ll \tau_{\text{entre coll.}} \quad (3.1)$$

Ceci donne un profil de Lorentz au spectre [31].

3.1.1 Hypothèses et approximations

Dans son modèle théorique, Baranger a considéré quelques suppositions concernant l'atome radiateur et l'atome perturbateur, à savoir :

- l'atome radiateur est fixe, avec des perturbateurs qui sont en mouvement autour de lui ;
- les états quantiques de l'atome radiateur sont non dégénérés ;
- seules les collisions élastiques sont prises en compte ;
- le gaz est dilué de sorte que le temps entre deux collisions successives est plus grand que la durée de la collision même ; c'est l'*approximation d'impact*.

Baranger propose ainsi de résoudre le problème considéré en deux étapes.

Première étape : Elle consiste à résoudre l'équation de Schrödinger de l'atome radiateur (A) en supposant que les perturbateurs sont fixés aux points $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N$. On appelle $u(\mathbf{x}_A, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)$ la fonction d'onde atomique. Alors $E + V_T(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)$ est l'énergie totale du système, avec E est l'énergie non perturbée. La fonction d'onde et l'énergie dépendent donc des paramètres $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N$.

Deuxième étape : Dans une deuxième étape, Baranger a essayé de résoudre l'équation de Schrödinger décrivant le mouvement des perturbateurs (P) dans le potentiel $V_T(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)$. En appelant $\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)$ la fonction d'onde et ϵ_T l'énergie des perturbateurs, la fonction d'onde du système entier est donnée par le produit $u(\mathbf{x}_A, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)$ et l'énergie totale est

$$E_T = E + \epsilon_T. \quad (3.2)$$

Il suppose en outre que les modifications provoquées par les perturbateurs sur la fonction d'onde atomique u sont petites qu'on peut donc négliger. Ainsi, la fonction d'onde devient $u(\mathbf{x}_A) \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)$, où le premier terme $u(\mathbf{x}_A)$ est la fonction d'onde non perturbée.

En ce qui concerne le potentiel $V_T(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)$ qui détermine le mouvement des perturbateurs, Baranger fait deux suppositions :

- Les perturbateurs ne s'interagissent pas et chaque perturbateur n'interagit qu'avec l'atome radiateur ;

- Le potentiel total V_T obeit au principe de l'additivité scalaire du potentiel d'interaction V_T

$$V_T(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) = V(\mathbf{x}_1) + V(\mathbf{x}_2) + \dots + V(\mathbf{x}_N). \quad (3.3)$$

Cette dernière supposition est valable pour certains types d'interaction, comme les forces de van der Waals (C_n/R^n).

3.1.2 Forme de raie

La puissance totale émise lors d'une transition dipolaire d'un état initial $|i\rangle$ vers un état final $|f\rangle$ est donnée par l'expression suivante [36]

$$\mathcal{P}_{if} \sim \frac{4\omega_{if}^4}{3c^3} |\langle f | \mathbf{d} | i \rangle|^2, \quad (3.4)$$

où $\mathbf{d} = \sum_{i=1}^{N_e} e\mathbf{r}_i$ est le moment dipolaire, c est la vitesse de la lumière et

$$\hbar\omega_{if} = E_i - E_f, \quad (3.5)$$

est la fréquence de Bohr, avec $\hbar = 1$ en u.a. Pour obtenir tout le spectre, il faut sommer sur tous les états finals possibles et moyennant sur tous les états initiaux. Dans ce cas, la puissance irradiée par unité de fréquence est

$$P(\omega) = \frac{4\omega^4}{3c^3} F(\omega). \quad (3.6)$$

La fonction $F(\omega)$ est connue sous le nom de *forme de raie* et est donnée par l'expression

$$F(\omega) = \sum_{if} \delta(\omega - \omega_{if}) |\langle f | \mathbf{d} | i \rangle|^2 \rho_i, \quad (3.7)$$

ρ_i est proportionnel au facteur de Boltzmann $\exp(-\epsilon_i/k_B T)$.

Généralement, on calcule la transformée de Fourier de $F(\omega)$

$$\Phi(s) = \int_{-\infty}^{+\infty} F(\omega) e^{-i\omega s} d\omega, \quad (3.8)$$

ce qui donne en utilisant Eq. (3.7)

$$\Phi(s) = \sum_{if} e^{-i\omega_{if}s} |\langle f | \mathbf{d} | i \rangle|^2 \rho_i. \quad (3.9)$$

La fonction $F(\omega)$ doit être réelle et $\omega > 0$ pour les émissions et $\omega < 0$ pour les absorptions. $\Phi(s)$ vérifie donc

$$\Phi(-s) = \Phi^*(s), \quad (3.10)$$

et

$$F(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} \Phi(s) e^{i\omega s} ds. \quad (3.11)$$

On calcule $\Phi(s)$ pour des valeurs de s positives seulement et $\Phi(s)$ sera trouvé, pour $s < 0$, de la condition (3.10).

Les fonctions d'onde initiales et finales ont la forme $u(\mathbf{x}_A) \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)$. En utilisant la supposition de l'additivité scalaire du potentiel, la fonction d'onde des perturbateurs $\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)$ est donc le produit des fonctions d'onde de chaque perturbateurs, i.e.

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) = \Psi_1(\mathbf{x}_1) \Psi_2(\mathbf{x}_2) \times \dots \times \Psi_N(\mathbf{x}_N). \quad (3.12)$$

Chaque fonction d'onde est une solution de l'équation de Schrödinger avec le potentiel V . Il y a deux potentiels, V_i le potentiel initial et V_f le potentiel final. Les équations de Schrödinger correspondantes sont

$$(K_1 + V_i) \Psi_{i_1}(\mathbf{x}_1) = \epsilon_1 \Psi_{i_1}(\mathbf{x}_1) \quad (3.13)$$

$$(K_1 + V_f) \Psi_{f_1}(\mathbf{x}_1) = \epsilon'_1 \Psi_{f_1}(\mathbf{x}_1), \quad (3.14)$$

où K_1 est l'énergie cinétique du perturbateur (1), ϵ_1 et ϵ'_1 sont les énergies totales du perturbateur pour chaque état. Ainsi, la fonction d'onde du système dans son état initial est $u_i(\mathbf{x}_A) \Psi_{i\mathbf{k}_1}^+(\mathbf{x}_1) \Psi_{i\mathbf{k}_2}^+(\mathbf{x}_2) \times \dots \times \Psi_{i\mathbf{k}_N}^+(\mathbf{x}_N)$, avec l'énergie $E_i + \epsilon_1 + \epsilon_2 + \dots + \epsilon_N$, et la fonction d'onde du système dans son état final est $u_f(\mathbf{x}_A) \Psi_{f\mathbf{k}'_1}^+(\mathbf{x}_1) \Psi_{f\mathbf{k}'_2}^+(\mathbf{x}_2) \times \dots \times \Psi_{f\mathbf{k}'_N}^+(\mathbf{x}_N)$, avec l'énergie $E_f + \epsilon'_1 + \epsilon'_2 + \dots + \epsilon'_N$, où $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}'_1, \dots$ sont les vecteurs d'onde des termes représentant les ondes planes de chaque fonction et $\epsilon_1 = k_1^2/2m$, avec m est la masse du perturbateur. Le signe (+) indique les ondes diffusées sortantes. Ce choix est arbitraire et n'a pas d'effet sur les résultats.

Avec ces fonctions d'onde, l'élément de matrice de l'expression (3.9) devient

$$|\langle f | \mathbf{d} | i \rangle|^2 = |\langle u_f | \mathbf{d} | u_i \rangle|^2 \left| \langle \Psi_{f\mathbf{k}'_1}^+ | \Psi_{i\mathbf{k}_1}^+ \rangle \right|^2 \times \cdots \times \left| \langle \Psi_{f\mathbf{k}'_N}^+ | \Psi_{i\mathbf{k}_N}^+ \rangle \right|^2 \quad (3.15)$$

et la fréquence ω_{if} dans (3.9) est

$$\omega_{if} = (E_i - E_f) + (\epsilon_1 - \epsilon'_1) + \cdots + (\epsilon_N - \epsilon'_N). \quad (3.16)$$

Le facteur $|\langle u_f | \mathbf{d} | u_i \rangle|^2$ dans l'équation (3.15) est constant et le terme le plus important est le recouvrement qu'il y a entre les fonctions d'onde des états initiaux avec celles des états finals.

On prend la fréquence $(E_i - E_f)$ comme origine des fréquences et la probabilité d'avoir un certain état initial est le produit $\rho_{\mathbf{k}_1} \rho_{\mathbf{k}_2} \cdots \rho_{\mathbf{k}_N}$ avec, comme déjà vu, $\rho_{\mathbf{k}} \propto e^{-\epsilon/k_B T}$. D'où

$$\begin{aligned} \Phi(s) = \sum_{\mathbf{k}_1 \cdots \mathbf{k}_N} \sum_{\mathbf{k}'_1 \cdots \mathbf{k}'_N} \rho_{\mathbf{k}_1} \times \cdots \times \rho_{\mathbf{k}_N} & \left| \langle \Psi_{f\mathbf{k}'_1}^+ | \Psi_{i\mathbf{k}_1}^+ \rangle \right|^2 \times \cdots \times \left| \langle \Psi_{f\mathbf{k}'_N}^+ | \Psi_{i\mathbf{k}_N}^+ \rangle \right|^2 \\ & \times \exp[-i(\epsilon_1 - \epsilon'_1 + \cdots + \epsilon_N - \epsilon'_N)s]. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Nous pouvons voir que $\Phi(s)$ est tout simplement une certaine fonction $\varphi(s)$ à la puissance N

$$\Phi(s) = [\varphi(s)]^N, \quad (3.18)$$

avec

$$\varphi(s) = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \rho_{\mathbf{k}} \left| \langle \Psi_{f\mathbf{k}'}^+ | \Psi_{i\mathbf{k}}^+ \rangle \right|^2 \exp[-i(\epsilon - \epsilon')s]. \quad (3.19)$$

Ainsi, la connaissance de $\varphi(s)$ permet de connaître $\Phi(s)$ et, par conséquent, la forme de raie $F(\omega)$ en utilisant Eq. (3.11).

Il ressort également de cette équation (3.19) que les perturbateurs agissent indépendamment sur l'atome radiateur. Le déplacement total de la fréquence est la somme des déplacements individuels apportés par chaque perturbateur à part. Donc, le but est de calculer $\varphi(s)$, la transformée de Fourier de la forme de raie due à un seul perturbateur.

Etant donné que la plupart du temps le perturbateur est très loin de l'atome radiateur et n'a pas d'influence sur lui, la forme de raie consiste principalement en une fonction δ à l'origine, mais qui subit une petite correction d'ordre \mathcal{V}^{-1} , où \mathcal{V} est le volume du gaz supposé

très grand. $\varphi(s)$ peut prendre la forme

$$\varphi(s) = 1 - \frac{g(s)}{\mathcal{V}} + \dots \simeq e^{-g(s)/\mathcal{V}}. \quad (3.20)$$

Sachant que la densité du gaz est $n = N/\mathcal{V}$, on peut écrire grâce à l'équation (3.18)

$$\Phi(s) = \exp[-ng(s)]. \quad (3.21)$$

Il est donc nécessaire de déterminer $g(s)$ pour connaître $\Phi(s)$.

Soient H_i et H_f les hamiltoniens du perturbateur quand l'atome est à l'état initial $|i\rangle$ et à l'état final $|f\rangle$, respectivement,

$$H_i = K + V_i \quad (3.22)$$

$$H_f = K + V_f. \quad (3.23)$$

En utilisant ces formes de H_i et H_f , d'après l'équation (3.19)

$$\varphi(s) = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \rho_{\mathbf{k}} \langle \Psi_{i\mathbf{k}}^+ | \Psi_{f\mathbf{k}'}^+ \rangle e^{i\epsilon' s} \langle \Psi_{f\mathbf{k}'}^+ | \Psi_{i\mathbf{k}}^+ \rangle e^{-i\epsilon s}. \quad (3.24)$$

Comme

$$H_i |\Psi_{i\mathbf{k}}^+\rangle = \epsilon |\Psi_{i\mathbf{k}}^+\rangle \quad (3.25)$$

$$H_f |\Psi_{f\mathbf{k}'}^+\rangle = \epsilon' |\Psi_{f\mathbf{k}'}^+\rangle \quad (3.26)$$

et en utilisant la relation de fermeture, Baranger trouve que

$$\varphi(s) = \sum_{\mathbf{k}} \rho_{\mathbf{k}} \langle \Psi_{i\mathbf{k}}^+ | e^{iH_f s} e^{-iH_i s} | \Psi_{i\mathbf{k}}^+ \rangle \quad (3.27)$$

est maintenant indépendant des états finals.

3.1.3 Forme intégrale de $\varphi(s)$

L'objectif maintenant est d'écrire $\varphi(s)$ sous la forme donnée dans Eq. (3.20). Pour se faire, Baranger normalise les fonctions d'onde diffusées apparaissant dans (3.27) par rapport au volume \mathcal{V} du récipient contenant le gaz. Il est par ailleurs judicieux d'alléger l'écriture de

(3.27) en omettant la moyenne sur les états initiaux qui sera faite à la fin du calcul avec le facteur de Boltzmann $e^{-\epsilon_i/k_B T}$. On désigne ci-dessous cette moyenne par l'indice 'av' dans les expressions les plus importantes. On peut donc écrire

$$\varphi(s) = \mathcal{V}^{-1} \langle \Psi_{i\mathbf{k}}^+ | e^{iH_f s} e^{-iH_i s} | \Psi_{i\mathbf{k}}^+ \rangle. \quad (3.28)$$

Baranger transforme ce $\varphi(s)$ en utilisant l'équation intégrale de Feynman [69]

$$e^{iH_f s} e^{iH_i s} = 1 - i \int_0^s dt e^{iH_f t} \Delta V e^{-iH_i t} \quad (3.29)$$

où ΔV est d'après les équations (3.22) et (3.23)

$$\Delta V = H_i - H_f \quad (3.30)$$

$$= V_i - V_f. \quad (3.31)$$

La substitution de ces équations dans Eq. (3.28) conduit à

$$\varphi(s) = 1 - \frac{i}{\mathcal{V}} \int_0^s dt e^{-i\epsilon t} \langle \Psi_{i\mathbf{k}}^+ | e^{iH_f t} \Delta V | \Psi_{i\mathbf{k}}^+ \rangle, \quad (3.32)$$

où la normalisation $\langle \Psi_{i\mathbf{k}}^+ | \Psi_{i\mathbf{k}}^+ \rangle = \mathcal{V}$ a été utilisée. Par identification avec l'équation (3.20) on peut écrire

$$g(s) = i \int_0^s dt e^{-i\epsilon t} \langle \Psi_{i\mathbf{k}}^+ | e^{iH_f t} \Delta V | \Psi_{i\mathbf{k}}^+ \rangle. \quad (3.33)$$

Selon Baranger, le terme $\langle \Psi_{i\mathbf{k}}^+ | e^{iH_f t}$ est le résultat de la propagation, à l'instant t , de l'onde $\langle \Psi_{i\mathbf{k}}^+ |$ avec l'hamiltonien H_f . Durant cette propagation, la partie diffusée de la fonction d'onde change graduellement et commence à ressembler à celle de $\langle \Psi_{f\mathbf{k}}^+ |$, surtout à l'origine. Aux grandes distances, l'onde diffusée est toujours celle de $\langle \Psi_{i\mathbf{k}}^+ |$, mais étant donné qu'elle doit être multipliée par $\Delta V | \Psi_{i\mathbf{k}}^+ \rangle$, qui disparaît aux grandes distances, l'élément de matrice $\langle \Psi_{i\mathbf{k}}^+ | e^{iH_f t} \Delta V | \Psi_{i\mathbf{k}}^+ \rangle$ devient pratiquement égal à $\langle \Psi_{f\mathbf{k}}^+ | e^{i\epsilon t} \Delta V | \Psi_{i\mathbf{k}}^+ \rangle$ pour t assez grand. Dans ce cas, $g(s)$ prend la forme simple

$$g(s) \simeq i s \langle \Psi_{f\mathbf{k}}^+ | \Delta V | \Psi_{i\mathbf{k}}^+ \rangle. \quad (3.34)$$

3.1.4 Largeur et déplacement de raie

En insérant cette forme de $g(s)$ dans Eq. (3.21), on obtient aisément

$$\Phi(s) = \exp [-ins \langle \Psi_{f\mathbf{k}}^+ | \Delta V | \Psi_{i\mathbf{k}}^+ \rangle] \quad (3.35)$$

de sorte que la transformée de Fourier inverse de cette fonction, qui est la forme de raie elle-même, est selon (3.11) l'intégrale

$$F(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty ds \exp [-ins \langle \Psi_{f\mathbf{k}}^+ | \Delta V | \Psi_{i\mathbf{k}}^+ \rangle] e^{i\omega s}. \quad (3.36)$$

Ecrivons l'élément de matrice $\langle \Psi_{f\mathbf{k}}^+ | \Delta V | \Psi_{i\mathbf{k}}^+ \rangle$ comme

$$\langle \Psi_{f\mathbf{k}}^+ | \Delta V | \Psi_{i\mathbf{k}}^+ \rangle = x + iy. \quad (3.37)$$

Il est donc évident que

$$x = \text{Re} [\langle \Psi_{f\mathbf{k}}^+ | \Delta V | \Psi_{i\mathbf{k}}^+ \rangle]_{\text{av}} \quad (3.38)$$

$$y = \text{Im} [\langle \Psi_{f\mathbf{k}}^+ | \Delta V | \Psi_{i\mathbf{k}}^+ \rangle]_{\text{av}}. \quad (3.39)$$

Sachant l'intégrale [39]

$$\int_0^\infty \exp(-ax) dx = \frac{1}{a}, \quad (3.40)$$

où a est un nombre complexe, l'utilisation des équations (3.38) et (3.39) dans (3.36) nous ramène à

$$F(\omega) = \frac{1/\pi}{i(nx - \omega) - ny}. \quad (3.41)$$

On a vu auparavant que $F(\omega)$ doit être réel; par conséquent

$$F(\omega) = -\frac{ny/\pi}{(\omega - nx)^2 + (ny)^2}. \quad (3.42)$$

Si on pose

$$\begin{aligned} w &= -ny \\ &= -n \text{Im} [\langle \Psi_{f\mathbf{k}}^+ | \Delta V | \Psi_{i\mathbf{k}}^+ \rangle]_{\text{av}} \end{aligned} \quad (3.43)$$

et

$$\begin{aligned} d &= +nx \\ &= +n \operatorname{Re} [\langle \Psi_{f\mathbf{k}}^+ | \Delta V | \Psi_{i\mathbf{k}}^+ \rangle]_{\text{av}} \end{aligned} \quad (3.44)$$

on obtient la forme de raie

$$F(\omega) = \frac{w/\pi}{(\omega - d)^2 + w^2}. \quad (3.45)$$

D'après cette formule, la forme de raie est une lorentzienne avec une largeur à mi-hauteur w et un déplacement d .

En utilisant l'équation de Lippmann-Schwinger [36] pour tout potentiel V

$$|\Psi_{\mathbf{k}}^+\rangle = |\mathbf{k}\rangle + (\epsilon - K + i\eta)^{-1} V |\Psi_{\mathbf{k}}^+\rangle, \quad (3.46)$$

où $|\mathbf{k}\rangle$ est la solution de l'équation libre et $\eta \rightarrow 0$ est une correction infiniment petite, l'élément de matrice $\langle \Psi_{f\mathbf{k}}^+ | \Delta V | \Psi_{i\mathbf{k}}^+ \rangle$, avec $\Delta V = V_i - V_f$, peut être calculer pour avoir la forme

$$\langle \Psi_{f\mathbf{k}}^+ | \Delta V | \Psi_{i\mathbf{k}}^+ \rangle = \langle \mathbf{k} | V_i | \Psi_{i\mathbf{k}}^+ \rangle - \langle \Psi_{f\mathbf{k}}^+ | V_f | \mathbf{k} \rangle + 2\pi i \langle \Psi_{f\mathbf{k}}^+ | V_f \delta(\epsilon - K) V_i | \Psi_{i\mathbf{k}}^+ \rangle, \quad (3.47)$$

où les relations suivantes sont utilisées [35]

$$(\epsilon - K + i\eta)^{-1} = \text{p.v.}(\epsilon - K)^{-1} - i\pi\delta(\epsilon - K) \quad (3.48)$$

$$(\epsilon - K - i\eta)^{-1} = \text{p.v.}(\epsilon - K)^{-1} + i\pi\delta(\epsilon - K), \quad (3.49)$$

p.v. dénote la valeur principale de Cauchy. Le dernier élément de matrice devient

$$\langle \Psi_{f\mathbf{k}}^+ | V_f \delta(\epsilon - K) V_i | \Psi_{i\mathbf{k}}^+ \rangle = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k' \langle \Psi_{f\mathbf{k}}^+ | V_f | \mathbf{k}' \rangle \delta(\epsilon - \epsilon') \langle \mathbf{k}' | V_i | \Psi_{i\mathbf{k}}^+ \rangle, \quad (3.50)$$

où $d^3k' = mk' d\epsilon' d\Omega$ et $k'^2 = 2m\epsilon'$, avec $d\Omega$ étant l'angle solide.

La grandeur physique $\langle \mathbf{k}' | V_i | \Psi_{i\mathbf{k}}^+ \rangle$ est, à un facteur près, l'amplitude de diffusion $f(\theta, \varphi)$. Celle-ci est donnée par [36]

$$f(\theta, \varphi) = - \left(\frac{m}{2\pi} \right) \langle \mathbf{k}' | V_i | \Psi_{i\mathbf{k}}^+ \rangle. \quad (3.51)$$

Des détails théoriques sur cette amplitude sont donnés dans le Chapitre 1.

Sachant que pour une collision élastique $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$, nous obtenons sans peine

$$\langle \Psi_{f\mathbf{k}}^+ | \Delta V | \Psi_{i\mathbf{k}}^+ \rangle = -\frac{2\pi}{m} [f_i(0) - f_f^*(0)] + iv \int d\Omega f_f^*(\theta, \varphi) f_i(\theta, \varphi). \quad (3.52)$$

Rappelons que la largeur de raie w est la partie imaginaire de cette dernière expression

$$\begin{aligned} \text{Im} [\langle \Psi_{f\mathbf{k}}^+ | \Delta V | \Psi_{i\mathbf{k}}^+ \rangle] &= -\frac{2\pi}{m} \text{Im} [f_i(0) - f_f(0)] \\ &\quad + \frac{1}{2}v \int d\Omega [f_f^*(\Omega) f_i(\Omega) + f_f(\Omega) f_i^*(\Omega)] \end{aligned} \quad (3.53)$$

et que le déplacement d est sa partie réelle

$$d = \left\{ -\frac{2\pi n}{m} \text{Re} [f_i(0) - f_f(0)] + \frac{1}{2}inv \int d\Omega [f_f^*(\Omega) f_i(\Omega) - f_f(\Omega) f_i^*(\Omega)] \right\}_{\text{av}}. \quad (3.54)$$

En utilisant le théorème optique [36]

$$\text{Im} f(0) = \frac{k}{4\pi} \int d\Omega |f(\Omega)|^2 = \frac{k}{4\pi} \sigma, \quad (3.55)$$

où σ est la section efficace totale de diffusion, w prend la forme suivante

$$w = \left\{ \frac{1}{2}nv \int d\Omega |f_i(\Omega) - f_f(\Omega)|^2 \right\}_{\text{av}}. \quad (3.56)$$

Les équations (3.54) et (3.56) donnent l'élargissement et le déplacement en terme de deux amplitudes de diffusion initiale et finale, f_i et f_f . Remarquons que si $f_i = f_f$, la largeur w et le déplacement d sont nuls.

Sachant que, si le potentiel d'interaction $V(\mathbf{R})$ est un potentiel central, i.e., dépendant seulement de la distance internucléaire R , l'amplitude de diffusion est fonction de l'angle θ , l'angle compris entre l'axe des z et la direction de la particule diffusée, et a la forme

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) (e^{2i\eta_l} - 1), \quad (3.57)$$

$P_l(\cos \theta)$ sont les polynômes de Legendre et η_l est le déphasage élastique.

En tenant compte de l'équation (3.57), l'élargissement w et le déplacement d , donnés par les expressions (3.54) et (3.56), peuvent être exprimés en termes des déphasages η_{il} et η_{fl} . En écrivant pour une émission $\eta_{il} = \eta'_l$, le déphasage associé à l'état excité de l'atome émetteur,

et $\eta_{fl} = \eta_l''$, le déphasage associé à son état fondamental, et en utilisant les propriétés des polynômes de Legendre, on aboutit aux expressions importantes suivantes

$$w = +n \langle v \cdot \sigma_w \rangle_{\text{av}} \quad (3.58)$$

$$d = -n \langle v \cdot \sigma_d \rangle_{\text{av}}, \quad (3.59)$$

où σ_w et σ_s sont respectivement les sections efficaces d'élargissement et de déplacement de raie

$$\sigma_w = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2(\eta_l' - \eta_l'') \quad (3.60)$$

$$\sigma_d = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin[2(\eta_l' - \eta_l'')]. \quad (3.61)$$

La moyenne dans les équations (3.58) et (3.59) est généralement calculée en adoptant la distribution de vitesses de Maxwell.

3.2 Sections efficaces

Après la construction des courbes d'énergie potentielle correspondant aux états fondamentaux, $X^1\Sigma^+$, et excités, $A^1\Pi$ et $B^1\Sigma^+$, du système MgHe, et après avoir fait une vérification de la qualité des potentiels, nous pouvons maintenant résoudre numériquement l'équation d'onde de Schrödinger (1.31) en utilisant l'algorithme de Numerov [40].

Cette résolution nous fournit les déphasages élastiques $\eta_l(E)$ pour chaque énergie E et moment orbital l , ce qui nous facilite donc le calcul des sections efficaces d'élargissement σ_w et de déplacement σ_d , données par les équations (3.60) et (3.61), respectivement.

Nos calculs de ces sections efficaces a été fait dans un intervalle d'énergie allant de 10^{-6} jusqu'à 10^{-1} u.a. En réalité, les sections efficaces spectrales, σ_w et σ_d , sont des moyennes pondérées [56, 70], i.e.,

$$\sigma_{w,d} = \frac{1}{3}\sigma_{w,d}^{\Sigma\Sigma} + \frac{2}{3}\sigma_{w,d}^{\Sigma\Pi} \quad (3.62)$$

où $\sigma_{w,d}^{\Sigma\Sigma}$ sont les sections efficaces relatives à la transition $X^1\Sigma^+ - B^1\Sigma^+$ et $\sigma_{w,d}^{\Sigma\Pi}$ relatives à la transition $X^1\Sigma^+ - A^1\Pi$. La représentation des sections efficaces σ_w et σ_d est faite sur les Figures 3-1 et 3-2. On voit une différence remarquable entre les sections efficaces calculées en admettant la série I et la série II, surtout aux basses énergies. Particulièrement, les pics

de résonance n'ont pas les mêmes positions énergétiques pour les deux séries adoptées. Aux hautes énergies, les courbes apparaissent plus lisses et ont pour les deux séries I et II presque le même comportement.

3.3 Largeur et déplacement de raie

Le calcul des sections efficaces mène, selon les équations (3.58) et (3.59), au calcul de la largeur w et de déplacement d de raie de résonance $\text{Mg}(3s3p - 3s^2)$ perturbée par l'hélium $\text{He}(1s^2)$. Les moyennes $\langle v \cdot \sigma_w \rangle_{\text{av}}$ et $\langle v \cdot \sigma_d \rangle_{\text{av}}$ sont calculées en admettant la distribution de Maxwell des vitesses relatives v données par [71]

$$\langle v \cdot \sigma_{w,d} \rangle_{\text{av}} = \frac{\int v \sigma_{w,d} f(v) d^3v}{\int f(v) d^3v}, \quad (3.63)$$

avec

$$f(v) = \left(\frac{\mu}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{\mu v^2}{2k_B T} \right). \quad (3.64)$$

La fonction de distribution de Maxwell est normalisée et les moyennes des sections efficaces effectives dans la largeur et dans le déplacement de raie seront données par

$$\langle v \cdot \sigma_{w,d} \rangle_{\text{av}} = 4\pi \left(\frac{\mu}{2\pi k_B T} \right) \int_0^\infty v^3 \sigma_{w,d} e^{-\mu v^2/2k_B T} dv. \quad (3.65)$$

En terme d'énergie relative $E = \frac{1}{2}\mu v^2$, cette dernière équation (3.65) devient

$$\langle v \cdot \sigma_{w,d} \rangle_{\text{av}} = \sqrt{\frac{8}{\mu\pi}} \frac{1}{(k_B T)^{3/2}} \int_0^\infty E \sigma_{w,d}(E) \exp(-E/k_B T) dE. \quad (3.66)$$

Les Figures 3-3 et 3-4 illustrent la variation des taux d'élargissement w/n et de déplacement d/n . On remarque l'importance de ces deux coefficients à haute température et ces deux mêmes Figures montrent la divergence importante avec la température T . Statistiquement, la différence relative entre les taux basée sur les deux séries de potentiel ne dépasse pas 30 %. Nous présentons en outre dans le Tableau 3.1 quelques valeurs des taux d'élargissement et de déplacement que nous avons calculées avec le modèle quantique de Barager. Nos valeurs sont aussi comparés avec les résultats publiés de Bottcher *et al.* [72]. La comparaison montre l'existence d'une bonne concordance. Finalement, il est important de montrer que,

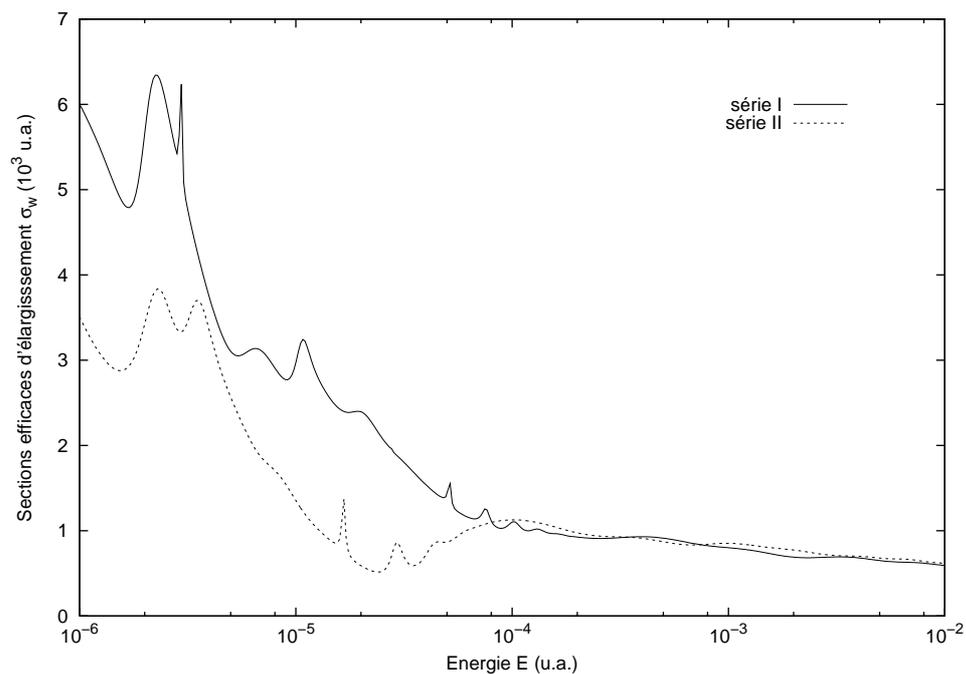


FIG. 3-1 – Variation avec l'énergie E des sections efficaces σ_w effectives dans l'élargissement en utilisant les deux séries de potentiel I et II.

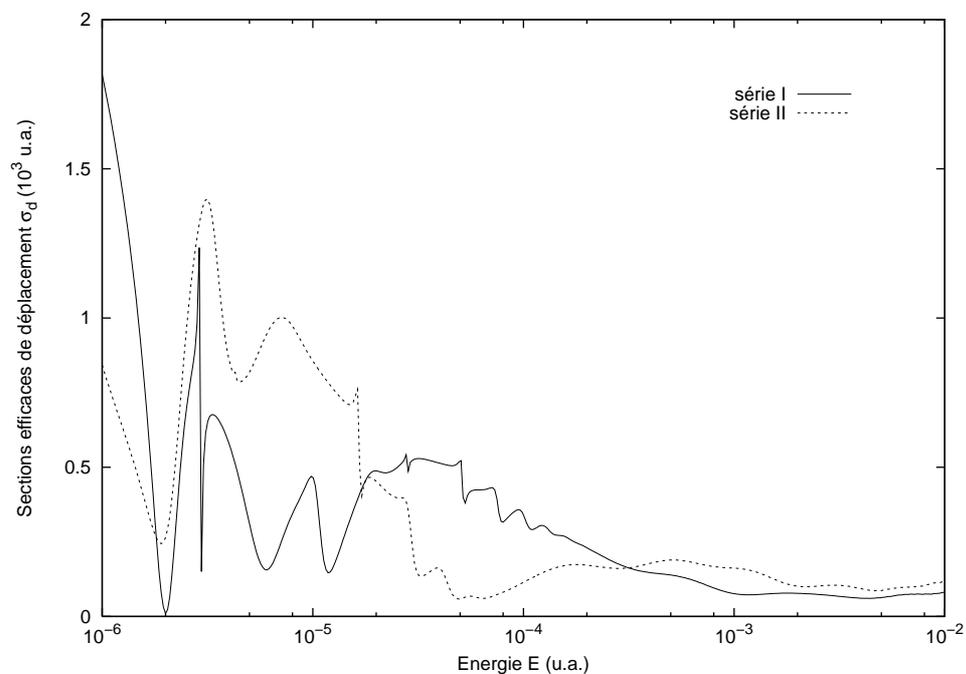


FIG. 3-2 – Variation avec l'énergie E des sections efficaces σ_d effectives dans le déplacement en utilisant les deux séries de potentiel I et II.

TAB. 3.1 – Comparaison des résultats des taux d’élargissement et de déplacement pour quelques températures avec ceux de Bottcher *et al.* [72].

Température T (K)	w/n ($10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$)			$-d/n$ ($10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$)	
	Série I	Série II	Bottcher <i>et al.</i> [72]	Série I	Série II
100	1.956	1.958		3.271	3.634
500	3.496	3.679	3.628	3.861	5.678
1000	4.524	4.733	4.826	5.214	7.537
1500	5.186	5.415	4.884	6.507	9.371
2000	5.656	5.919		7.597	10.932
2500	6.012	6.326		8.480	12.199
3000	6.294	6.675		9.187	13.210

pour $100 \leq T \leq 1500$ K, le taux d’élargissement par rapport à celui de déplacement est trouvé d’environ 8 à 9.

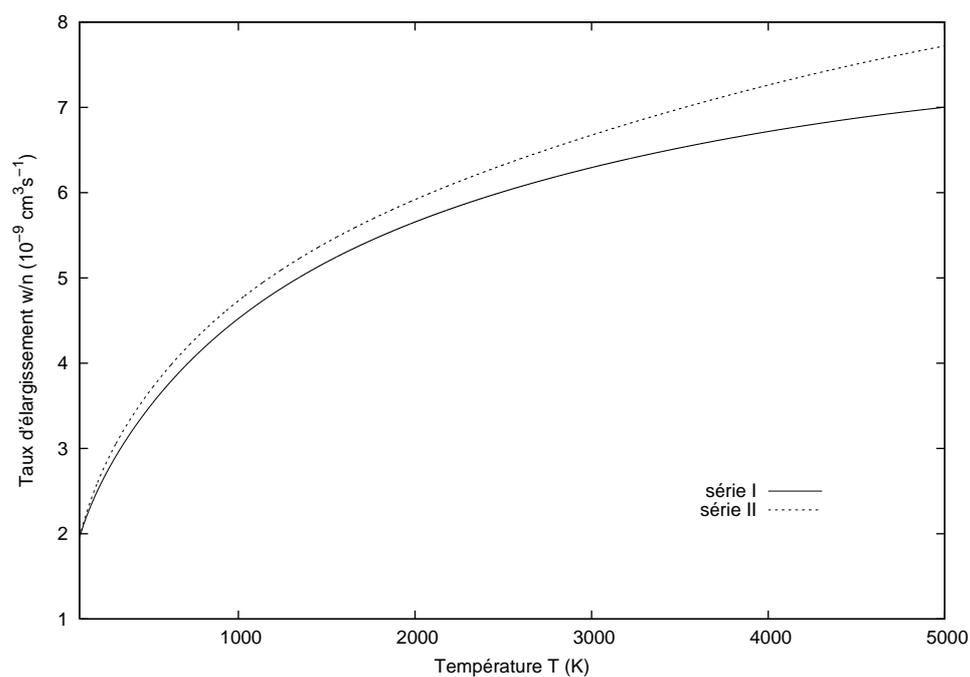


FIG. 3-3 – Taux d'élargissement w/n en fonction de la température T calculés avec les séries de potentiel I et II.

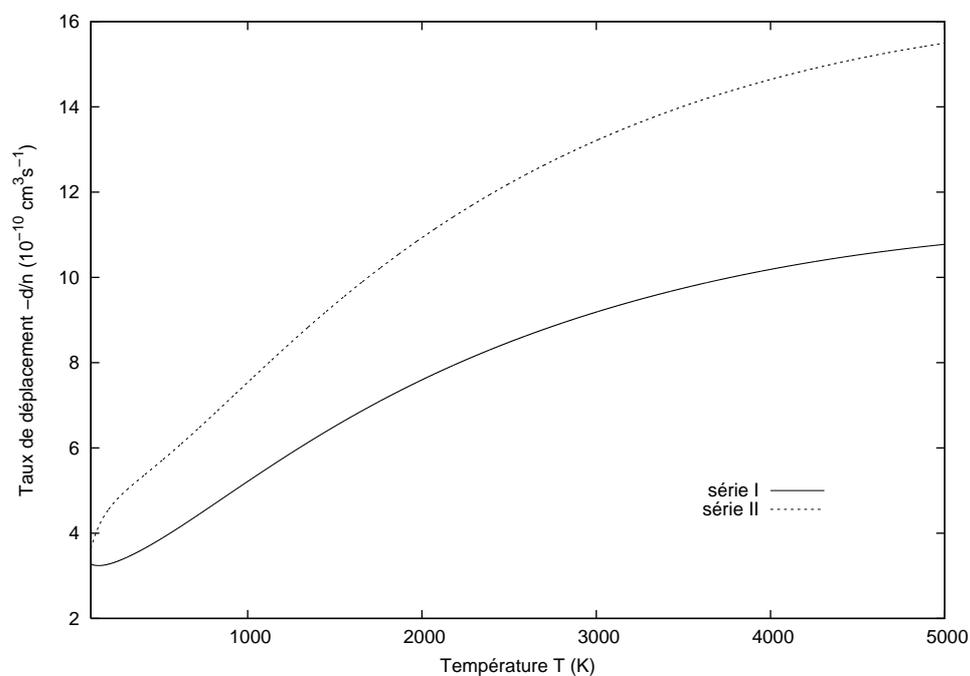


FIG. 3-4 – Taux de déplacement d/n en fonction de la température T calculés avec les séries de potentiel I et II.

Chapitre 4

Elargissement de pression dans les ailes

L'interprétation des profils spectraux d'absorption peut fournir de riches informations sur les atomes absorbeurs évoluant dans un environnement gazeux, telles que la température, la densité et la composition des atmosphères des naines brunes et des planètes extrasolaires. Ainsi, l'étude des formes des profils d'absorption peut révéler beaucoup d'informations liées à l'environnement de l'atome absorbant et de ses interactions avec les atomes perturbateurs. La région des ailes entourant la raie spectrale est généralement caractérisée par l'apparition de petits pics, appelés *satellites* [22, 73], pouvant conduire à expliquer le type d'interaction entre l'atome absorbant et l'atome perturbateur. Plus particulièrement, le spectre de photoabsorption prend généralement naissance de quatre transitions possibles. Ces transitions d'un état électronique inférieur vers un autre état supérieur sont essentiellement de types *lié-lié*, *lié-libre*, *libre-lié* et *libre-libre*, comme le montre la Figure 4-1. Dans le cas de la raie du magnésium $\text{Mg}(3s3p \leftarrow 3s^2)$ perturbé par l'hélium $\text{He}(1s^2)$, la majeure contribution vient exclusivement des transitions de type *libre-libre*. Ceci est surtout dû au caractère répulsif des courbes d'énergie potentielle de l'état fondamental $X \ ^1\Sigma^+$ et des deux états excités $A \ ^1\Pi$ et $B \ ^1\Sigma^+$ du système moléculaire MgHe .

4.1 Théorie

Selon Lambert et Beer [34, 48], le processus de photoabsorption peut être caractérisé à travers le coefficient d'absorption $k(\nu)$ avec ν étant la fréquence du photon absorbé. Pour

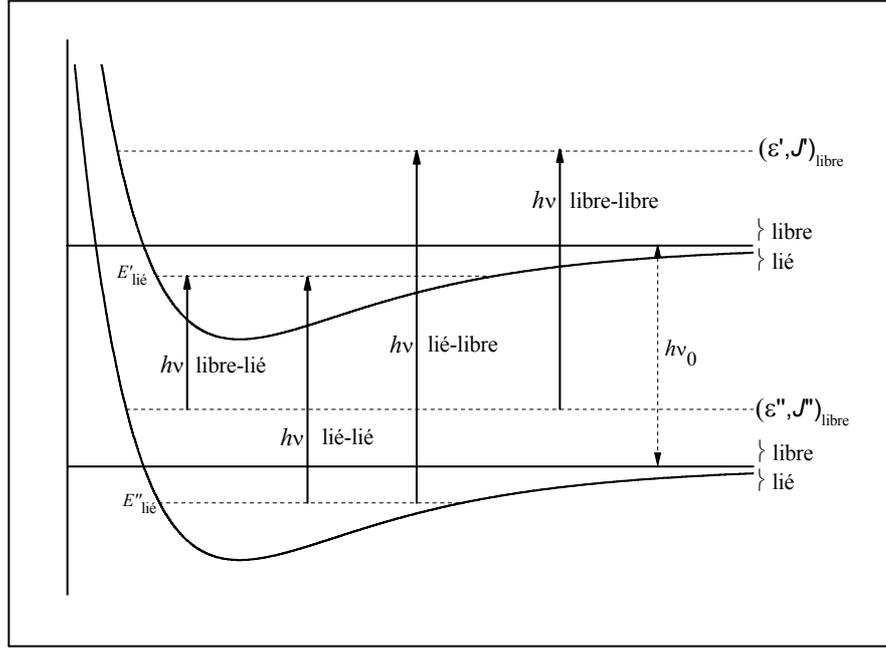


FIG. 4-1 – Représentation schématique des différentes transitions possibles entre un état moléculaire inférieur et un autre supérieur.

les raisons abordées auparavant, et qui concernent la qualité des potentiels, nous présentons brièvement ci-après un traitement quantique du problème, dont l'approche théorique est donnée avec détails dans la Réf. [32], pour aboutir à l'expression du coefficient d'absorption de type libre-libre.

Le coefficient d'absorption est le nombre de photons absorbés par unité de temps, par unité de volume et par unité d'intervalle de fréquence [21]. L'atome absorbant, qui est en interaction avec un autre atome perturbateur, passe d'un état initial $|i\rangle$ vers un état final $|f\rangle$ en absorbant un photon d'énergie $h\nu$. Le coefficient d'absorption qui décrit ce processus est donné par l'expression

$$k_{if} = \frac{P_{if} N_i}{F} \quad (4.1)$$

où P_{if} est la probabilité de transition par état moléculaire et par unité de temps, N_i est la densité d'états moléculaires et F est le flux de photons incidents sur la molécule par unité de surface et par unité de temps. De ce fait, le coefficient d'absorption est donné comme une longueur⁻¹.

La quasimolécule formée temporairement de deux atomes A et B, pour une transition de type libre-libre, passe d'un état inférieur d'énergie ϵ'' vers un état supérieur d'énergie ϵ' en absorbant un photon d'énergie $h\nu$; ainsi, selon la Figure 4-1

$$h\nu = \epsilon' - \epsilon'' + h\nu_0 \quad (4.2)$$

avec ν_0 est la fréquence de la raie centrale ou la raie non perturbée.

En supposant l'approximation de Born-Oppenheimer, les fonctions d'onde de la quasi-molécule pour un état initial $|i\rangle$ et un état final $|f\rangle$ peuvent être écrites comme

$$|i\rangle = |\chi_i\rangle |\Psi_i\rangle \quad (4.3)$$

$$|f\rangle = |\chi_f\rangle |\Psi_f\rangle \quad (4.4)$$

où $|\chi\rangle$ est la fonction d'onde électronique et $|\Psi\rangle$ est la fonction d'onde nucléaire. La probabilité de transition entre ces deux états est donnée par

$$P_{if} = \frac{\pi^2 E_0^2}{3h} \left| \langle \Psi_f(\mathbf{R}) | D_{if}(R) \hat{\mathbf{R}} | \Psi_i(\mathbf{R}) \rangle \right|^2 \delta(h\nu - h\nu_{if}) \quad (4.5)$$

avec E_0 est l'amplitude du champ électrique associé à l'onde électromagnétique incidente, \mathbf{R} est le vecteur position internucléaire, de module R et de vecteur unitaire $\hat{\mathbf{R}}$, $D_{if}(R)$ est le moment dipolaire de transition et le terme $\delta(h\nu - h\nu_{if})$ est la densité d'états finals. Le flux incident est décrit par l'expression

$$F = \frac{cE_0^2}{8\pi h\nu} \quad (4.6)$$

où c est la vitesse de la lumière dans le vide.

Pour aboutir à l'expression finale du coefficient d'absorption k_{if} , on doit savoir la formule qui donne la densité d'états moléculaires. Cette densité est la population des états initiaux du mouvement nucléaire N_i qui est donnée, pour une température T , par rapport à la distribution thermique de Maxwell

$$N_i = n_A n_B \varpi \left(\frac{h^2}{2\pi\mu k_B T} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{\hbar^2 K_i^2}{2\mu k_B T} \right) \quad (4.7)$$

où n_A et n_B sont les densités des atomes A et B dans un mélange gazeux, ϖ est la probabilité pour que les deux atomes A et B forme une molécule dans un état final, \hbar est la constante de Planck réduite et K_i est le module du vecteur d'onde relatif \mathbf{K}_i de la paire en collision dans un état initial. De ce fait, la multiplication des trois équations (4.5), (4.6) et (4.7) donne

$$k_{if} = n_A n_B \varpi \left(\frac{8\pi^3 \nu}{3c} \right) \left(\frac{h^2}{2\pi\mu k_B T} \right)^{3/2} \left| \langle \Psi_f(\mathbf{R}) | D_{if}(R) \hat{\mathbf{R}} | \Psi_i(\mathbf{R}) \rangle \right|^2 \times \exp\left(-\frac{\hbar^2 K_i^2}{2\mu k_B T} \right) \delta(h\nu - h\nu_{if}). \quad (4.8)$$

Avant d'arriver à l'expression finale du coefficient d'absorption qui décrit le spectre d'absorption correspondant aux transitions libre-libre, on doit mentionner une approximation faite dans ce traitement quantique. La quasi-molécule subit, pendant ce processus, une transition d'un état électronique fondamental libre $(\epsilon'', J'', \Lambda'')$ vers un autre état électronique supérieur libre $(\epsilon', J', \Lambda')$, où J'' et J' sont les nombres quantiques de rotation pour chaque état, connectés par le moment dipolaire de transition $D(R)$. Etant donné que nous avons pris dans nos calculs des valeurs importantes pour les nombres quantiques de rotation, on peut donc supposer l'approximation $J'' \simeq J' = J$.

Après un traitement assez long, décrit dans la Réf. [32], le coefficient d'absorption pour une transition libre-libre à une fréquence ν est donné par l'expression

$$k(\nu) = n_A n_B \frac{8\pi^3 \nu}{3c} \varpi \left(\frac{2\pi \hbar^2}{\mu k_B T} \right)^{3/2} \sum_J (2J+1) \times \int_0^\infty |\langle \Phi_{\epsilon', J} | D(R) | \Phi_{\epsilon'', J} \rangle|^2 \exp(-\epsilon''/k_B T) d\epsilon', \quad (4.9)$$

où $\Phi_{\epsilon, J}$ sont les fonctions d'onde radiales normalisées par rapport à l'énergie, avec

$$\Psi_i(R) = \frac{\Phi_{\epsilon'', J''}}{R} Y_{J''}^{m''} \quad (4.10)$$

et

$$\Psi_f(R) = \frac{\Phi_{\epsilon', J'}}{R} Y_{J'}^{m'}, \quad (4.11)$$

où Y_J^m sont les harmoniques sphériques. Ces fonctions d'onde radiales sont obtenues par la résolution numérique de l'équation d'onde radiale

$$\frac{d^2}{dR^2} \Phi_{\epsilon, J}(R) + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[\epsilon - V(R) - \frac{\hbar^2 J(J+1) - \Lambda^2}{2\mu R^2} \right] \Phi_{\epsilon, J}(R) = 0. \quad (4.12)$$

En réalité, nous nous intéressons beaucoup plus à calculer $k_r(\nu) = k(\nu)/n_A n_B$, le coefficient d'absorption *réduit*, donné par [13, 74]

$$k_r(\nu) = \varpi \frac{8\pi^3 \nu}{3c} \left(\frac{2\pi \hbar^2}{\mu k_B T} \right)^{3/2} \sum_J (2J+1) \times \int_0^\infty |\langle \Phi_{\epsilon', J} | D(R) | \Phi_{\epsilon'', J} \rangle|^2 \exp(-\epsilon''/k_B T) d\epsilon', \quad (4.13)$$

avec

$$\varpi = \xi \frac{2S_{AB} + 1}{(2S_A + 1)(2S_B + 1)}, \quad (4.14)$$

où

$$\xi = \frac{2 - \delta_{0,\Lambda'+\Lambda''}}{2 - \delta_{0,\Lambda''}}, \quad (4.15)$$

δ est le symbole de Kronecker et S_A , S_B et S_{AB} sont les multiplicités de spin des atomes A et B et de la quasimolécule AB, respectivement.

4.2 Méthode de calcul

Après avoir construit les différentes courbes de potentiel d'interaction $V(R)$ du système MgHe, relativement aux deux séries de données I et II, nous avons vérifié leurs exactitudes à travers le calcul de quelques autres paramètres physiques. De la même façon, nous avons également construit et vérifié les moments dipolaires de transition $D(R)$.

Nous avons utilisé l'Eq. (4.13) pour calculer le coefficient d'absorption réduit $k_r(\nu)$, où pour notre cas du système MgHe, $\xi = 1$ pour l'état $B \ ^1\Sigma^+$, $\xi = 1$ pour l'état $A \ ^1\Pi$ et $S_{\text{MgHe}} = S_{\text{Mg}} = S_{\text{He}} = 1$. Pour calculer l'intégrale apparaissant dans l'Eq. (4.13), nous avons utilisé la méthode quadratique de Gauss-Laguerre [75] avec 100 points pondérés. La difficulté fondamentale dans ce calcul est la divergence de cette intégrale. Ceci est dû au fait que les moments dipolaires de transition tend vers une constante pour les grandes séparations internucléaires et aussi que les fonctions d'onde deviennent des fonctions d'onde planes. Pour contourner cette divergence, nous avons utilisé la méthode proposée dans les Réfs. [48, 76], où les auteurs ont adopté la transformation

$$\langle \Phi_{\epsilon',J} | D(R) | \Phi_{\epsilon'',J} \rangle = \langle \Phi_{\epsilon',J} | [D(R) - D(\infty)] | \Phi_{\epsilon'',J} \rangle + \langle \Phi_{\epsilon',J} | D(\infty) | \Phi_{\epsilon'',J} \rangle. \quad (4.16)$$

Le premier terme du second membre de l'équation tend vers zéro pour les grandes distances R et le dernier terme peut être réécrit comme

$$\langle \Phi_{\epsilon',J} | D(\infty) | \Phi_{\epsilon'',J} \rangle = D(\infty) \frac{\langle \Phi_{\epsilon',J} | \Delta V | \Phi_{\epsilon'',J} \rangle}{\epsilon'' - \epsilon'}, \quad (4.17)$$

où $D(\infty)$ est une valeur constante du moment dipolaire de transition pour les grandes valeurs de R et $\Delta V = V'(R) - V''(R)$ est la différence de potentiel entre l'état excité et l'état fondamental.

On doit noter que nous avons utilisé une valeur maximale du nombre quantique de rotation $J_{\max} = 250$ et un pas de fréquence $\Delta\nu = 10 \text{ cm}^{-1}$.

4.3 Résultats et comparaison

Comme nous l'avons déjà mentionné, notre but est de vérifier l'effet des potentiels d'interaction utilisés dans le calcul de l'élargissement de pression dans le cœur et dans les ailes et d'examiner aussi l'effet de la température sur ces paramètres.

Concernant le coefficient d'absorption, nous avons utilisé pour calculer ce paramètre spectral deux séries de données pour un intervalle de température entre 800 K et 3000 K. Les calculs sont faits pour des longueurs d'onde comprises entre 260 nm et 310 nm englobant la longueur d'onde de la raie du magnésium non perturbée $\text{Mg}(3s3p \leftarrow 3s^2)$, $\lambda_0 = 285.2 \text{ nm}$.

Nous représentons sur les Figures 4-2, 4-3 et 4-4 les profils d'absorption pour trois températures différentes : 1000, 2000 et 3000 K. Les courbes présentées par des lignes continues sont celles obtenues à partir des potentiels d'interaction de la série I et les courbes présentées par des lignes en pointillées sont celles obtenues avec la série II. Il semble clair que l'intensité des satellites augmente avec la température et que les deux profils pour les deux séries ont des formes très similaires, i.e., composés de deux ailes de part et d'autre de la longueur d'onde non perturbée λ_0 . Les calculs dévoilent surtout que l'apparition des satellites dans l'aile *bleue* est essentiellement due aux transitions $B \ ^1\Sigma^+ \leftarrow X \ ^1\Sigma^+$ et que le satellite déterminé à partir de la série I est plus intense que celui calculé à partir de la série II. Par contre, les branches représentant l'aile *rouge* des profils, pour les deux séries de données, sont particulièrement similaires ; plus exactement, les profils ont des formes lisses et monotones et sont presque de même intensité qui augmente avec la température. Les calculs montrent toutefois l'existence d'une structure satellitaire, dans l'aile bleue et à la température d'environ $T \sim 1800 \text{ K}$, autour de deux longueurs d'onde distinctes : $\lambda \simeq 276 \text{ nm}$ lorsque la série I est utilisée et $\lambda \simeq 272 \text{ nm}$ lorsque la série II est utilisée. On remarque aussi l'importance de l'effet de la température sur les deux profils spectraux déterminés avec les deux séries I et II. Ces positions de satellite ont déjà été estimées classiquement par la technique des différences de potentiel, à savoir, $\lambda \simeq 273 \text{ nm}$ avec la série I et $\lambda \simeq 268 \text{ nm}$ avec la série II. Dans les deux cas, l'erreur ne dépasse pas les 2%.

Pour une meilleure comparaison de l'effet des potentiels sur la forme des profils, la position des satellites et leurs comportements avec la température, nous présentons sur la Figure 4-5

les coefficients d'absorption réduits générés aux trois températures précédentes.

Par ailleurs, la technique des différences de potentiel, que nous avons présenté dans les Figures 2-4 et 2-5, prédit l'existence d'un satellite dans l'aile rouge proche de la longueur d'onde $\lambda \simeq 413\text{ nm}$ quand la série II est utilisée. Mais malheureusement nos calculs ne produisent aucun satellite au voisinage de cette longueur d'onde.

A cet effet, nous présentons, en unités arbitraires, sur la Figure 4-6 le coefficient d'absorption réduit et modifié, $k_r(\Delta\omega) \times \Delta\omega^2$, calculé à la température $T = 800\text{ K}$, en fonction de l'écart $\Delta\omega = \omega - \omega_0$ (en cm^{-1}) où ω_0 correspond à la raie de résonance atomique du magnésium Mg. La raison pour cette modification, déjà proposée par Lyyra *et al.* [33], est d'améliorer la représentation du profil et surtout pour faire apparaître les satellites de faibles intensités. En effet, il arrive parfois de trouver dans les différences de potentiel des extrêmes qui correspondent à des satellites de faibles intensités très difficilement visibles lors de la représentation du spectre d'absorption $k_r(\nu)$. Ceci survient surtout avec des satellites qui sont situés dans les régions difficilement accessibles par des températures ambiantes du gaz [77].

Dans ce travail, nos calculs montrent une structure des pics satellitaires, obtenus avec les deux séries de potentiel, dans les deux branches du profil. Dans l'aile bleue du spectre, le satellite se trouve proche de $\Delta\omega \sim 1000\text{ cm}^{-1}$, tandis que dans l'aile rouge un faible satellite est situé au voisinage de $\Delta\omega \sim 300\text{ cm}^{-1}$. En utilisant un calcul purement quantique à $T = 800\text{ K}$, Paul-Kwiek et Czuchaj [27] ont obtenu théoriquement des résultats que nous illustrons sur la Figure 4-6. Sur cette même Figure 4-6, nous avons représenté les données expérimentales mesurées à $T = 700\text{ K}$ par Lyyra *et al.* [33]. Il est important de noter à ce niveau que nos résultats, dans les deux ailes bleue et rouge, sont normalisés de telle sorte qu'ils soient convenables avec les valeurs publiées. On remarque clairement qu'ils sont en bon accord avec les données théoriques et expérimentales.

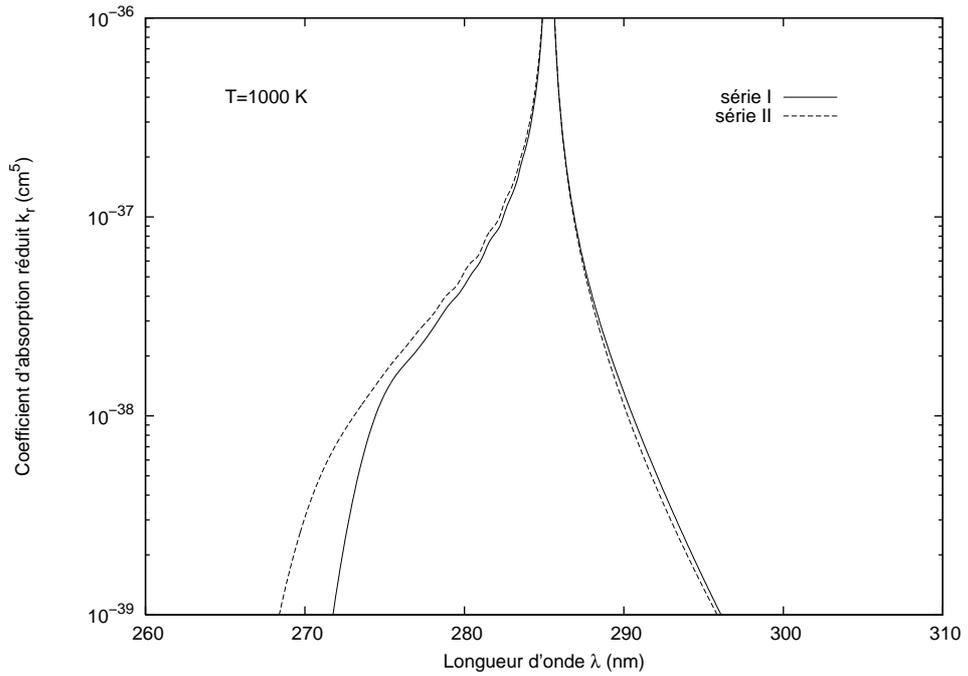


FIG. 4-2 – Coefficients d'absorption réduits $k_r(\nu)$ du système MgHe à la température $T = 1000$ K. La courbe représentée par une ligne continue est celle obtenue avec la série I et la courbe représentée par une ligne en pointillés est celle obtenue avec la série II.

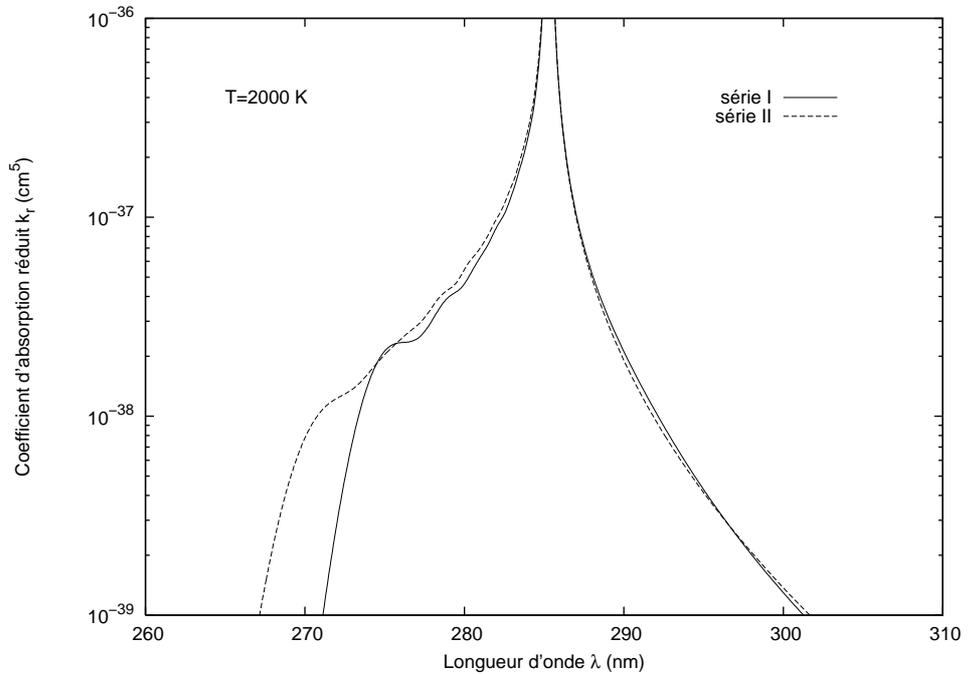


FIG. 4-3 – Coefficients d'absorption réduits $k_r(\nu)$ du système MgHe pour la température $T = 2000$ K. La courbe représentée par une ligne continue est celle obtenue avec la série I et la courbe représentée par une ligne en pointillés est celle obtenue avec la série II.

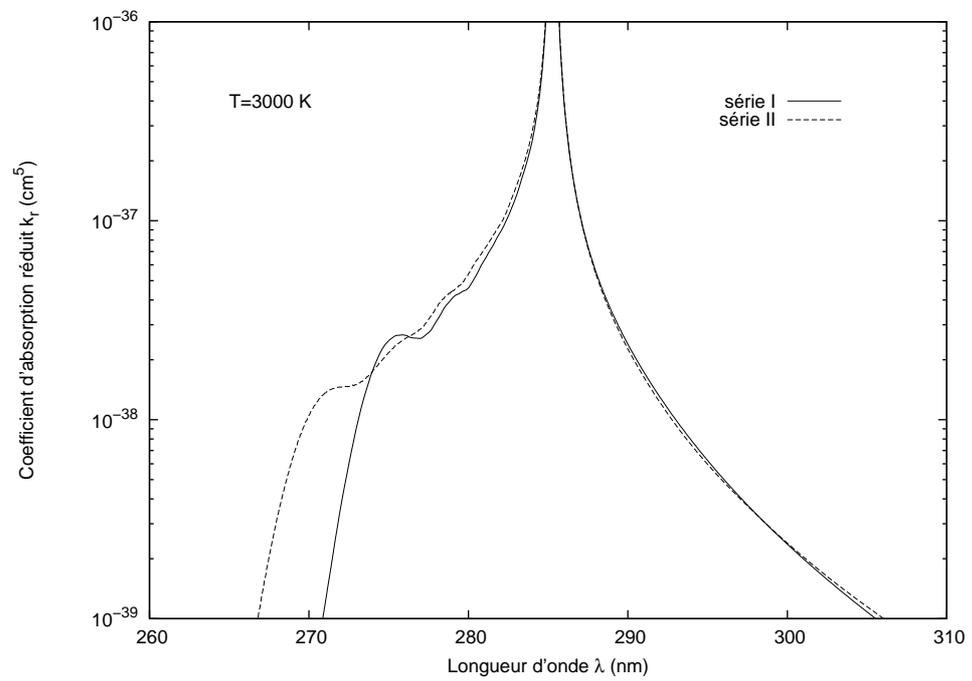


FIG. 4-4 – Coefficients d’absorption réduits $k_r(\nu)$ du système MgHe pour la température $T = 3000$ K. La courbe représentée par une ligne continue est celle obtenue avec la série I et la courbe représentée par une ligne en pointillés est celle obtenue avec la série II.

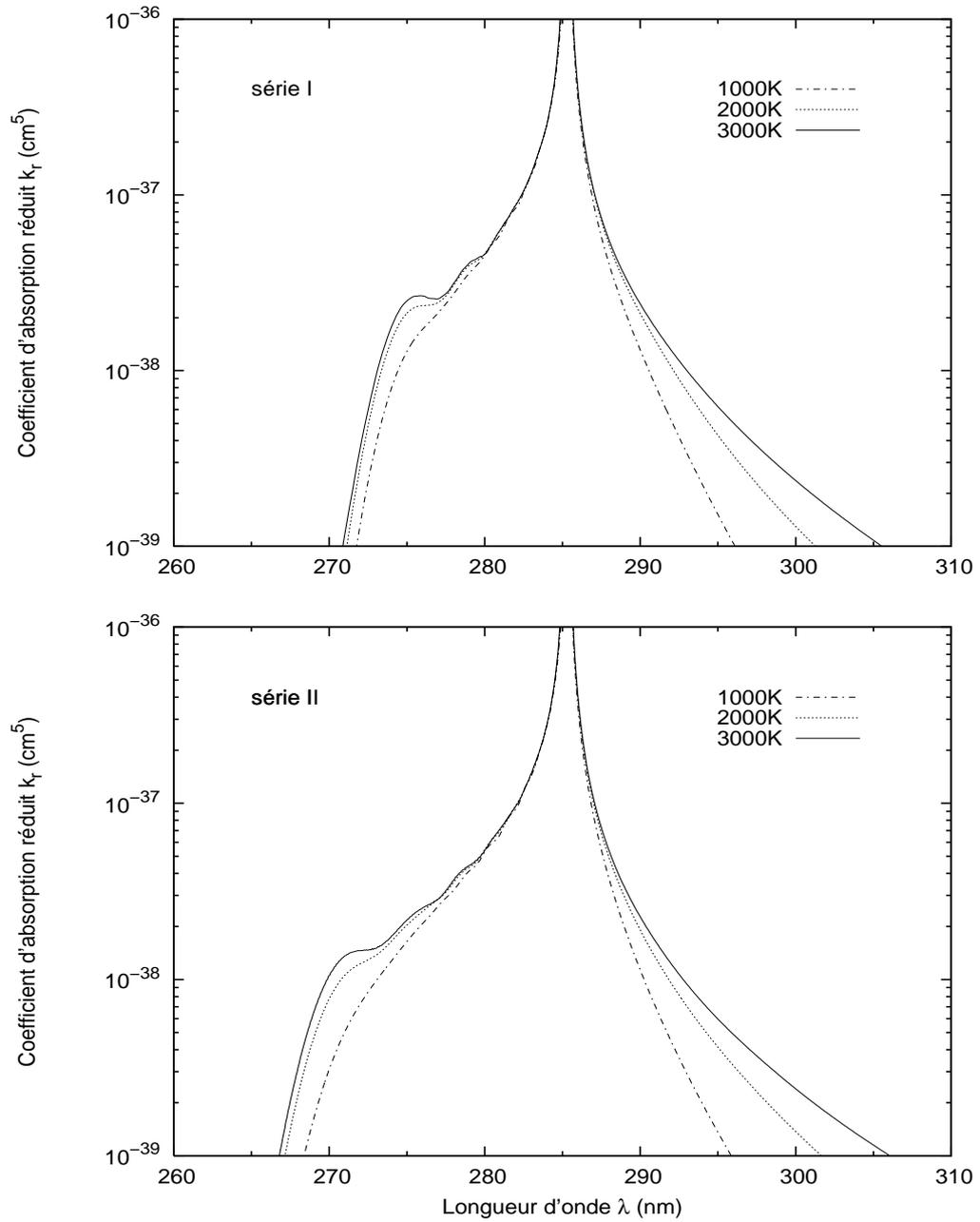


FIG. 4-5 – Coefficients d’absorption réduits $k_r(\nu)$ du système MgHe pour trois températures distinctes : $T = 1000, 2000$ et 3000 K, générés par les deux séries de potentiel I et II.

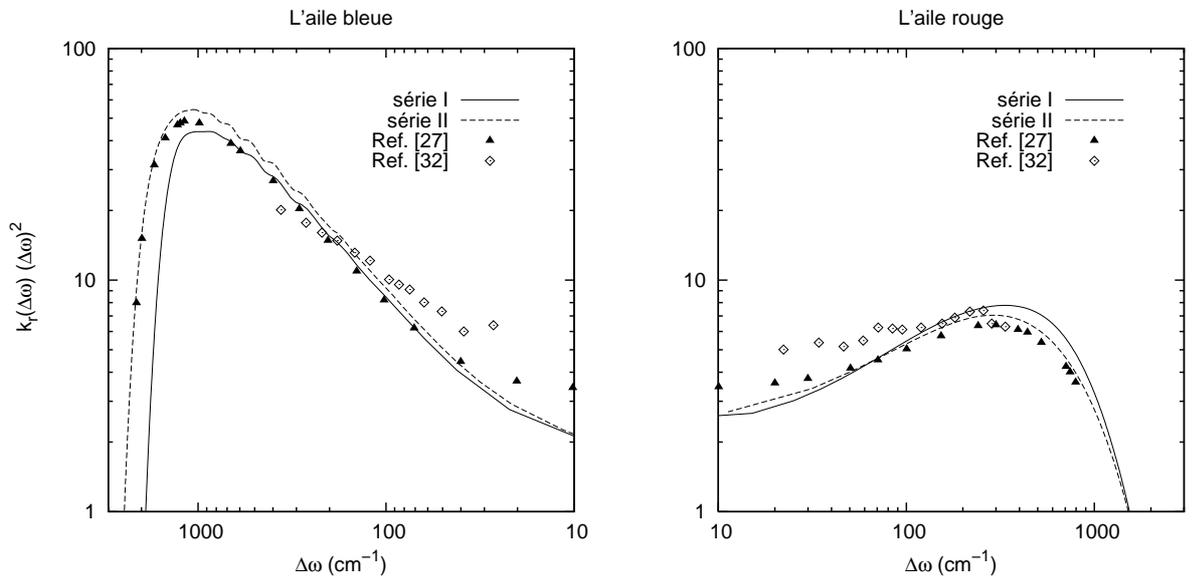


FIG. 4-6 – Coefficients d'absorption réduits modifiés $k_r(\Delta\omega) \times (\Delta\omega)^2$ à $T = 800$ K en fonction de $\Delta\omega = |\omega - \omega_0|$. Nos résultats sont représentés par des lignes continues et en pointillés pour les série I et II, respectivement. Ils sont comparés avec les valeurs théoriques de la Réf. [27] et expérimentales de la Réf. [33].

Conclusion

Dans ce travail, nous avons examiné les effets du potentiel d'interaction et de la température sur l'élargissement de pression de la raie de résonance du magnésium $\text{Mg}(3s^2 - 3s3p)$ perturbé par l'hélium. Pour commencer la construction des potentiels d'interaction $V(R)$, à travers lesquels un atome dans son état fondamental $3s^2 \ ^1S_0$ ou dans son premier état excité $3s3p \ ^1P_1$ interagisse avec un atome d'hélium dans son état fondamental $1s^2 \ ^1S_0$, nous avons adopté deux séries différentes de données théoriques *ab initio*. Cette construction est faite dans trois domaines de distances internucléaires d'une manière lisse et convenable. De la même façon, nous avons construit les moments dipolaires de transition (TDMs) qui connectent un état fondamental avec un autre état excité. Pour vérifier la qualité de ces potentiels d'interaction et des TDMs, nous avons choisi de calculer quelques paramètres physiques, tels que les intégrales de collision, les coefficients de diffusion, les niveaux rovibrationnels et les durées de vie des états excités. La comparaison de nos résultats avec d'autres valeurs publiées montre qu'ils sont en bon accord avec ces valeurs. Pour calculer les taux d'élargissement w/n et de déplacement d/n de la raie de résonance de magnésium $\text{Mg}(3s3p - 3s^2)$ perturbé par l'hélium $\text{He}(1s^2)$, nous avons adopté la théorie quantique simplifiée de Baranger de l'élargissement de pression dans le cœur qui est basée sur l'approximation d'impact. La représentation des variations des taux d'élargissement et de déplacement montre une divergence remarquable pour les hautes températures entre les taux calculés en utilisant les deux séries où cette divergence est d'environ 30 %. Concernant le calcul du coefficient d'absorption, nous avons concentré les calculs sur les transitions de type libre-libre seulement, car la contribution des autres transitions est négligeable. Le spectre d'absorption montre l'apparition vers la température $T \sim 1800 \text{ K}$ d'un satellite dans l'aile bleue, due essentiellement aux transitions $B \ ^1\Sigma^+ \leftarrow X \ ^1\Sigma^+$, proche de $\lambda \simeq 276 \text{ nm}$, lorsque la série I est utilisée, et de $\lambda \simeq 272 \text{ nm}$, lorsque la série II est utilisée. Les ailes rouges, trouvées avec les deux séries de potentiel, semblent être similaires et sont presque de même intensité et qui augmentent avec la température. D'après ces résultats, nous avons remarqué l'effet des potentiels d'interaction sur la position des satel-

lites et de la température sur leurs intensités. Nous avons aussi examiné une représentation modifiée du coefficient d'absorption réduit $k_r(\Delta\omega) \times \Delta\omega^2$, utilisée pour augmenter l'intensité des faibles satellites, qui a permis de montrer une bonne concordance des résultats publiés avec les nôtres.

Annexe A

Termes électroniques d'une quasi-molécule

Dans ce travail, nous considérons le binaire formé lors d'une collision comme une *quasi-molécule*. Alors, comment peut-on distinguer les états électroniques des systèmes diatomiques hétéronucléaires ?

La quasi-molécule est caractérisée par les symétries moléculaires où chaque symétrie décrit l'état électronique de la quasi-molécule, dit terme électronique. Chacun de ces termes peut être classé selon la valeur de la projection du moment orbital total \mathbf{L} sur l'axe joignant les deux atomes. Comme le montre la Figure A-1, Λ désigne la valeur absolue de la projection du moment orbital total sur l'axe de la molécule. De ce fait, les valeurs possibles de Λ sont : $\Lambda = 0, 1, 2, \dots, |L|$, qui correspondent respectivement aux majuscules grecques $\Sigma, \Pi, \Delta, \dots$

Chaque état électronique est aussi caractérisé par un exposant à gauche du symbole Λ appelé *multiplicité* et égal à $2S + 1$, où S est le spin total de la molécule. Pour les termes Σ , cas où $\Lambda = 0$, il y a un signe “+” ou “-” qui apparaît comme un exposant à droite : Σ^+ dont la fonction d'onde ne change pas de signe dans une réflexion par rapport à un plan passant par l'axe de la molécule et Σ^- dans le cas contraire. On doit mentionner aussi que les termes électroniques de valeur non nulle de Λ sont doublement dégénérés. Alors, les termes électroniques des systèmes diatomiques sont représentés par les symétries moléculaires $^{2S+1}\Lambda^{(\pm)}$ [38].

Finalement, il faut savoir que la molécule passe de l'une de ces symétries moléculaires à une autre en respectant les règles de sélection suivantes [49] :

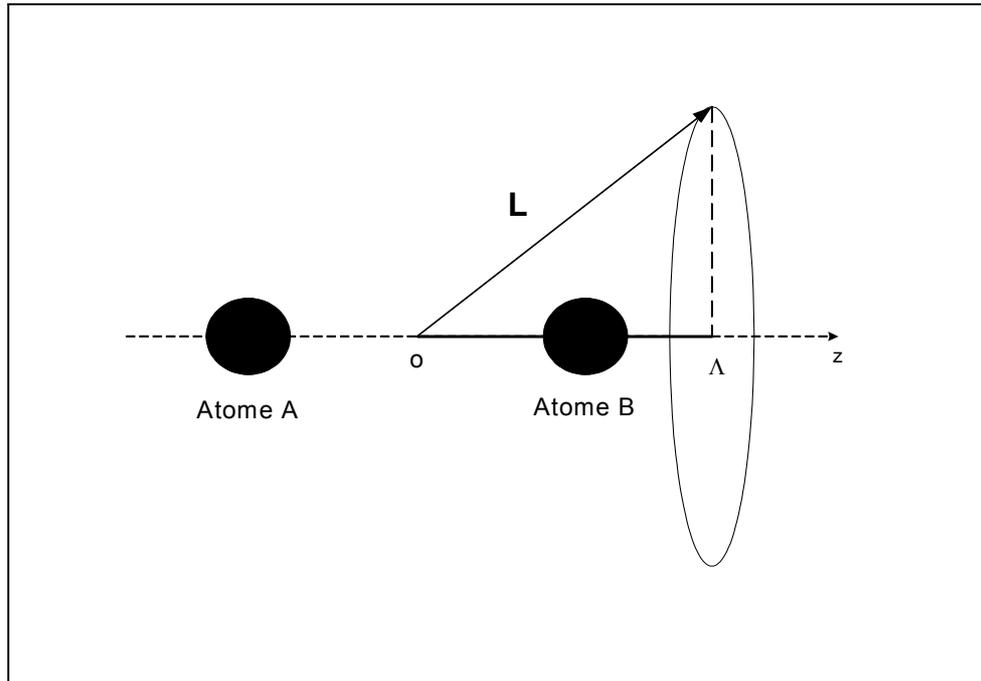


FIG. A-1 – Projection Λ du moment cinétique orbital électronique total \mathbf{L} d'une molécule diatomique sur l'axe internucléaire z .

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta\Lambda = 0, \pm 1; \\ \Delta(2S + 1) = 0; \\ + \longleftrightarrow + \text{ et } - \longleftrightarrow -. \end{array} \right.$$

Annexe B

Publications et communications

Le travail présenté dans cette thèse a fait objet de plusieurs articles et communications. Dans cet Annexe, nous reproduisons les deux articles qui contiennent l'essentiel de ce travail et énumérons le titre des communications et le lieu de leur présentation dans les congrès internationaux.

B.1 Articles

- **L. Reggami and M. Bouledroua**, *Direct potential and temperature effects on the MgHe line-core and far-wing photo-absorption profiles*, Physical Review A **83**, 032719 (2011).
- **L. Reggami and M. Bouledroua**, *Pressure broadening of Mg resonance line perturbed by He*, Journal of Physics : Conference Series **194**, 092002 (2009).

B.2 Communications

- **L. Reggami and M. Bouledroua**, *Line-core and line-wing features in the temperature-dependent MgHe emission/absorption spectra*, 12th Quadrennial Symposium on Solar Terrestrial Physics, 12-16 July 2010, Berlin, Germany.
- **L. Reggami and M. Bouledroua**, *Pressure broadening of magnesium resonance line perturbed by helium. (II. Line wings)*, XXVI International Conference on Photonic, Electronic, and Atomic Collisions, 22-28 July 2009, Kalamazoo, Michigan, USA.

- **M. Bouledroua and L. Reggami**, *Pressure broadening of magnesium resonance line perturbed by helium. (I. Line core)*, 19th Europhysics Conference on the Atomic and Molecular Physics of Ionized Gases, 15-19 July 2008, Granada, Spain.
- **L. Reggami and M. Bouledroua**, *Pressure broadening of calcium resonance line perturbed by helium*, 40th Conference of the European Group for Atomic Systems, 2-5 July 2008, Graz, Austria.
- **L. Reggami, M.T. Bouazza, and M. Bouledroua**, *Thermophysical deductions from the elastic collision of alkali-metal monatoms with hydrogen*, International Conference on Research and Applications of Plasmas, 16-19 October 2007, Greifswald, Germany.

Bibliographie

- [1] N.F. Allard and J.F. Kielkopf, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 1103 (1982).
- [2] J. Szudy and W.E. Baylis, *Phys. Rep.* **266**, 127 (1996).
- [3] N.F. Allard, F. Allard, P.H. Hauschildt, J.F. Kielkopf, and L. Machin, *Astron. Astrophys.* **411**, L473 (2003).
- [4] A Burrows and M. Volobuyev, *Astrophys. J.* **583**, 985 (2003).
- [5] F. Stienkemeier, J. Higgins, C. Callegari, S.I. Kanorsky, W.E. Ernst, and G. Scoles, *Z. Phys. D* **38**, 253 (1996).
- [6] A. Nakayama and K. Yamashita, *J. Chem. Phys.* **114**, 780 (2001).
- [7] A. Hernando, M. Barranco, R. Mayol, M. Pi, and F. Ancilotto, *Phys. Rev. B* **78**, 184515 (2008).
- [8] R. Guardiola, J. Navarro, D. Mateo, and M. Barranco, *J. Chem. Phys.* **131**, 174110 (2009).
- [9] K.B. Whaley, *Int. Rev. Phys. Chem.* **13**, 41 (1994).
- [10] J.P. Toennies and A.F. Vilesov, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **49**, 1 (1998).
- [11] M. Barranco, R. Guardiola, S. Hernández, R. Mayol, J. Navarro, and M. Pi, *J. Low Temp. Phys.* **142**, 1 (2006).
- [12] H.-K. Chung, K. Kirby, and J.F. Babb, *Phys. Rev. A* **60**, 2002 (1999).
- [13] H.-K. Chung, K. Kirby, and J.F. Babb, *Phys. Rev. A* **63**, 032516 (2001).
- [14] M. Bouledroua, A. Dalgarno, and R. Côté, *Phys. Rev. A* **65**, 012701 (2001).
- [15] P.S. Erdman, C.W. Larson, M. Fajardo, K.M. Sando, and W.C. Stwalley, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **88**, 447 (2004).
- [16] C. Vadla, R. Beuc, V. Horvatic, M. Movre, A. Quentmeier, and K. Niemax, *Eur. Phys. J. D* **37**, 37 (2006).

- [17] C. Vadla, V. Horvatic, and K. Niemax, *Appl. Phys. B* **84**, 523 (2006).
- [18] F. Talbi, M. Bouledroua, and K. Alioua, *Eur. Phys. J. D* **50**, 141 (2008).
- [19] C. Zhu, J.F. Babb, and A. Dalgarno, *Phys. Rev. A* **71**, 052710 (2005).
- [20] C. Zhu, J.F. Babb, and A. Dalgarno, *Phys. Rev. A* **73**, 012506 (2006).
- [21] K. Alioua and M. Bouledroua, *Phys. Rev. A* **74**, 032711 (2006).
- [22] F. Shindo, J.F. Babb, K. Kirby, and K. Yoshino, *J. Phys. B* **40**, 2841 (2007).
- [23] N.F. Allard, F. Spiegelman, and J.F. Kielkopf, *Astron. Astrophys.* **465**, 1085 (2007).
- [24] D.F.T. Mullanphy, G. Peach, V. Venturi, I.B. Whittingham, and S.J. Gibson, *J. Phys. B* **40**, 1141 (2007).
- [25] K. Alioua, M. Bouledroua, A.R. Allouche, and M. Aubert-Frécon, *J. Phys. B* **41**, 175102 (2008).
- [26] E. Czuchaj, F. Reberntrost, H. Stoll, and H. Preuss, *Theor. Chem. Acc.* **100**, 117 (1998).
- [27] E. Paul-Kwiek and E. Czuchaj, *Eur. Phys. J. D* **3**, 163 (1998).
- [28] B. Kerkeni, P.S. Barklem, A. Spielfiedel, and N. Feautrier, *J. Phys. B* **37**, 677 (2004).
- [29] J.C. Holtgrave and P.J. Wolf, *Phys. Rev. A* **72**, 012711 (2005).
- [30] C.C. Lovallo and M. Klobukowski, *Chem. Phys. Lett.* **373**, 439 (2003).
- [31] M. Baranger, *Phys. Rev.* **111**, 481 (1958).
- [32] K. Alioua, Thèse de Doctorat, Université Badji Mokhtar, Annaba (2007).
- [33] A.M. Lyyra, K.M. Sando, and P.D. Kleiber, *Phys. Rev. A* **35**, 915 (1987).
- [34] B.H. Bransden and C.J. Joachain, *Physics of Atoms and Molecules*, (Longman, London, 1983).
- [35] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloë, *Mécanique quantique Tome II*, (Hermann, Paris, 1973).
- [36] L.I. Schiff, *Quantum Mechanics*, (McGraw-Hill Book Company, Inc., New York, 1955).
- [37] R. D. Cowan, *The Theory of Atomic Structure and Spectra*, (University of California Press, Berkeley, 1981).
- [38] L.D. Landau and E.M. Lifchitz, *Quantum Mechanics, Non-Relativistic Theory*, (Pergamon Press, Oxford, England, 1977).
- [39] M. Abramowitz and I.A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, (Dover Publications, Inc., New York, 1972).

- [40] B. Numerov, *Pub. Observ. Central Astrophys. Russ.* **2**, 188 (1933).
- [41] N.F. Mott and H.S.W. Massey, *The Theory of Atomic Collisions*, (Oxford University Press, Oxford, 1965).
- [42] R.J. Hinde, *J. Phys. B* **336**, 3119 (2003).
- [43] M.Mella, G. Calderoni, and F. Cargnoni, *J. Chem. Phys.* **123**, 054328 (2005).
- [44] J. Reho, U. Merker, M.R. Radchiff, K.K. Lehmann, and G. Scoles, *J. Chem. Phys.* **112**, 8409 (2000).
- [45] H. Partridge and J.R. Stallcop, *J. Chem. Phys.* **115**, 6471 (2001).
- [46] R.H. Xie and J. Gong, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 263202 (2005).
- [47] J. Mitroy and J.Y. Zhang, *Mol. Phys.* **106**, 127 (2008).
- [48] P.S. Herman and K.M. Sando, *J. Chem. Phys.* **68**, 1153 (1978).
- [49] P.F. Bernath, *Spectra of Atoms and Molecules*, (Oxford University Press, New York, 1995).
- [50] R.J. Le Roy, Level 7.4 program, University of Waterloo, Chemical Physics Research Report (2001).
- [51] D.J. Funk, W.H. Breckenridge, J. Simons, and G. Chałasiński, *J. Chem. Phys.* **91**, 1114 (1989).
- [52] G.F. Gribakin and V.V. Flambaum, *Phys. Rev. A* **48**, 546 (1993).
- [53] S. Chapman and T.G. Cowling, *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1952).
- [54] J.O. Hirschfelder, C.F. Curtis, and R.B. Bird, *Molecular Theory of Gases and Liquids*, (Wiley and Sons, New York, 1964).
- [55] A. Dalgarno, M.R.C. McDowell, and A. Williams, *Phil. Trans. Roy. Soc. London A* **250**, 411 (1958).
- [56] E.A. Mason and E.W. McDaniel, *Transport Properties of Ions in Gases*, (Wiley and Sons, Inc., New York, 1988).
- [57] T.P. Redko, I.M. Rusianov, and A.B. Blagoev, *J. Phys. B* **26**, 107 (1993).
- [58] K.M. Aref'ev, M.A. Guseva, and B.M. Khomchenkov, *High Temp.* **25**, 174 (1987).
- [59] J.C. Barthelat, I. Ortega-Blake, S.A. Cruz, C. Vergas-Alburto, and L.T. Chadderton, *Phys. Rev. A* **31**, 1382 (1985).

- [60] E. Czuchaj, H. Stoll, and H. Preuss, *J. Phys. B* **20**, 1487 (1987).
- [61] G. Herzberg, *Molecular Spectra and Molecular Structure, Vol. I : Spectra of Diatomic Molecules*, (D. van Nostrand Co., Princeton, 1963).
- [62] Yu. Ralchenko, A.E. Kramida, J. Reader, and NIST ASD Team, *NIST Atomic Spectra Database*, v. 3.1.5 (2008).
- [63] A. Lurio, *Phys. Rev.* **136**, A376 (1964).
- [64] T. Andersen, J. Desesquelles, K.A. Jessen, and G. Sørensen, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **10**, 1143 (1970).
- [65] P. Jönsson and C. Froese Fischer, *J. Phys. B* **30**, 5861 (1997).
- [66] P. Jönsson, C Froese Fischer, and M.R. Godefroid, *J. Phys. B* **32**, 1233 (1999).
- [67] D.C. Morton, *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **149**, 205 (2003).
- [68] J. Szudy and W.E. Baylis, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **15**, 641 (1975).
- [69] R.P. Feynman, *Phys. Rev.* **76**, 749 (1949).
- [70] L. Reggami, M. Bouledroua, A.R. Allouche, and M. Aubert-Frécon, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **110**, 72 (2008).
- [71] W. Greiner, L. Neise et H. Stöcher, *Thermodynamique et mécanique statistique*, (Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1999).
- [72] C. Bottcher, K.K. Docken, and A. Dalgarno, *J. Phys. B* **8**, 1756 (1975).
- [73] W.R. Hindmarsh and J.M. Farr, *J. Phys. B* **2**, 1388 (1969).
- [74] K.M. Sando and A. Dalgarno, *Mol. Phys.* **20**, 103 (1971).
- [75] W.H. Press, B.P. Flannery, S.A. Teukolsky, and W.T Vetterling, *Numerical Recipes. The Art of Scientific Computing*, (Cambridge University Press, New York, 1987).
- [76] K.M. Sando and P.S. Herman, in *Proceeding of Sixth International Conference Boulder*, edited by K. Burnett, (Colorado 1983).
- [77] A.M. Lyyra, (Communication privée, 2010).