Etude, par la méthode des anticroisements, des niveaux n=3 et 4 de l'atome d'hydrogène excité, formé par dissociation de la molécule H2

Michèle Glass-Maujean

▶ **To cite this version:**

Michèle Glass-Maujean. Etude, par la méthode des anticroisements, des niveaux n=3 et 4 de l'atome d'hydrogène excité, formé par dissociation de la molécule H2. Physique Atomique [physics.atom-ph]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 1974. Français. NNT : . tel-00011819

HAL Id: tel-00011819
https://theses.hal.science/tel-00011819

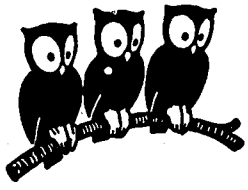
Submitted on 8 Mar 2006

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

UNIVERSITÉ DE PARIS

LABORATOIRE DE PHYSIQUE DE L'ÉCOLE NORMALE SUPÉRIEURE



THESE DE DOCTORAT D'ETAT ES SCIENCES PHYSIQUES

présentée

A L'UNIVERSITE PARIS VI

par

Michèle GLASS-MAUJEAN

pour obtenir le grade de Docteur ès Sciences

Sujet de la thèse : ETUDE, PAR LA METHODE DES ANTICROISEMENTS, DES NIVEAUX n = 3 et 4 DE L'ATOME D'HYDROGENE EXCITE, FORME PAR DISSOCIATION DE LA MOLECULE H_2.

Soutenue le 12 Février 1974, devant la Commission d'Examen :

MM. J. BROSSEL	Président
P. JACQUINOT C. COHEN-TANNOUDJI J.P. DESCOUBES J. DURUP	Examinateurs

N° d'enregistrement
au C.N.R.S.
A.O. 9563

THESE DE DOCTORAT D'ETAT ES SCIENCES PHYSIQUES

présentée

A L'UNIVERSITE DE PARIS VI

par

Michèle G L A S S - M A U J E A N

pour obtenir

le grade de Docteur ès Sciences

Sujet de la Thèse :

"ETUDE, PAR LA METHODE DES ANTICROISEMENTS, DES NIVEAUX n = 3 ET 4 DE L'ATOME D'HYDROGENE EXCITE, FORME PAR DISSOCIATION DE LA MOLECULE H_2".

soutenue le 12 FEVRIER 1974 devant la Commission d'Examen :

MM.	J. BROSSEL	Président
	P. JACQUINOT	Examinateurs
	C. COHEN-TANNOUDJI	
	J.P. DESCOUBES	
	J. DURUP	

Ce travail a été effectué au Laboratoire de Spectroscopie Hertzienne de l'Ecole Normale Supérieure (Halle aux Vins) au cours des années 1968 - 1973. Je tiens à remercier Messieurs les Professeurs A. KASTLER et J. BROSSEL de m'avoir permis de bénéficier de conditions matérielles et intellectuelles remarquables.

Je suis heureuse d'exprimer, ici, ma profonde reconnaissance à J.P. DESCOUBES, à qui je dois l'essentiel de ce que j'ai appris durant ces années. Il m'a fait profiter, à tous moments, de sa grande expérience et de sa remarquable intuition des phénomènes physiques. Je voudrais le remercier, aussi, de son extrême gentillesse et de l'ambiance très amicale qu'il a su créer dans son équipe.

Je suis reconnaissante à Monsieur J. DURUP pour avoir accepté de participer au jury et pour sa lecture critique du manuscrit et les suggestions qu'il a bien voulu me faire alors.

Je remercie C. COHEN-TANNOUDJI et A. OMONT pour les fructueuses discussions que nous avons eues, lors de la mise au point du manuscrit.

Qu'il me soit permis d'exprimer ma gratitude à Monsieur P. JACQUINOT pour avoir bien voulu participer au jury et pour l'interêt qu'il a porté à ce travail.

Madame L. JULIEN a réalisé une partie des expériences et des mesures qui sont décrites. Je la remercie vivement pour sa contribution importante à ce travail.

Je voudrais remercier aussi tout particulièrement T. DOHNALIK (de l'institut de physique de l'Université Jagellonienne de Cracovie) pour ses remarques stimulantes et pour sa collaboration, pendant son année de stage au laboratoire.

Sans pouvoir tous les citer, je remercie vivement tous mes camarades de la "Halle aux Vins" et plus particulièrement R. BARBE et R. ROMESTAIN pour leurs suggestions sur le montage expérimental.

Que P.M. GUYON trouve ici mes remerciements pour les très intéressantes discussions que nous avons eues sur la dissociation de la molécule.

Bien entendu, ce travail a bénéficié de l'aide indispensable des techniciens des ateliers de Mécanique, d'Electronique et de Verrerie. Je tiens à les remercier tous ici, pour la qualité de leur travail, leur efficacité et leur esprit d'initiative.

Je remercie M.HAI, de la C.I.F.T.E., pour toutes les facilités qu'il m'a données lors de la construction des cellules.

Madame M. HEYVAERTS a assuré la frappe de cette thèse avec une très grande compétence. Je la prie de trouver ici mes remerciements.

Madame AUDOIN a accepté, avec une grande gentillesse, de se charger du tirage de cette thèse, dans des délais très courts et je lui en suis très reconnaissante.

Je remercie également Madame L. ROBIN pour avoir, avec compétence et gentillesse, réalisé les photographies à partir desquelles a été tiré un certain nombre de figures.

Enfin que tous ceux qui m'ont apporté leur aide, de quelque manière que ce soit, pendant la réalisation de ce travail, trouvent ici l'expression de ma gratitude.

TABLE DES MATIERES

INTRODUCTION 1

CHAPITRE I - RAPPELS SUR L'ATOME D'HYDROGENE 7

A/ La structure fine de l'atome d'hydrogène 7

1) Equation de Dirac 7

2) Equation de Pauli-Darwin 8

3) Résolution de l'équation de Dirac 11

B/ La structure hyperfine

C/ Les corrections radiatives

1) Le hamiltonien de pertubation 16

2) Les déplacements radiatifs et la durée de vie 17

3) La renormalisation de la masse 18

4) Les déplacements radiatifs et l'électrodynamique quantique 19

D/ Les valeurs numériques 21

CHAPITRE II - CALCUL DU DIAGRAMME ZEEMAN 23

A/ Principe du calcul 23

1) Le hamiltonien de Breit en présence de $\vec{H}$ 25

2) Calcul du hamiltonien total dans la représentation $|((\ell s)\ j, I)\ f\ m_f>$ 25

B/ Les valeurs numériques des matrices représentant le hamiltonien total 27

C/ Calcul des positions des croisements 30

D/ Calcul des fonctions d'onde aux points de croisement 33

E/ Calcul des pentes 34

CHAPITRE III - LA MATRICE DIPOLAIRE ELECTRIQUE 35

A/ Le hamiltonien de perturbation lié à un champ électrique $\vec{E}$ 35

1) Le hamiltonien atomique en présence d'un champ électrique. 35

2) Le calcul de $\mathcal{H}_E$ dans la base des $|(s\ell)\ j\ m_j>$ 36

3) Les résultats numériques 38

B/ Calcul des probabilités d'émission spontanée 41

1) Equation de Heisenberg relative à l'émission spontanée 41

2) Calcul des w dans la base des $|(s\ell)\ j\ m_j>$ 43

3) Application à l'observation transversale 45

4) Influence de la perturbation par le champ électrique 48

CHAPITRE IV - LA FORMATION DES ATOMES EXCITES 52

A/ Preuves expérimentales du processus à 1 collision

1) Les différents processus possibles 52

2) Les observations expérimentales 54

B/ Calcul de l'état atomique après le processus de dissociation 56

1) Les hypothèses 57

2) Evolution de la matrice densité lors du processus d'excitation 58

C/ Calcul des vitesses des fragments de dissociation 61

1) Etat initial 62

2) Vitesse de la molécule après collision 62

3) Explosion de H_2 64

4) Vitesse des atomes dans le repère du laboratoire 64

D/ Hypothèse d'une répartition isotrope de ϑ_H^* 66

1) Validité et limites 66

2) Calcul de la distribution de $\vec{V}$ dans l'hypothèse de la répartition isotrope 67

CHAPITRE V - ETUDE DES ANTICROISEMENTS 70

A/ Principe du calcul 70

1) Excitation des atomes 71

2) Evolution propre dans l'état excité 71

3) Désexcitation par émission spontanée 72

4) La solution stationnaire 72

B/ Les anticroisements par couplage direct 73

1) Les hypothèses 73

2) Le calcul des éléments de matrice σ 73

3) Intensité de la lumière observable 75

4) Discussion des effets liés aux populations 76

5) Discussion de l'effet lié à l'excitation cohérente 78

C/ Les anticroisements par couplage indirect 80

1) Calcul des éléments de la matrice 81

2) Calculs approchés dans le cas d'une perturbation faible 85

3) Discussion des termes obtenus dans le cas d'une perturbation faible 86

4) Calcul de l'élargissement 88

5) Intensité de la lumière observable 90

6) Etude de la cohérence induite par la perturbation électrique entre les niveaux a et c 90

D/ Etude de l'influence de tous les autres niveaux 95

1) Principe du calcul des déplacements 95

2) Les résultats numériques

E/ Conséquences de la répartition de vitesses sur les signaux 97

1) Conséquence sur les effets de cohérence 98

2) Conséquence sur les effets de population 99

CHAPITRE VI - DISPOSITIF EXPERIMENTAL 101

A/ La cellule à excitation électronique 101

1) Description 101

2) Montage et formation 102

3) Les domaines de pression 104

4) Le montage électrique 106

5) Les champs électriques parasites 107

B/ Le champ magnétique 110

1) Les bobines de Helmholtz 110

2) L'électro-aimant 112

C/ Le système de détection 116

1) Mesures sur l'intensité lumineuse totale 116

2) Mesures en polarisation 119

CHAPITRE VII - COMPARAISON EXPERIENCE-THEORIE 122

A/ Les anticroisements observés et leur identification 122

1) L'observation globale 122

2) L'identification 124

B/ Détermination des différents paramètres 126

1) Les différents paramètres 126

2) Conditions de détermination des différents paramètres 128

3) Détermination des vitesses atomiques 128

4) Détermination des coefficients ρ 130

5) Détermination des structures 132

C/ Comparaison des courbes théoriques et expérimentales sur n=3 au seuil d'excitation 133

1) Les huit anticroisements entre sous-niveaux P et D 134

2) Les anticroisements entre sous-niveaux issus de $^2S_{1/2}$ $m_j = 1/2$, $^2D_{5/2}$ $m_j = -3/2$ (E,α) 140

3) Les anticroisements entre sous-niveaux $3^2S_{1/2}$ $m_j = -1/2$ $3^2D_{5/2}$ $m_j = -5/2$ (β, F) 144

4) L'ensemble des anticroisements en champ magnétique fort 154

5) Cas des anticroisements 3^2S $m_j = 1/2$, 3^2D $m_j = -3/2$ issu de $^2D_{3/2}$ J (α,J) 160

D/ Etude des anticroisements pour des énergies d'excitation légèrement supérieures au seuil

1) Les effets d'une répartition anisotrope 163

2) Conséquence des différences de populations à l'intérieur d'un même terme 164.

3) Les anticroisements 3 SD 1 , 3 SD 2 166

4) Etude des courbes en intensité totale 168

E/ Evolution des signaux d'anticroisement en fonction de l'énergie d'excitation 176

F/ Etude des anticroisements S D sur n = 4 186

CHAPITRE VIII - DISCUSSION DES RESULTATS 202

A/ Les structures atomiques 202

1) Les résultats 202

2) La mesure de $\mathcal{S}$ 203

3) Le Lamb-shift $3^2P_{3/2} - 3^2D_{3/2}$ 205

4) Les principales causes d'incertitude 208

B/ Les résultats relatifs à la molécule H_2 210

1) Polarisation des raies de Balmer 210

2) Etude de la dissociation de H_2 en fragments excités par les anticroisements 211

3) Le projet de Lure 222

4) Les courbes d'excitation 222

CONCLUSION 225

INTRODUCTION

La connaissance de plus en plus fine du spectre de l'atome d'hydrogène est en très grande partie à l'origine des théories de plus en plus élaborées de physique atomique.

Le modèle de Bohr (1913) ([1]) permit de rendre compte de l'existence de séries de raies : les raies de Lyman ([2]), Balmer ([3]) et Paschen ([4]) et en outre d'en prédire les longueurs d'onde.

Mais même en 1913, la résolution de certains spectrographes était suffisante pour faire soupçonner un dédoublement des raies de Balmer qui fut confirmé en 1916 par Paschen ([5]). Le modèle de Sommerfeld (1916) ([6]) en rendait compte. Neuf ans plus tard, en 1925, les observations de Hansen ([7]) infirmaient le modèle de Bohr-Sommerfeld.

La première théorie de physique atomique établie par Schrodinger ([8]), en 1926, n'attribuait à l'atome d'hydrogène que les niveaux d'énergies décrits par le modèle de Bohr.

L'équation de Dirac en 1928 ([9]) sembla alors tout expliquer. Les méthodes d'investigation étaient, à l'époque, fondées sur la spectroscopie optique. Les structures des raies de Balmer étaient dans ces conditions, très loin d'être complètement résolues. En effet l'élargissement Doppler est particulièrement important sur les raies de l'hydrogène, le plus léger de tous les atomes. Cependant dès 1934, des doutes étaient émis au sujet de la théorie de Dirac ([10]).

Il fallut attendre l'avènement de la spectroscopie de radiofréquence, pour voir disparaître les inconvénients de l'effet Doppler. Les expériences historiques de Lamb et Retherford ([11]) en 1947, permirent de montrer que le niveau $2^2S_{1/2}$ a une énergie supérieure de 1 000 MHz environ à celle du niveau $2^2P_{1/2}$; ce résultat mettait en défaut la théorie de Dirac prévoyant au contraire, pour ces niveaux, la même énergie.

Bethe ([12]) fut le premier à expliquer ce déplacement, en tenant compte de l'interaction de l'atome avec le champ de rayonnement quantifié. Mais le calcul complet du "Lamb-shift" doit être relativiste et nécessite le formalisme de l'électrodynamique quantique ([13]). Depuis, ce calcul n'a cessé d'être corrigé et amélioré ([14]) tandis que les mesures devenaient plus précises ([15]); un désaccord persistait cependant entre les expériences et la théorie.

En 1970, Appelquist et Brodsky ([16]) ont corrigé une erreur de signe dans les calculs antérieurs des effets radiatifs d'ordre 4 et ont donné une nouvelle valeur théorique du "Lamb-shift" :

$$\delta = 2^2S_{1/2} - 2^2P_{1/2} = 1\ 057{,}91 \pm 0{,}16\ \text{MHz}$$

en accord avec les résultats des mesures les plus récentes.

La mesure des corrections radiatives correspondant à d'autres niveaux, également calculées avec précision ([17]), offrent de même un très grand intérêt.

Les "Lamb-shift" $n^2S_{1/2} - n^2P_{1/2}$ ont été mesurés pour n = 3 ([18]) ([19]) ([20]) ([21]) ([22]) et n = 4 ([19]) ([20]) ; par contre, aucune expérience n'avait permis de mettre en évidence de manière certaine les déplacements radiatifs entre niveaux de J = 3/2. Cette mise en évidence constitue le but premier du travail qui est présenté ici.

Nous avons eu alors, à résoudre deux problèmes : choisir le mode de formation des atomes excités, puis déterminer la technique adaptée à ces mesures de structures, en fonction du mode de formation choisie.

Pour former des atomes excités, il est nécessaire de dissocier la molécule et d'exciter les atomes ainsi formés. La solution la plus simple est d'employer un faisceau d'électrons lents qui entre en collision avec de l'hydrogène moléculaire sous très faible pression dans une enceinte scellée. De plus, la technologie correspondante nous était familière ([23]).

Ce procédé avait déjà été choisi par Lamb et ses collaborateurs ([19]) ([24]). Ils utilisaient, en outre, une méthode de détection optique des transitions dipolaires électriques de radiofréquence, très analogue à la détection optique de la résonance magnétique qui avait été mise au point dès 1951 ([25]).

La méthode des anticroisements de niveaux, proposée par Wieder et Eck ([26]), permet les mêmes mesures que la technique des radiofréquences ; sur le plan expérimental, elle est plus simple et comme nous le verrons, elle permet dans certains cas, des mesures plus précises. C'est elle que nous avons utilisée.

Le principe en est l'étude locale du diagramme Zeeman des niveaux excités de l'atome d'hydrogène, au voisinage des valeurs du champ magnétique pour lesquelles deux sous-niveaux Zeeman, de parités différentes, ont la même énergie (on dit qu'ils se croisent).

Considérons alors une perturbation convenable qui mélange ces deux états ; le diagramme d'énergie est modifié, il se produit une répulsion des sous-niveaux (on dit qu'ils "s'anticroisent"). La perturbation induit, d'autre part, des transitions entre ces deux sous-niveaux; s'ils sont initialement peuplés différemment, il est possible d'observer, sur la lumière de fluorescence de ces sous-niveaux, une variation résonnante d'intensité, quand on balaye le champ magnétique sur une plage contenant le point d'anticroisement. Il faut noter que les deux sous-niveaux concernés ayant des parités différentes, leurs diagrammes de rayonnement sont différents. Une condition nécessaire d'application de cette méthode est de ce fait remplie.

De l'étude de ces résonances, on tire divers renseignements sur le phénomène d'anticroisement de niveaux excités des atomes d'hydrogène produits par dissociation des molécules.

Des positions des résonances, on déduit la structure en champ nul du groupe de niveaux étudiés. Les largeurs de ces résonances donnent la grandeur de la perturbation responsable du mélange. Enfin, leurs amplitudes permettent d'évaluer les vitesses de formation des différents niveaux excités dues, au processus de dissociation.

Le présent mémoire a pour objet de rapporter les résultats ainsi obtenus, de les interpréter et de les discuter.

Dans le premier chapitre, nous nous bornerons à rappeler l'origine physique des différentes structures.

Le chapitre II traite de l'étude précise du diagramme Zeeman, indispensable pour relier les structures aux positions des anticroisements.

La perturbation utilisée pour mélanger les sous-niveaux est due à un champ électrique statique. La technique des anticroisements n'est rien d'autre ici qu'une transposition à fréquence nulle de la méthode des résonances dipolaires électriques. Le calcul de la perturbation électrique fait l'objet du 3ème chapitre ; on en utilise alors les résultats pour en déduire les différentes probabilités d'émission spontanée.

Le champ électrique induit (ou champ motionnel), dû au mouvement de l'atome dans le champ magnétique statique, suffit pour provoquer le mélange cherché. Les vitesses des atomes excités dépendent du processus de formation de ces atomes, donc de la dissociation de la molécule en atomes excités. C'est ce que nous verrons dans le chapitre IV.

Le chapitre V utilise les résultats des chapitres qui le précédent. Nous y traitons complètement les anticroisements entre sous-niveaux mélangés directement par la perturbation (anticroisement par couplage

direct) ou entre sous-niveaux mélangés indirectement par l'intermédiaire d'un troisième sous-niveau (anticroisement par couplage indirect).

Le dispositif expérimental est ensuite décrit au chapitre VI.

Nous comparons dans le chapitre VII les courbes expérimentales ainsi obtenues aux courbes prévues théoriquement au chapitre V. Nous en déduisons les valeurs des structures des niveaux atomiques et des informations sur les niveaux moléculaires qui se dissocient en donnant des atomes excités.

Enfin, ces résultats sont interprétés et discutés dans le chapitre VIII.

C H A P I T R E I

RAPPELS SUR L'ATOME D'HYDROGENE

La mécanique quantique élémentaire ne permet pas d'expliquer tous les détails du spectre de l'atome d'hydrogène. L'introduction de la relativité, avec l'équation de Dirac, conduit à des prévisions plus précises sur les niveaux d'énergie. Il faut cependant les compléter par un certain nombre de corrections, telles que : la structure hyperfine et les corrections radiatives.

A - LA STRUCTURE FINE DE L'ATOME D'HYDROGENE

1) L'équation de Dirac

Lorsqu'un atome H est isolé, sans champ électromagnétique extérieur, on peut décrire ses propriétés grâce à une fonction d'onde à 4 composantes qui obéit à l'équation de Dirac [9]

I.1 $$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = (c\, \vec{\alpha}.\vec{p} + \beta\, m\, c^2 + eV)\psi$$

où $\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$ est l'opérateur impulsion, β et α_i sont les matrices de Dirac 4 × 4 (pour ces matrices voir réf. 27) et V le potentiel coulombien.

Les états stationnaires du système sont décrits par des fonctions d'onde de la forme :

I.2 $$\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} e^{-iEt/\hbar}$$

où les vecteurs colonnes 1 × 2 : φ et χ ne dépendent pas du temps et sont désignés respectivement par la grande et la petite composante.

Il n'est pas très facile de travailler avec une telle fonction d'onde; nous allons voir qu'il est possible de se ramener à une fonction à deux composantes (1×2) seulement, régie par l'équation de Pauli - Darwin, au prix de certaines approximations.

2) L'équation de Pauli-Darwin

L'équation de Dirac (I.1), quand on explicite la fonction d'onde (I.2), se décompose en un système de deux équations couplées :

I.3
$$\begin{cases} \vec{\sigma}.\vec{p}\ \chi = \frac{1}{c}\,(E - eV - mc^2)\,\varphi \\ \vec{\sigma}.\vec{p}\ \varphi = \frac{1}{c}\,(E - eV + mc^2)\,\chi \end{cases}$$

En éliminant χ entre ces 2 équations, on trouve que la grande composante φ est solution de :

I.4
$$c^2\{\vec{\sigma}.\vec{p}\ (E - eV + mc^2)^{-1}\ \vec{\sigma}.\vec{p}\}\ \varphi = (E - eV - mc^2)\ \varphi .$$

L'énergie E de l'atome comprend l'énergie de masse et l'énergie de liaison E_{obs}, c'est-à-dire celle que l'on observe expérimentalement ; on a, bien sûr :

$$eV\ ,\ E_{obs} << mc^2$$

de sorte que l'on peut écrire :

$$(E - eV + mc^2)^{-1} \simeq \left(1 - \frac{E_{obs} - eV}{2mc^2}\right)\frac{1}{2mc^2}$$

L'équation I.4 devient alors :

I.5 $$\{ \frac{1}{2m} \vec{\sigma}.\vec{p} \, (1 - \frac{E_{obs} - eV}{2mc^2}) \, \vec{\sigma}.\vec{p} + eV \} \varphi = E_{obs} \varphi$$

Cette relation ressemble à une équation de Schrodinger, indépendante du temps, du type :

I.6 $$\mathcal{H} \varphi = E_{obs} \varphi$$

où $\mathcal{H}$ serait un hamiltonien de valeur propre E_{obs} et de fonction propre φ. En fait, la grande composante φ n'est pas normalisée ; en effet, c'est la fonction d'onde ψ qui est normalisée, en ce sens que :

$$\int (\varphi^{\dagger}\varphi + \chi^{\dagger}\chi) \, d^3\vec{r} = 1$$

Or il est facile de voir, à partir de I.3 que

$$\chi \simeq \frac{1}{2mc} \vec{\sigma}.\vec{p} \, \varphi$$

la condition de normalisation devient :

$$\int \varphi^{\dagger} \, (1 + \frac{p^2}{4m^2c^2}) \, \varphi \, d^3\vec{r} = 1$$

Il faut donc prendre comme fonction d'onde, l'expression normalisée

$$\Phi = (1 + \frac{p^2}{8m^2c^2}) \, \varphi = \Omega \varphi$$

En utilisant la relation:

$$\Omega^{-1} \mathcal{H} \Omega^{-1} \Phi = E_{obs} \Omega^{-2} \Phi$$

et, en explicitant au premier ordre en v^2/c^2, on trouve (réf. 27 p.87)

I.7 $$(\frac{p^2}{2m} + eV - \frac{p^4}{8m^3c^2} + \frac{e\hbar \vec{\sigma}.(\vec{\nabla}V \wedge \vec{p})}{4m^2c^2} + \frac{e\hbar^2}{8m^2c^2} \nabla^2 V)\Phi = E_{obs} \Phi$$

Cette équation ne présente plus les difficultés rencontrées pour l'équation I.5 ; la fonction Φ est normalisée, l'équation I.7 peut donc être considérée comme une équation du type I.6.

Elle est appelée équation de Pauli-Darwin. Elle n'est qu'approchée, mais elle offre un très grand intérêt :

- la fonction d'onde Φ n'a que deux composantes
- l'équation apparaît naturellement comme l'équation aux valeurs propres d'un hamiltonien, somme du hamiltonien non relativiste habituel $p^2/2m + eV$ et d'une série de termes correctifs que l'on peut interpréter physiquement.

Ainsi le troisième terme est la correction relativiste apportée à l'ordre le plus bas à l'énergie cinétique.

Le quatrième représente l'interaction spin-orbite ; en effet :

$$\overrightarrow{\nabla V} = \frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\vec{r} \quad \text{or} \quad \vec{r} \wedge \vec{p} = \vec{L} \quad \text{et} \quad \vec{\sigma} = \frac{2}{\hbar}\vec{S}$$

ainsi cette correction s'écrit :

$$\frac{e}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\vec{S}\cdot\vec{L}$$

Le dernier terme, enfin, est appelé terme de Darwin ; il vaut :

$$\frac{e\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla^2 V = \frac{4\pi e^2\hbar^2}{8m^2c^2}\delta(\vec{r})$$

On voit qu'il n'a d'effet que sur les états S. Il est lié à la non localisation de l'électron de Dirac. En effet, l'opérateur position d'un électron libre a des éléments de matrice entre états d'énergie > 0 et états d'énergie < 0 ; la valeur moyenne $\langle \vec{r} \rangle$, pour un paquet d'ondes contenant les deux types d'états, comporte une partie oscillante à des fréquences $\approx 2mc^2/h$ et d'amplitude $\approx \hbar/mc$. Ce phénomène porte le nom de Zitterbewegung. On peut montrer qu'une conséquence de ce phénomène

est que, à la limite non relativiste, l'interaction entre l'électron et le potentiel n'est plus locale : l'électron explore le potentiel dans une région de dimension linéaire de l'ordre de $\hbar/mc$. En développant le potentiel, on retrouve le terme dit de Darwin à un facteur 3/4 près.

Tous ces termes avaient été déterminés, antérieurement à l'équation de Dirac, par Darwin, à l'exception du dernier terme ([28]).

Il nous faut maintenant évaluer les erreurs que l'on introduit en utilisant une telle équation; pour cela il est nécessaire de comparer les résultats de l'équation de Pauli-Darwin à ceux de l'équation de Dirac. Il s'agit donc de résoudre l'équation de Dirac.

3) Résolution de l'équation de Dirac

Cette résolution est relativement connue, elle est exposée en détail dans la réf. 27. Nous nous bornerons à en donner les résultats.

On montre, après avoir déterminé les différentes constantes du mouvement, que la grande et la petite composante (I.2) de la fonction d'onde peuvent se décomposer en parties radiales et parties angulaires . On a donc :

$$\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \\ \chi \end{pmatrix} e^{-iEt/\hbar} = \begin{pmatrix} g(r)\mathcal{Y}^{m_j}_{j\ell} \\ \\ if(r)\mathcal{Y}^{m_j}_{j\ell'} \end{pmatrix} e^{-iEt/\hbar}$$

avec $\ell = j \pm 1/2$ et $\ell' = j \mp 1/2$

Les harmoniques sphériques spinorielles $\mathcal{Y}$ correspondent tout simplement aux kets propres du moment cinétique total :

$$\mathcal{Y}^{m_j}_{j\ell} \rightleftharpoons |s , \ell , j , m_j >$$

Dans ces conditions, à partir du système I.3, on déduit un système d'équations différentielles liant f(r) et g(r). Comme dans le cas de l'équation de Schrodinger, on cherche, en posant :

$$F(r) = r\,g(r) \quad \text{et} \quad G(r) = r\,g(r)$$

avec

$$\rho = r\,\frac{\sqrt{m^2c^4 - E^2}}{\hbar c}$$

les solutions particulières de la forme :

$$F = e^{-\rho}\,\rho^{s} \sum_{m=0}^{\infty} a_m \rho^m \quad \text{et} \quad G = e^{-\rho}\,\rho^{s} \sum_{m=0}^{\infty} b_m \rho^m$$

En utilisant le fait que la fonction d'onde ψ (I.2) doit être normée, on déduit un certain nombre de conditions, en particulier que les séries F et G doivent être finies. On détermine ainsi les valeurs discrètes de l'énergie E :

I.8
$$E = mc^2 \Bigg/ \sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{\left(n - j - {}^1\!/_2 + \sqrt{(j + {}^1\!/_2)^2 - \alpha^2}\right)^2}}$$

où α est la constante de structure fine $\left(\alpha \simeq \frac{1}{137}\right)$

L'énergie observable devient, en développant suivant les puissances de α :

$$E_{obs} = \frac{mc^2}{2}\,\frac{\alpha^2}{n^2}\left(1 + \frac{\alpha^2}{n}\left(\frac{1}{j+{}^1\!/_2} - \frac{3}{4n}\right) \ldots\right)$$

où l'on reconnaît l'énergie de Rydberg $\left(\frac{mc^2}{2}\,\alpha^2 = Ry\right)$ et l'énergie de structure fine. Ces deux premiers termes sont ceux que l'on obtient à partir de l'équation de Pauli-Darwin. Nous pouvons ainsi connaître la précision pour laquelle l'approximation de Pauli-Darwin est suffisante. Il suffit d'évaluer le terme suivant du développement de E_{obs}. Il est proportionnel à $(mc^2/2 \times \alpha^2/n^2) \times \alpha^4/n^2$ soit environ 10^5 fois plus petit

que la structure fine des niveaux de n = 3. La précision de nos mesures n'atteint pas 10^{-5} en énergie. De toute manière les effets radiatifs interviennent avant. Nous utiliserons donc l'approximation de Pauli-Darwin, et en particulier, les fonctions d'onde qui décrivent l'électron dans cette représentation ; ce sont les fonctions propres bien connues de l'équation de Schrodinger avec spin.

E - LA STRUCTURE HYPERFINE

Dans la théorie qui précède, on a admis que le noyau est infiniment lourd et on a négligé tout ce qui le concernait. Or, un proton est une particule de Fermi, qui,elle aussi, obéit à l'équation de Dirac. Nous devons donc considérer la généralisation de l'équation de Dirac à deux particules qui est une équation approchée,appelée l'équation de Breit. La fonction d'onde a 16 composantes qui correspondent à la combinaison des 4 composantes de l'électron et des 4 composantes du proton. Le hamiltonien s'écrit, pour un système sans champ extérieur ([29]) :

$$\mathcal{H} = c\vec{\alpha}_e.\vec{p}_e + \beta_e\, mc^2 + c\vec{\alpha}_N.\vec{p}_N + \beta_N\, Mc^2$$
$$- \frac{e^2}{r}\left(1 - \frac{\vec{\alpha}_e.\vec{\alpha}_N}{2} - \frac{(\vec{\alpha}_r.\vec{r}).(\vec{\alpha}_N.\vec{r})}{r^2}\right)$$

Les indices e et N caractérisent les grandeurs rattachées respectivement à l'électron et au noyau.

Le premier et le second terme figurent déjà dans l'équation de Dirac d'un électron libre; de même,le troisième et le quatrième figurent dans l'équation analogue pour le noyau ; le dernier est le terme de couplage entre ces deux particules. Il comprend deux parties :

- l'interaction de Coulomb : $- e^2/r$
- l'interaction de Breit :

$$\mathcal{H}_B = \frac{e^2}{r}\left(\frac{\vec{\alpha}_e.\vec{\alpha}_N}{2} + \frac{(\vec{\alpha}_e.\vec{r})\ (\vec{\alpha}_N.\vec{r})}{r^2} \right)$$

Cette dernière ne constitue qu'une approximation : elle correspond à l'échange d'un photon transversal entre l'électron et le noyau ; sont négligés les échanges de plusieurs photons ...

L'interaction de Coulomb est souvent considérée comme résultant de l'échange entre l'électron et le noyau d'un photon longitudinal ou temporel.

Il est possible, en changeant de représentation, de trouver un hamiltonien analogue à celui de Pauli-Darwin et dont les fonctions propres sont à 4 composantes : 2 pour le spin de l'électron et 2 pour celui du noyau ([29]) ([30]).

A une précision supérieure à 10^{-5} , ce hamiltonien s'écrit :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{shf}$$

où $\mathcal{H}_0$ est le hamiltonien de Pauli-Darwin où la masse de l'électron est remplacée par sa masse réduite $m/(1+\frac{m}{M})$.

Le hamiltonien de structure hyperfine $\mathcal{H}_{shf}$ est le transformé de l'interaction de Breit dans cette représentation ; il s'écrit :

$$\mathcal{H}_{shf} = -\frac{e}{2mc}.\frac{e}{2Mc}.g_N\left[-\frac{8\pi}{3}\delta^3(\vec{r})\ g_S\ \vec{S}.\vec{I} + g_S\frac{1}{r^3}\left(\vec{S}.\vec{I} - \frac{3}{r^3}(\vec{S}.\vec{r})\ (\vec{I}.\vec{r})\right) - \frac{2}{r^3}\vec{I}.\vec{L}\right]$$

où g_S et g_N sont les facteurs de Landé de l'électron et du proton.

Dans la théorie de Dirac, g_S et g_N valent 2, mais il est bien connu que g_S et g_N ont des valeurs anormales et cette forme permet d'en tenir compte.

Les vecteurs propres de $\mathcal{H}_0$ sont les vecteurs $|n\,((s,\ell)\,j,\,I)\,f\,m_f>$ Ils ne sont pas vecteurs propres de $\mathcal{H}_{shf}$, mais celui-ci s'écrit simplement dans cette base ; ΔE_{shf} est la matrice correspondante :

$$\Delta E_{shf} = \frac{e}{2mc}\frac{e}{2Mc} g_N \langle n,\ell|\ \frac{1}{r^3}\ |n,\ell\rangle \left(\frac{2\ell(\ell+1)}{j(j+1)}\ \langle|\vec{I}.\vec{J}|\rangle\ +\ (1-\delta_{jj'})\ \langle|\vec{I}.\vec{L}|\rangle\right)$$

où $\langle|\vec{I}.\vec{J}|\rangle$ représente l'élément de matrice :

$$\langle\,((\ell,s)\,j',\,I)\,f'\,m_f\ |\vec{I}.\vec{J}|\ ((\ell,s)\,j,\,I)\,f\,m_f\,\rangle$$

et de même pour $\vec{I}.\vec{L}$.

Or
$$\langle n,\ell|\ \frac{1}{r^3}|\ n,\ell\rangle = \frac{1}{a_0^{\,3}}\ \frac{1}{n^3}\ \frac{1}{\ell(\ell+1)(\ell+1/2)}$$

Ainsi

I.9
$$\Delta E_{shf} = \frac{e}{2mc}\frac{e}{2Mc}\frac{g_N}{a_0^{\,3}n^3}\left[\ \frac{2}{j(j+1)(\ell+1/2)}\ \langle|\vec{I}.\vec{J}|\rangle\ +\ (1-\delta_{jj'})\ \frac{1}{\ell(\ell+1)(\ell+1/2)}\ \langle|\vec{I}.\vec{L}|\rangle\ \right]$$

Ce calcul n'est pas valable pour les niveaux de $\ell = 0$; en reprenant correctement le calcul, dans ce cas [29], on retrouve le 1er terme de l'équation I.9.

C - LES CORRECTIONS RADIATIVES

Classiquement, un électron, libre ou lié, crée un champ électromagnétique. Que ce champ puisse réagir sur cet électron, fut un point longtemps discuté [31]. Dans la théorie quantique du rayonnement, cet effet est traduit par le processus à deux étapes suivant :

- l'électron émet un photon (virtuel)
- ce photon est réabsorbé par le même électron.

L'énergie d'interaction est appelée la "self-énergie". Elle est inobservable pour un électron libre, car il est impossible de supprimer le couplage entre l'électron et le champ de rayonnement. Cependant, dans le cas d'un électron lié, l'effet de ce couplage peut varier d'un niveau à l'autre et il peut se traduire par un déplacement des niveaux d'énergie.

Il est possible de rendre compte, en grande partie, de ces déplacements, sans utiliser une équation relativiste pour l'électron. L'interaction entre l'atome non relativiste et le champ de rayonnement est traitée comme une perturbation.

1) Le Hamiltonien de perturbation

Le hamiltonien du système : atome et champ de rayonnement en interaction comprend 3 termes correspondant à l'atome seul, le rayonnement seul, et l'interaction :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{at} + \mathcal{H}_{R} + \mathcal{H}_{int.}$$

$$\mathcal{H}_{int} = - \frac{e}{mc} \vec{p}.\vec{A} + \frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2$$

Le champ électromagnétique dont il est question ici est tel que le potentiel scalaire est nul et $\vec{\nabla}.\vec{A} = 0$. On dit alors qu'on utilise "la jauge de Coulomb". Le développement de $\vec{A}$ s'écrit :

$$\vec{A} = \sum_{k,\lambda} \frac{e}{\sqrt{V_0}} \sqrt{\frac{\hbar 2\pi}{\omega}} \left(a_{k,\lambda} \vec{\varepsilon}_{\lambda} e^{-i\omega t} + a^{\dagger}_{k,\lambda} \vec{\varepsilon}_{\lambda} e^{i\omega t}\right)$$

dans l'approximation dipolaire électrique ; $a_{k,\lambda}$ et $a^{\dagger}_{k,\lambda}$ sont les opérateurs annihilation et création de photon, de vecteur d'onde $\vec{k}$, ($\omega = |\vec{k}|c$), de polarisation $\vec{\varepsilon}_{\lambda}$ perpendiculaire à $\vec{k}$ ($\lambda = 1,2$). V est le volume considéré pour la quantification.

Les vecteurs propres de $\mathcal{H}_{at.} + \mathcal{H}_R$ sont les kets $|\varphi_i, n>$ correspondant à l'atome dans l'état $|\varphi_i>$ en présence de n photons.

Il s'agit donc de connaître l'influence de tous les états $|I,1>$ (atome dans l'état I et un photon d'énergie E_γ) sur un état $|A,0>$, donc liés à $|A,0>$ par le processus d'émission ou d'absorption d'un photon.

2) Les déplacements radiatifs et la durée de vie

Le calcul des effets de cette perturbation sont assez connus, nous ne les retracerons pas (voir par exemple les références [27] [32]). On obtient à la fois un déplacement en énergie ΔE_A du niveau et la durée de vie de cet état excité τ_A :

$$\Delta E_A = \frac{2}{3\pi} \frac{e^2}{\hbar c} \frac{1}{m^2 c^2} \sum_I \mathcal{P} \int \frac{E_\gamma |<I|\vec{p}.\vec{\varepsilon}_\lambda|A>|^2}{E_A - E_i - E_\gamma} \, dE_\gamma \qquad \text{I.10}$$

et

$$\frac{1}{\tau_A} = \Gamma_A = \frac{1}{3} \frac{e^2}{\hbar c} \frac{1}{m^2 c^2} \sum_I \int E_\gamma |<I|\vec{p}.\vec{\varepsilon}_\lambda|A>|^2 \, \delta(E_A - E_i - E_\gamma) \, dE_\gamma$$

où $\mathcal{P}$ désigne la partie principale.

On remarque que dans Γ_A intervient la fonction $\delta(E_A - E_i - E_\gamma)$. Seuls les photons dont l'énergie respecte la loi de conservation de l'énergie participent au processus alors que pour ΔE_A, tous les photons, même non résonnants, interviennent : on dit que les transitions correspondantes sont virtuelles.

L'intégrale (I.10) sur toutes les énergies E_γ possibles diverge linéairement pour $E_\gamma \to \infty$.

3) La renormalisation de la masse

On peut résoudre cette difficulté en remarquant que la masse utilisée dans le hamiltonien atomique $\mathcal{H}_{at}$ est la masse expérimentale m de l'électron libre. Or cet électron est en interaction avec le rayonnement, il n'est pas "nu". La masse de l'électron "nu", m_0 , est inaccessible expérimentalement ; or c'est elle qui devrait intervenir dans $\mathcal{H}_{at}$. En utilisant m au lieu de m_0 , on a donc déjà tenu compte de l'émission et de la réabsorption d'un photon par l'électron libre. Or il est bien connu que ([32]) l'effet des photons de très grande énergie est sensiblement le même pour l'électron libre et l'électron lié, car le temps qui sépare l'émission et la réabsorption d'un tel photon est trop court pour que l'effet du potentiel qui lie l'électron puisse se faire sentir.

Le déplacement ΔE observable, étant la différence entre ΔE_A et la self énergie de l'électron libre, est donc très peu sensible aux photons de grande énergie.

Enfin, l'expression donnée plus haut, pour ΔE_A est basée sur une théorie non relativiste de l'électron et n'est certainement plus valable pour $E_\gamma > mc^2$. De plus, les éléments de matrice sont calculés dans l'approximation dipolaire électrique qui devient vite discutable, même pour des énergies de photons inférieures à mc^2 ([32]). Il ne peut donc être question ici que de calculer un ordre de grandeur, ce qui est fait en bornant l'intégrale qui figure dans I.10 à $E_\gamma = mc^2$; on obtient ainsi

$$\Delta E = \frac{8}{3\pi} \, Ry \, \alpha^3 \, \frac{1}{n^3} \, \mathrm{Log} \, \frac{E_\gamma^{max}}{\langle E_i - E_A \rangle_{moy}} \qquad \delta(\ell) \qquad \text{I.11}$$

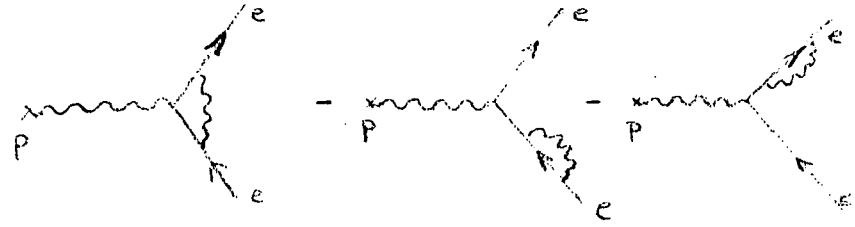
c'est-à-dire, en prenant $E_\gamma^{max} = mc^2$ et $\langle E_i - E_A \rangle_{moy} = 17{,}8 \, Ry$

$$\Delta E \simeq 1\,040 \text{ MHz} \quad \text{pour le niveau } 2^2S.$$

4) Les déplacements radiatifs et l'électrodynamique quantique

Le calcul complet de la "self-énergie" par l'électrodynamique quantique relativiste est fondé sur les mêmes principes que le calcul de Bethe. En diagrammes de Feynman, où l'électron est représenté par un segment, le photon par une ligne ondulée et le noyau par une croix :

self-energie observable =



A chaque symbole du diagramme correspond un opérateur. Les graphes ne sont pas seulement une visualisation des processus mis en cause, mais ils constituent une véritable classification des termes de la série de perturbation qu'il s'agit de calculer.

Les graphes ci-dessus représentent la self-energie de l'électron lié, à laquelle on retranche la self-energie de l'électron libre représentée par les deux derniers graphes.

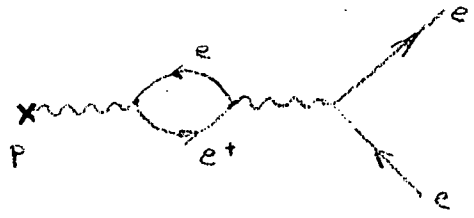
Le calcul ainsi établi présente une difficulté de principe : il débouche sur une intégrale sur l'énergie du photon qui diverge pour les faibles valeurs (elle converge pour les énergies relativistes).

Il est nécessaire d'introduire une coupure : pour les énergies inférieures à la valeur de la coupure, le calcul de Bethe est utilisé, pour les énergies supérieures, c'est l'intégrale relativiste qui permet le calcul.

Une nouvelle méthode de calcul de cette self-energie publiée récemment ([33]), permet de s'affranchir de cette difficulté, par un calcul complètement cohérent pour les faibles et les fortes énergies.

La self-energie n'est pas la seule correction qui intervienne dans

le Lamb-shift. Il y a la "polarisation du vide" ; ce terme correspond au diagramme suivant :



c'est-à-dire la possibilité qu'a le "photon"associé à l'interaction de Coulomb de créer une paire électron-positron. On imagine bien que cette paire écrante la charge de proton et modifie donc l'énergie de liaison de l'électron S qui a une probabilité non nulle d'être au voisinage immédiat du noyau.

Ces corrections sont appelées du 2ème ordre,car elles ne font intervenir que deux interactions avec le champ électromagnétique. La précision expérimentale est telle qu'il faut pousser le calcul jusqu'au 4ème ordre.

Pour le niveau 2S voici la contribution des différents termes ([16]) :

DESCRIPTION	ORDER	MAGNITUDE (MHz)
2^{nd}ORDER – SELF-ENERGY	$\alpha(Z\alpha)^4 m\{\log Z\alpha, 1\}$	1079.32 ± 0.02
2^{nd}ORDER – VAC. POL.	$\alpha(Z\alpha)^4 m$	- 27.13
2^{nd}ORDER – REMAINDER	$\alpha(Z\alpha)^5 m$	7.14
	$\alpha(Z\alpha)^6 m\{\log^2 Z\alpha, \log Z\alpha, 1\}$	- 0.38 ± 0.04
4^{th}ORDER – SELF-ENERGY	$\alpha^2(Z\alpha)^4 m \begin{cases} F_1'(0) \\ F_2(0) \end{cases}$	0.45 ± 0.07 - 0.10
	$\alpha^2(Z\alpha)^5 m$	± 0.02
4^{th}ORDER – VAC. POL.	$\alpha^2(Z\alpha)^4 m$	- 0.24
REDUCED MASS CORRECTIONS	$\alpha(Z\alpha)^4 \frac{m}{M} m\{\log Z\alpha, 1\}$	- 1.64
RECOIL	$(Z\alpha)^5 \frac{m}{M} m\{\log Z\alpha, 1\}$	0.36 ± 0.01
PROTON SIZE	$(Z\alpha)^4 (mR_N)^2 m$	0.13
	$\mathscr{S} = \Delta E(2S_{\frac{1}{2}} - 2P_{\frac{1}{2}})$	= 1057.91 ± 0.16 (L. E.)
$\alpha^{-1} = 137.03608(26)$	$\Delta E(2P_{\frac{3}{2}} - 2S_{\frac{1}{2}})$	= 9911.12 ± 0.22 (L. E.)
	$\Delta E(2P_{\frac{1}{2}} - 2P_{\frac{1}{2}})$	= 10969.03 ± 0.12 (L. E.)

Mais contrairement aux résultats de Bethe, les corrections radiatives déplacent aussi les niveaux autres que S de quantités plus faibles, mais non négligeables. Ainsi la levée de dégénérescence entre les niveaux

$$3^2D_{3/2} \text{ et } 3^2P_{3/2}$$

est un effet purement relativiste.

D - LES VALEURS NUMERIQUES

Tous ces calculs conduisent aux valeurs numériques suivantes ([17]) :

$2^2S_{1/2} - 2^2P_{1/2}$:	1 057,912 ± 0,011	MHz
$2^2P_{3/2} - 2^2P_{1/2}$:	10 969,035 ± 0,034	"
$3^2S_{1/2} - 3^2P_{1/2}$:	314,8966± 0,0034	"
$3^2P_{3/2} - 3^2P_{1/2}$:	3 250,087 ± 0,010	"
$3^2D_{3/2} - 3^2P_{1/2}$:	3 244,755 ± 0,010	"
$3^2D_{5/2} - 3^2P_{1/2}$:	4 328,092 ± 0,013	"
$4^2S_{1/2} - 4^2P_{1/2}$:	133,0850± 0,0014	"
$4^2P_{3/2} - 4^2P_{1/2}$:	1 371,1290± 0,0043	"
$4^2D_{3/2} - 4^2P_{1/2}$:	1 368,812 ± 0,085	"
$4^2D_{5/2} - 4^2P_{1/2}$:	1 825,845 ± 0,085	"
$4^2F_{5/2} - 4^2P_{1/2}$:	1 825,121 ± 0,085	"
$4^2F_{7/2} - 4^2P_{1/2}$:	2 053,636 ± 0,085	"

si l'on ne tient pas compte de la structure hyperfine. Nous la calculerons numériquement dans le chapitre suivant.

D'autre part, les valeurs calculées des durées de vie sont [29] (en nanosecondes) :

3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f
158,4	5,273	15,47	226,6	12,36	36,16	72,56

-=-=-=-=-=-

C H A P I T R E II

CALCUL DU DIAGRAMME ZEEMAN

Pour interpréter nos résultats, il nous sera nécessaire de connaître l'action d'un champ magnétique statique $\vec{H}$ sur l'atome d'hydrogène et cela, dans le cas où l'énergie Zeeman est comparable ou supérieure aux différentes énergies calculées dans le chapitre précédent.

Nous avons calculé à 10^{-5} près le diagramme Zeeman de l'ensemble des niveaux n = 3 et n = 4 en nous inspirant des calculs effectués sur l'ensemble n = 2 à 10^{-6} près par BRODSKY et PARSONS ([34]).

Nous avons alors diagonalisé numériquement le hamiltonien total dans la représentation des états $|((\ell,s)j,I)f,m_f>$, pour des valeurs particulières du champ magnétique afin de déterminer à une précision supérieure à 10^{-4}, les champs des anticroisements observables.

Puis nous avons évalué les pentes des niveaux et les fonctions d'onde effectives au voisinage de ces champs ainsi calculés.

A - PRINCIPE DU CALCUL

1) Le hamiltonien de BREIT en présence de $\vec{H}$.

Nous avons vu, dans le chapitre précédent, que le hamiltonien de l'atome d'hydrogène, en l'absence de champ extérieur, peut se décomposer en trois parties :

$$\mathcal{H}(0) = \mathcal{H} + \mathcal{H}_B + \mathcal{H}_{f..R.}$$

où $\mathcal{H}$ décrit dans le formalisme de Dirac le système de l'électron et du

proton en interaction coulombienne. Si ce terme était seul, l'atome aurait des niveaux d'énergie donnés par l'expression (I-9) où la masse m serait remplacée par la masse réduite.

$\mathcal{H}_B$ est le terme d'interaction de BREIT ; il décrit la structure hyperfine et enfin $\mathcal{H}_{CR}$ correspond aux corrections radiatives.

Considérons maintenant l'action d'un champ magnétique statique $\vec{H}$; il affecte différemment les trois termes du hamiltonien.

On sait que, là où figurait l'impulsion $\vec{p}$ dans le hamiltonien de l'atome sans champ magnétique, on doit faire figurer $\vec{p} - e\vec{A}$ où $\vec{A}$ est le potentiel-vecteur. Comme, dans ce cas, le champ magnétique est uniforme :

$$\vec{A}_e = -\frac{1}{2}\ \vec{r}_e \wedge \vec{H}$$

et de même pour $\quad \vec{A}_N = -\frac{1}{2}\ \vec{r}_N \wedge \vec{H}$

$\mathcal{H}_0$ devient alors :

$$\mathcal{H}_0(H) = \mathcal{H}_0(0) - |e|\ (\vec{\alpha}_e.\vec{A}_e - \vec{\alpha}_N.\vec{A}_N)$$

Le terme de BREIT est insensible à l'effet du champ magnétique à la précision exigée.

Les processus d'émission et d'absorption de photons, responsables de $\mathcal{H}_{CR}$ entraînent une valeur anormale pour le moment magnétique de l'électron. D'autre part, le proton possède également un moment anormal dû, aux interactions fortes. Le hamiltonien total de l'atome, en présence d'un champ magnétique $\vec{H}$, peut s'écrire :

$$\mathcal{H}(H) = \mathcal{H}(0) - \frac{|e|}{2}\ (\vec{\alpha}_e \wedge \vec{r}_e - \vec{\alpha}_N \wedge \vec{r}_N)\ .\ \vec{H}$$

$$+ (g_s - 2)\ \frac{|e|}{2m}\ \vec{S}.\vec{H} - (g_N - 2)\ \frac{|e|}{2M}\ \vec{I}.\vec{H}$$

où g_s et g_N sont respectivement les facteurs de Landé de spin de l'électron et du proton ([35]) :

$$g_s \simeq 2(1,0011596384 \pm 0,0000000033)$$

$$g_N \simeq 2(2,79271 \pm 0,00003)$$

2) Calcul du hamiltonien total dans la représentation des $|((\ell,s)j,I)f,m_f>$

Nous avons vu précédemment (ch. I), qu'à la précision demandée (10^{-5} près), le spectre de $\mathcal{H}(0)$ peut être décrit par un hamiltonien dont les vecteurs propres peuvent s'écrire dans la base des vecteurs $|((\ell,s)\ j\ ,\ I\ )f\ m_f>$

Nous rappelons que dans cette base, la matrice de $\mathcal{H}_B$ s'écrit :

$$<|\mathcal{H}_B|> = \frac{e}{2mc}\frac{e}{2Mc} g_N \cdot \frac{1}{n^3 a_0^3} \left\{ \frac{2}{j(j+1)(\ell+1/2)} \vec{<I.J>} + \frac{1-\delta_{jj'}}{\ell(\ell+1)(\ell+1/2)} \vec{<I.L>} \right\}$$

$$= \frac{3}{16} E_F \left\{ \frac{1}{j(j+1)(\ell+1/2)} \vec{<I.J>} + \frac{1-\delta_{jj'}}{\ell(\ell+1)(\ell+1/2)} \vec{<I.L>} \right\}$$

où E_F est le déplacement du niveau S.

BRODSKY et PARSONS ([34]) ont montré que le hamiltonien Zeeman, c'est-à-dire $\mathcal{H}_{mag} = \mathcal{H}(H) - \mathcal{H}(0)$, s'écrit dans cette base, l'axe de quantification étant fixé par $\vec{H}$

$$<|\mathcal{H}_{mag}|> = (g_s S_z + (1 - \frac{m}{M}) L_z - g_N \cdot \frac{m}{M} I_z) \mu_0 H + O(e^2 A^2/m)$$

si l'on néglige les corrections relativistes (de Margenau) en $\alpha^2/n^2 (\simeq 10^{-5}$ pour $n=3)$. ([79]). Il reste alors l'effet de recul du noyau (2ème terme) et les corrections aux moments magnétiques de spin de l'électron et du proton (1er et 3ème terme).

D'autre part l'effet Zeeman quadratique peut être négligé pour les valeurs de H considérées. Il introduit des différences d'énergies, entre les sous-niveaux de même n, inférieures à 10^{-3} MHz.

En résumé, on aura à calculer seulement les éléments de matrice de $\vec{I}.\vec{J}$, $\vec{I}.\vec{L}$, S_z, L_z et I_z.
Il est immédiat d'évaluer $\vec{I}.\vec{J}$. On trouve sans difficulté :

$$< |\vec{I}.\vec{J}| >= \frac{f(f+1) - j(j+1) - I(I+1)}{2} \delta_{f,f'} \delta_{j,j'} \delta_{\ell,\ell'} \delta_{m_f,m'_f}$$

Le calcul de L_z s'effectue à l'aide de : $L_z = F_z - I_z - S_z$ avec $< |F_z| > = \delta_{ff'} \delta_{jj'} \delta_{\ell\ell'} \delta_{m_f m'_f} m_f$. Il ne reste plus à évaluer que I_z, S_z et $\vec{I}.\vec{L}$; à cet effet, on applique le théorème de Wigner-Eckart et on obtient (36) :

$$< ((\ell',s')j',I)f' \; m'_f | I_z | ((\ell,s)j,I)f \; m_f > = (-1)^{f'+f-I-j-m_f} \times$$

$$\times \quad \delta_{\ell\ell'} \; \delta_{jj'} \; \delta_{ss'} \quad \times \quad \sqrt{(2f'+1)(2f+1)(2I+1)(I+1)I} \quad \times$$

$$\times \quad \begin{pmatrix} f' & f & 1 \\ -m'_f & m_f & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} f' & f & 1 \\ I & I & j \end{Bmatrix}$$

$$< ((\ell',s')j',I)f' \; m'_f | S_z | ((\ell,s)j,I)f \; m_f > = (-1)^{\ell+2j'-m_f+s+I-1} \times$$

$$\times \quad \delta_{ss'} \; \delta_{\ell\ell'} \quad \sqrt{(2j+1)(2f'+1)(2f+1)(2j'+1)(2s+1)(s+1)s} \quad \times$$

$$\times \quad \begin{pmatrix} f' & f & 1 \\ -m'_f & m_f & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} f' & f & 1 \\ j & j' & I \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} 1/2 & j' & \ell \\ j & 1/2 & 1 \end{Bmatrix}$$

et enfin

$$\langle ((\ell',s')j',I)f'\ m_f' \left| \vec{I}.\vec{L} \right| ((\ell,s)j,I)f\ m_f \rangle = (-1)^{2j+\ell+f+I+3/2}$$

$$\delta_{ff'}\ \delta_{m_f m_f'}\ \delta_{\ell\ell'}\ \delta_{ss'}\ \sqrt{(2j+1)(2j'+1)(2I+1)(I+1)I(2\ell+1)(\ell+1)\ell}$$

$$\begin{Bmatrix} f & I & j' \\ 1 & j & I \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \ell & j' & 1/2 \\ j & \ell & 1 \end{Bmatrix}$$

Nous retrouvons sur ces équations que s, ℓ , I , m_f sont de bons nombres quantiques alors que j et f ne le sont pas toujours. La matrice du hamiltonien total est donc réductible en sous-matrices correspondant, pour un ℓ donné, aux différents sous-niveaux de même m_f.

B - LES VALEURS NUMERIQUES DES MATRICES REPRESENTANT LE HAMILTONIEN TOTAL

La notation que nous avons adoptée est celle de BRODSKY et PARSONS ([34]) car elle est d'écriture plus rapide :

$$(F_z\ ,\ S_z\ ,\ I_z) = \mu_0\ H\ (F_z(1 - \frac{m}{M}) + S_z(1 + 2a + \frac{m}{M}) - I_z(1 - \frac{m}{M} + 5{,}58\ \frac{m}{M}))$$

où $a \simeq 1{,}16.10^{-3}$ est la correction au facteur de Landé $g_s = 2$ qui conduit au moment anormal de l'électron.

Nous noterons $\mathcal{H}_{\ell,m_f}$ les sous.matrices correspondantes (voir tableau I). Les sous-matrices $\mathcal{H}_{3,m_f}$, n'étant pas utiles dans cette étude, sont omises.

L'énergie d'un sous-niveau pour un champ magnétique donné est donc obtenue par diagonalisation de telles matrices.

Le diagramme représentant ces sous-niveaux en fonction du champ magnétique est reproduit en Fig. I ; la structure hyperfine a été négligée sur le dessin.

NIVEAU S

$m_f = \pm 1$ $\quad \mathcal{H}_{0,\pm 1} =$

$f=1 \quad \left(E(^2S_{1/2}) + \frac{E_F}{4} \pm (1 \, , \, \frac{1}{2} \, , \, \frac{1}{2}) \right)$

$m_f = 0$ $\quad \mathcal{H}_{0,0} =$

f	1	0
1	$E(^2S_{1/2}) + \frac{E_F}{4} + (0 \, , \, 0 \, , \, 0)$	$(0 \, , \, \frac{1}{2} \, , \, -\frac{1}{2})$
0	$(0 \, , \, \frac{1}{2} \, , \, -\frac{1}{2})$	$E(^2S_{1/2}) - \frac{3E_F}{4} + (0 \, , \, 0 \, , \, 0)$

NIVEAU P

$m_f = \pm 2$ $\quad \mathcal{H}_{1,\pm 2} =$

$f=2 \quad \left(E(^2P_{3/2}) + \frac{E_F}{20} \pm (2, \frac{1}{2} \, , \, \frac{1}{2}) \right)$

$m_f = \pm 1$ $\quad \mathcal{H}_{1,\pm 1} =$

j,f	3/2,2	3/2,2	1/2,1
3/2,2	$E(^2P_{3/2}) + \frac{E_F}{20} \pm (1, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$	$(0, \frac{1}{4\sqrt{3}}, \frac{-\sqrt{3}}{4})$	$(0, \frac{-1}{\sqrt{6}}, 0)$
3/2,1	$(0, \frac{1}{4\sqrt{3}}, \frac{-\sqrt{3}}{4})$	$E(^2P_{3/2}) - \frac{E_F}{12} \pm (1, \frac{5}{12}, \frac{-1}{4})$	$\frac{-E_F}{24\sqrt{2}} \pm (0, \frac{\sqrt{2}}{6}, 0)$
1/2,1	$(0, \frac{-1}{\sqrt{6}}, 0)$	$\frac{-E_F}{24\sqrt{2}} \pm (0, \frac{\sqrt{2}}{6}, 0)$	$E(^2P_{1/2}) + \frac{E_F}{12} \pm (1, \frac{-1}{6}, \frac{1}{2})$

$m_f = 0$ $\quad \mathcal{H}_{1,0} =$

j,f	3/2,2	3/2,1	1/2,1	1/2,0
3/2,2	$E(^2P_{3/2}) + \frac{E_F}{20} + (0,0,0)$	$(0, \frac{1}{6}, \frac{-1}{2})$	$(0, \frac{-\sqrt{2}}{3}, 0)$	$(0,0,0)$
3/2,1	$(0, \frac{1}{6}, \frac{-1}{2})$	$E(^2P_{3/2}) - \frac{E_F}{12} + (0,0,0)$	$\frac{-E_F}{24\sqrt{2}} + (0,0,0)$	$(0, \frac{-\sqrt{2}}{3}, 0)$
1/2,1	$(0, \frac{-\sqrt{2}}{3}, 0)$	$-\frac{E_F}{24\sqrt{2}} + (0,0,0)$	$E(^2P_{1/2}) - \frac{E_F}{12} + (0,0,0)$	$(0, \frac{-1}{6}, \frac{-1}{2})$
1/2,0	$(0,0,0)$	$(0, \frac{-\sqrt{2}}{3}, 0)$	$(0, \frac{-1}{6}, \frac{-1}{2})$	$E(^2P_{1/2}) - \frac{E_F}{4} + (0,0,0)$

TABLEAU I - Matrices $\mathcal{H}_{f,m_f}$

NIVEAU D :

$m_f = \pm 3$ $\quad \mathcal{H}_{2,\pm 3} =$

f=3 $\quad \left(E(^2D_{5/2}) + \frac{3E_F}{140} \pm (3, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \right)$

$m_f = \pm 2$ $\quad \mathcal{H}_{2,\pm 2} =$

J,f	$^5/_2,3$	$^5/_2,2$	$^3/_2,2$
$\frac{5}{2},3$	$E(^2D_{5/2}) + \frac{3E_F}{140} \pm (2,\frac{1}{3},\frac{1}{3})$	$(0,\frac{1}{6\sqrt{5}},\frac{-\sqrt{5}}{6})$	$(0,-\sqrt{\frac{2}{15}},0)$
$\frac{5}{2},2$	$(0,\frac{1}{6\sqrt{5}},\frac{-\sqrt{5}}{6})$	$E(^2D_{5/2}) - \frac{3E_F}{100} \pm (2,\frac{7}{15},\frac{-1}{3})$	$-\frac{E_F}{200}\sqrt{\frac{3}{2}} \pm (0,\frac{\sqrt{2}}{5\sqrt{3}},0)$
$\frac{3}{2},2$	$(0,\sqrt{\frac{2}{15}},0)$	$-\frac{E_F}{200}\sqrt{\frac{3}{2}} \pm (0,\frac{1}{5}\sqrt{\frac{2}{3}},0)$	$E(^2D_{3/2}) + \frac{3E_F}{100} \pm (2,\frac{-3}{10},\frac{1}{2})$

$m_f = \pm 1$ $\quad \mathcal{H}_{2,\pm 1} =$

J,f	$^5/_2,3$	$^5/_2,2$	$^3/_2,2$	$^3/_2,1$
$\frac{5}{2},3$	$E(^2D_{5/2}) + \frac{3E_F}{140} \pm (1,\frac{1}{6},\frac{1}{6})$	$(0,\frac{\sqrt{2}}{15},\frac{-\sqrt{2}}{3})$	$(0,\frac{-4}{5\sqrt{3}},0)$	$(0,0,0)$
$\frac{5}{2},2$	$(0,\frac{\sqrt{2}}{15},\frac{-\sqrt{2}}{3})$	$E(^2D_{5/2}) - \frac{3E_F}{100} \pm (1,\frac{7}{30},\frac{-1}{6})$	$-\frac{E_F}{200}\sqrt{\frac{3}{2}} \pm (0,\frac{1}{5\sqrt{6}},0)$	$(0,\frac{-3}{5\sqrt{2}},0)$
$\frac{3}{2},2$	$(0,\frac{-4}{5\sqrt{3}},0)$	$-\frac{E_F}{200}\sqrt{\frac{3}{2}} \pm (0,\frac{-1}{5\sqrt{6}},0)$	$E(^2D_{3/2}) + \frac{3E_F}{100} \pm (1,\frac{-3}{20},\frac{1}{4})$	$(0,\frac{-\sqrt{3}}{20},\frac{-\sqrt{3}}{4})$
$\frac{3}{2},1$	$(0,0,0)$	$(0,\frac{-3}{5\sqrt{2}},0)$	$(0,\frac{-\sqrt{3}}{20},\frac{-\sqrt{3}}{4})$	$E(^2D_{3/2}) - \frac{E_F}{20} \pm (1,\frac{-1}{4},\frac{-1}{4})$

$m_f = 0$ $\quad \mathcal{H}_{2,0} =$

J,f	$^5/_2,3$	$^5/_2,2$	$^3/_2,2$	$^3/_2,1$
$\frac{5}{2},3$	$E(^2D_{5/2}) + \frac{3E_F}{140} + (0,0,0)$	$(0,\frac{1}{10},\frac{-1}{2})$	$(0,\frac{-\sqrt{6}}{5},0)$	$(0,0,0)$
$\frac{5}{2},2$	$(0,\frac{1}{10},\frac{-1}{2})$	$E(^2D_{5/2}) - \frac{3E_F}{100} + (0,0,0)$	$-\frac{E_F}{200}\sqrt{\frac{3}{2}} + (0,0,0)$	$(0,\frac{-\sqrt{6}}{5},0)$
$\frac{3}{2},2$	$(0,\frac{-\sqrt{6}}{5},0)$	$-\frac{E_F}{200}\sqrt{\frac{3}{2}} + (0,0,0)$	$E(^2D_{3/2}) + \frac{3E_F}{100} + (0,0,0)$	$(0,\frac{-1}{10},\frac{-1}{2})$
$\frac{3}{2},1$	$(0,0,0)$	$(0,\frac{-\sqrt{6}}{5},0)$	$(0,\frac{-1}{10},\frac{-1}{2})$	$E(^2D_{3/2}) - \frac{E_F}{20} + (0,0,0)$

TABLEAU I - (suite)

Nous voyons apparaître très nettement sur ce diagramme des croisements entre sous-niveaux correspondant à des valeurs de ℓ différentes. Nous verrons plus loin qu'il est possible de détecter ceux de ces croisements qui répondent aux règles de sélection suivantes :

$$\Delta\ell = \pm 1 \quad , \Delta m_f = \pm 1,0$$

$$\Delta\ell = \pm 2 \quad , \Delta m_f = \pm 2,0$$

en les transformant en anticroisements par une perturbation convenable.

Nous avons donc besoin de connaître avec précision leurs positions en champ magnétique.

C - CALCUL DES POSITIONS DES CROISEMENTS

Nous caractériserons un croisement donné par les sous-niveaux qui se croisent $^2L(m_f)$ et $^2L'(m'_f)$ car seuls ℓ et m_f restent de bons nombres quantiques. Les vecteurs propres correspondants $\varphi(^2L(m_f))$ et $\varphi(^2L'(m'_f))$ sont fonctions propres des matrices $\mathcal{H}_{\ell,m_f}$ et $\mathcal{H}_{\ell',m'_f}$ avec la même valeur propre E_0 pour la même valeur H_0 du champ magnétique. E_0 et H_0 sont donc les racines communes aux équations :

$$\text{dét}\,(\mathcal{H}_{\ell,m_f}(H) - E\,I) = 0$$

$$\text{dét}\,(\mathcal{H}_{\ell',m'_f}(H) - E\,I) = 0$$

où I est la matrice unité.

Nous sommes donc ramenés à résoudre un système de deux équations algébriques à deux inconnues. La seule difficulté réside dans la valeur élevée du degré de ces équations (souvent du quatrième). Sauf dans les cas très particuliers des croisements $^2S(-1)$ $^2P(-2)$, $^2P(-2)$ $^2D(-3)$ et $^2S(-1)$ $^2D(-3)$ où la résolution est triviale (équation du 1er degré),

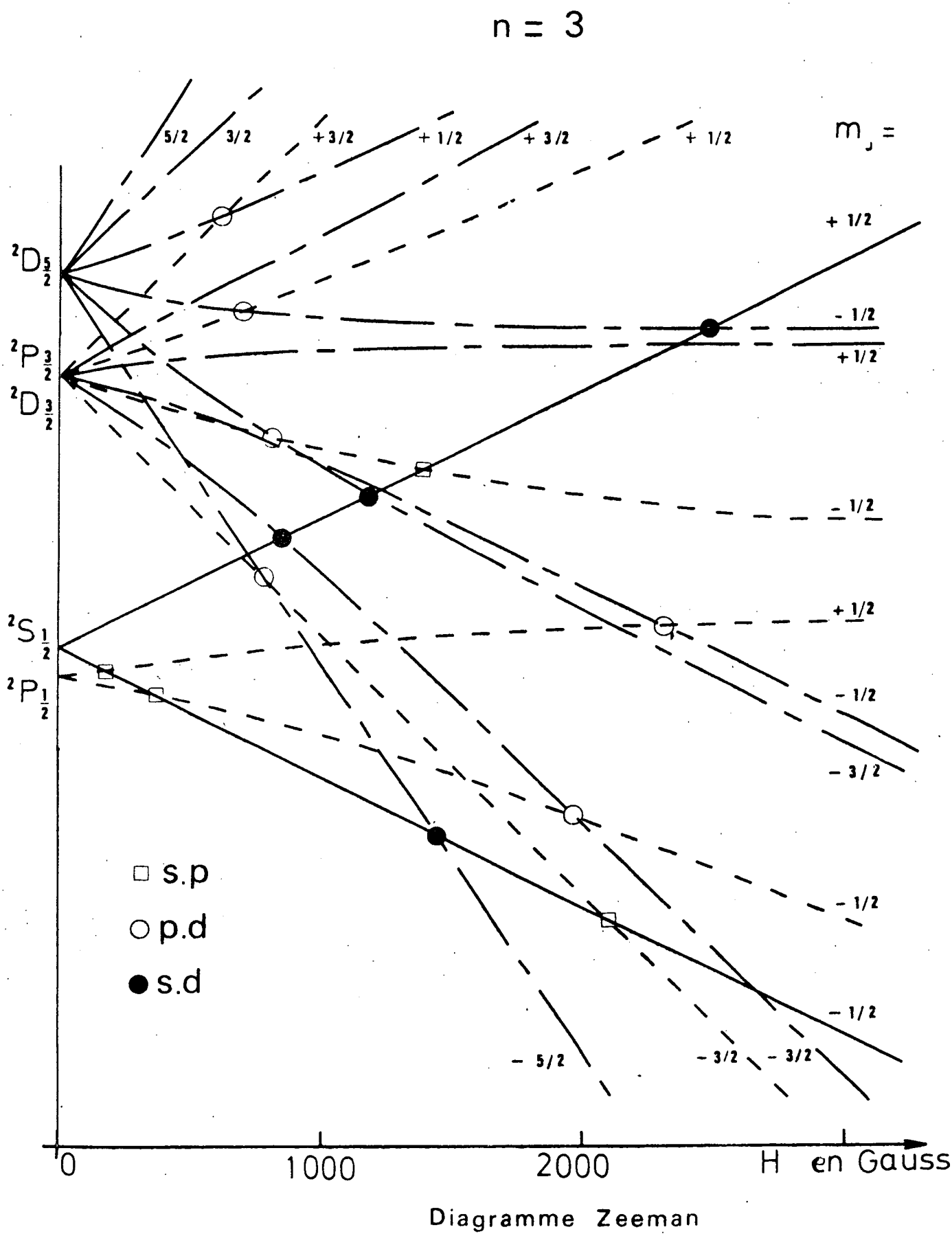


Diagramme Zeeman

Fig. I

nous avons cherché à résoudre numériquement ces équations.

Considérons le cas d'un croisement où intervient un niveau S. L'équation caractéristique est du 1er ou du 2ème degré, il est facile de la mettre sous la forme

$$E_0 = f(H_0)$$

car l'on sait, par le diagramme de la figure I, quelle racine choisir. On substitue alors dans l'autre équation caractéristique et l'on résout numériquement par ordinateur.

Dans les autres cas, il nous a paru plus simple de calculer numériquement quelques points de chaque sous-niveau près du point de croisement et d'interpoler géométriquement. Par approximations successives on détermine la position du croisement à la précision souhaitée (10^{-4}) (voir l'appendice A).

Nous avons calculé ainsi les positions de :

- 8 croisements hyperfins entre sous niveaux S et P sur n=3
- 12 croisements hyperfins entre sous-niveaux P et D sur n=3
- 8 croisements hyperfins entre sous-niveaux S et D sur n=3
- 4 croisements hyperfins entre sous-niveaux S et D sur n=4

Nous voyons sur ces résultats que ces croisements sont presque confondus deux à deux, c'est-à-dire que la structure hyperfine est faible devant les autres energies ; le moment magnétique nucléaire est totalement découplé des autres. Nous sommes dans les conditions de l'effet BACK-GOUDSMIT ([37]).

Ce résultat apparaît de manière encore plus nette si l'on calcule les fonctions d'onde.

D - CALCUL DES FONCTIONS D'ONDE AUX POINTS DE CROISEMENT

Les fonctions d'onde effectives aux points de croisement ne correspondent pas à des états $|((\ell,s)j,I)f\ m_f>$ purs, mais on peut très facilement les obtenir exprimées dans cette base. Ce sont les vecteurs propres des matrices $\mathcal{H}_{\ell,m_f}(H_0)$ avec la valeur propre E_0. Elles sont déterminées ainsi à un facteur multiplicatif près dont le module est obtenu par la condition de normalisation et le signe par la limite en champ nul.

Nous avons ainsi déterminé les fonctions d'onde effectives des croisements $^2S(-1)$ $^2D(-3)$ et $^2S(0)$ $^2D(-2)$ situés vers 1430 gauss. Pour le premier, le résultat est trivial :

$$\begin{cases} \varphi(^2S(-1)) = |((0,{}^1/_2)^1/_2,{}^1/_2)1,-1> \\ \varphi(^2D(-3)) = |((2,{}^1/_2)^5/_2,{}^1/_2)3,-3> \end{cases}$$

Pour le second, on trouve :

$$\begin{cases} \varphi(^2S(0)) = 0,70289\ |((0,{}^1/_2)^1/_2,{}^1/_2)1,0> - 0,71130\ |((0,{}^1/_2)^1/_2,{}^1/_2)0,0> \\ \varphi(^2D(-2)) = 0,40777\ |((2,{}^1/_2)^5/_2,{}^1/_2)3,-2> - 0,91308\ |((2,{}^1/_2)^5/_2,{}^1/_2)2,-2> \\ \qquad\qquad - 0,000279\ |((2,{}^1/_2)^3/_2,{}^1/_2)2,-2> \end{cases}$$

mais si l'on change de base, si on les exprime dans la base des $|(\ell,s)j,I,m_j,m_i>$, on voit alors que :

$$\begin{aligned} \varphi(^2S(-1)) &= |(0,{}^1/_2)^1/_2,{}^1/_2,-{}^1/_2,-{}^1/_2> \\ \varphi(^2D(-3)) &= |(2,{}^1/_2)^5/_2,{}^1/_2,-{}^5/_2,-{}^1/_2> \\ \varphi(^2S(0)) &= 0,99998\ |(0,{}^1/_2)^1/_2,{}^1/_2,-{}^1/_2,+{}^1/_2> \\ &\quad - 0,00595\ |(0,{}^1/_2)^1/_2,{}^1/_2,+{}^1/_2,-{}^1/_2> \\ \varphi(^2D(-2)) &= 0,99999\ |(2,{}^1/_2)^5/_2,{}^1/_2,-{}^5/_2,+{}^1/_2> \\ &\quad - 0,00052\ |(2,{}^1/_2)^5/_2,{}^1/_2,-{}^3/_2,-{}^1/_2> \\ &\quad - 0,00028\ |(2,{}^1/_2)^3/_2,{}^1/_2,-{}^3/_2,-{}^1/_2> \end{aligned}$$

Les spins nucléaires sont presque totalement découplés même pour le niveau S qui est particulièrement sensible à la structure hyperfine.

Ces fonctions d'onde effectives interviennent dans le calcul de la perturbation électrique au point de croisement ainsi que pour les probabilités de transition. Nous verrons que l'expérience n'est pas sensible à des variations de 10^{-3} sur les fonctions d'onde.

Nous utiliserons donc dorénavant la base $|(s,\ell)j,m_f>$ dans les calculs.

Les valeurs numériques des fonctions d'onde effectives pour chaque croisement sont reportées en appendice (Appendice B).

E - CALCUL DES PENTES

Il est bien naturel de penser que l'effet attendu lors d'un anti-croisement va dépendre de la variation en fonction du champ magnétique de la différence d'énergie entre les niveaux.

En première approximation :

$$E(^2L(m_f)) - E(^2L'(m'_f)) = p(H - H_0)$$

En écrivant cette égalité, on confond les courbes des sous-niveaux avec leur tangente au point de croisement. Les valeurs des pentes p sont déduites des calculs numériques des sous-niveaux faits pour chercher la position du croisement.

Cette approximation, de sous-niveau rectiligne, est suffisante, même pour les anticroisements très larges ([38]).

Les valeurs numériques sont reportées en appendice B.

C H A P I T R E III

LA MATRICE DIPOLAIRE ELECTRIQUE

Certains croisements peuvent être détectés s'ils sont transformés en anticroisements par une perturbation convenable. On utilise pour cela un champ électrique faible. Nous nous attacherons tout d'abord à calculer numériquement les effets qui en résultent.

Ces anticroisements seront détectés optiquement; il nous faut donc connaître le diagramme de rayonnement du système atomique. Nous évaluerons donc les différentes probabilités d'émission spontanée ; nous verrons que les calculs nécessaires pour cela se déduisent très simplement des précédents.

A - LE HAMILTONIEN DE PERTURBATION LIE A UN CHAMP ELECTRIQUE $\vec{E}$

1) Le hamiltonien atomique en présence d'un champ électrique.

Le hamiltonien qui décrit l'interaction de l'atome avec le champ électrique statique $\vec{E}$ est ([39]) :

$$\mathcal{H}_E = e\,\Phi$$

où Φ est le potentiel lié au champ $\vec{E}$ par

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\,\Phi$$

Si le champ $\vec{E}$ est uniforme, le potentiel est

$$\Phi = -\vec{E}.\vec{r}$$

$$\mathcal{H}_E = - e \vec{E}.\vec{r} = |e| \vec{E}.\vec{r}$$

Il s'agit donc de représenter ce hamiltonien sur la base des fonctions propres de $\mathcal{H}(H)$. Nous avons vu (chap. II,D) que celles-ci s'expriment plus simplement dans la base des états $|(s\ell)\ j\ m_j>$ que dans la base précédemment utilisée : $|((\ell s)j,I)f\ m_f>$. Nous utiliserons donc systématiquement la représentation $|(s\ell)j\ m_j>$ dans les calculs qui suivent.

2) Calcul de $\mathcal{H}_E$ dans la base des $|(s\ell)j\ m_j>$.

Nous nous proposons de rappeler ici la décomposition de l'opérateur $\mathcal{H}_E$ en une partie radiale et une partie angulaire.
Tout d'abord la fonction d'onde complète $|n(s\ell)j\ m_j>$ peut s'écrire :

$$|n(s\ell)j\ m_j> = R_{n,\ell}(r)\ |(s\ell)j\ m_j>$$

où la fonction $R_{n,\ell}(r)$ est donnée par l'expression habituelle ([29]). On a

$$<n(s\ell)j\ m_j|\ \mathcal{H}_E|n'(s'\ell')j'\ m'_j> = |e\vec{E}|\mathcal{R}_{n\ell}^{n'\ell'}\mathcal{A}_{s\ell jm_j}^{s'\ell'j'm'_j}$$

où la partie radiale $\mathcal{R}$ vaut

$$\mathcal{R}_{n\ell}^{n'\ell'} = \int_0^\infty R_{n\ell}\ R_{n'\ell'}\ r^3\ dr$$

Le champ électrique considéré est faible, il ne crée qu'une perturbation vis à vis de la structure fine et de l'effet Zeeman, il est donc amplement justifié de se limiter aux interactions qu'il provoque à l'intérieur de l'ensemble des états de même nombre n et de négliger l'interaction due aux niveaux de n différents.

D'autre part il est bien connu - nous le retrouverons tout à l'heure - que seuls des niveaux tels que $|\ell-\ell'| = 1$ peuvent être couplés par la perturbation électrostatique ; il suffit donc de calculer les parties

radiales telles que n = n' et ℓ' = ℓ±1. Dans ce cas on a :

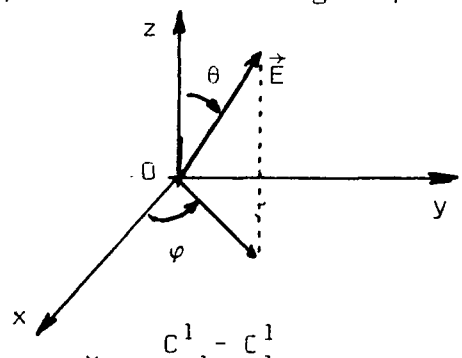
$$\mathcal{R}_{n\ell}^{n\ell-1} = \mathcal{R}_{n\ell-1}^{n\ell} = a_0 \frac{3n}{2} \sqrt{n^2-\ell^2}$$

où a_0 est le rayon de la 1ère orbite de Bohr ([29]).

La partie angulaire, quant à elle, s'écrit :

$$\mathcal{A}_{s\ jm_j}^{s'\ell'j'm'_j} = \langle (s\ell)j\ m_j \mid \frac{1}{|\vec{E}|} \frac{\vec{E}.\vec{r}}{r} \mid (s'\ell')j'\ m'_j \rangle$$

On évalue le produit scalaire en coordonnées sphériques. Si l'on appelle θ et φ les angles polaires de $\vec{E}$, on trouve :



$$\vec{E}.\vec{r} = |E|\{z \cos\theta + \sin\theta\ (x\cos\varphi + y \sin\varphi)\}$$

Les opérateurs x, y et z se décomposent en opérateurs tensoriels irréductibles ([36]) :

$$\frac{x}{r} = \frac{C_{-1}^1 - C_1^1}{\sqrt{2}} \qquad \frac{y}{r} = i\frac{C_{-1}^1 + C_1^1}{\sqrt{2}} \qquad \text{et} \qquad \frac{z}{r} = C_0^1$$

de sorte que la partie angulaire $\frac{1}{E}\frac{\vec{E}.\vec{r}}{r}$ s'écrit :

$$\frac{1}{E}\frac{\vec{E}.\vec{r}}{r} = \{ C_0^1 \cos\theta - \frac{C_1^1}{\sqrt{2}} \sin\theta\ e^{-i\varphi} + \frac{C_{-1}^1}{\sqrt{2}} \sin\theta\ e^{i\varphi} \}$$

$$= \sum_q \alpha_q C_q^{(1)}$$

Les $C_q^{(1)}$ sont proportionnels aux harmoniques sphériques

$$C_q^{(1)} = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}\ Y_{1\,q}$$

Ils n'agissent que sur les variables orbitales angulaires ; le théorème de Wigner-Eckart permet d'écrire ([36]) :

$$\langle (s\ell)j\ m_j \Big| \sum_q \alpha_q\ C^1_q \Big| (s'\ell')j'\ m'_j \rangle = \sum_q \alpha_q\ (-1)^{s+\ell'+m_j-1}\ \delta_{ss'}\ \sqrt{(2j+1)(2j'+1)}$$

III.1
$$\times \begin{Bmatrix} j & k & j' \\ \ell' & s & \ell \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} j & 1 & j' \\ -m_j & q & m'_j \end{pmatrix} \langle \ell \| C^{(1)} \| \ell' \rangle$$

où l'élément de matrice réduit vaut :

$$\langle \ell \| C^{(1)} \| \ell' \rangle = (-1)^{\ell} \sqrt{(2\ell+1)(2\ell'+1)} \begin{pmatrix} \ell & 1 & \ell' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

ainsi :

$$\mathcal{A}^{s'\ell'j'm'_j}_{s\ell jm_j} = \sum_q \alpha_q\ (-1)^{s+m_j}\ \delta_{ss'}\ \sqrt{(2j+1)(2j'+1)(2\ell+1)(2\ell'+1)}$$

III.2
$$\times \begin{Bmatrix} j & 1 & j' \\ \ell' & s & \ell \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} j & 1 & j' \\ -m_j & q & m'_j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell & 1 & \ell' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

3) Les résultats numériques

Nous avons porté sur le tableau II les valeurs numériques des matrices C^1_0 , $-C^1_1/\sqrt{2}$ et $C^1_{-1}/\sqrt{2}$, dans la base $|(s\ell)j\ m_j\rangle$.

Le premier coefficient (3j) est non nul seulement si

$$-m_j + q + m'_j = 0$$

Donc, à un couple donné m_j et m'_j, il correspond une seule valeur de q ; on obtient l'expression de $\mathcal{A}$ en multipliant chaque nombre qui figure dans le tableau II par le coefficient $\alpha'_q = \alpha'_{m_j - m'_j}$ soit $\alpha \pm 1 = \sin\theta\ e^{\pm i\varphi}$ et $\alpha_0 = \cos\theta$.

		$^2F_{1/2}$		$^2P_3$	
		1/2	-1/2	3/2	1/2
$^2S_{1/2}$	$+\frac{1}{3}$	1/3	1/3	$-\frac{1}{\sqrt{6}}$	$+\frac{\sqrt{2}}{3}$
	$-\frac{1}{2}$	1/3	- 1/3		$-\frac{1}{3\sqrt{2}}$
$^2D_{3/2}$	$\frac{3}{2}$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}$		$\frac{1}{5}$	$\frac{1}{5\sqrt{3}}$
	$\frac{1}{2}$	$\frac{\sqrt{2}}{3}$	$-\frac{1}{3\sqrt{2}}$	$\frac{1}{5\sqrt{3}}$	$\frac{1}{15}$
	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{3\sqrt{2}}$	$\frac{\sqrt{2}}{3}$		$\frac{2}{15}$
	$-\frac{3}{2}$		$\frac{1}{\sqrt{6}}$		
$^2D_{5/2}$	$\frac{5}{2}$			$-\frac{1}{\sqrt{5}}$	
	$\frac{3}{2}$			$\frac{2}{5}$	$-\frac{\sqrt{3}}{5}$
	$\frac{1}{2}$			$\frac{1}{5\sqrt{2}}$	$\frac{\sqrt{6}}{5}$
	$-\frac{1}{2}$				$\frac{\sqrt{3}}{5\sqrt{2}}$
	$-\frac{3}{2}$				
	$-\frac{5}{2}$				

	$^2F_{5/2}$							$^2F_{7/2}$							
	- 3/2	5/2	3/2	1/2	- 1/2	- 3/2	- 5/2	7/2	5/2	3/2	1/2	- 1/2	- 3/2	-5/2	-7/2
	$\frac{1}{\sqrt{6}}$														
		$-\frac{1}{\sqrt{5}}$	$-\frac{2}{5}$	$\frac{1}{5\sqrt{2}}$											
			$-\frac{\sqrt{3}}{5}$	$\frac{\sqrt{6}}{5}$	$\frac{\sqrt{3}}{5\sqrt{2}}$										
	$\frac{1}{5\sqrt{3}}$			$-\frac{\sqrt{3}}{5\sqrt{2}}$	$\frac{\sqrt{6}}{5}$	$\frac{\sqrt{3}}{5}$									
	$-\frac{1}{5}$				$-\frac{1}{5\sqrt{2}}$	$-\frac{2}{5}$	$\frac{1}{\sqrt{5}}$								
		$\frac{1}{7}$	$\frac{1}{7\sqrt{5}}$					$-\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{14}}$	$\frac{\sqrt{6}}{7}$	$\frac{1}{7\sqrt{2}}$					
		$\frac{1}{7\sqrt{5}}$	$\frac{3}{35}$	$\frac{2\sqrt{2}}{35}$					$-\frac{\sqrt{15}}{7\sqrt{2}}$	$\frac{\sqrt{10}}{7}$	$\frac{\sqrt{3}}{7\sqrt{2}}$				
			$\frac{2\sqrt{2}}{35}$	$\frac{1}{35}$	$\frac{3}{35}$					$-\frac{\sqrt{5}}{7}$	$\frac{2\sqrt{3}}{7}$	$\frac{\sqrt{3}}{7}$			
	$-\frac{1}{5\sqrt{2}}$			$\frac{3}{35}$	$-\frac{1}{35}$	$\frac{2\sqrt{2}}{35}$					$-\frac{\sqrt{5}}{7}$	$\frac{2\sqrt{3}}{7}$	$\frac{\sqrt{5}}{7}$		
	$\frac{2}{5}$				$\frac{2\sqrt{2}}{35}$	$-\frac{3}{35}$	$\frac{1}{7\sqrt{5}}$					$-\frac{\sqrt{3}}{7\sqrt{2}}$	$\frac{\sqrt{10}}{7}$	$\frac{\sqrt{15}}{7\sqrt{2}}$	
	$\frac{1}{\sqrt{5}}$					$\frac{1}{7\sqrt{5}}$	$-\frac{1}{7}$						$-\frac{1}{7\sqrt{2}}$	$\frac{\sqrt{6}}{7}$	$\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{14}}$

TABLEAU II - Partie angulaire des éléments de $\mathcal{H}_E$ -

Pour la partie radiale : $\mathcal{R}_{n\ell}^{n'\ell'}/a_0 = \frac{3n}{2}\sqrt{n^2-\ell^2}$ (voir ci-dessous Tableau III).

$\mathcal{R}_{n\ell}^{n'\ell'}/a_0$	3S	3D	4S	4D
3P	$9\sqrt{2}$	$\frac{9\sqrt{5}}{2}$		
4P			$6\sqrt{15}$	$12\sqrt{3}$
4F				$6\sqrt{7}$

Tableau III

La perturbation électrique s'écrit donc numériquement :

$$H_{p.E} = |e|.E\ a_0\ (\mathcal{R}/a_0)\ \mathcal{A}(\theta,\varphi)$$

$$(H_{p.E.})_{MHz} = 1{,}279\ \ (\mathcal{R}/a_0)\ \mathcal{A}(\theta,\varphi)\ .\ E_{V/cm}$$

dans la base des $|j\ m_j>$.

En fait, les termes de perturbation qui interviendront dans la suite devront être calculés dans la base propre de $\mathcal{H}(H)$:

$$|\varphi> = \alpha|(s\ell)j_1\ m_j> + \beta|(s\ell)j_2\ m_j>$$

Les valeurs numériques ont été calculées pour chaque anticroisement pour un champ électrique transversal de 1 V/cm ($\theta = \frac{\pi}{2}$, $\varphi = 0$) elles sont reportées en appendice B.

B - CALCUL DES PROBABILITES D'EMISSION SPONTANEE

Il est bien connu que l'émission spontanée est principalement un effet dipolaire électrique et que les probabilités d'émission sont proportionnelles au carré des éléments de matrice de $e\,\vec{\varepsilon}_\lambda \cdot \vec{r}$ où $\vec{\varepsilon}_\lambda$ est le vecteur polarisation. Il est donc naturel d'utiliser les mêmes calculs pour traiter la perturbation électrique et l'émission spontanée.

Dans la plupart des travaux effectués auparavant en spectroscopie hertzienne, on ne s'intéressait qu'à des groupes de sous-niveaux Zeeman appartenant à un même terme spectral $n^{2S+1}L$. Lorsqu'une méthode de détection optique est utilisée, ce sont des transitions entre sous-niveaux de la même paire de termes spectraux qui entrent en jeu. On comprend que, dans les publications habituelles de spectroscopie hertzienne, on se contente d'évaluer les facteurs $|< |\vec{\varepsilon}_\lambda \cdot \vec{r}| >|^2$ qui donnent les signaux cherchés à une constante multiplicative près, la même pour toutes les transitions.

Dans la situation présente, nous avons au contraire à étudier des mélanges de sous-niveaux Zeeman provenant de termes spectraux différents. La détection optique du phénomène met en jeu des transitions entre sous-niveaux appartenant à différentes paires de termes spectraux. Il est bien clair que dans ces conditions, les constantes multiplicatives, qui dépendent cette fois des transitions envisagées, doivent être calculées.

C'est pour cela que nous allons rappeler l'origine théorique des probabilités d'émission spontanée pour un atome de Schrodinger. Nous calculerons ensuite, numériquement ces probabilités d'émission.

1) Equation de Heisenberg relative à l'émission spontanée

Il s'agit de calculer la probabilité de transition de l'état (A, 0 photon) vers l'état (I, 1 photon défini par $\vec{k}$, $\vec{\varepsilon}_\lambda$). C'est le même problème que dans le premier chapitre (§ C). Il est bien connu [27] que la probabilité d'émettre un photon de polarisation $\vec{\varepsilon}_\lambda$, dans un angle solide $d\Omega$, est :

$$w_{\lambda, d\Omega} = d\Omega \int \frac{e^2}{m^2} \frac{\omega}{2\pi\hbar c^3} \left| \langle I | \vec{p}.\vec{\varepsilon}_\lambda | A \rangle \right|^2 \delta(E_i - E_a + \hbar\omega)\, d\hbar\omega$$

$$= \left(\frac{e}{m}\right)^2 \frac{\omega}{2\pi\hbar c^3} \left| \langle I | \vec{p}.\vec{\varepsilon}_\lambda | A \rangle \right|^2 d\Omega$$

où ω a la définition : $\omega = (E_i - E_a)/\hbar$

Il nous faut donc calculer l'élément de matrice de l'opérateur $\vec{p}$ or l'on sait que ([39]) :

$$[\vec{p}^2, \vec{r}] = -2i\hbar\,\vec{p}$$

donc
$$\vec{p} = i\frac{m}{\hbar}[H_0, \vec{r}]$$

où H_0 est le hamiltonien de Schrodinger.(On néglige donc la structure fine et l'effet Zeeman devant l'énergie de Rydberg).

Ainsi en tenant compte de l'égalité précédente on a :

$$\langle I | \vec{p}.\vec{\varepsilon}_\lambda | A \rangle = i\frac{m}{\hbar}(E_i - E_a) \langle I | \vec{r}.\vec{\varepsilon}_\lambda | A \rangle$$

Un atome excité d'énergie E_a a une probabilité d'émettre un photon d'énergie $\hbar\omega = E_a - E_i$, dans un angle solide $d\Omega$, avec la polarisation $\vec{\varepsilon}_\lambda$, qui vaut :

$$w_{\lambda, d\Omega} = \frac{e^2}{\hbar c} \frac{(E_a - E_i)^3}{\hbar^3 c^2} \left| \langle I | \vec{r}.\vec{\varepsilon}_\lambda | A \rangle \right|^2 \frac{d\Omega}{2\pi}$$

La probabilité d'émission d'un tel photon dans tout l'espace avec toutes les polarisations possibles est :

$$w = \sum_\lambda \frac{4}{3} \frac{e^2}{\hbar c} \frac{(E_a - E_i)^3}{\hbar^3 c^2} \left| \langle I | \vec{r}.\vec{\varepsilon}_\lambda | A \rangle \right|^2$$

C'est l'expression donnée par Heisenberg ([27]).

2) Calcul de w dans la base des $|(s\ell)j\ m_j>$

Les éléments de matrice $<I|\vec{r}.\vec{\varepsilon}_\lambda|A>$ ont déjà été calculés dans la base des $|n\ (s\ell)j\ m_j>$, dans le paragraphe précédent. Ici encore nous nous intéressons seulement aux transitions optiques. Le niveau I a donc 1 ou 2 pour valeur du nombre quantique principal n. Les parties angulaires de ces éléments de matrice ont été déjà calculées et figurent dans le tableau III. Au contraire, les parties radiales qui sont relatives à des paires de niveaux de n différents doivent être recalculées. Elles figurent dans le tableau IV ([29]) :

$\mathcal{R}/a_0$	3S	3P	3D	4S	4P	4D
1S		0,51669			0,30458	
2S		3,0648			1,2823	
2P	0,9384		4,7480	0,38230		1,7097
3S					5,4693	
3P				2,4435		7,5654
3D					1,3294	

Tableau IV

La probabilité totale exprimée dans cette base s'écrit :

$$w = \frac{4}{3}\ \frac{e^2}{\hbar c^3}\ \sum_{n',\ell'}\left\{\frac{(E_n - E_{n'})^3}{\hbar^3}\ \left|\mathcal{R}_{n\ell}^{n'\ell'}\right|^2 \sum_{j',\lambda} \left|< (s\ell)j\ m_j|\frac{\vec{r}}{r}.\vec{\varepsilon}_\lambda|(s\ell')j'\ m_j'>\right|^2\right\}$$

Pour les transitions optiques, à la précision du calcul, l'énergie de Rydberg est une approximation suffisante ; pour les transitions non optiques (telles que n = n'), les probabilités d'émission sont négligeables (10^{15} fois plus faibles environ).

Par ailleurs, les éléments de matrice de $\frac{\vec{r}}{r}.\vec{\varepsilon}_\lambda$ ont été calculés dans le paragraphe précédent (éq. III.1). On montre aisément que [36] :

III.3 $$\sum_{j'\lambda} |< (s\ell)j\ m_j|\frac{\vec{r}}{r}.\vec{\varepsilon}_\lambda|(s\ell')j'\ m'_j >|^2 = (2\ell'+1)\begin{pmatrix} \ell & \ell' & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 = \frac{\sup(\ell,\ell')}{2\ell+1}$$

La probabilité w devient alors :

$$w = \frac{4}{3}\ \frac{e^2}{\hbar c^3}\ \sum_{n'\ell'}\ \frac{(E_n - E_{n'})^3}{3}\ \left|\mathcal{R}_{n\ell}^{n'\ell'}\right|^2 \frac{\sup(\ell,\ell')}{2\ell+1}$$

Cette probabilité est, bien sûr, égale à l'inverse de la durée de vie du niveau ; elle a été maintes fois calculée [29]. Les déterminations expérimentales de ces durées de vie [40] sont en parfait accord avec les valeurs théoriques.

Il est commode alors d'exprimer la probabilité $w_{\lambda,d\Omega}$ en fonction de la largeur naturelle $\Gamma_{n,\ell}$:

III.4 $$w_{\lambda,d\Omega} = \frac{3d\Omega}{8\pi}\ \Gamma_{n\ell}\ \frac{(E_n-E_{n''})^3\ |\mathcal{R}_{n\ell}^{n''\ell''}|^2}{\sum_{n'\ell'}\{(E_n-E_{n'})^3\ |\mathcal{R}_{n\ell}^{n'\ell'}|^2\ \frac{\sup(\ell,\ell')}{2\ell+1}\}} \times |< (s\ell)j\ m_j|\frac{\vec{r}}{r}.\vec{\varepsilon}_\lambda|s\ell'')j''\ m''_j >|^2$$

Les coefficients $\mathcal{P}_{n\ell}^{n''\ell''}$ tels que

$$\mathcal{P}_{n\ell}^{n''\ell''} = \frac{(E_n-E_{n''})^3\ |\mathcal{R}_{n\ell}^{n''\ell''}|^2}{\sum_{n'\ell'}\{(E_n-E_{n'})^3\ |\mathcal{R}_{n\ell}^{n'\ell'}|^2\ \frac{\sup(\ell,\ell')}{2\ell+1}\}}$$

sont regroupés dans le tableau V, où l'on voit que pour n et ℓ donnés et n"=2, ℓ" est déterminé ; les coefficients $\mathcal{P}_{n\ell}^{2\ell''}$ seront désormais notés $\mathcal{P}_{n\ell}$.

$\mathcal{N}_{n'\ell'}$	3^2S	3^2P	3^2D	4^2S	4^2P	4^2D
2^2S	–	0,3551	–	–	0,3369	–
2^2P	1	–	2,5	1,752	–	1,864

Tableau V

On remarque que les valeurs de $\mathcal{N}$ sont plus faibles pour les niveaux ^2P que pour les autres, car ils se désexcitent plutôt sur le niveau 1^2S par les raies de Lyman (88 % quand on somme sur les polarisations). Nous verrons que cette propriété est importante pour l'observation de certains anticroisements.

Avant d'expliciter la partie angulaire de l'expression III.4 nous devons remarquer que la raie optique observée est une des raies de Balmer H_α ($n = 3 \rightarrow 2$) ou H_β ($n = 4 \rightarrow 2$) et que les transitions vers les niveaux $2^2P_{1/2}$ et $2^2P_{3/2}$ ne sont pas séparées. Dans les calculs d'intensités, il est nécessaire de faire intervenir la somme des probabilités des deux transitions. Si l'on appelle $\mathcal{D}^{\lambda}_{\ell,j,m_j}$ cette partie angulaire, elle vaut alors :

$$\mathcal{D}^{\lambda}_{\ell,j,m_j} = \sum_{j''} \left| < (s\ell)j\ m_j \left| \frac{\vec{r}}{r}.\vec{\varepsilon}_\lambda \right| (s\ell'')j''\ m''_j > \right|^2$$

Elle dépend de la direction d'observation : nous observons la lumière émise suivant un pinceau de direction Oy, d'angle solide $d\Omega$ petit, avec une polarisation $\vec{\varepsilon}_\pi \parallel Oz$ ou $\vec{\varepsilon}_\sigma \parallel Ox$.

3) Application à l'observation transversale

Les éléments de matrice sont calculés dans chaque cas en faisant $\theta = 0$ (polarisation π) ou $\theta = \pi/2$, $\varphi = 0$ (polarisation σ).

On remarque par ailleurs que les états propres des niveaux émetteurs (chapitre II, § D) ne sont pas des états $|(s\ell)j\ m_j >$ mais

qu'ils sont de la forme :

$$|\varphi> = \alpha\ |(s\ell)j_1\ m_j> + \beta\ |(s\ell)j_2\ m_j>$$

En effet le découplage de $\vec{L}$ et de $\vec{S}$, pour les champs magnétiques que nous avons utilisés, est important pour les niveaux ^2D principalement ; il est à peine sensible sur les niveaux 3^2P, dont la structure fine est trois fois plus petite ($\frac{27}{8}$) que celle des niveaux 2^2P. L'effet de découplage sur ces derniers est négligeable.

Dans ces conditions, la partie angulaire $\mathcal{D}^{\lambda}_{\ell,j,m_j}$ se met sous la forme :

$$\mathcal{D}^{\lambda}_{\varphi} = \sum_{j''m''_j} \Big| \alpha < (s\ell'')j''\ m''_j|\frac{\vec{r}}{r}.\vec{\varepsilon}_\lambda|(s\ell)j_1\ m_j> + \beta < (s\ell'')j''\ m''_j|\frac{\vec{r}}{r}.\vec{\varepsilon}_\lambda|(s\ell)j_2\ m_j> \Big|^2 \qquad \text{III.5}$$

Nous voyons qu'il intervient une somme de termes carrés et de termes croisés, ces derniers sont du type :

$$\sum_{j''m''_j} < (s\ell'')j''\ m''_j|\frac{\vec{r}}{r}.\vec{\varepsilon}_\lambda|(s\ell)j_1\ m_j>< (s\ell)j_2\ m_j|\frac{\vec{r}}{r}.\vec{\varepsilon}_\lambda|(s\ell'')j''\ m''_j>$$

Les valeurs de tous ces termes sont reportées dans le tableau VI ; les termes carrés y sont distingués par les 4 nombres $s, \ell, j_1 = j_2, j$; chaque terme croisé est obtenu par une seule paire j_1 , j_2 sans ambiguïté. On retrouve le résultat bien connu de l'équation III.3 en remarquant que :

$\mathcal{D}^{\pi}_{\ell,j,m_j} + 2\,\mathcal{D}^{\sigma}_{\ell,j,m_j} = \frac{\sup(\ell,\ell')}{2\ell+1}$; cette somme est indépendante de j et de m_j.

Par commodité, on note $f^{\lambda}_{n,\ell,j,m_j}$ le produit :

$$f^{\lambda}_{n,\ell,j,m_j} = \mathcal{D}^{\lambda}_{\ell,j,m_j} \times \mathcal{N}_{n\ell}$$

		POL. π	POL. σ
S → P	1/2, 0, 1/2, ± 1/2	1/3	1/3
P → S	1/2, 1, 3/2, ± 3/2	0	1/6
	1/2, 1, 3/2, ± 1/2	2/9	1/18
	1/2, 1, 1/2, ± 1/2	1/9	1/9
	1/2, 1, (3/2,1/2), ± 1/2	$\pm \sqrt{2}/9$	$\mp 1/9\sqrt{2}$
D → P	1/2, 2, 5/2, ± 5/2	0	1/5
	1/2, 2, 5/2, ± 3/2	4/25	3/25
	1/2, 2, 3/2, ± 3/2	1/25	9/50
	1/2, 2, (5/2,3/2) ± 3/2	± 2/25	$\mp$ 1/25
	1/2, 2, 5/2, ± 1/2	6/25	2/25
	1/2, 2, 3/2, ± 1/2	17/75	13/150
	1/2, 2, (5/2,3/2) ± 1/2	$\pm 2/25\sqrt{6}$	$1/25\sqrt{6}$

TABLEAU VI - Eléments carrés et croisés de $\mathcal{D}^{\lambda}_{\varphi}$ -

La probabilité d'émission de photons, dans la direction d'observation, avec la polarisation λ, à la longueur d'onde considérée s'écrit :

$$w_{d\Omega,\lambda} = \frac{3\ d\Omega}{8\pi}\ \Gamma_{n\ell} \cdot f_{\varphi}^{\lambda}$$

Tous les éléments ont été maintenant tabulés. Les coefficients f_{φ}^{λ} sont des rapports de branchement. Il ne peut y avoir de confusion avec les forces d'oscillateur notées parfois par la même lettre.

4) Influence de la perturbation par le champ électrique

Nous avons vu que le champ électrique est susceptible de coupler des niveaux de parités différentes. Sous l'effet d'un champ électrique, l'état propre d'un niveau émetteur n'est plus un état propre de $\vec{L}$; au premier ordre, c'est :

$$|\psi> = A\ |(s\ell_1)j_1\ m_1> + B\ |(s\ell_2)j_2\ m_2>$$

où $\quad |\ell_1 - \ell_2| = 1$

(On négligera dans l'exposition de cet effet le découplage magnétique, pour simplifier l'écriture).

Dans ce cas l'équation III.4 doit être remplacée par :

$$w_{\lambda,d\Omega} = \frac{3\ d\Omega}{8\pi}\ \frac{(E_n - E_{n''})^3}{\sum_{n'\ell'} \{(E_n - E_{n'})^3 |\mathcal{R}_{n\ell}^{n'\ell'}|^2\ \frac{\sup(\ell\ell')}{2\ell+1}\}}\ \sum_{\ell''j''} |<\psi|\vec{r}.\vec{\varepsilon}_{\lambda}|(s\ell'')j''\ m_j''>|^2$$

car on ne peut, sur la transition optique, séparer l'état 2^2S des états 2^2P. L'opérateur $\vec{r}.\vec{\varepsilon}_{\lambda}$ ayant une parité déterminée, la somme des éléments de matrice vaut :

$$\sum_{\ell''j''} |<\psi|\vec{r}.\vec{\varepsilon}_{\lambda}|(s\ell'')j''\ m_j''>|^2 = |A|^2 . |\mathcal{R}_{n\ell_1}^{n''\ell_1''}|^2 . \mathcal{D}_{\ell_1 j_1 m_1}^{\lambda} + |B|^2 . |\mathcal{R}_{n\ell_2}^{n''\ell_2''}|^2 . \mathcal{D}_{\ell_2 j_2 m_2}^{\lambda}$$

On note l'absence de termes croisés dans cette expression ($\ell''_1=\ell_1\pm1$; $\ell''_2=\ell_2\pm1$).

On retrouve donc que la probabilité d'émission est alors dans ce cas :

$$w_{\lambda,d\Omega} = \frac{3\ d\Omega}{8\pi}\left(\Gamma_{n\ell_1}\ f^{\lambda}_{\ell_1,j_1,m_1}\ |A|^2 + \Gamma_{n\ell_2}\ f^{\lambda}_{\ell_2,j_2,m_2}\ |B|^2\right)$$

Là encore tous les éléments sont tabulés. En sommant sur tous les atomes, on obtient l'expression bien connue de l'intensité émise ([41]) où $\Sigma|A|^2$ et $\Sigma|B|^2$ sont respectivement les populations des niveaux 1 et 2.

Mais le champ électrique peut coupler, au deuxième ordre de perturbation des niveaux tels que $|\ell_1 - \ell_2| = 2$ et l'opérateur $|\vec{r}.\vec{\varepsilon}_\lambda|$ les relie alors à un même niveau ℓ''. La somme des éléments de matrice vaut dans ce cas :

$$\sum_{j''m''} |<\psi|\vec{r}.\vec{\varepsilon}_\lambda|(s\ell'')j''\ m''_j>|^2 = |A|^2.|\mathcal{R}^{n''\ell''}_{n\ell_1}|^2\ \mathcal{D}^{\lambda}_{\ell_1 j_1 m_1} + |B|^2.|\mathcal{R}^{n''\ell''}_{n\ell_2}|^2\ \mathcal{D}^{\lambda}_{\ell_2 j_2 m_2}$$

$$+ AB^{\star}\ \mathcal{R}^{n''\ell''}_{n\ell_1}\ \mathcal{R}^{n''\ell''}_{n\ell_2} \sum_{j''m''} \{ <(s\ell_2)j_2\ m_2|\frac{\vec{r}}{r}.\vec{\varepsilon}_\lambda|(s\ell'')j''\ m''> <(s\ell'')j''\ m''|\frac{\vec{r}}{r}.\vec{\varepsilon}_\lambda|(s\ell_1)j_1\ m_1>$$

$$+ C.C.$$

Les deux premiers termes sont liés aux populations des niveaux 1 et 2, les deux suivants à la cohérence entre ces niveaux. On voit la différence avec le cas précédemment considéré; la probabilité d'émission peut être exprimée par la somme de deux termes :

$$w_{\lambda,d\Omega} = w_{pop.} + w_{coh.}$$

avec

$$w_{pop.} = |A|^2\ \Gamma_{n\ell_1}\ f^{\lambda}_{\ell_1 j_1 m_1} + |B|^2\ \Gamma_{n\ell_2}\ f^{\lambda}_{\ell_2 j_2 m_2}$$

et

$$w_{coh.} = \frac{d\Omega}{2\pi}\frac{e^2}{\hbar c^3}\ \frac{(E_n - E_{n''})^3}{\hbar^3}\left\{AB^{\star}\ \mathcal{R}^{n''\ell''}_{n\ell_1}\ \mathcal{R}^{n''\ell''}_{n\ell_2} \sum_{j''m''} \mathcal{A}^{\ell''j''m''}_{\ell_2 j_2 m_2}\left(\mathcal{A}^{\ell''j''m''}_{\ell_1 j_1 m_1}\right)^{\star} + c.c\right\}$$

Les intégrales radiales sont réelles et positives (tableau VI).

W_{coh} peut se mettre sous la forme :

$$W_{coh} = \frac{3\,d\Omega}{8\pi} \sqrt{\frac{\Gamma_{n\ell_1}(E_n - E_{n'})^3 \,|\mathcal{R}^{n''\ell''}_{n\ell_1}|}{\sum_{n'} (E_n - E_{n'})^3 \,|\mathcal{R}^{n'\ell'}_{n\ell_1}| \,\frac{\sup(\ell_1,\ell')}{2\ell_1+1}}} \times$$

$$\times \frac{(E_n - E_n)^3 \,|\mathcal{R}^{n''\ell''}_{n\ell_2}| \,.\Gamma_{n\ell_2}}{\sum_{n'} (E_n - E_{n'})^3 \,|\mathcal{R}^{n'\ell'}_{n\ell_2}| \,\frac{\sup(\ell',\ell_2)}{2\ell_2+1}} \sum_{j''m''} AB^{\star} \mathcal{A}^{\ell''j''m''}_{\ell_2 j_2 m_2} \left[\mathcal{A}^{\ell''j''m''}_{\ell_1 j_1 m_1}\right]^{\star} + c.c$$

soit

$$W_{coh} = \frac{3\,d\Omega}{8\pi} \sqrt{\Gamma_{n\ell_1}\,\Gamma_{n\ell_2}} \sqrt{\mathcal{N}_{n\ell_1}\,\mathcal{N}_{n\ell_2}} \sum_{j''m''} \mathcal{A}^{\ell''j''m''}_{\ell_2 j_2 m_2} \left[\mathcal{A}^{\ell''j''m''}_{\ell_1 j_1 m_1}\right]^{\star} \times AB^{\star} + c.c$$

Les coefficients $\mathcal{A}$ sont calculés à partir de l'équation III-2 du paragraphe A. L'observation, dans nos conditions expérimentales, est transversale, suivant Oy les coefficients $\mathcal{A}$ sont réels, ils sont tabulés dans le tableau II.

L'intensité lumineuse émise, dans ces conditions, est :

$$I \propto \sum_{\text{atomes}} W_{pop} + \sum_{\text{atomes}} W_{coh}$$

soit

$$I \propto \frac{3\,d\Omega}{8\pi} \Gamma_{n\ell_1} f^{\lambda}_{\ell_1 j_1} . \sigma_{11} + \Gamma_{n\ell_2} f^{\lambda}_{\ell_2 j_2} . \sigma_{22} +$$

$$(\sigma_{12} + \sigma^{\star}_{12}) \sqrt{\Gamma_{n\ell_1}\,\Gamma_{n\ell_2}} \sqrt{\mathcal{N}_{n\ell_1}\mathcal{N}_{n\ell_2}} \sum_{j''m''} \mathcal{A}^{\ell''j''m''}_{\ell_1 j_1 m_1} \mathcal{A}^{\ell''j''m''}_{\ell_2 j_2 m_2}$$

où σ_{11}, σ_{22} sont les populations des niveaux 1 et 2, σ_{12} et $\sigma^{\star}_{12}$ la cohérence entre eux ; (ce sont les éléments non diagonaux de la matrice densité [11]).

L'opérateur dipolaire électrique ne couplant que des niveaux tels que $\Delta\ell = 1$, l'émission spontanée n'est sensible qu'à la cohérence induite entre des niveaux tels que $\Delta\ell = 0$ ou $\Delta\ell = 2$, c'est ce que nous avons retrouvé par les équations III.5 et III.6.

Nous avons donc calculé tous les cas possibles.

C H A P I T R E IV

LA FORMATION DES ATOMES EXCITES

Les atomes d'hydrogène excités, que nous étudions, sont formés à la suite de chocs électroniques sur de l'hydrogène moléculaire contenu dans une enceinte.

Nous allons, dans ce chapitre, chercher le processus responsable de la formation de ces atomes. Nous décrirons alors l'état du système atomique après excitation. Nous utiliserons, pour cela, le formalisme de la matrice densité.

Nous étudierons, enfin, la répartition de vitesses des atomes après la dissociation.

A - PREUVES EXPERIMENTALES DU PROCESSUS A UNE COLLISION

Nous allons montrer comment le processus de formation d'atomes excités qui se produit avec la plus grande probabilité fait intervenir un niveau moléculaire très excité, conduisant alors à deux atomes, l'un dans l'état excité n = 3 (ou 4), l'autre vraisemblablement dans l'état fondamental $1\ ^2S$.

1) Les différents processus possibles.

Dans une enceinte, sous faible pression d'hydrogène, les collisions des molécules avec des électrons lents peuvent conduire à des atomes excités par trois voies possibles :

a) une voie indirecte ou à deux collisions

Un premier choc inélastique produit une excitation dissociative de la molécule d'hydrogène.

$$H_2 + e \rightarrow H_2^{\star} + e \rightarrow H(1^2S) + H(1^2S) + e$$

Un second choc électronique est alors nécessaire, avant la recombinaison avec un autre atome, pour exciter les atomes ainsi formés :

$$H(1^2S) + e \rightarrow H^{\star}(n^2L) + e$$

Les énergies minimum nécessaires, pour ces excitations, sont respectivement 4,6 eV (énergie de dissociation de H_2), et 12,1 eV (énergie de H (n=3)). Le seuil en énergie de ce processus indirect est donc 12,1 eV.

D'autre part, lorsqu'on étudie le spectre d'émission de la molécule H_2, dans le visible, on constate que les "raies ultimes" ne peuvent apparaître que pour des énergies électroniques supérieures à 13,8 eV [42], (donc à peine supérieures à l'énergie d'ionisation de l'atome).

Dans ce cas, les raies atomiques apparaissent pour des énergies un peu plus faibles que les raies moléculaires.

b) Une voie directe ou à une collision

L'atome ne passe pas par un état intermédiaire 1^2S, la dissociation de $H_2^{\star}$ conduit à un atome excité et un atome dans l'état fondamental

$$H_2 + e \rightarrow H_2^{\star} + e$$

$$H_2^{\star} \rightarrow H(n^2L) + H(1^2S) + \Delta E$$

L'énergie minimum nécessaire à ce processus direct est alors

$$\Delta E \geq 4,6 + 12,1 = 16,7 \text{ eV}$$

Elle est nettement supérieure à l'énergie nécessaire à l'émission, dans le visible, de la molécule excitée. Dans ce cas, l'émission des raies atomiques se produit pour des énergies électroniques plus élevées que l'émission des raies moléculaires.

c) Il existe un troisième processus possible, dans le canon à électrons. Il s'agit de la dissociation de molécules H_2 en présence d'un fil chaud (le filament de chauffage indirect est à 2 000 °K) sans collision électronique:

$$H_2 \rightarrow H(1^2S) + H(1^2S)$$

Des atomes ainsi formés pourraient alors être excités, comme dans le processus décrit en a).

L'énergie minimum de l'électron incident reste égale à 12,1 eV, comme en a).

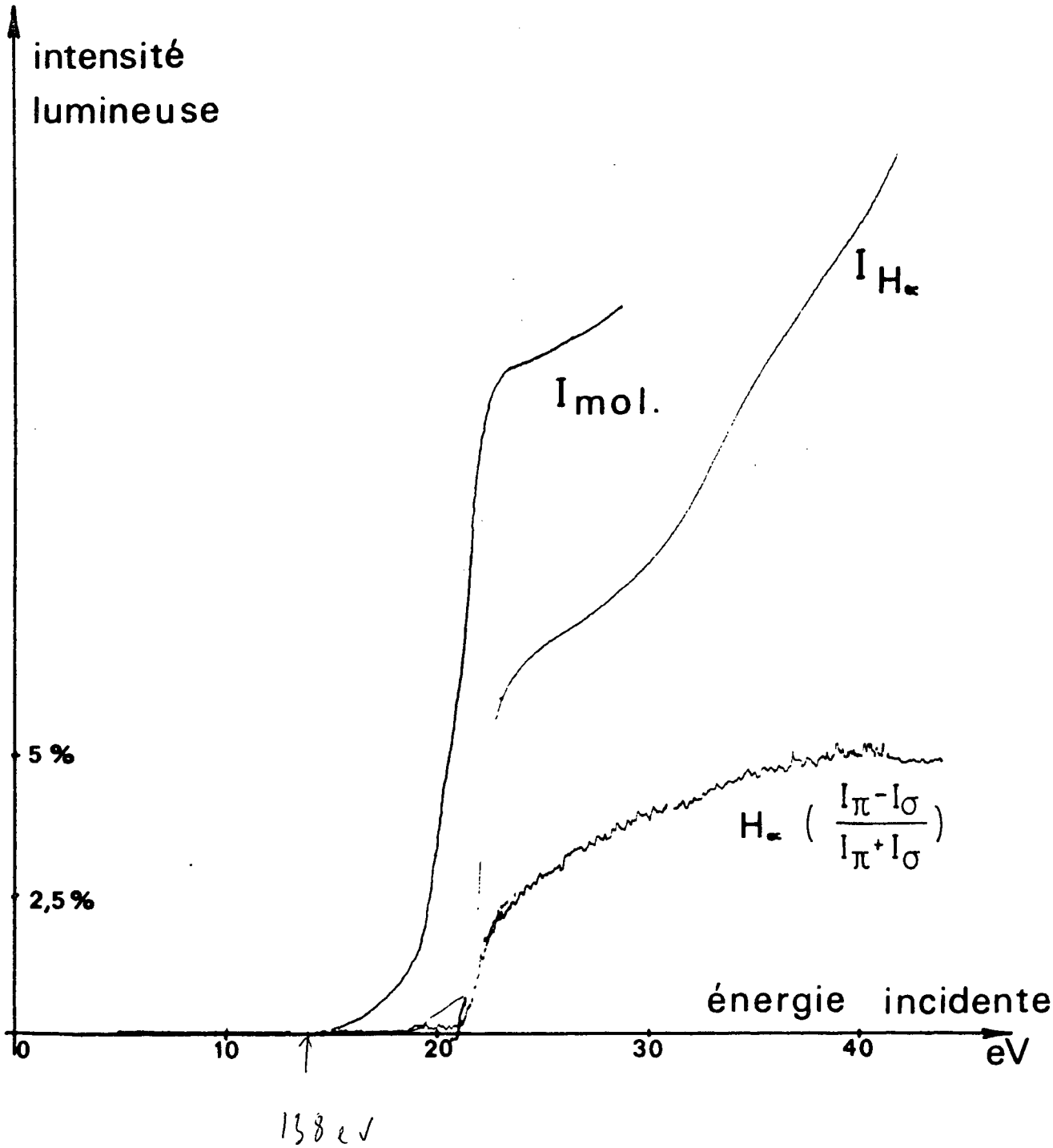
On voit donc que, en comparant les seuils de l'émission atomique et celui de l'émission moléculaire dans le visible, on obtient des renseignements précieux sur le processus de formation des atomes excités.

2) Les observations expérimentales

La Fig. II montre comment varie l'intensité lumineuse, en fonction de l'énergie des électrons incidents, pour une raie atomique et pour l'ensemble des raies moléculaires.

La différence des énergies des deux seuils est de l'ordre de 4 eV, autrement dit, l'émission des raies atomiques n'apparaît qu'à partir d'une énergie électronique incidente, pour laquelle l'émission moléculaire est déjà importante.

Fig. II


intensité
lumineuse
I_{H_α}
$I_{mol.}$
5 %
2,5 %
$H_\alpha \left(\frac{I_\pi - I_\sigma}{I_\pi + I_\sigma} \right)$
énergie incidente
0
10
20
30
40
eV

13,8 eV

Nous voyons donc clairement que, dans les conditions expérimentales où nous opérons (celles-ci seront précisées dans le chapitre suivant), le processus décrit en b) est largement prépondérant.

Les atomes excités sont donc des fragments de dissociation, produits lors d'un processus à une collision. La formation d'atomes d'hydrogène, excités dans les niveaux n = 3 ou 4, par ce même processus, a été déjà observée par VROOM et DE HEER ([43]) en 1969, sur un jet moléculaire, et en 1970, dans une enceinte, par WEAVER et HUGHES ([44])

Par ailleurs, la formation d'atomes dans l'état 2^2S par dissociation, a été plus étudiée ([45,46,47,48]). Les travaux sont en général récents et concernent la répartition des vitesses des fragments. Les atomes dans l'état 2^2S sont métastables et peuvent être étudiés par une technique de temps de vol ; d'autre part, cette étude a permis d'évaluer le champ électrique motionnel subi par les atomes dans un champ magnétique, susceptible d'introduire des erreurs systématiques dans les mesures du Lamb shift $2^2S_{1/2} - 2^2P_{1/2}$. Nous aurons à plusieurs reprises l'occasion de comparer ces résultats aux nôtres.

B - CALCUL DE L'ETAT ATOMIQUE APRES LE PROCESSUS DE DISSOCIATION

L'excitation électronique des atomes, à partir de leur état fondamental, a été étudiée en détail ([49,50]), et comparée à l'excitation optique.

Dans le présent travail, les atomes sont formés à partir d'un niveau prédissociatif ou d'un niveau dissociatif de la molécule excitée par choc électronique. La principale différence, qui intervienne ici, entre ces deux types de niveaux, est l'ordre de grandeur de leurs durées de vie : 10^{-10} s à 10^{-12} s pour un niveau prédissociatif, 10^{-13} à 10^{-14} s pour un niveau dissociatif.

Nous reviendrons sur l'aspect moléculaire du problème dans le chapitre VIII.

Pour décrire l'évolution des atomes ainsi excités, nous avons utilisé, comme dans les travaux ([49,50]), le formalisme de la matrice densité. Nous devons pour cela, préciser un certain nombre de points.

1) Les hypothèses

Pour utiliser l'équation pilote, d'évolution de la matrice densité, il nous faut comparer les durées des différents processus : excitation de la molécule, évolution de la molécule, dissociation, évolution propre de l'atome, désexcitation de l'atome.

La largeur du paquet d'ondes excitateur est liée à la définition en énergie des électrons incidents : elle est de 0,1 eV environ. Il lui correspond un temps d'interaction de l'ordre de quelques 10^{-16} s.

Ce temps est très bref devant la durée de vie du niveau moléculaire qui est $\geq 10^{-13}$ seconde que ce niveausoit prédissociatif ou dissociatif. La dissociation intervient pendant un laps de temps qui est de l'ordre de 10^{-14} s.

La durée de vie de l'atome excité est au plus $2,2.10^{-7}$ s (niveau 4^2S) et au moins 5.10^{-9} s (niveau 3^2P). La désexcitation de l'atome se fait par émission spontanée sur une transition optique, donc en un temps extrêmement bref devant la durée de vie des niveaux excités.

Ainsi, l'évolution dans l'état atomique excité (n = 3 ou 4) dure un temps qui est long devant le temps de désexcitation et surtout devant la durée complète de l'excitation (excitation de la molécule, évolution de celle-ci, dissociation) ; il est donc légitime d'utiliser l'équation pilote d'évolution de la matrice densité de l'état atomique excité ([41]) :

$$\frac{d\sigma}{dt} = \left(\frac{d\sigma}{dt}\right)_1 + \left(\frac{d\sigma}{dt}\right)_2 + \left(\frac{d\sigma}{dt}\right)_3$$

La vitesse d'évolution de la matrice σ est la somme des vitesses d'évolution lors des trois étapes successives :

- formation des atomes dans l'état excité n = 3 ou 4
- évolution propre dans cet état
- désexcitation par émission spontanée.

2) Evolution de la matrice densité lors du processus d'"excitation"

La vitesse d'évolution de σ, lors du processus de formation des atomes, s'écrit :

$$\left(\frac{d\sigma}{dt}\right)_1 = \rho$$

où ρ est la matrice d'excitation.

Ces éléments sont proportionnels au nombre d'électrons par unité de volume, au nombre de molécules dans l'état fondamental $X\ ^1\Sigma_g^+$, et aux sections efficaces d'excitation des niveaux moléculaires parents.

Les éléments diagonaux de cette matrice ρ sont les vitesses de formation des atomes, dans les états excités considérés. Ces éléments sont, a priori, différents pour chaque sous-niveau.

Mais, à partir d'un niveau prédissociatif donné de la molécule, l'atome excité formé n'est pas nécessairement dans un état propre du hamiltonien $\mathcal{H}_0(H)$: (énergie de structure fine, énergie Zeeman), mais bien plutôt dans une superposition d'états propres.

Nous ne connaissons pas la symétrie des ou du niveau moléculaire impliqué dans le processus. En effet, un niveau prédissociatif est un niveau lié, perturbé par un niveau dissociatif (voir Fig. III).

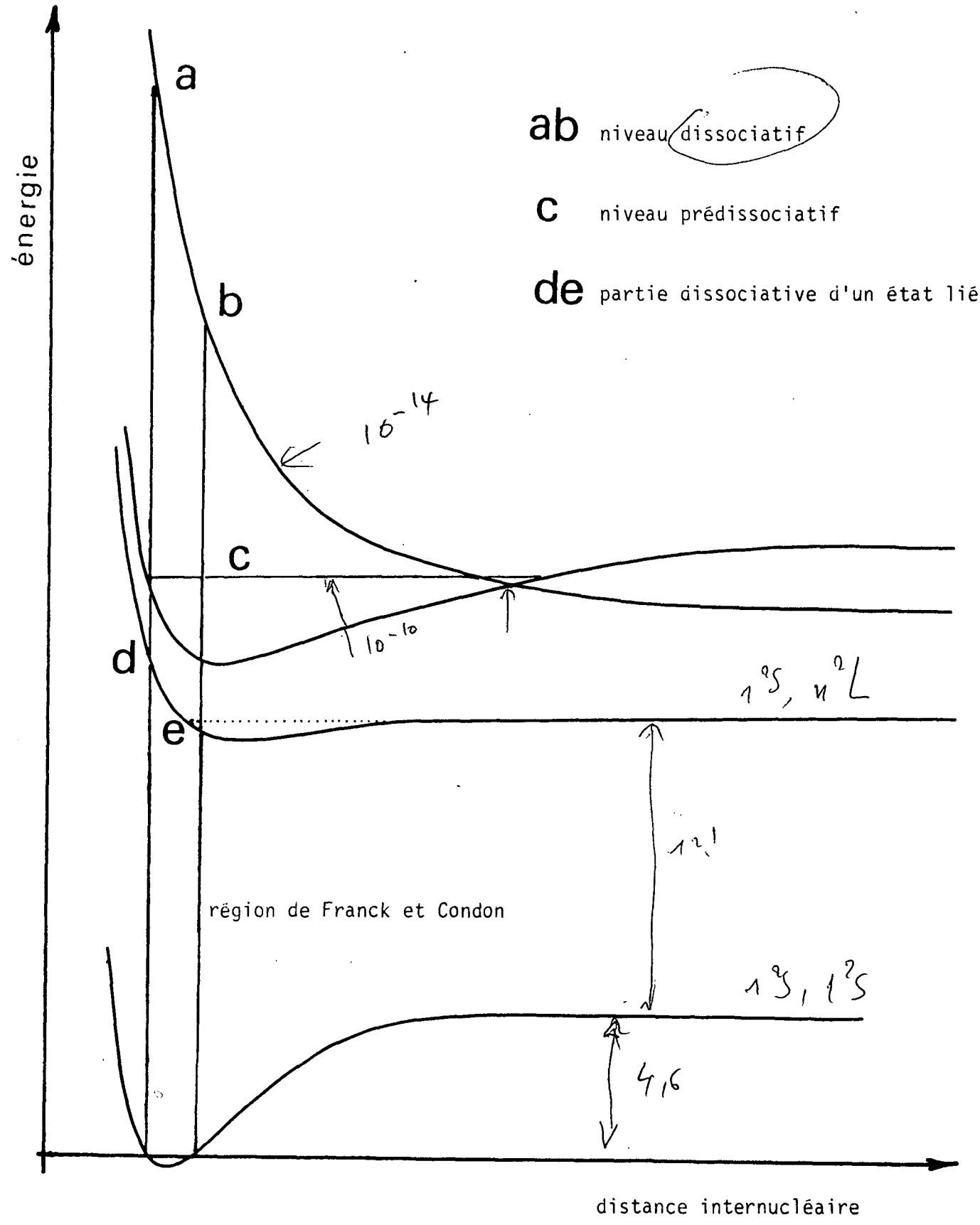


Fig. III

DIFFERENTS TYPES DE DISSOCIATION

Utiliser le diagramme de corrélations, pour établir des règles de sélection, sur les niveaux atomiques excités ainsi formé, conduirait à des prévisions incomplètes.

Nous supposerons ici que nous n'excitons qu'un seul niveau moléculaire conduisant à la dissociation. Sinon, il nous faudrait tenir compte d'une superposition aussi bien pour les vitesses d'excitations ρ que pour les vitesses des atomes.

Nous remarquons d'autre part que les différences d'énergies, entre les sous-niveaux S, P ou D du même état n = 3 ou 4, sont totalement négligeables par rapport à l'énergie cinétique des atomes due à la dissociation. En effet, comme nous le verrons plus loin, l'énergie cinétique des atomes est de l'ordre de 0,5 eV alors que les structures des niveaux n = 3 ou 4 ne dépassent pas 2.10^{-5} eV (c'est de l'ordre de grandeur de la largeur naturelle d'un niveau prédissociatif).

Ainsi, les atomes excités sont formés dans une superposition d'états atomiques propres, de la forme :

$$|\varphi> = A\,|a> + B\,|b>$$

les éléments de la matrice ρ correspondante sont alors :

$$\rho_a \propto \sum_{\text{atomes}} |A|^2 \quad , \quad \rho_b \propto \sum_{\text{atomes}} |B|^2 \quad \text{et} \quad \rho_{ab} \propto \sum_{\text{atomes}} A^{\star} B$$

Les cohérences qui vont intervenir dans notre problème sont celles qui peuvent exister entre des niveaux qui s'anticroisent, c'est-à-dire tels que :

$$\Delta\ell = 1 \qquad \Delta m_j = 0 \,,\, \pm 1$$

$$\Delta\ell = 2 \qquad \Delta m_j = 0 \,,\, \pm 2$$

Si les niveaux a et b, entre lesquels l'excitation a induit un terme $\rho_{ab} \neq 0$ sont tels que $\Delta m_j \neq 0$, c'est que l'ensemble des atomes excités possède une grandeur transversale macroscopique, donc nécessairement, il intervient deux directions priviligiées dans le processus d'excitation dissociative. Or, ce dernier a une symétrie de révolution autour de l'axe de quantification ($\vec{H}$ est parallèle au faisceau). Il ne peut donc apparaître de grandeur transversale et globalement, les termes ρ_{ab} doivent s'annuler.

Au contraire, si $\Delta m_j = 0$, nulle grandeur transversale n'apparaît. L'existence d'une seule direction priviligiée dans le processus est, cette fois, compatible avec une valeur globale non nulle pour ρ_{ab} ; cette "cohérence" dans l'excitation est possible.

Une telle excitation cohérente a été observée, par battements quantiques, dans le cas de la formation d'atomes d'hydrogène dans l'état n = 4, par un procédé de beam-foil ("faisceau-lame") (c'est une cohérence entre sous-niveaux 4^2S et 4^2D tels que $\Delta m_j = 0$) [51].

C - CALCUL DES VITESSES DES FRAGMENTS DE DISSOCIATION

Le champ électrique responsable de la perturbation calculée dans le chapitre précédent est le champ motionnel, c'est-à-dire le champ électrique d'induction subi par les atomes allant à une vitesse $\vec{V}$ dans un champ magnétique $\vec{H}$:

$$\vec{E} = \vec{V} \wedge \vec{H}$$

Il est donc fondamental de déterminer la répartition des vitesses des atomes excités.

Nous allons, dans un premier temps, calculer la vitesse d'une molécule qui vient de subir une collision inélastique avec un électron. On supposera, conformément à l'hypothèse du paragraphe précédent, que la durée de vie du niveau excité dans lequel a été portée la molécule est supérieure

à la durée de la collision. On voit dans ces conditions que l'expression "molécule excitée" a un sens. Nous calculerons ensuite la vitesse des fragments.

Nous nous limiterons à un traitement classique, ce qui est légitime car nous ne cherchons pas les sections efficaces.

1) Etat initial

L'axe Oz est parallèle à la vitesse $\vec{v}_e$ des électrons, avant collision, avec :

si V est la tension d'accélération des électrons. Par exemple $|\vec{v}_e| \sim 2\,600$ km/s pour V = 20 volts.

A cause de l'agitation thermique, la molécule a, dans le repère du laboratoire, une vitesse $\vec{v}_{H_2}$. Sa vitesse quadratique moyenne à 1 000 °K (température du point le plus chaud dans la cellule) est de 3,5 km/s environ. Sa répartition peut être considérée comme maxwellienne, en première approximation. En particulier, sa direction est répartie de manière isotrope dans l'espace.

2) Vitesse de la molécule après collision

Les vitesses de la molécule et de l'électron, avant la collision, sont très différentes, mais leurs quantités de mouvement sont du même ordre de grandeur.

Nous ferons les calculs dans le référentiel du centre de masse.

Dans ce référentiel, nous appelerons $\vec{v}_0$ et $\vec{\vartheta}_0$ les vitesses respectives de l'électron et de la molécule avant la collision et $\vec{v}_r$ et $\vec{\vartheta}_r$, leurs vitesses après la collision.

La loi de conservation de la quantité de mouvement s'écrit :

IV.1
$$m\vec{v}_0 + 2M\vec{\vartheta}_0 = 0$$
$$m\vec{v}_r + 2M\vec{\vartheta}_r = 0$$

m est la masse de l'électron, M celle du proton (on néglige m devant M).

La loi de conservation de l'énergie donne :

IV.2
$$\frac{1}{2} m |\vec{v}_0|^2 + \frac{1}{2} (2M) |\vec{\vartheta}_0|^2 = \frac{1}{2} m |\vec{v}_r|^2 + \frac{1}{2} (2M) |\vec{\vartheta}_r|^2 + eV_1$$

où eV_1 est l'énergie d'excitation de la molécule.

Tenant compte des relations IV.1, l'équation IV.2 devient :

$$|\vec{v}_0|^2 - \left(\frac{2M}{m}\right)^2 |\vec{\vartheta}_r|^2 = \frac{2eV_1}{m(1+ m/2M)} \simeq \frac{2e V_1}{m}$$

Mais $\vec{v}_0$ est la vitesse initiale de l'électron dans le référentiel du centre de masse, de sorte que

$$\vec{v}_0 = \vec{v}_e - \frac{m\vec{v}_e + 2M\vec{\vartheta}_{H_2}}{m+2M}$$

compte tenu des ordres de grandeur des différentes vitesses on a :

$$|\vec{v}_0|^2 \simeq |\vec{v}_e|^2 = \frac{2eV}{m}$$

Ainsi

IV.3
$$|\vec{\vartheta}_r| \simeq \sqrt{\frac{m}{2M^2} e(V-V_1)} \sim 160 \sqrt{(V-V_1)} \quad m/s$$

Par ce calcul classique, nous avons obtenu une estimation du module de cette vitesse, mais aucun renseignement sur son orientation.

3) Explosion de H_2

Le repère naturel à choisir pour ce nouveau problème est bien sûr celui du centre de masse de la molécule. Soient dans ce système, $\vec{\vartheta}_H$ la vitesse de l'atome dans l'état 1^2S et $\vec{\vartheta}_{H^*}$ celle de l'atome excité ; les lois de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement donnent :

$$M\,\vec{\vartheta}_H + M\,\vec{\vartheta}_{H^*} = 0$$

$$\frac{1}{2} M\,|\vec{\vartheta}_H|^2 + \frac{1}{2} M\,|\vec{\vartheta}_{H^*}|^2 + e\,V_2 = e\,V$$

où eV_2 est la somme de l'énergie interne de H^* et de l'énergie de dissociation. On obtient alors :

IV.4
$$|\vec{\vartheta}_{H^*}| = \sqrt{\frac{e(V_1 - V_2)}{M}} \simeq 9{,}800\,\sqrt{V_1 - V_2}\ \text{km/s}$$

Nous voyons que la grandeur de cette vitesse ne dépend que des énergies internes de la molécule et de l'atome, et qu'elle peut devenir très vite considérable.

Si la molécule d'hydrogène a été portée dans un niveau prédissociatif et un seul, la vitesse des atomes $\vec{\vartheta}_{H^*}$ a une grandeur bien définie, la même pour tous. Seule, l'orientation de cette vitesse est indéterminée.

4) Vitesse des atomes dans le repère du laboratoire

Soit $\vec{V}$ la vitesse des atomes excités, dans le repère du laboratoire (il n'y a pas de confusion possible entre la vitesse $\vec{V}$ et la tension d'accélération V).

On a, en composant les vitesses des différents repères précédents :

$$\vec{V} = \vec{\vartheta}_{H^*} + \vec{\vartheta}_r + \frac{m\,\vec{v}_e + 2M\,\vec{\vartheta}_{H_2}}{m+2M}$$

En fait, nous aurons à calculer la projection de $\vec{V}$ sur le plan xOy c'est-à-dire sur le plan perpendiculaire au champ magnétique $\vec{H}$

IV.5 $$\perp\vec{V} = \perp\vec{\vartheta}_{H^*} + \perp\vec{\vartheta}_r + \frac{m}{2M}\perp\vec{v}_e + \perp\vec{\vartheta}_{H_2}$$

La vitesse $\vec{v}_e$ est sensiblement parallèle à $\vec{H}$, affectée du coefficient m/2M ; une mauvaise collimation du faisceau d'électrons peut entraîner pour la composante transversale une valeur qui peut atteindre $|\perp\vec{v}_e| \sim \frac{1}{10}|\vec{v}_e|$ soit $\frac{m}{2M}\perp\vec{v}_e \sim 60$ m/s, ce qui est négligeable, même devant la vitesse thermique de la molécule (3 km/s à 1 000 °K).

La vitesse de recul de la molécule $\vec{\vartheta}_r$ peut être, en général, négligée. En effet, près du seuil d'excitation, c'est-à-dire avec des électrons incidents d'énergie eV telle que

$$e(V - V_1) < 10 \text{ eV}$$

on trouve, à partir de l'équation (IV.3) :

$$|\vec{\vartheta}_r| < 470 \text{ m/s}$$

Même quand cette vitesse est purement transversale, elle est petite devant la vitesse thermique $\perp\vec{\vartheta}_{H_2}$ dont l'effet, comme nous le verrons plus loin, est faible devant celui de $\vec{\vartheta}_{H^*}$. On négligera donc $\vec{\vartheta}_r$.

La relation IV.5 se simplifie alors :

IV.6 $$\perp\vec{V} = \perp\vec{\vartheta}_{H^*} + \perp\vec{\vartheta}_{H_2}$$

La répartition de la vitesse thermique de H_2 peut être approchée par une distribution qui ne dépend que de la température du gaz dans l'enceinte. Etant donnée la faible influence de $\vec{v}_{H_2}$, nous prévoyons que la répartition effective n'a que peu d'importance. Aussi nous supposerons que $\vec{v}_{H_2}$ a une répartition de Maxwell, bien que le gaz ne soit pas en équilibre thermique dans la cellule (il y a des points chauds et des points froids).

La répartition de $\vec{v}_{H^*}$ n'est pas connue a priori, et sera supposée isotrope dans l'espace.

D - HYPOTHESE DE REPARTITION ISOTROPE DE $\vec{v}_{H^*}$

1) Validité et limites

Cette hypothèse est, bien sûr, la plus simple que l'on puisse faire, elle a, en plus, l'avantage de permettre tous les calculs.

a) Justification expérimentale.

La seule étude expérimentale de la distribution angulaire des fragments de dissociation de l'hydrogène après collision électronique a été faite par MISAKIAN et ZORN ([48]). Il a été observé expérimentalement que la distribution des vitesses des atomes 2^2S est isotrope pour des énergies d'électrons incidents inférieures à 29 eV.

Etant donnée l'analogie des situations, nous avons fait l'hypothèse de la distribution isotrope.

b) Limite de validité.

L'hypothèse ci-dessus cesse d'être valable dès qu'apparaît de la polarisation sur les raies de Balmer. En effet VAN BRUNT et ZARE ([52]) ont montré dès 1968, que la lumière émise par des fragments de dissociation ne peut être polarisée que sous deux conditions :

.a. La distribution de la vitesse des fragments doit être anisotrope.

.b. Il doit exister des différences de populations entre les sous-niveaux Zeeman des fragments excités.

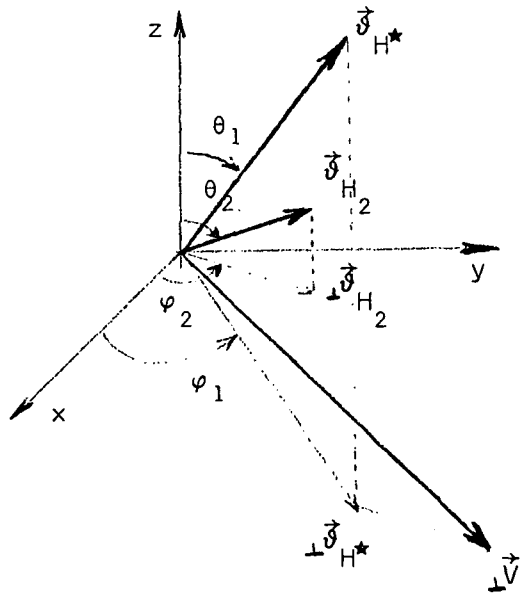
La Fig. II représente un enregistrement de l'intensité et du taux de polarisation de H_α (transition $n = 3 \rightarrow n = 2$), en fonction de l'énergie des électrons incidents.

On voit que l'hypothèse d'une distribution isotrope n'est certainement plus vraie pour des énergies incidentes supérieures à 21 eV. Dans ce cas, nous manquons d'informations sur cette distribution pour calculer les effets d'anticroisement.

2) Calcul de la distribution de $_\perp\vec{V}$, dans l'hypothèse de la répartition isotrope

La vitesse $_\perp\vec{V}$ résulte de la composition de deux vitesses dont les distributions sont différentes. Nous allons exprimer chacune d'elles et les composer :

a) Vitesse thermique.



La distribution de $\vec{\vartheta}_{H_2}$ est maxwellienne Soient θ et φ les angles polaires de $\vec{\vartheta}_{H_2}$.

La probabilité pour que cette vitesse ait v pour grandeur, à dv près, c'est-à-dire :

$$v < |\vec{\vartheta}_2| < v + dv$$

et que ses angles polaires soient compris entre θ_2 et $\theta_2 + d\theta_2$ d'une part, et φ_2 et $\varphi_2 + d\varphi_2$ d'autre part, est :

$$\rho(v,\theta_2,\varphi_2)\ dv\ d\theta_2\ d\varphi_2 = \left(\frac{1}{2\pi}\frac{2M}{kT}\right)^{3/2} e^{-(Mv^2)/kT}\ v^2 \sin\theta_2\ dv\ d\theta_2\ d\varphi_2$$

b) La vitesse d'explosion.

Nous avons admis que le module de cette vitesse est bien défini par (IV.4). Cela implique qu'un seul niveau moleculaire est responsable de la dissociation et que ce niveau est prédissociatif. En effet, un niveau dissociatif a une énergie qui varie considérablement dans la région de Franck et Condon. On rappelle que la région de Franck et Condon est le domaine des niveaux d'énergie de la molécule qui correspond à une distance internucléaire comprise entre r_1 et r_2, valeurs extrêmes de cette distance pour le niveau fondamental $X\ \Sigma_g^+$. Lors d'une collision avec un électron, la distance des noyaux n'a pas le temps de varier et les niveaux d'énergie atteints sont ceux de la région de Franck et Condon.

Nous avons donc supposé qu'un seul niveau prédissociatif était excité et que la répartition des vitesses d'explosion est isotrope dans tout l'espace ; donc la probabilité pour que les angles polaires de cette vitesse soient compris entre θ_1 et $\theta_1 + d\theta_1$, φ_1 et $\varphi_1 + d\varphi_1$ est :

$$\rho(\theta_1,\varphi_1)\ d\theta_1 d\varphi_1 = \frac{1}{4\pi}\ \sin\theta_1\ d\theta_1 d\varphi_1$$

c) La vitesse de H^*.

Nous verrons dans le chapitre suivant que nous n'avons à calculer que le module de la vitesse transversale. L'équation (IV.6) entraîne :

IV.7 $$|\vec{V}|^2 = |\vec{\vartheta}_{H^*}|^2 \sin^2\theta_1 + |\vec{\vartheta}_{H_2}|^2 \sin^2\theta_2 + 2\,|\vec{\vartheta}_{H^*}||\vec{\vartheta}_{H_2}| \sin\theta_1 \sin\theta_2 \cos(\varphi_1 - \varphi$$

La probabilité relative à $\vec{V}$ est le produit des probabilités :
$\rho_1(\theta_1,\varphi_1)\ d\theta_1 d\varphi_1\ \rho_2(\theta_2,\varphi_2,v)\ dv\ d\theta_2\ d\varphi_2$
les coordonnées étant toutes indépendantes.

Nous voyons donc que la vitesse transversale de l'atome - donc le champ motionnel - et la répartition spatiale sont alors exprimées en fonction de la température dans la cellule et d'un paramètre $|\vec{\vartheta}_{H^*}|$ qui est inconnu, mais que nous déterminerons, en comparant les courbes expérimentales des anticroisements, aux courbes calculées en fonction de ce paramètre.

L'étude théorique de ces anticroisements fait l'objet du chapitre suivant.

C H A P I T R E V

ETUDE DES ANTICROISEMENTS

Nous allons dans ce chapitre, étudier les phénomènes observables au voisinage d'un croisement de niveaux. Nous nous intéressons au cas où ceux-ci sont mèlangés par une perturbation électrique soit directement, soit indirectement par l'intermédiaire d'un troisième niveau. Ce croisement est alors transformé en anticroisement [53] [54].

Nous traiterons successivement ces deux cas : couplage direct, et couplage indirect. Nous interpréterons alors physiquement les résultats.

Nous verrons ensuite l'influence de la répartition spatiale des champs électriques sur ces signaux.

A - PRINCIPE DU CALCUL

Nous avons décrit dans le chapitre précédent l'évolution de la matrice densité σ de l'état atomique excité. Elle peut, sous certaines conditions que nous avons alors discutées, être interprétée comme la succession de trois étapes :

- création d'atomes dans l'état excité
- évolution propre dans l'état excité
- désexcitation par émission spontanée.

Il en résulte que la vitesse de variation de σ est la somme de trois termes qui en décrivent les vitesses de variation respectives au cours de ces trois étapes.

1) Excitation des atomes

La vitesse de variation de σ, lors de la première étape, est :

$$\left(\frac{d\sigma}{dt} \right)_1 = \rho$$

Il est entendu qu'il n'y a aucune raison pour que la matrice soit diagonale dans la base des états propres de $\mathcal{H}(H)$.

C'est ainsi que, lorsqu'on peut limiter l'ensemble des états atomiques aux seuls états (a) et (b) , ρ a pour forme :

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{aa} & \rho_{ab} \\ \rho_{ab}^{\star} & \rho_{bb} \end{pmatrix}$$

2) Evolution propre dans l'état excité

Le terme correspondant s'écrit ([39]) :

$$\left(\frac{d\sigma}{dt} \right)_2 = - i \left[\mathcal{H}_t , \sigma \right]$$

(on a pris $\hbar = 1$) , où $\mathcal{H}_t$ est le hamiltonien total du système :

$$\mathcal{H}_t = \mathcal{H}(H) + \mathcal{H}_E$$

On rappelle que, dans la base des fonctions propres de $\mathcal{H}(H)$, le hamiltonien électrostatique $\mathcal{H}_E$ n'est pas diagonal.

Il apparaît, dès maintenant, des différences fondamentales entre la situation actuelle ("anticroisements") et la situation des "croisements de niveaux" de FRANKEN ([55]).

- Comme nous l'avons vu, dans le chapitre précédent, l'excitation, ici, n'est pas nécessairement cohérente; au contraire, elle doit l'être pour que les croisements soient observables.

- C'est le hamiltonien de perturbation qui couple les sous-niveaux, alors que pour les croisements ce point n'est pas obligatoire.

Nous verrons plus loin comment se manifestent ces différences.

3) Désexcitation par émission spontanée.

On sait que le terme qui décrit ce processus est ([56]) :

$$\left(\frac{d\sigma}{dt} \right)_3 = -\frac{1}{2} [\Gamma , \sigma]_+ = -\frac{1}{2} (\Gamma\sigma + \sigma\Gamma)$$

où la matrice Γ est diagonale, dans la base des fonctions propres de $\mathcal{H}(H)$, et a pour éléments :

$$< \varphi(n^2L) \,|\Gamma|\, \varphi(n^2L) > = \gamma_{n,\ell}$$

On voit la différence avec les cas habituellement étudiés ([41]) où l'atome est porté dans un ensemble de sous-niveaux Zeeman issus d'un même terme tel que n^2L ; la matrice Γ est alors un multiple de la matrice unité.

Nous verrons, en particulier, que l'inégalité des durées de vie des niveaux couplés a des conséquences particulières sur les anticroisements à couplage indirect.

4) La solution stationnaire de l'équation d'évolution

Le champ électrique qui couple les sous-niveaux est statique. La vitesse d'excitation des atomes est constante. La matrice densité qui décrit le système atomique, dans l'état de régime, est donc la solution stationnaire de l'équation : $d\sigma/dt = 0$

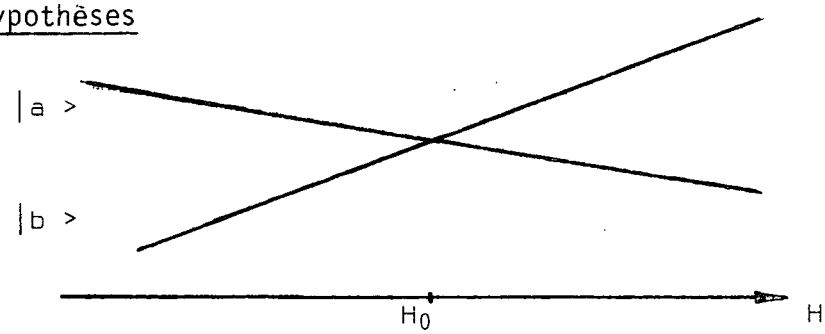
c'est-à-dire :

V.1 $$\dot{\rho} - i\,[\mathcal{H}_t, \sigma] - \frac{1}{2}\,[\Gamma, \sigma]_+ = 0$$

Nous allons donc la résoudre, successivement, dans les deux cas annoncés : couplage direct, puis couplage indirect par l'intermédiaire d'un seul sous-niveau.

B - LES ANTICROISEMENTS PAR COUPLAGE DIRECT

1) Les hypothèses



Soient deux états $|a>$ et $|b>$, états propres de $\mathcal{H}(H)$, et dont les énergies respectives E_a et E_b seraient égales, pour la valeur du champ magnétique $H = H_0$, s'ils n'étaient pas couplés par la perturbation électrique (ils sont donc de parités opposées).

On suppose qu'au voisinage du point de croisement, les autres niveaux qui peuvent être couplés à $|a>$ ou à $|b>$, par la perturbation électrique, en sont très éloignés. On peut donc considérer les deux niveaux a et b comme s'ils étaient seuls. Nous reviendrons sur la validité de cette hypothèse à la fin de ce chapitre.

2) Calcul des éléments de matrice

Le problème est alors réduit à un problème à deux niveaux : L'équation (V.1) fait intervenir quatre matrices qui sont :

- la matrice d'"excitation" $\rho = \begin{pmatrix} \rho_a & \rho_{ab} \\ \rho^{\star}_{ab} & \rho_b \end{pmatrix}$

- la matrice des durées de vie :

$$\Gamma = \begin{pmatrix} \gamma_a & 0 \\ 0 & \gamma_b \end{pmatrix}$$

- la matrice densité σ

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{aa} & \sigma_{ab} \\ \sigma_{ab}^{\star} & \sigma_{bb} \end{pmatrix}$$

- le hamiltonien total :

$$\mathcal{H}_t = \begin{pmatrix} E_a & V \\ V^{\star} & E_b \end{pmatrix}$$

où V est le terme de perturbation électrique calculé entre les états $|a>$ et $|b>$, vecteurs propres de $\mathcal{H}(H)$ (voir chapitre III § A-3).

On calcule alors très facilement le commutateur :

$$[\mathcal{H}, \sigma] = \begin{pmatrix} V\sigma_{ba} - V^{\star}\sigma_{ab} & V(\sigma_{bb} - \sigma_{aa}) + \sigma_{ab}(E_a - E_b) \\ V^{\star}(\sigma_{aa} - \sigma_{bb}) + \sigma_{ab}^{\star}(E_b - E_a) & V^{\star}\sigma_{ab} - V\sigma_{ab}^{\star} \end{pmatrix}$$

et l'anticommutateur :

$$[\Gamma, \sigma]_+ = \begin{pmatrix} 2\gamma_a\sigma_{aa} & (\gamma_a + \gamma_b)\,\sigma_{ab} \\ (\gamma_a + \gamma_b)\sigma_{ab}^{\star} & 2\gamma_b\sigma_{bb} \end{pmatrix}$$

L'équation (V-1) est donc équivalente au système

$$\begin{cases} \rho_a - i(V\sigma_{ab}^{\star} - V^{\star}\sigma_{ab}) - \gamma_a\sigma_{aa} = 0 \\ \rho_b + i(V\sigma_{ab}^{\star} - V^{\star}\sigma_{ab}) - \gamma_b\sigma_{bb} = 0 \\ \rho_{ab} - i\left[V(\sigma_{bb} - \sigma_{aa}) + \sigma_{ab}(E_a - E_b)\right] - \dfrac{\gamma_a + \gamma_b}{2}\,\sigma_{ab} = 0 \end{cases}$$

et une quatrième équation, complexe conjuguée de la troisième.

De la 3ème équation du système IV-2, on tire :

$$V^{\star}\sigma_{ab} = \frac{|V|^2(\sigma_{bb} - \sigma_{aa}) + i\rho_{ab}\, V^{\star}}{E_b - E_a - i\left(\frac{\gamma_a + \gamma_b}{2}\right)}$$

en reportant dans les deux premières on a alors un système d'équations algébriques à deux inconnues, dont les solutions sont :

$$\sigma_{aa} = \rho_a/\gamma_a + (\rho_b/\gamma_b - \rho_a/\gamma_a)\,\frac{\gamma_a+\gamma_b}{\gamma_a}\,|V|^2 \Big/ \left\{(E_a - E_b)^2 + \left(\frac{\gamma_a+\gamma_b}{2}\right)^2 (1+4|V|^2/\gamma_a\gamma_b)\right.$$

$$\left. + \left\{(\rho^{\star}_{ab}\, V + \rho_{ab}\, V^{\star})(E_a - E_b) + i\left(\frac{\gamma_a+\gamma_b}{2}\right)(\rho_{ab}V^{\star} - \rho^{\star}_{ab}V)\right\} \Big/ \left\{(E_a-E_b)^2 + \left(\frac{\gamma_a+\gamma_b}{2}\right)^2 \left(1+\frac{4|V|^2}{\gamma_a\gamma_b}\right)\right.\right.$$

et de même pour σ_{bb} en échangeant a et b.

3) Intensité de la lumière observable

L'intensité de la lumière émise à partir des deux sous-niveaux a et b dans la direction d'observation Oy, sur un ensemble de transitions donné (raie H_α ou raie H_β) pour la polarisation λ,..., est proportionnelle à :

$$I \propto \sum_{\substack{k,\mu \\ i,j=a,b}} \langle k,\mu|\vec{\varepsilon}_\lambda.\vec{r}| > \sigma_{ij} < j|\vec{\varepsilon}_\lambda.\vec{r}|k,\mu >$$

où $|k,\mu>$ représentent les sous-niveaux de n = 2.

Les niveaux a et b sont couplés directement par l'opérateur $\vec{\varepsilon}.\vec{r}$, donc ils sont de parités différentes; ils ne peuvent pas être reliés au même sous-niveau k,μ par une transition dipolaire électrique. Il ne subsiste donc que les termes proportionnels aux populations σ_{aa} et σ_{bb}. La détection ne peut être ici qu'incohérente.

L'intensité de la lumière émise par le niveau a de population σ_{aa} dans la direction Oy, avec la polarisation λ... est égale à (voir chapitre III § B)

$$I_a \propto \sigma_{aa} \cdot w_{d\Omega,\lambda} = \sigma_{aa} \cdot \gamma_a \cdot f_a^\lambda$$

où f_a^λ est le rapport de branchement du niveau a, pour les transitions considérées, et de même, pour le niveau b ; l'intensité émise par l'ensemble des sous-niveaux, dans les conditions d'observation ci-dessus, est :

$$I \propto \rho_a f_a^\lambda + \rho_b f_b^\lambda - (f_a^\lambda - f_b^\lambda)(\rho_a/\gamma_a - \rho_b/\gamma_b) \frac{(\gamma_a+\gamma_b)|V|^2}{(E_a-E_b)^2 + (\frac{\gamma_a+\gamma_b}{2})^2 \ (1+\frac{4|V|^2}{\gamma_a\gamma_b})} +$$

$$+ \frac{(f_a^\lambda\gamma_a - f_b^\lambda\gamma_b)\{(\rho_{ab}^\star V + \rho_{ab} V^\star)(E_a - E_b) + i(\frac{\gamma_a+\gamma_b}{2})(\rho_{ab}V^\star - \rho_{ab}^\star V)\}}{(E_a - E_b)^2 + (\frac{\gamma_a+\gamma_b}{2})^2 (1 + 4|V|^2/\gamma_a\gamma_b)}$$

C'est l'expression établie pour la 1ère fois par Wieder et Eck [26], à partir d'un calcul de perturbation dépendant du temps, beaucoup plus laborieux que le calcul présenté ici.

Nous nous proposons maintenant de discuter successivement les effets de populations (proportionnels à ρ_a et ρ_b), puis les effets liés aux "cohérences" ρ_{ab} et $\rho_{ba} = \rho_{ab}^\star$.

4) Discussion de l'effet lié aux populations

Dans tout ce paragraphe, on supposera que $\rho_{ab} = 0$ (excitation non cohérente).

a) Interprétation physique

L'équation (V.3), qui fixe la valeur de la population de σ_{aa}, montre alors qu'il y a bien transfert de population entre l'état $|a\rangle$ et l'état $|b\rangle$ par la perturbation . En effet, si $|V| = 0$, $\sigma_{aa} = \rho_a/\gamma_a$ représente la population de l'état a en régime stationnaire, lorsqu'on le peuple à la vitesse ρ_a, tout en le vidant à la vitesse $\gamma_a\sigma_{aa}$.

Si $|V| \neq 0$, on voit que σ_{aa} dépend alors de $\rho_b/\gamma_b - \rho_a/\gamma_a$, c'est-à-dire de la différence entre les populations des deux niveaux.

On peut dire qu'il y a transition entre les deux niveaux ; c'est une transition "dipolaire électrique" à fréquence nulle.

b) Discussion des résultats.

α) Forme de la variation

On distingue immédiatement, dans l'expression de l'intensité, un terme qui ne dépend pas de la perturbation:

$$I_0 \propto \rho_a f_a^\lambda + \rho_b f_b^\lambda$$

Il correspond à la lumière émise, en l'absence d'effet d'anti-croisement ; il est responsable d'un fond lumineux continu. Il s'y superpose le signal :

$$\Delta I \propto - (f_a^\lambda - f_b^\lambda)(\rho_a/\gamma_a - \rho_b/\gamma_b) \frac{(\gamma_a+\gamma_b)|V|^2}{(E_a-E_b)^2 + (\frac{\gamma_a+\gamma_b}{2})^2 (1 + \frac{4|V|^2}{\gamma_a\gamma_b})}$$

Ce terme est résonnant pour $E_a = E_b$ c'est-à-dire pour la valeur du champ magnétique, H_0, pour laquelle les niveaux se croisent sans perturbation.

La résonance est élargie par un terme qui est proportionnel au carré du module du terme de perturbation, donc à la puissance électrique. L'intensité du signal est, pour une perturbation faible, proportionnelle elle aussi, à la puissance électrique, et se sature aux grandes puissances On retrouve tous les éléments des transitions dipolaires électriques de radiofréquence ([56]).

β) Les conditions d'observation de cet anticroisement sont :

-aa- Il faut qu'il y ait, en régime dynamique, une différence de populations : s'il y a autant d'atomes, par seconde, qui passent de l'état a vers l'état b, que d'atomes qui passent de b à a, on n'observe rien.

-bb- La proportion des photons observés, sur les photons émis, ne doit pas être la même pour les deux sous-niveaux.

A la limite, si l'on détectait tous les photons émis par les deux sous-niveaux sans les différencier par leur énergie ou leur polarisation, on n'observerait aucun changement au voisinage du point d'anticroisement, la population globale du système restant la même.

-cc- Aucun niveau ne doit être métastable ; ceci a été supposé implicitement lors du calcul. Si l'on reprend celui-ci pour $\gamma_a = 0$ (par exemple) on retrouve alors le résultat obtenu par SERIES ([57]) :

$$I \propto (\rho_a + \rho_b)\, f_b^{\lambda} = \text{Cte}$$

Si la durée de vie du niveau a est infinie, la seule voie de désexcitation étant la transition radiative de $|b>$, au bout d'un temps plus ou moins long, d'un nombre plus ou moins grand de transitions $|a> \rightarrow |b>$, il se désexcitera par l'état $|b>$ et globalement rien ne sera décelable en régime stationnaire, (expérimentalement le niveau a toujours une durée de vie finie, due aux collisions).

5) Discussion de l'effet lié à l'excitation "cohérente"

Tout d'abord, nous devons rappeler (voir chapitre IV) que l'excitation de l'ensemble des atomes ne peut être "cohérente" qu'entre sous-niveaux de même nombre quantique m_j.

Dans tous les autres cas, les éléments non diagonaux de la matrice ρ sont nuls.

Cet effet se traduit par une variation d'intensité lumineuse superposée au fond continu I_0 et au signal ΔI_i dû aux différences de populations :

$$\Delta I_c = (f_a^{\lambda}\gamma_a - f_b^{\lambda}\gamma_b)\,\frac{(E_a-E_b)(\rho^{*}_{ab}V+\rho_{ab}V^{*}) + i(\frac{\gamma_a+\gamma_b}{2})(\rho_{ab}V^{*}-\rho^{*}_{ab}V)}{(E_a-E_b)^2 + (\frac{\gamma_a+\gamma_b}{2})^2\,(1+\frac{4|V|^2}{\gamma_a\gamma_b})}$$

Nous voyons alors que ΔI_c a une variation résonnante autour du point d'anticroisement. Elle présente un effet d'élargissement proportionnel au carré $|V|^2$, comme le signal ΔI_i lié à la partie incohérente de l'excitation.

Ce terme peut être décomposé en deux parties :
- l'une, proportionnelle à $Re(\rho^{*}_{ab}V)$, varie en forme de dispersion en fonction de la différence d'énergie $E_a - E_b$ (donc en fonction de la variation du champ magnétique $H - H_0$)
- l'autre, proportionnelle à $Im(\rho^{*}_{ab}V)$, varie en fonction de $(H - H_0)$ en forme d'absorption.

On remarque que, ΔI_c dépend de V et V^{*} séparément et non pas du module du terme de couplage $|V|^2$ comme c'était le cas pour l'effet "incohérent" ΔI_i.

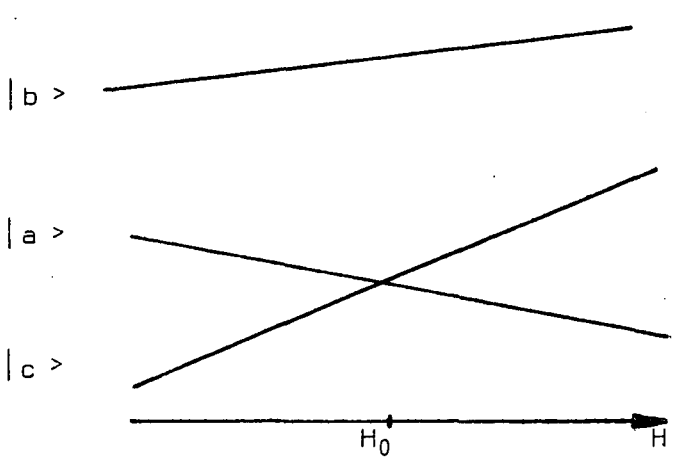
Le champ électrique qui crée le couplage entre sous-niveaux de même m_j est nécessairement parallèle à l'axe Oz. Dans nos conditions expérimentales, le seul champ répondant à cette symétrie est dû à la charge d'espace du faisceau d'électrons, dans l'espace d'observation ; il est tel que $\Sigma\vec{E}_{//} = 0$ avec $\Sigma|\vec{E}_{//}|^2 \neq 0$: il ne nous est donc pas possible de détecter la "cohérence" qui serait créée par l'excitation, sur les anticroisements à couplage direct.

Il ne faut pas croire que c'est là la situation générale. C'est ainsi que LAMB et ses collaborateurs [19] ont réalisé une expérience dans laquelle tous les atomes sont soumis au même champ électrique

oscillant (il s'agit d'une expérience de résonance dipolaire électrique). Dans ce cas, les effets de cohérence ne se détruisent pas quand on en fait la somme sur tous les atomes. Pourtant, aucun de ces effets n'a été mis en évidence. La cohérence, si elle existe, est donc très faible.

Pour cette raison, nous négligerons l'influence de la partie cohérente de l'excitation dans le cas des anticroisements à couplage indirect. Les calculs s'en trouveront simplifiés. De plus, le seul anticroisement qui pourrait être perturbé par cette cohérence à l'excitation pose d'autres problèmes théoriques, comme nous le verrons au chapitre VII.

C - LES ANTICROISEMENTS PAR COUPLAGE INDIRECT - CAS DE TROIS NIVEAUX.



Soient $|a>$, $|b>$ et $|c>$, trois états propres de $\mathcal{H}(H)$ avec les valeurs propres E_a , E_b et E_c.
Pour la valeur H_0 du champ magnétique, les énergies E_a et E_c sont égales. Les états $|a>$ et $|c>$ sont tous les deux couplés au même états $|b>$ par la perturbation électrique. Les niveaux a et c sont de même parité.

On admettra, ici encore, que les autres états couplés à $|a>$, $|b>$ ou $|c>$ en sont assez éloignés (en énergie) pour que l'on ait le droit de considérer les trois niveaux a, b et c comme s'ils étaient seuls, en première approximation. Nous verrons plus loin comment améliorer les résultats en tenant compte de leur existence. Nous avons fait l'hypothèse que le niveau b couplant a et c est unique, pour simplifier les calculs; nous discuterons sur chaque cas particulier comment nous pouvons nous ramener à ce cas simplifié.

1) Calcul des éléments de la matrice densité

Les matrices d'excitation et de désexcitation s'écrivent respectivement dans la base a, b, c

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_a & 0 & 0 \\ 0 & \rho_b & 0 \\ 0 & 0 & \rho_c \end{pmatrix} \quad ; \quad \Gamma = \begin{pmatrix} \gamma_a & 0 & 0 \\ 0 & \gamma_b & 0 \\ 0 & 0 & \gamma_c \end{pmatrix}$$

en négligeant la partie cohérente de l'excitation.

Le hamiltonien a alors la forme suivante :

$$\mathcal{H}_t = \begin{pmatrix} E_a & V & 0 \\ V^\star & E_b & W \\ 0 & W^\star & E_c \end{pmatrix}$$

où V et W sont les termes de perturbation électrique calculés entre les états $|a>$ et $|b>$ puis $|b>$ et $|c>$.
La matrice densité σ cherchée est :

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{aa} & \sigma_{ab} & \sigma_{ac} \\ \sigma^\star_{ab} & \sigma_{bb} & \sigma_{bc} \\ \sigma^\star_{ac} & \sigma^\star_{bc} & \sigma_{cc} \end{pmatrix}$$

On évalue l'anticommutateur $[\Gamma,\sigma]_+$ et on trouve :

$$[\Gamma,\sigma]_+ = (\Gamma\sigma + \sigma\Gamma) = \begin{pmatrix} 2\sigma_{aa}\gamma_a & \sigma_{ab}(\gamma_a+\gamma_b) & \sigma_{ac}(\gamma_a+\gamma_c) \\ \sigma^\star_{ab}(\gamma_a+\gamma_b) & 2\sigma_{bb}\gamma_b & \sigma_{bc}(\gamma_b+\gamma_c) \\ \sigma^\star_{ac}(\gamma_a+\gamma_c) & \sigma^\star_{bc}(\gamma_b+\gamma_c) & 2\sigma_{cc}\gamma_c \end{pmatrix}$$

Le commutateur $[\mathcal{H}_t,\sigma]$ prend une forme plus compliquée :

$$[\mathcal{H}_t,\sigma] = \begin{cases} V\sigma^*_{ab} - V^*\sigma_{ab} & V(\sigma_{bb}-\sigma_{aa}) + \sigma_{ab}(E_a-E_b) - W^*\sigma_{ac} & \sigma_{ac}(E_a-E_c) + \sigma_{bc}V - W\sigma_{ab} \\ V^*(\sigma_{aa}-\sigma_{bb}) + \sigma^*_{ab}(E_b-E_a) & V^*\sigma_{ab} - V\sigma^*_{ab} + W\sigma^*_{bc} - W^*\sigma_{bc} & W(\sigma_{cc}-\sigma_{bb}) + (E_b-E_c)\sigma_{bc} + V^*\sigma_{ac} \\ \sigma^*_{ac}(E_c-E_a) + W^*\sigma^*_{ab} - V^*\sigma^*_{bc} & W^*(\sigma_{bb}-\sigma_{cc}) + \sigma^*_{bc}(E_c-E_b) - V\sigma^*_{ac} & W^*\sigma_{bc} - W\sigma^*_{bc} \end{cases}$$

L'équation V.1 entre opérateurs est donc équivalente au système d'équations suivant :

$$(V.5) \quad \begin{cases} (1) \quad \begin{cases} \rho_a + i(V^*\sigma_{ab} - V\sigma^*_{ab}) - \gamma_a\sigma_{aa} = 0 \\ \rho_b - i(V^*\sigma_{ab} - V\sigma^*_{ab}) + i(W^*\sigma_{bc} - W\sigma^*_{bc}) - \gamma_b\sigma_{bb} = 0 \\ \rho_c - i(W^*\sigma_{bc} - W\sigma^*_{bc}) - \gamma_c\sigma_{cc} = 0 \end{cases} \\ (2) \quad \begin{cases} \left(i(E_b-E_a) - \frac{1}{2}(\gamma_a+\gamma_b)\right)\sigma_{ab} + iW^*\sigma_{ac} - iV(\sigma_{bb}-\sigma_{aa}) = 0 \\ \left(i(E_c-E_a) - \frac{1}{2}(\gamma_c+\gamma_a)\right)\sigma_{ac} + iW\sigma_{ab} - iV\sigma_{bc} = 0 \\ \left(i(E_c-E_b) - \frac{1}{2}(\gamma_c+\gamma_b)\right)\sigma_{bc} - iV^*\sigma_{ac} - iW(\sigma_{cc}-\sigma_{bb}) = 0 \end{cases} \end{cases}$$

On remarque alors que les trois dernières équations forment un système algébrique pour les éléments σ_{ab} , σ_{bc} , σ_{ac}. Il est facile de les exprimer, en fonction des différents paramètres et des différences de populations $\sigma_{aa}-\sigma_{bb}$ et $\sigma_{bb}-\sigma_{cc}$.

On notera :

$$\Gamma_{ab} = \frac{1}{2}(\gamma_a + \gamma_b) + i(E_a - E_b)$$

de même pour Γ_{ac} et Γ_{bc}, et

$$\Delta = \Gamma_{ab}\,\Gamma_{ac}\,\Gamma_{bc} + |V|^2\,\Gamma_{ab} + |W|^2\,\Gamma_{bc}$$

Dans ces conditions, le système V.5 (2) se résout par la méthode de Cramer :

V.6
$$\begin{cases} \sigma_{ab} = (iV/\Delta)\,[(\sigma_{aa} - \sigma_{bb})(\Gamma_{ac}\,\Gamma_{bc} + |V|^2) + (\sigma_{bb} - \sigma_{cc})|W|^2] \\ \sigma_{ac} = -(VW/\Delta)\,[(\sigma_{aa} - \sigma_{bb})\,\Gamma_{bc} - (\sigma_{bb} - \sigma_{cc})\,\Gamma_{ab}] \\ \sigma_{bc} = (iW/\Delta)\,[(\sigma_{aa} - \sigma_{bb})\,|V|^2 + (\sigma_{bb} - \sigma_{cc})(\Gamma_{ab}\,\Gamma_{ac} + |W|^2)] \end{cases}$$

On reporte ces valeurs dans le système V.5 (1) . Il faut, au préalable, calculer les quantités :

$$V^*\,\sigma_{ab} - V\,\sigma_{ab}^* \qquad \text{et} \qquad W^*\,\sigma_{bc} - W\,\sigma_{bc}^*$$

et pour cela séparer les parties réelles et les parties imaginaires ; on pose à cet effet :

$$\Delta = R + i\,I$$

$$\Gamma_{ac}\,\Gamma_{bc} = \mathcal{R}(\Gamma_{ac}\,\Gamma_{bc}) + i\,\mathcal{J}(\Gamma_{ac}\,\Gamma_{bc}) \ldots$$

On note alors :

$$P = \mathcal{R}(\Gamma_{ac}\,\Gamma_{bc}).R + \mathcal{J}(\Gamma_{ac}\,\Gamma_{bc}).I$$

et $$Q = \mathcal{R}(\Gamma_{ac}\,\Gamma_{ab}).R + \mathcal{J}(\Gamma_{ac}\,\Gamma_{ab}).I$$

Le système V.5(1) devient alors :

V.7

$$\begin{cases} \rho_a - \gamma_a \sigma_{aa} - (2|V|^2/|\Delta|^2)\,[P(\sigma_{aa} - \sigma_{bb}) + R|W|^2(\sigma_{bb} - \sigma_{cc})] = 0 \\ \rho_c - \gamma_c \sigma_{cc} - (2|W|^2/|\Delta|^2)\,[Q(\sigma_{bb} - \sigma_{cc}) + R|V|^2(\sigma_{aa} - \sigma_{bb})] = 0 \\ \rho_a + \rho_b + \rho_c - \gamma_a \sigma_{aa} - \gamma_b \sigma_{bb} - \gamma_c \sigma_{cc} = 0 \end{cases}$$

Ce système linéaire est résolu, lui aussi, par la méthode de Cramer. Si l'on condense encore les notations :

$$A = 2\,|V|^2\,P/|\Delta|^2$$

$$B = 2\,|W|^2\,Q/|\Delta|^2$$

$$C = 2\,|V|^2|W|^2\,R/|\Delta|^2$$

et d'autre part si

$$D = 1 + A(1/\gamma_a + 1/\gamma_b) + B(1/\gamma_b + 1/\gamma_c) - \frac{2}{\gamma_b}C + (AB-C^2)(1/\gamma_a + 1/\gamma_b + 1/\gamma_c$$

les populations des niveaux s'écrivent :

V.8

$$\begin{cases} \sigma_{aa} = \dfrac{\rho_a}{\gamma_a}\dfrac{1}{D}\left[1 + \dfrac{A}{\gamma_b}\left(1 + \dfrac{\rho_b}{\rho_a}\right) + \dfrac{B}{\gamma_b}\dfrac{\gamma_b+\gamma_c}{\gamma_c} - C\left(\dfrac{2}{\gamma_b} + \dfrac{1}{\gamma_b}\dfrac{\rho_b}{\rho_a} - \dfrac{1}{\gamma_c}\dfrac{\rho_c}{\rho_a}\right) + \dfrac{\rho_a+\rho_b+\rho_c}{\rho_a\gamma_b\gamma_c}(AB-C^2)\right. \\ \sigma_{cc} = \dfrac{\rho_c}{\gamma_c}\dfrac{1}{D}\left[1 + \dfrac{B}{\gamma_b}\left(1 + \dfrac{\rho_b}{\rho_c}\right) + \dfrac{A}{\gamma_b}\dfrac{\gamma_b+\gamma_a}{\gamma_a} - C\left(\dfrac{2}{\gamma_b} + \dfrac{1}{\gamma_b}\dfrac{\rho_b}{\rho_c} - \dfrac{1}{\gamma_a}\dfrac{\rho_a}{\rho_c}\right) + \dfrac{\rho_a+\rho_b+\rho_c}{\rho_c\gamma_a\gamma_b}(AB-C^2)\right. \\ \sigma_{bb} = \dfrac{\rho_b}{\gamma_b}\dfrac{1}{D}\left[1 + \dfrac{A}{\gamma_a}\left(1 + \dfrac{\rho_a}{\rho_b}\right) + \dfrac{B}{\gamma_c}\left(1 + \dfrac{\rho_c}{\rho_b}\right) - C\left(\dfrac{1}{\gamma_a}\dfrac{\rho_a}{\rho_b} + \dfrac{1}{\gamma_c}\dfrac{\rho_c}{\rho_b}\right) + \dfrac{\rho_a+\rho_b+\rho_c}{\rho_b\gamma_a\gamma_c}(AB-C^2)\right] \end{cases}$$

Les coefficients de cohérence σ_{ab} , σ_{bc} , σ_{ac} se déduisent alors en reportant les éléments de V.8 dans les équations V.6.

On connaît donc maintenant les populations des niveaux et les coefficients de cohérence. Il est possible alors de calculer l'intensité lumineuse émise

Toutefois, le calcul rigoureux précédent a conduit à des résultats dont la forme est singulièrement compacte. Une interprétation physique simple est impossible dans ce cas, mais peut être obtenue à partir d'une forme approchée des équations ci-dessus. C'est ce que nous faisons dans le paragraphe suivant.

2) Calculs approchés dans le cas d'une perturbation faible.

Nous nous limitons au cas où les énergies de couplage et les largeurs naturelles sont très petites devant les différences d'énergie $|E_b - E_c|$ et $|E_b - E_a|$.

Nous avons utilisé une notation qui ne conserve plus vraiment de rôles symétriques à a et c, mais elle est plus commode. Nous avons posé :

$$\Omega = E_b - E_a$$

$$\omega = E_c - E_a$$

Ainsi $|\Omega|$ est grand devant toutes les autres quantités ; nous avons donc effectué un développement limité de chaque expression, par rapport à Ω.

Le détail du développement est donné en appendice (Appendice C). Nous n'avons conservé que les termes d'ordre inférieur à 3 en $1/\Omega$.

Les populations des différents niveaux prennent alors la forme de sommes de termes plus simples. Par exemple :

$$\sigma_{aa} = (\sigma_{aa})_1 + (\sigma_{aa})_2 + (\sigma_{aa})_3 + (\sigma_{aa})_4$$

où chaque terme vaut :

V.9

$$\begin{cases} (\sigma_{aa})_1 = \rho_a/\gamma_a \\ (\sigma_{aa})_2 = -\left(\frac{\rho_a}{\gamma_a} - \frac{\rho_b}{\gamma_b}\right) \frac{\gamma_a+\gamma_b}{\gamma_a} \frac{|V|^2}{\Omega^2} \\ (\sigma_{aa})_3 = -\left(\frac{\rho_a}{\gamma_a} - \frac{\rho_c}{\gamma_c}\right) \frac{\gamma_a+\gamma_c}{\gamma_a} \frac{|V|^2|W|^2}{\Omega(\Omega-\omega)} \frac{1 + \omega(\gamma_a - \gamma_c)/\Omega(\gamma_a + \gamma_c)}{\left(\frac{\gamma_a+\gamma_c}{2}\right)^2 + \left(\omega - \frac{|W|^2 - |V|^2}{\Omega}\right)^2} \\ (\sigma_{aa})_4 = -\left(\frac{\rho_a}{\gamma_a} - \frac{\rho_b}{\gamma_b}\right) \frac{\gamma_b}{\gamma_a} \frac{|V|^2|W|^2}{\Omega(\Omega-\omega)} \frac{\omega/\Omega}{\left(\frac{\gamma_a+\gamma_c}{2}\right)^2 + \left(\omega - \frac{|W|^2 - |V|^2}{\Omega}\right)^2} \end{cases}$$

On obtient les expressions correspondantes pour σ_{cc} en échangeant a et c, $|V|^2$ et $|W|^2$, et Ω et $\Omega - \omega$.

σ_{bb} est tiré de la relation (V.7 (3))

$$\sigma_{aa}\,\gamma_a + \sigma_{bb}\,\gamma_b + \sigma_{cc}\,\gamma_c = \rho_a + \rho_b + \rho_c$$

qui signifie que la population de l'ensemble des trois niveaux est stationnaire : il se forme autant d'atomes excités par unité de temps qu'il s'en désexcite par émission spontanée.

3) Discussion des termes obtenus dans le cas d'une perturbation faible

a) - Le premier terme $(\sigma_{aa})_1$ représente la population du niveau a, en état de régime, en l'absence de perturbation.

b) - Le second terme $(\sigma_{aa})_2$ est obtenu par un calcul de perturbation au 1er ordre. Il décrit la transition entre les niveaux a et b et correspond, dans le champ H, à la fin de l'anticroisement (a,b). Expérimentalement il en résulte un fond continu lentement variable en fonction du champ magnétique, car $\Omega = E_b - E_a$ dépend de H.

c) - Le troisième terme (σ_{aa}) ne dépend que de la différence des populations entre les niveaux a et c. Il représente une transition entre a et c et est résonnant au voisinage de $H = H_0$ (c'est-à-dire $\omega = 0$) sur une région de largeur $(\gamma_a + \gamma_c)/2$. A cette approximation il n'y a pas d'élargissement mais il y a un déplacement de la résonance. En effet, cette dernière se produit lorsque $E_c - |W|^2/\Omega = E_a - |V|^2/\Omega$. En d'autres termes, l'anticroisement se produit à l'égalité des valeurs des énergies des niveaux a et c, telles qu'on peut les évaluer par un calcul de perturbation stationnaire au second ordre.

On peut rapprocher ce résultat de celui que l'on obtient lors de l'étude des transitions à 2 quanta ([58]).

$(\sigma_{aa})_3$ varie en fonction de H suivant une combinaison linéaire d'une courbe d'absorption et d'une courbe de dispersion.

Cette dernière contribution s'annule si les deux largeurs naturelles γ_a et γ_c sont égales.

D'autre part, à cause des variations de Ω et $\Omega - \omega$, en fonction de H, les intensités des effets dépendent lentement de H. Il en résulte une distorsion des courbes d'anticroisement.

d) - Le dernier terme (σ_{aa}) est lui aussi résonnant pour $\omega + \Delta\omega = 0$ $(\Delta\omega = (-|W|^2+|V|^2)/\Omega)$, lui aussi proportionnel aux forces de couplage $|V|^2/\Omega$ et $|W|^2/(\Omega-\omega)$, mais il dépend de la différence de populations entre les états a et b. Il introduit une cause supplémentaire de distorsion à la courbe d'anticroisement.

Tout ce qui vient d'être dit sur la population σ_{aa} est valable pour la population σ_{cc}.

L'expression de σ_{bb} est un peu différente :

$$\sigma_{bb} = \frac{\rho_b}{\gamma_b} + \left(\frac{\rho_a}{\gamma_a} - \frac{\rho_b}{\gamma_b}\right) \frac{\gamma_a + \gamma_b}{\gamma_b} \frac{|V|^2}{\Omega^2} + \left(\frac{\rho_c}{\gamma_c} - \frac{\rho_b}{\gamma_b}\right) \frac{\gamma_b + \gamma_c}{\gamma_b} \frac{|W|^2}{\Omega^2} +$$

V.10

$$+ \left(\frac{\rho_a}{\gamma_a} - \frac{\rho_c}{\gamma_c}\right) \frac{|V|^2}{\Omega} \frac{|W|^2}{\Omega - \omega} \frac{\omega/\Omega}{\left(\frac{\gamma_a + \gamma_c}{2}\right)^2 + (\omega + \Delta\omega)^2}$$

σ_{bb} est la somme de 4 termes qui sont respectivement $(\sigma_{bb})_1$, $(\sigma_{bb})_2$, $(\sigma_{bb})'_2$ et $(\sigma_{bb})_4$. Tout d'abord, on voit que

$$\gamma_b (\sigma_{bb})_2 = - \gamma_a (\sigma_{aa})_2 \quad \text{et} \quad \gamma_b (\sigma_{bb})'_2 = - \gamma_c (\sigma_{cc})_2$$

Ces derniers représentent les ailes des anticroisements à couplage direct (a,b) et (b,c). Au contraire, aucun terme ne correspond à $(\sigma_{aa})_3$ et $(\sigma_{cc})_3$, ce qui est normal car ceux-ci traduisent une transition entre a et c.

Cependant, il demeure un terme résonnant à l'anticroisement a,c même si les règles de sélection sont telles que seul le niveau b est excité. Ceci est peut-être le résultat le plus surprenant du calcul.

A l'approximation choisie pour les équations V.9 ou V.10, on met ainsi en évidence un déplacement de la résonance, et des distorsions ; quand on calcule la résonance par les équations rigoureuses on met en évidence en outre un élargissement et un effet de saturation aux grandes valeurs du champ électrique. L'étude de cet élargissement est l'objet du paragraphe suivant.

4) Calcul de l'élargissement

Il nous faut effectuer le développement limité en $1/\Omega$ à l'ordre suivant. Etant donnée la complexité des calculs, nous avons supposé pour simplifier que seul l'état a était excité. Nous avons cherché alors à mettre la population de l'état a sous la forme :

$$\sigma_{aa} - \rho_a/\gamma_a = \mathcal{N}/\mathcal{D}$$

où le numérateur $\mathcal{N}$, à cette précision, n'est pas résonnant (il est de l'ordre de Ω^2). $\mathcal{N}$ et $\mathcal{D}$ sont des fonctions de Ω, ω, $|V|^2$, $|W|^2$, γ. Le détail des calculs est reporté en appendice C'.

Le dénominateur $\mathcal{D}$ peut se mettre sous la forme

$$\mathcal{D} = \Omega^2(\Omega-\omega)^2 \left[1 + \frac{(\gamma_b+\gamma_c)^2}{4\Omega^2} + \frac{(\gamma_a+\gamma_c)^2}{4\Omega^2} + \frac{|V|^2}{\Omega^2}\left(1 + \frac{(\gamma_a+\gamma_b)^2}{\gamma_a\gamma_b}\right) + \frac{|W|^2}{\Omega^2}\left(1 + \frac{(\gamma_b+\gamma_c)^2}{\gamma_b\gamma_c}\right)\right] \times$$

$$\times \left[\left(\omega - \frac{|W|^2-|V|^2}{\Omega - \frac{\omega}{2}}\right)^2 + \left(\frac{\gamma_a+\gamma_c}{2}\right)\left(\frac{\gamma_a+\gamma_c}{2} + 2\frac{|V|^2|W|^2}{\Omega^2}\frac{\gamma_a+\gamma_c}{\gamma_a\gamma_c} + \gamma_b \frac{|V|^2+|W|^2}{\Omega^2} + \frac{\gamma_a-\gamma_c}{2}\frac{|W|^2-|V|^2}{\Omega^2}\right)\right]$$

Nous observons donc, dans ce dénominateur le produit de 4 facteurs. Les trois premiers augmentent à peu près comme $1 + \alpha|\vec{E}|^2$. Ils ont comme effet de diminuer l'intensité de la résonance. Mais cet effet n'est pas très important : le 4ème facteur met en évidence un déplacement, déjà calculé, et un élargissement qui comprend principalement deux termes, proportionnels respectivement à $|\vec{E}|^2$ et à $|\vec{E}|^4$. Ce terme en $|\vec{E}|^4$ est à rapprocher du terme d'élargissement observé lors des transitions à 2 quanta de J.M. WINTER ([58]). Le terme en $|\vec{E}|^2$ est plus inattendu, d'autant plus qu'il peut être négatif et produire alors un affinement.

Ces résultats ont été retrouvés d'autre part par T. DOHNALIK et J. DUPONT-ROC ([59]) qui ont repris l'étude de ce problème dans le formalisme de la résolvante.

5) Intensité de la lumière observable

L'intensité de la lumière émise à partir des trois sous-niveaux a, b et c, dans un petit angle solide dΩ autour de Oy, à la longueur d'onde des transitions considérées, avec la polarisation λ est proportionnelle à :

$$I \propto \sum_{\substack{k,\mu \\ i,j=a,b,c}} < k,\mu|\vec{\varepsilon}_\lambda.\vec{r}|i > \sigma_{ij} < j|\vec{\varepsilon}_\lambda.\vec{r}|k,\mu >$$

Mais ici, contrairement au cas précédent, les états a et c sont de même parité et il existe un état $|k,\mu>$ au moins auquel ils sont couplés par l'opérateur dipolaire électrique. Par exemple, pour un anticroisement S.D, les sous-niveaux sont reliés par transitions dipolaires électriques aux mêmes sous-niveaux $2^2P_{j,m_j}$.

L'observation peut être cohérente. La "cohérence" entre les niveaux a et c peut donc se manifester sur l'intensité lumineuse émise I. Dans ce cas, on peut écrire :

$$I \propto f_a^\lambda \gamma_a \sigma_{aa} + f_b^\lambda \gamma_b \sigma_{bb} + f_c^\lambda \gamma_c \sigma_{cc} + \sum_{k,\mu} < k,\mu|\vec{\varepsilon}_\lambda.\vec{r}|a >< c|\vec{\varepsilon}_\lambda.\vec{r}|k,\mu>\sigma_{ac} + cc$$

L'effet d'anticroisement, comme nous l'avons déjà vu, se manifeste sur les populations. Nous allons voir comment il se traduit sur la cohérence entre les niveaux a et c, c'est-à-dire sur σ_{ac}.

6) Etude de la cohérence induite par la perturbation électrique entre les niveaux a et c

a) Conditions d'observation

Le produit des éléments de matrice :

$$< k,\mu|\vec{\varepsilon}_\lambda.\vec{r}|a >< c|\vec{\varepsilon}_\lambda.\vec{r}|k,\mu >$$

est réel (voir chapitre III) lorsque la polarisation de détection est parallèle à Oz (I_π) ou parallèle à Ox (I_σ). Les effets de cohérence observables sur l'intensité lumineuse sont donc alors proportionnels à :

$$S = \sigma_{ac} + \sigma_{ac}^{\star}$$

L'équation V.6(2) nous permet de calculer σ_{ac} à partir des expressions des populations. On voit que σ_{ac} est proportionnel à la quantité complexe VW. Au contraire, les populations ne contiennent que les termes réels $|V|^2$ et $|W|^2$.

Nous avons vu dans le chapitre III que les éléments V et W dépendent de l'orientation du champ électrique par rapport aux axes de quantification.

Par exemple, les éléments de matrice dipolaire électrique entre deux niveaux tels que $\Delta m_j = +1$ sont du type:

$$U = U_0 \sin\theta \, e^{i\varphi}$$

où U_0 est réel.

C'est pour cela que les éléments V et W sont en général complexes, et leur produit peut s'écrire :

$$VW = \mathcal{R}(VW) + i\,\mathcal{I}(VW)$$

et on peut mettre S sous la forme :

$$S = \mathcal{R}(VW).S_1 + \mathcal{I}(VW).S_2$$

b) Interprétation

La forme générale des coefficients S_1 et S_2 est trop compliquée pour qu'on puisse en dégager une interprétation physique simple. Nous allons donc, ici encore, nous placer dans le cas d'une perturbation

faible (c'est-à-dire:Ω est grand devant les largeurs et les termes de perturbation électrique $|V|$ et $|W|$). Les coefficients S_1 et S_2 sont alors de la forme :

$$S_1 = (S_1)_1 + (S_1)_2$$

avec

$$(S_1)_1 = \frac{1}{\Omega - \frac{\omega}{2}} \frac{\omega - \frac{|W|^2 - |V|^2}{\Omega} - \frac{\gamma_a - \gamma_c}{8\Omega}}{(\omega - \frac{|W|^2 - |V|^2}{\Omega})^2 + (\frac{\gamma_a + \gamma_c}{2})^2} (\frac{\rho_a}{\gamma_a} - \frac{\rho_c}{\gamma_c})$$

$$(S_1)_2 = \frac{1}{2\Omega(\Omega - \omega)} [\frac{\gamma_b (\frac{\gamma_a + \gamma_c}{2})}{(\omega - \frac{|W|^2 - |V|^2}{\Omega})^2 + (\frac{\gamma_a + \gamma_c}{2})^2} + 1] (2\frac{\rho_b}{\gamma_b} - \frac{\rho_c}{\gamma_c} - \frac{\rho_a}{\gamma_a})$$

$$(S_2)_1 = \frac{1}{\Omega - \frac{\omega}{2}} \frac{\frac{\gamma_a + \gamma_c}{2} + \frac{3\omega}{2\Omega} \frac{\gamma_a - \gamma_c}{2}}{(\omega + \frac{|W|^2 - |V|^2}{\Omega})^2 + (\frac{\gamma_a + \gamma_c}{2})^2} (\frac{\rho_a}{\gamma_a} - \frac{\rho_c}{\gamma_c})$$

$$(S_2)_2 = \frac{1}{2\Omega(\Omega - \omega)} \frac{\gamma_b \omega}{(\omega - \frac{|W|^2 - |V|^2}{\Omega})^2 + (\frac{\gamma_a + \gamma_c}{2})^2} (2\frac{\rho_b}{\gamma_b} - \frac{\rho_a}{\gamma_a} - \frac{\rho_c}{\gamma_c})$$

c) Conséquences sur les courbes d'anticroisement

On remarque tout d'abord que les termes en S, de l'ordre de $VW/\Omega\gamma \propto |\vec{E}|^2$ sont beaucoup plus grands que les termes d'anticroisements $(\sigma_{aa})_3$ et $(\sigma_{cc})_3$ précédemment calculés qui sont, eux, de l'ordre de $|V|^2|W|^2/\Omega(\Omega-\omega)\gamma^2$ ($\propto |\vec{E}|^4$). On s'attend à ce que les termes de cohérence donnent une contribution prépondérante dans l'intensité lumineuse.

Si nous avons cependant discuté l'effet des populations sur les anticroisements, c'est que -nous le verrons plus loin- cet effet, dû à la cohérence, est en général inobservable dans nos conditions expérimentales.

L'effet de cohérence a les mêmes caractéristiques que celui des populations.

aa - C'est un effet résonnant en un point déplacé par rapport au point de croisement, de la même quantité que dans le cas des populations. En effet, les dénominateurs ont une valeur minimale pour :

$$\omega = E_c - E_a = \frac{|W|^2 - |V|^2}{\Omega}$$

bb - A cette précision du calcul, la largeur de la résonance est égale à la largeur moyenne des niveaux a et c.

cc - Son amplitude est proportionnelle à la différence des populations des états a et c.

dd - Les termes $(S_1)_2$ et $(S_2)_2$ introduisent des distorsions aux courbes de résonance qui s'ajoutent à celles liées aux termes en $(\gamma_a - \gamma_c)/\Omega$ de $(S_1)_1$ et $(S_2)_1$.

ee - D'autre part, comme tous les effets cohérents, il n'est pas isotrope dans l'espace : il n'est observable que dans certaines directions, avec des polarisations données. La forme de la courbe de résonance dépend de cette direction d'observation. Bien sûr, une intégration de l'effet dans tout l'espace et pour toutes les polarisations donne un résultat nul.

En résumé, l'observation d'un anticroisement a dans les deux cas : étude des effets de cohérence ou des populations, les mêmes inconvénients :

- déplacement des résonances
- distorsion des courbes.

d) Cas particulier des anticroisements $\Delta m_j = \pm 2$

Dans ce cas, nous avons vu au chapitre III, que :

$$VW = V_0 W_0 \sin^2 \theta \, e^{\pm 2i\varphi}$$

Si les anticroisements sont observables dans la direction Oy, leur intensité est maximale en détection σ ($\sigma^+ + \sigma^-$ cohérent).

La forme des courbes de résonance dépend de l'orientation φ ($\varphi = (\overrightarrow{Ox}, \vec{E})$) du champ électrique autour de Oz.

- si $\varphi = 0$, le produit VW est réel, la courbe a une forme de dispersion (on néglige alors les petites distorsions citées précédemment) et a pour amplitude A. Ce cas a été observé expérimentalement sur He^+ par BEYER et KLEINPOPPEN ([60]).

- si $\varphi = \pi/4$, le produit VW est imaginaire pur, la courbe a une forme d'absorption de même amplitude A.

- si $\varphi = \pi/2$, le produit VW est réel ; la courbe a de nouveau une forme de dispersion, mais son amplitude est - A.

- si $\varphi = 3\pi/4$, on observe de même une courbe d'absorption de signe opposé à celle qu'on obtient pour $\varphi = \pi/4$; $A(\frac{3\pi}{4}) = - A(\pi/4)$

Pour les valeurs intermédiaires de l'angle φ, les courbes observées sont une superposition de courbes d'absorption et de dispersion.

e) Cas des anticroisements tels que $\Delta m_j = 0$

Le produit VW reste réel quelle que soit l'orientation de $\vec{E}$ dans tout l'espace et pour toutes les polarisations, la courbe de résonance a la forme d'une courbe d'absorption mais son amplitude varie avec l'angle Θ de l'axe Oz avec le vecteur polarisation de la lumière observée. Ici encore, en sommant sur les polarisations, l'effet s'annule.

Dans toute cette étude d'anticroisement, on a supposé que l'on pouvait réduire les niveaux du système à deux ou trois. Nous nous proposons pour terminer de voir quelles corrections il faut apporter à l'étude précédente, pour tenir compte des autres niveaux.

D - ETUDE DE L'INFLUENCE DE TOUS LES AUTRES NIVEAUX

Il existe en général des niveaux i qui sont couplés à l'un des trois niveaux a, b ou c. Ne couplant pas a et c, ils ne participent pas à l'effet d'anticroisement, mais ils modifient les fonctions d'onde et les énergies des niveaux a, b et c. Les changements de fonctions d'onde ne contribuent qu'à diminuer l'amplitude des anticroisements ; nous n'avons pas pu mettre en évidence une telle diminution parce que les mesures d'amplitudes n'ont pas une précision assez grande. Aussi avons-nous négligé les modifications des fonctions d'onde de a, b et c, dues aux niveaux i. Au contraire, les énergies des niveaux a, b et c déterminent la position des anticroisements qui peut être mesurée à 10^{-4} près. Il était donc important de calculer les déplacements des niveaux a, b et c au voisinage du point d'anticroisement, sous l'influence de tous les niveaux i ($i \neq a, b$ ou c). Dans le cas des anticroisements à couplage indirect, l'effet de déplacement du niveau b est négligeable : il contribue, comme les effets sur les fonctions d'onde, à modifier l'amplitude de la résonance et non sa position.

1) Principe du calcul des déplacements

Un calcul très classique de perturbation stationnaire nous conduit à remplacer l'énergie E_a du niveau non perturbé par l'énergie $\overline{E}_a$ telle que :

$$\overline{E}_a = E_a + \sum_i \frac{|< a|\mathcal{H}_E|i >|^2}{E_a - E_i}$$

Il en est de même, bien sûr, pour le niveau b ou c.

Pour calculer ces déplacements, nous avons besoin de connaître les énergies E_i , les états $|i>$, et les éléments de matrice $< a|\mathcal{H}_E|i >$ pour tous les niveaux i, au voisinage des points d'anticroisement.

Les niveaux i sont suffisamment éloignés du niveau a, b, ou c auquel ils sont couplés, ainsi le calcul de perturbation a un sens. D'autre part,

la contribution de la structure hyperfine aux écarts d'énergie est négligeable.

Le hamiltonien $\mathcal{H}_0(H_0)$ (chapitre II § A), (hamiltonien sans la structure hyperfine et sans le moment anormal de l'électron), dans la représentation des états $|(s\ \ell)\ j\ m_j>$, se décompose en sous-matrices 1×1 et 2×2, étiquetées par une valeur de m_j donnée.

Le calcul des énergies et des fonctions d'onde est alors immédiat ; comme dans le chapitre II, il s'agit de diagonaliser des matrices 1×1 ou 2×2 pour la valeur H_0.

Ces calculs ont été faits, de manière systématique, sur ordinateur.

2) Les résultats numériques

Les éléments de matrices $< a|\mathcal{H}_E|i >$ dépendent de la direction du champ électrique. Dans les conditions expérimentales, le champ électrique responsable des anticroisements est le champ motionnel $E_\perp$, transversal par rapport à $\vec{H}$ ($\theta = \pi/2$), mais le champ électrique de charge d'espace $E_{/\!/}$, sensiblement longitudinal ($\theta = 0$) peut aussi déplacer les niveaux (nous verrons par la suite que ce champ électrique est en général négligeable).

Les déplacements des niveaux d'énergie s'expriment donc en fonction de $|E_\perp|^2$ et $|E_{/\!/}|^2$. Ils ont été calculés pour chaque anticroisement tant sur $n = 3$ que $n = 4$.

Les valeurs numériques sont reportées en appendice D.

Nous avons observé des champs électriques transversaux de 10 V/cm, sur l'ensemble des deux croisements hyperfins de $n = 3$

$$(^2S, m_f = -1\ ,\ ^2D, m_f = -3) \text{ et } (^2S, m_f = 0\ ,\ ^2D, m_f = -2)$$

l'ordre de grandeur des déplacements obtenus est :

$$\left|(\bar{E}_a - \bar{E}_c) - (E_a - E_c)\right| \simeq 2\text{MHz}$$

Il en résulte un déplacement de 0,7 G sur la position de l'anticroisement, ce qui est un peu supérieur à l'imprécision de la mesure (± 0,3 G).

Pour les anticroisements analogues, sur n = 4, pour une vitesse semblable, soit un champ électrique de 4 V/cm (10 V/cm × $H_0(n=4)/H_0(n=3)$), le déplacement attendu est de 3,6 G, ce qui est très supérieur à l'imprécision de la mesure (± 0,2 G).

En conclusion, nous avons réussi à calculer complètement les variations d'intensité lumineuse attendues lors d'un anticroisement.

Pour achever ces prévisions théoriques, il reste à évaluer les vitesses relatives de formation des niveaux considérés et le champ électrique responsable des signaux d'anticroisement ; or ce champ électrique, *dans notre expérience, est le champ motionnel qui dépend de la vitesse de* l'atome :

$$\vec{E} = \vec{V} \wedge \vec{H} = \underset{\perp}{\vec{V}} \wedge \vec{H}$$

Nous allons voir maintenant quelles sont les conséquences de la répartition des vitesses, calculée dans le chapitre précédent, sur les signaux d'anticroisement.

E - CONSEQUENCES DE LA REPARTITION DE VITESSES SUR LES SIGNAUX

Les vitesses $\vec{V}$ *des atomes ne sont pas identiques, le champ* électrique subi varie d'un atome à l'autre. Le signal d'anticroisement que nous pouvons observer est la somme des signaux émis par chaque atome excité.

Faire la somme sur les atomes revient à faire la somme sur les vitesses en tenant compte des probabilités calculées dans le chapitre précédent.

Nous avons vu que la perturbation électrique n'intervient que par le module de ses éléments, sauf dans les termes liés aux cohérences : cohérence à l'excitation ou cohérence à la détection (cas des niveaux tels que $\Delta m_j = 2$) où la direction du champ électrique intervient.

1) Conséquence sur les effets de cohérence

Le champ électrique dépend de la vitesse transversale de l'atome considéré. Nous avons vu, dans le chapitre précédent, que cette vitesse transversale s'exprime simplement comme la résultante de deux vitesses :

$$\perp\vec{V} = \perp\vec{\vartheta}_{H_2} + \perp\vec{\vartheta}_{H^*}$$

Or ces deux vitesses ont une répartition isotrope autour de la direction Oz, commune au faisceau d'électrons et au champ magnétique, qui est un axe de révolution pour le système.

Si l'on appelle φ l'angle $(\vec{Ox}, \vec{E})$ (on remarque alors que l'angle du vecteur vitesse transversale avec Ox vaut : $(\vec{Ox}, \vec{V}) = \varphi + \pi/2$), le terme de couplage électrostatique peut se mettre sous la forme :

$$U = U_0 \, e^{\pm i\varphi}$$

où U_0 est réel (voir chapitre III). Les angles φ ont alors des valeurs également probables.

a) Cas de la cohérence à l'excitation (anticroisements à couplage direct).

Les variations d'intensité lumineuse liées à cet effet peuvent se mettre sous la forme :

$$\Delta I_c = \cos \varphi . f_1(U_0) + \sin \varphi . f_2(U_0)$$

On voit immédiatement que ce terme s'annule quand on somme sur tous les atomes.

b) Cas de la cohérence à la détection entre niveaux tels que $\Delta m_j = \pm 2$

Les variations d'intensité lumineuse liées à cet effet peuvent se mettre sous la forme :

$$\Delta I = \cos 2\varphi . f'_1(|V|, |W|) + \sin 2\varphi . f'_2(|V|, |W|)$$

Dans ce cas aussi, la somme sur tous les atomes donne un effet nul.

Il n'est pas possible, dans ces conditions, d'observer ces phénomènes de cohérence. Mais il est un cas où ce terme ne s'annule pas.

c) Cas de la cohérence à la détection, entre niveaux tels que $\Delta m_j = 0$ (anticroisement à couplage indirect). Dans ce cas, le produit V.W est de la forme :

$$V\,W = V_0\, e^{-i\varphi} . W_0\, e^{+i\varphi} = V_0\, W_0$$

et les variations d'intensité lumineuse ne dépendent alors que de $|\vec{E}|^2$, pour une direction d'observation donnée. Les contributions de tous les atomes ne s'annulent pas. Un tel effet de cohérence est théoriquement observable. Son calcul ne faisant intervenir que $|\vec{E}|^2$ n'est pas différent de celui des effets de populations. Ils seront donc traités ensemble.

2) Conséquence sur les effets de population

Ces signaux d'anticroisement ne dépendent que de $|V|^2$ et $|W|^2$, V et W étant les termes du hamiltonien de perturbation électrique. $|V|^2$ et $|W|^2$ sont proportionnels à $|\vec{E}|^2$ donc, bien sûr, à $|_{\perp}V|^2$.

Le signal d'anticroisement, dû à un atome, est une fonction de ce module au carré :

$$i\left(\left|\vec{V}_{\perp}\right|^2\right)$$

Le signal global dû à l'ensemble des atomes est :

$$I = \Sigma\, i\left(\left|\vec{V}_{\perp}\right|^2\right)$$

soit, en tenant compte du §D,2,c :

$$I = \int\cdots\int i\left(\left|\vec{V}_{\perp}\right|^2\right) \cdot \rho(\theta_1,\varphi_1)\,\rho(v,\theta_2,\varphi_2)\,dv\,d\theta_1\,d\theta_2\,d\varphi_1\,d\varphi_3$$

où, d'après l'équation V.7

$$\left|\vec{V}_{\perp}\right|^2 = \left|\vec{\vartheta}_{H^\star}\right|^2 \sin^2\theta_1 + v^2 \sin\theta_2 + 2v\left|\vec{\vartheta}_{H^\star}\right| \sin\theta_1 \sin\theta_2 \cos(\varphi_1-\varphi_2)$$

On remarque que la double intégrale sur φ_1 et φ_2 se ramène à une seule intégrale sur $\Phi = \varphi_1 - \varphi_2$.

Le signal d'anticroisement est donc obtenu, pour chaque valeur du champ magnétique, par une intégrale quadruple (sur v, θ_1, θ_2 et Φ).

Ces intégrales ne s'expriment pas à partir de fonctions simples. Les calculs ont été faits numériquement pour chaque anticroisement.

L'effet lié à la vitesse thermique v est suffisamment faible pour pouvoir être négligé dans une première approximation. Il ne reste alors qu'une intégrale. On économise considérablement le temps de calcul.

C H A P I T R E VI

DISPOSITIF EXPERIMENTAL

Le dispositif expérimental est très classique. Il est largement inspiré de montages précédemment décrits [50,61]. Nous allons simplement en rappeler les différents éléments.

Il se compose principalement d'une cellule à excitation électronique, placée dans un champ magnétique, et d'un ensemble dit de détection qui permet l'étude de la lumière émise par la cellule.

A - LA CELLULE A EXCITATION ELECTRONIQUE

Les premières cellules contenaient des canons à électrons du même type que ceux qui avaient été utilisés par J.P. DESCOUBES pour l'excitation de l'hélium [50]. Mais aux tensions auxquelles il fallait les utiliser, la cellule contenait plus d'ions positifs que dans le cas de l'hélium; le débit électronique était plus fort, et les électrodes se trouvaient portées au rouge.

Nous avons alors, avec la collaboration de M. HAI (de la C.I.F.T.E.), mis au point un système démontable fonctionnant en vide dynamique sur un banc de pompage, pour nous permettre d'essayer des géométries différentes.

1) Description

La configuration adoptée pour la cellule est celle d'une tétrode à électrodes planes et parallèles (voir Fig. IV), et plus précisément celle d'un tube de puissance à faisceaux dirigés [62].

La cathode est une cathode à oxydes, à chauffage indirect, de grande surface (6 × 32 mm) et de forte puissance (élément du tube 4Y75)

La première grille G_1 est constituée par des fils de 1/10 mm, tendus tous les 2 mm, dont le support entoure complètement la cathode. Elle est distante de 1 mm à 1,5 mm de cette dernière.

La deuxième grille G_2 est constituée de fils de 1/10 mm, tendus tous les mm, parallèles à ceux de la première et à une distance de 1 à 1,5 mm de G_1. Afin d'obtenir un faisceau d'électrons bien collimaté, un fil sur deux de G_2 est situé "dans l'ombre" d'un fil de G_1 (voir Fig. IV-a). Les fils de G_2 sont, eux aussi, soudés à un écran d'assez grandes dimensions qui entoure complètement le premier écran que constitue le support de G_1. On élimine ainsi, grâce à eux, la lumière émise par la cathode et les pièces chaudes.

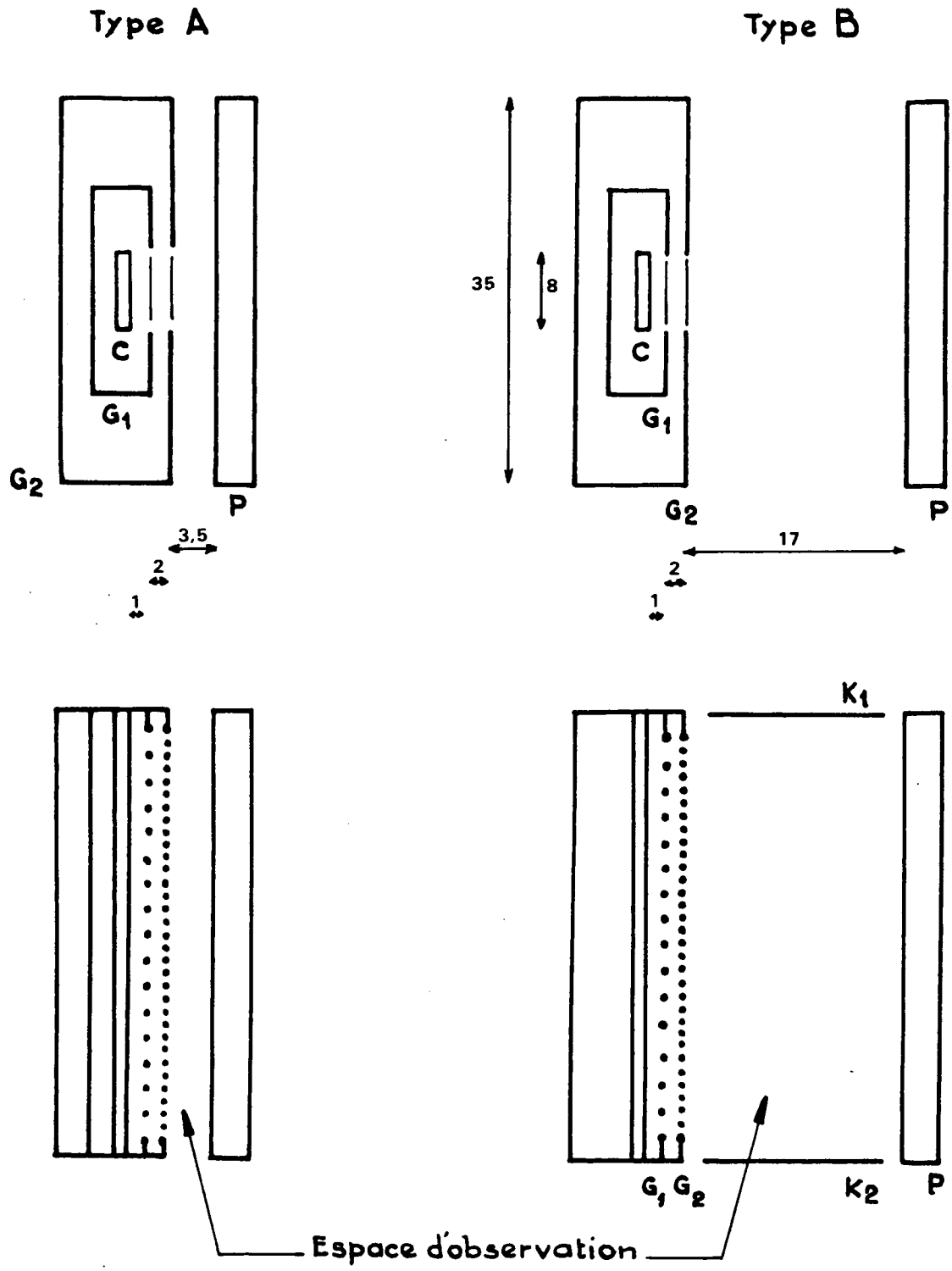
Le collecteur d'électrons a été, lui aussi, choisi assez grand, pour pouvoir dissiper de la chaleur. Dans les cellules les plus simples (type A), sa distance à la deuxième grille est de 3 à 4 mm. Dans celles, destinées à l'étude des actions de champs électriques transversaux (type B), il se trouve éloigné de 17 mm de G_2. On peut ainsi placer perpendiculairement à ces électrodes deux petites électrodes K_1 et K_2 distantes de 30 mm et de dimensions 14 × 25 mm (voir Fig. IV-b).

Nous avons d'abord essayé de réaliser ces cellules en tantale, car ce métal est très facile à souder par points ; cependant il adsorbe l'hydrogène ([63]). Nous avions pensé qu'il suffisait alors de saturer les électrodes en H_2. En fait, la grande quantité d'hydrogène et la longue durée nécessaires à cette saturation nous ont obligé à utiliser des électrodes en molybdène malgré la difficulté de travailler ce métal.

Les dernières cellules ont été réalisées par M.HAI (de la C.I.F.T.E.), en inox 18/10.

3) Montage et formation

Ce canon à électrons, monté sur une embase de verre MO à 9 passages de molybdène (3 T 100 de la C.I.F.T.E.), est enfermé dans une ampoule en verre MO. Celle-ci est alors reliée à un système de vidage et de remplis-



echelle 2

Plan des cellules utilisées.

Fig: IV

sage (voir Fig. V), qui comprend :

a) une pompe à getter (capable de pomper l'hydrogène) isolée par un robinet à vide ,

b) une réserve d'hydrogène de 50C cm^3 sous quelques torrs dans une ampoule reliée à la cellule par un sas

c) une jauge de Pirani, pour estimer la pression d'hydrogène.

L'ensemble est alors relié à un banc de pompage, en vue de dégazage des électrodes et des parois, de la formation, et de l'activation de la cathode.

Le dégazage doit être particulièrement soigné, car il est, bien sûr, impossible d'utiliser des getters pour éliminer les gaz étrangers ; ils absorberaient nécessairement l'hydrogène.

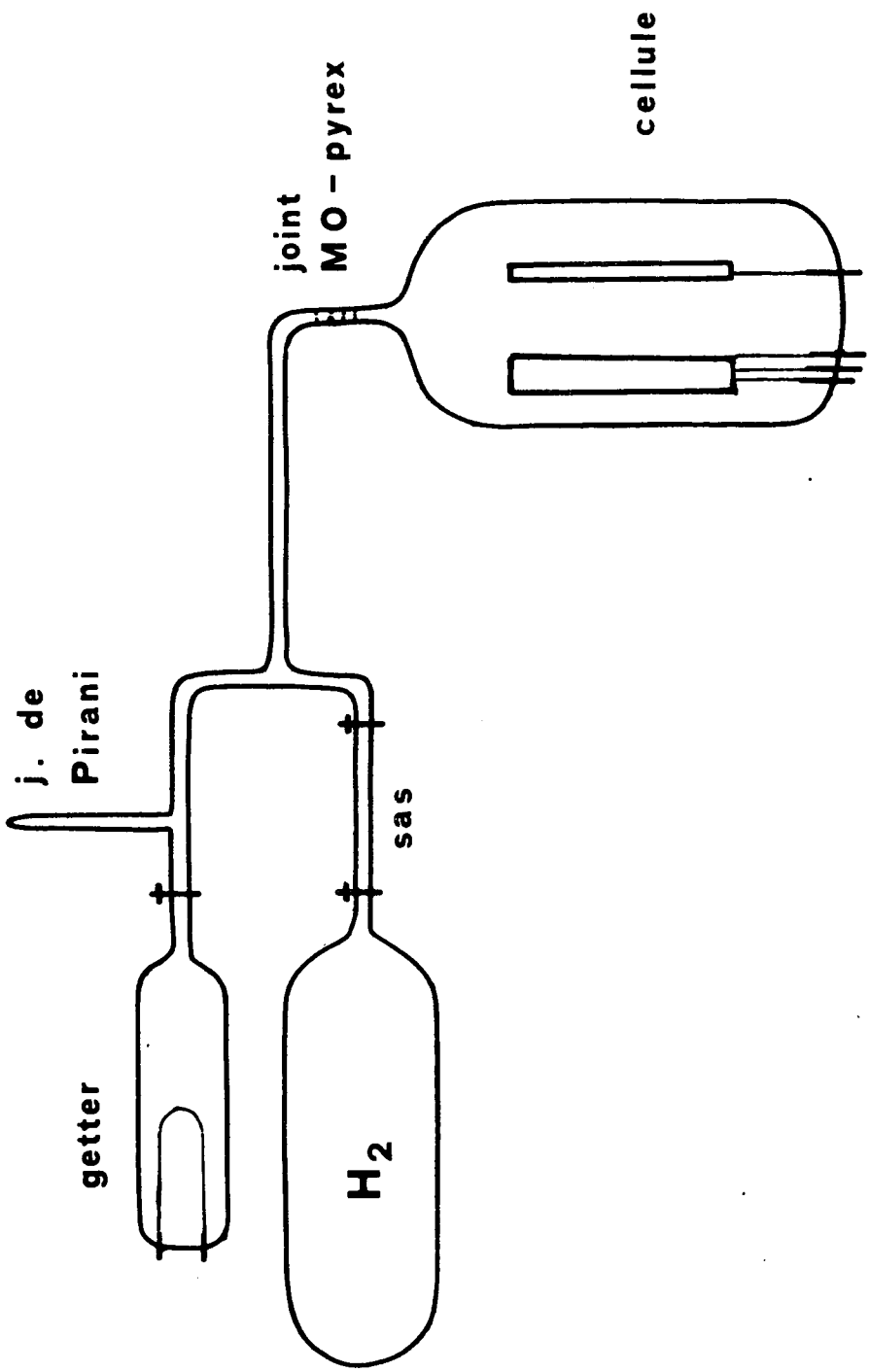
La cathode est enfin activée, sous vide dynamique puis en présence d'hydrogène sous quelques 10^{-2} torr. Lorsque le débit du tube est stabilisé, l'ensemble est désolidarisé du banc par scellement, et placé au centre de l'expérience.

3) Les domaines de pression

Le rapport signal sur bruit de l'expérience dépend de manière assez critique de la pression d'hydrogène. C'est pour cela que les cellules ont été munies d'un système permanent de vidage et de remplissage partiel.

Le domaine de pressions, le plus favorable, est situé autour de 10^{-3} torr. Dans ces conditions, la jauge de Pirani est peu utilisable. A cause des risques de contamination par la vapeur de mercure, nous n'avons pas voulu utiliser de jauge de Mac Leod.

Nous avons observé que la pression d'hydrogène dans la cellule diminue au cours du temps, d'autant plus vite que le tube fonctionne à plus



la cellule

Fig . V

forte tension. Le système de remplissage permet donc d'allonger considérablement la durée de vie d'une cellule.

4) Le montage électrique

a) La cathode est chauffée indirectement par un filament parcouru par un courant de 1,7 à 2 A, fourni par une alimentation Hémitechnique(100 V 5 A) stabilisée en courant à 10^{-4} près.

La cathode est à la masse générale.

b) La première grille G_1 est polarisée faiblement, positivement ou négativement par rapport à la cathode, par une alimentation Kepco (60 V, 100 mA) stabilisée à 10^{-4} près. En fait, le plus souvent, elle est au même potentiel que la cathode.

Cette faible polarisation permet de contrôler le débit d'électrons d'énergie donnée (celle-ci étant déterminée par la tension de G_2 et de l'anode).

c) La deuxième grille G_2 et l'anode, délimitant l'espace d'observation, sont maintenues à la même tension, afin de déterminer, entre elles, un espace sans champ électrique. Cette tension, variable de 0 à 300 V, est délivrée par une alimentation Kepco (300 V, 300 mA) stabilisée en tension à 10^{-4} près. Elle est mesurée par un voltmètre digital Rochar.

d) Les électrodes K_1 et K_2, parallèles au faisceau d'électrons sont maintenues, en général, au même potentiel que l'anode. Pour appliquer un champ électrique transversal dans l'espace d'observation (G_2/P), il suffit de les polariser. A cet effet, on utilise des alimentations Kepco (0-300 V). Il n'a, cependant, pas été possible, avec la géometrie actuelle, de mettre en évidence le moindre effet.

e) Ordre de grandeur des courants.

Pour des tensions telles que $V_P = V_{G_2} = V_{K_1} = V_{K_2} = 25$ volts et $V_{G_1} = 0$, on note des courants de l'ordre de 1 mA pour l'anode, ainsi que pour G_2, dans des cellules à grand espace d'observation. (Il est 10 fois plus grand pour les autres). La grille G_1 capte environ 0,5 mA.

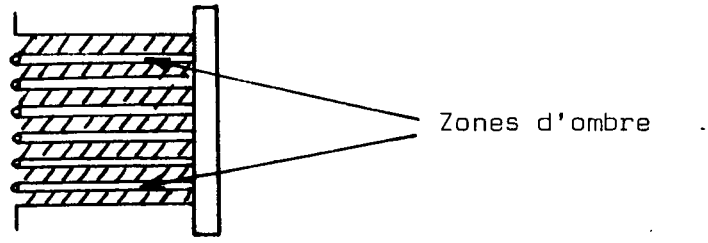
5) Les champs électriques parasites

Les résultats expérimentaux sont sensibles aux champs électriques; aussi, nous avons cherché à évaluer ceux que le canon à électrons crée en cours de fonctionnement. Ils peuvent être de deux sortes : les effets de bords et la charge d'espace.

a) Les effets de bords

Pour limiter les échauffements, les dimensions latérales de G_2 et de P (voir Fig. IV-b) ont été prises très grandes par rapport aux dimensions utiles (30 mm pour 6 mm utiles). Ainsi les effets de bords dans la direction correspondant à la largeur de la cathode sont rendus très faibles.

Dans la direction correspondant à la longueur de la cathode, les électrodes dépassent moins largement les parties utiles. Cependant, nous pouvons là encore négliger ces effets : les trajectoires électroniques sont rendues visibles par la lumière émise par l'hydrogène excité, on voit ainsi très nettement des régions obscures qui correspondent à "l'ombre" des fils de grille. Or un champ électrique transversal de 1V/cm dévierait de 1,5 mm au niveau de la plaque des électrons de 20 eV d'énergie. La dimension des fils de grille est bien inférieure.



Les effets de bords peuvent donc être négligés.

b) La charge d'espace.

Si les effets de bords donnent naissance à des champs électriques transversaux (par rapport au faisceau d'électrons), la charge d'espace introduit un champ électrique longitudinal. (*)

Nous pouvons en calculer une limite supérieure, en négligeant l'influence des ions H_2^+ et H^+.

(*) Elle donne également naissance à des effets de bords. Le champ électrique transversal associé est faible (<<1 V/cm), nous l'avons négligé.

Ce calcul est classique ([62]). Comme les effets de bords sont négligés, le problème se ramène à la recherche de la variation du potentiel V, le long de l'axe Oz, parallèle au faisceau d'électrons.

Ce potentiel obéit aux lois suivantes :

- loi de Poisson $$\frac{d^2V(z)}{dz^2} = -\frac{\rho(x)}{\varepsilon_0}$$

  où ρ est la densité de charge ; celle-ci est liée à la densité de courant J par $J = \rho(z)\, v(z)$ où v est la vitesse des électrons

- la loi de conservation de l'énergie

$$\frac{1}{2} m\, v(z)^2 = e\, V(z)$$

Si l'on résout le système, on trouve une équation donnant l'expression de V(z) en fonction de z, de la tension de la grille G_2, de celle de l'anode, et de la densité de courant J qui traverse la grille.

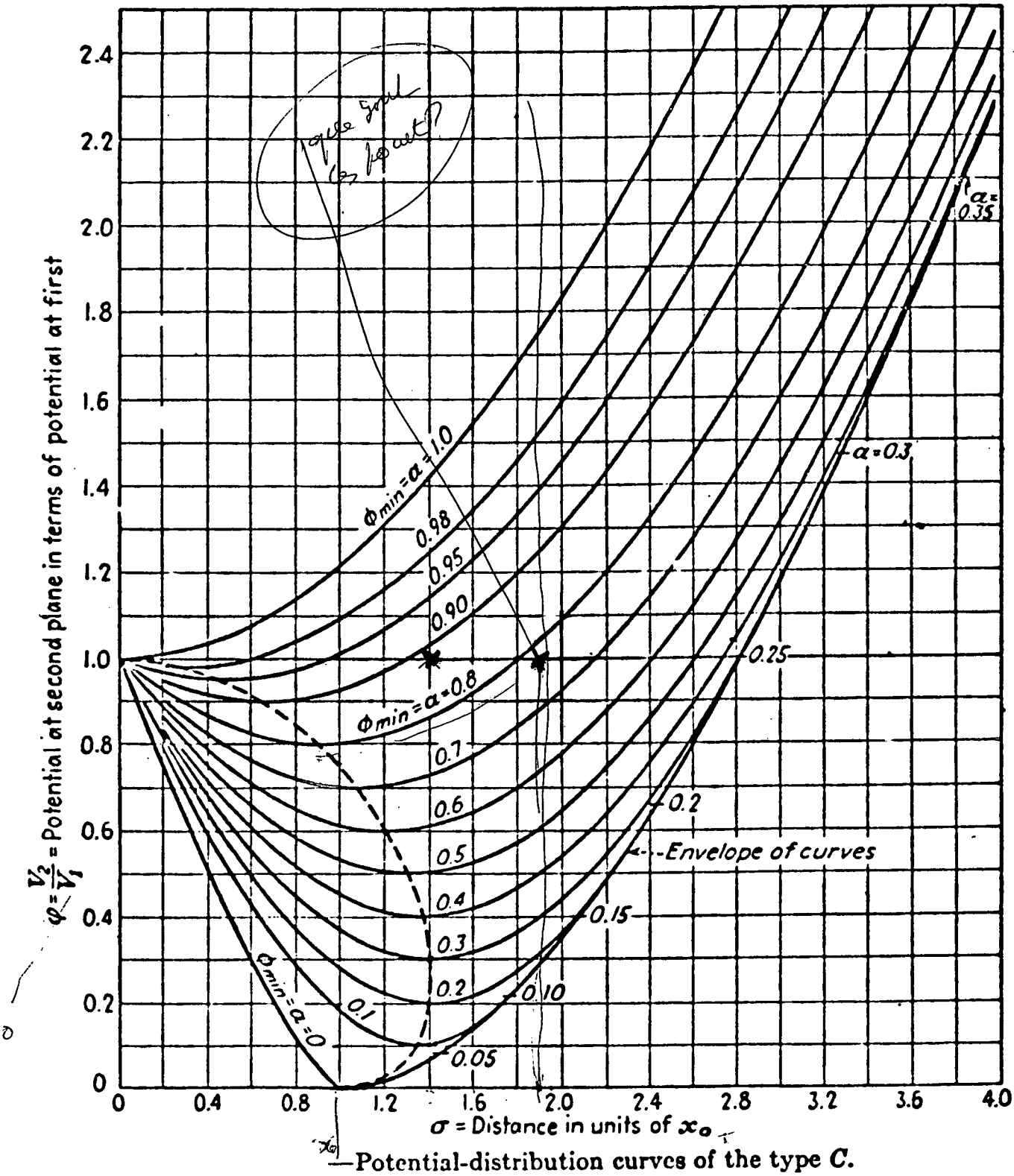
La Fig. VI, extraite de ([62]), représente ces variations en fonction de:

$$x_0 = \frac{V_G^{3/4}}{J^{1/2}} \cdot \frac{2}{3} \varepsilon_0^{1/2} \left(\frac{m}{2e}\right)^{-1/4}$$

Numériquement, pour $V_G = V_P = 30$ V, avec un courant anodique de 1 mA, soit $J \sim 0{,}5$ mA/cm^2, le creux de potentiel est de 6 volts environ ($x_0 \simeq 9$ mm ; $\sigma_P \simeq 1{,}9$).

Le champ électrique correspondant est, bien sûr, nul au centre (minimum de potentiel), mais est important près des électrodes ($\simeq 13$ V/cm), du moins pour les cellules à grand espace d'observation (type B). Pour les cellules de type A, un courant de 10 mA (soit une densité de courant de 5 mA/cm^2) fait naître un creux de potentiel de $\lesssim 3$ volts environ ($x_0 \simeq 2{,}8$ mm ; $\sigma_P \simeq 1{,}4$).

Il faut bien noter cependant, que la présence d'ion H_2^+ et H^+ ne peut que diminuer la charge d'espace, donc le champ électrique qui en résulte.



—Potential-distribution curves of the type *C*.

Fig. VI

Expérimentalement, on trouve que le champ de charge d'espace est très inférieur aux valeurs calculées. Comme il est attendu, il est plus important pour les cellules de type A que pour celles de type B. De plus on observe, pour les premières, tout l'espace entre G_2 et P, y compris les régions près des électrodes où le champ est fort, tandis que pour celles de type B, on se limite au centre par un diaphragme.

On peut remarquer, d'autre part, que le champ magnétique axial tend à diminuer cette charge d'espace ([64]).

B - LE CHAMP MAGNETIQUE

Nous avons réalisé deux séries d'expériences, la première en champs magnétiques faibles (0-700 G) avec des bobines de Helmholtz, la seconde en champs magnétiques plus forts (300-5 000 G), grâce à un petit électro-aimant.

1) Les bobines de Helmholtz

a) Description.

Ces bobines, fabriquées par la S.F.M.E., n'ont rien de bobines minces : chacune d'elles a une épaisseur de 23 cm et est constituée d'enroulements dont le diamètre est compris entre 50 et 90 cm. Leur distance moyenne est de 38 cm, ce qui laisse pour l'observation transversale un espace étroit de 13 cm.

Les enroulements, montés en série, ont une résistance de 0,25 Ω; ils sont réalisés à l'aide de tubes de cuivre. Le refroidissement est assuré par une circulation d'eau à l'intérieur de ces tubes.

Le champ magnétique maximum est de 700 G pour 170 A de courant magnétisant, soit une puissance de 7 kW. Ce courant est fourni par une alimentation Varian (V 2503) stabilisée en courant à 10^{-6} près, balayable lentement.

La position relative des deux enroulements a été déterminée de telle manière que l'inhomogénéité du champ magnétique soit inférieure à 10^{-5} dans un cube de 4 cm d'arête, plus grand que l'espace utile de la cellule. Le réglage a été effectué grâce à une résonance de protons.

b) La résonance de protons.

Nous avons réalisé un système de résonance de protons, à fréquence continuement variable, permettant de mesurer des champs de 100 à 700 G, avec une précision supérieure à 10^{-5}. Nous avons adapté pour cela, le système utilisé par B. CAGNAC [65] conservant le principe du pont en double T de SOUTIF[66] (voir Fig. VII), mais en utilisant des transistors pour les amplificateurs et les détecteurs (Fig. VIII). La source de fréquence est un synthétiseur Schlumberger stable à 10^{-8} et dont la fréquence est affichée à 0.1 Hz près.

La gamme de champ magnétique est couverte par seulement trois sondes (700-380 ; 500-250 ; 320-100 G). Elles sont constituées par des enroulements bobinés autour de petits récipients cylindriques en téflon, de 6 mm de diamètre et de 15 mm de long, contenant une solution de nitrate ferrique à Fe^{+++}/300 par litre.

Les mesures de fréquence sont corrigées de l'effet dû au décentrage de la sonde par rapport à la zone d'homogénéité.

c) Mesure du courant.

Ce système de résonance de protons permet de mesurer un champ magnétique par valeurs discrètes. Or, dans toutes nos mesures, le champ magnétique est balayé lentement. Les courbes d'anticroisement sont des courbes représentant une variation d'intensité lumineuse en fonction du champ magnétique. Il est donc agréable de disposer d'une tension proportionnelle à ce champ (qui est envoyée sur la voie X d'un enregistreur XY).

Pour cela, nous avons placé, en série avec les bobines de Helmholtz, une résistance de très faible valeur ($\simeq 2.10^{-4}\Omega$), constituée par des barreaux de manganine dont la résistivité varie peu avec la température.

La tension aux bornes de cette résistance est très faible (32 mV pour un champ de 700 G). On la mesure en lui opposant une ddp fournie par un étalon de tension (PAR modèle PPMS1), on atteint une précision de 1 µV.

Mais cette mesure peut être faussée par les f.é.m. parasites, de contact ou d'origine thermoélectrique, dont les valeurs sont constantes au cours de chaque balayage de courant magnétisant. Pour éliminer leur effet, à chaque balayage, nous mesurons le champ magnétique pour une valeur donnée du courant, par le système de résonance de protons. L'erreur de mesure du champ magnétique dans ces conditions peut être inférieure à 10^{-5}.

d) Compensation des champs magnétiques parasites.

Grâce à trois paires de bobines de Helmholtz auxiliaires, comprenant chacune 3 ou 4 enroulements, placées à l'intérieur des bobines principales soit parallèlement, soit perpendiculairement à leur axe, nous avons compensé le champ magnétique terrestre ainsi que ceux créés par les expérimentateurs voisins à mieux que le mG près.

Un des enroulements des bobines auxiliaires, de même axe que les bobines donnant le champ directeur, est utilisé pour créer un petit champ magnétique alternatif qui balaye la résonance de protons.

2) L'électroaimant

a) Description.

C'est un électroaimant Drusch (type EAF 16H) de six pouces (15 cm), et de 60 mm d'entrefer. Ses pôles ont été réalisés de façon que l'inhomogénéité soit inférieure à 10^{-5} pour 2 000 G, dans l'espace de mesure, soit un cube de 30 mm de côté.

Cet aimant, de résistance 0,5 Ω, est alimenté par une alimentation Varian (V 2503) du même type que celle décrite plus haut.

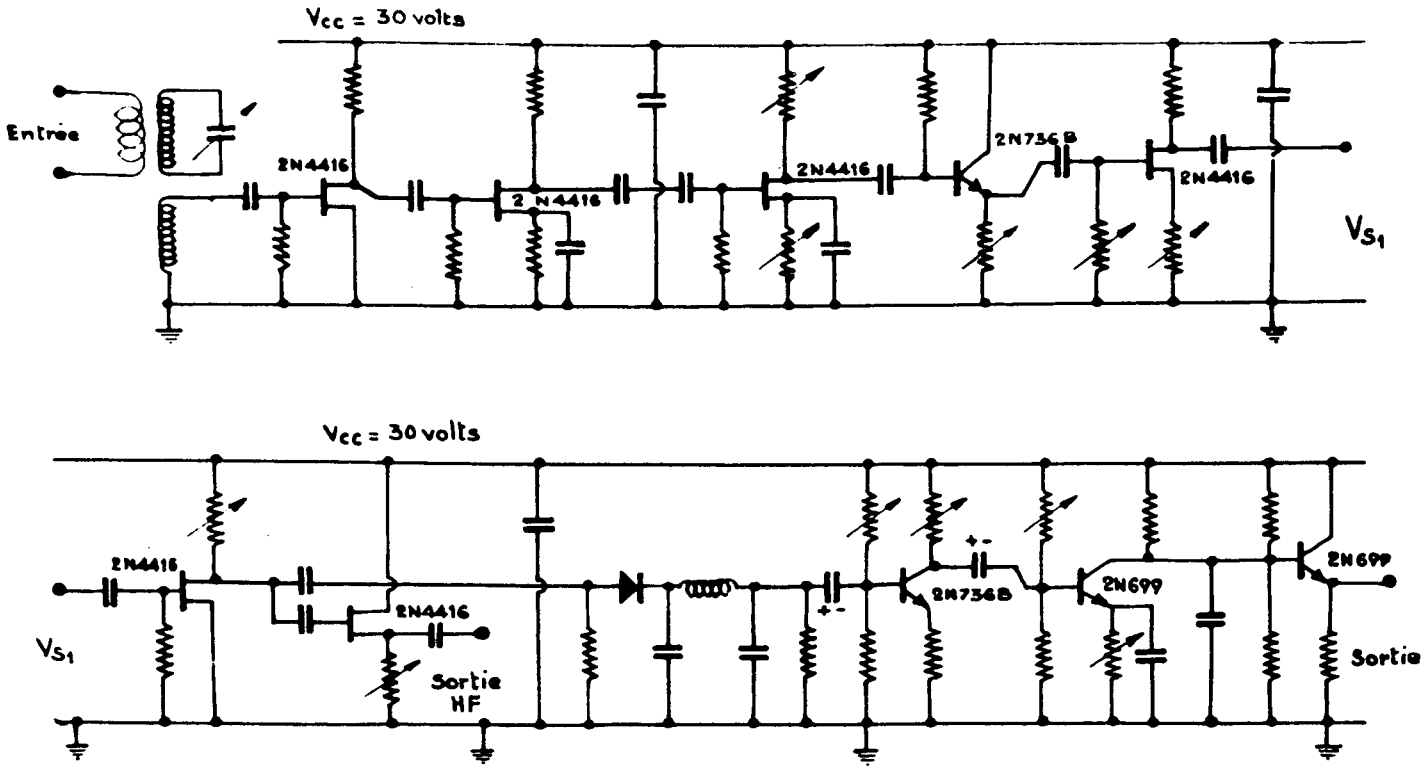
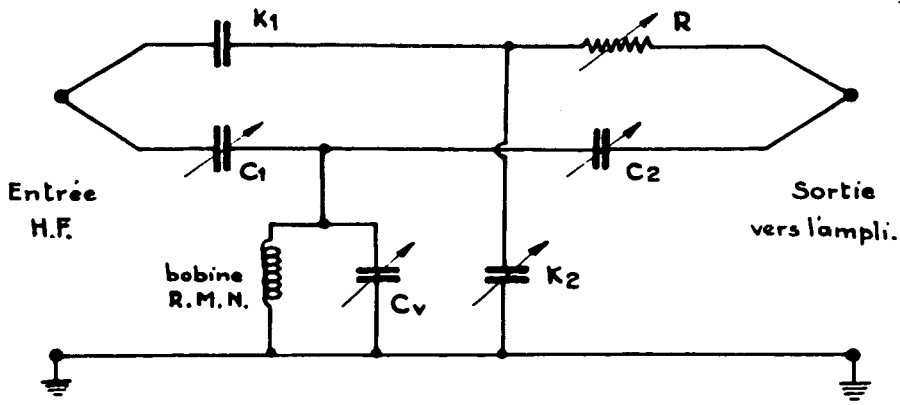


Schéma electronique de la R.M.N.

Fig: VIII



Pont de la R.M.N.

Fig: VII

b) Mesure du champ.

Comme dans le dispositif précédent, un système de résonance de protons nous permet de mesurer des valeurs discrètes du champ magnétique.

Le système de résonance de protons est celui d'un magnétomètre A.E.G., il permet de mesurer à 10^{-5} près des champs compris entre 300 et 6 000 G, avec deux sondes.

Le balayage du champ magnétique est effectué à l'aide d'un balayage lent en courant, de 10 à 50 mn.

Ici encore, il nous fallait disposer d'une tension proportionnelle aux variations de H, pour l'envoyer sur la voie X d'un enregistreur XY. Pour des courbes d'anticroisement de faible largeur, cette opération exige une bonne précision ; la tension cherchée est obtenue à partir de la tension existant aux bornes de l'aimant, après compensation en un point moyen du balayage grâce à une alimentation Kepco (60 V) stabilisée à quelques 10^{-5} en tension.

Pour chaque balayage, on mesure la fréquence de la résonance de protons, pour différentes valeurs du champ magnétique (6 à 10 points). On s'assure ainsi de la linéarité de la tension utilisée en X en fonction du champ magnétique à la précision requise (Fig. IX).

Cette linéarité ne se manifeste que, parce que les champs magnétiques auxquels nous travaillons sont loin de saturer les pièces polaires.

Dans d'autres expériences, nous avons dû effectuer des balayages sur des régions très larges s'étendant de 500 à 1 000 G. Pour de si grandes variations, la tension aux bornes de l'aimant n'est plus une fonction linéaire de H à la précision souhaitée ; d'autre part, ce domaine de champ magnétique demande l'utilisation simultanée des deux sondes de RMN. Pour ces courbes, nous avons été conduits à utiliser un gaussmètre à bobine tournante Rawson-Lush (type 644) délivrant une tension proportionnelle

Exemple d'un pointage de H

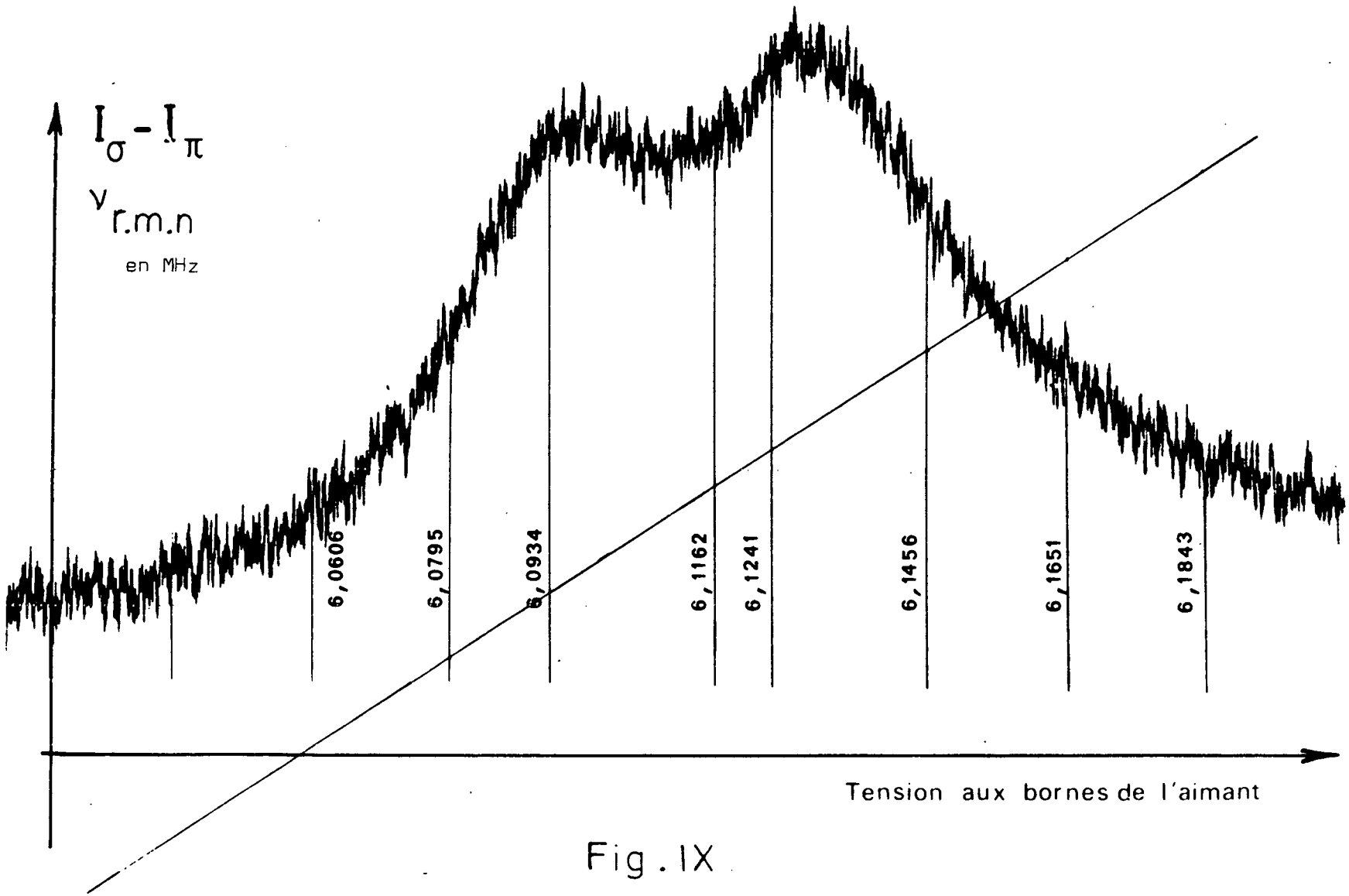


Fig. IX

à la différence entre le champ magnétique mesuré et une valeur affichée digitalement. Cette tension a été étalonnée grâce à la R.M.N.

Dans tous les cas, la mesure du champ magnétique peut être faite avec précision (supérieure à 10^{-5}) et l'on a pu disposer d' une tension proportionnelle à ΔH (à la précision souhaitée) pour enregistrer directement les courbes d'anticroisement (ΔH correspond à la variation du champ lors d' un balayage).

D'autre part, l'inhomogénéité du champ magnétique est toujours inférieure à l'imprécision de la mesure.

C - LE SYSTEME DE DETECTION

La cellule à excitation électronique est placée au centre des bobines de Helmholtz ou de l'électroaimant. Le faisceau d'électrons est parallèle au champ magnétique. On observe la lumière émise perpendiculairement à cette direction (Fig. X).

La raie spectrale étudiée est isolée, soit par un monochromateur à réseau Jarrell Ash de 25 cm de focale, et dont le réseau de 1200 t/mm a pour dimensions 5×5 cm et est blazé à 6 000 Å, soit à l'aide d'un filtre interférentiel (MDTE -VI- TPH de Seavom) dont la bande passante a une largeur de l'ordre de 15 Å et dont la transmission est de 60 % environ.

Un banc d'optique à deux lentilles permet de faire l'image de l'espace de collisions, soit sur la fente d'entrée du monochromateur, soit directement sur la photocathode du P.M.

Le photomultiplicateur utilisé est à couche trialcaline S20 , sensible dans le rouge (EMI 9558QB ou RTC 56TVP).

1) Mesures sur l'intensité lumineuse totale

Plusieurs techniques ont été utilisées successivement :

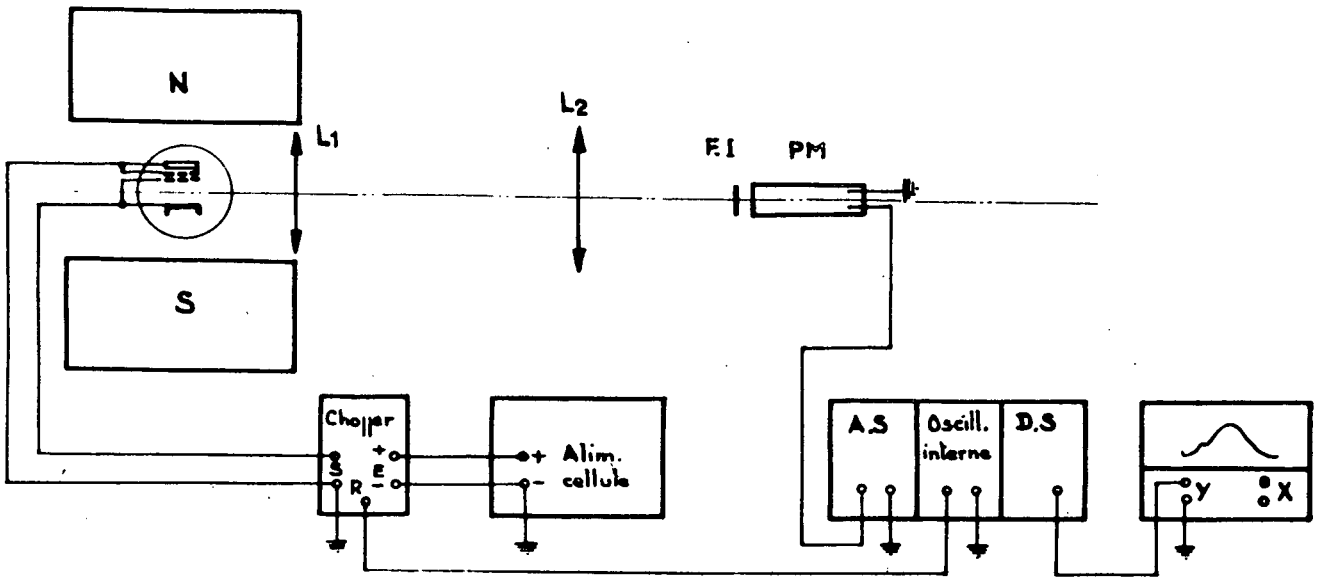


Fig: X

SCHEMA DU MONTAGE POUR LES MESURES EN INTENSITE

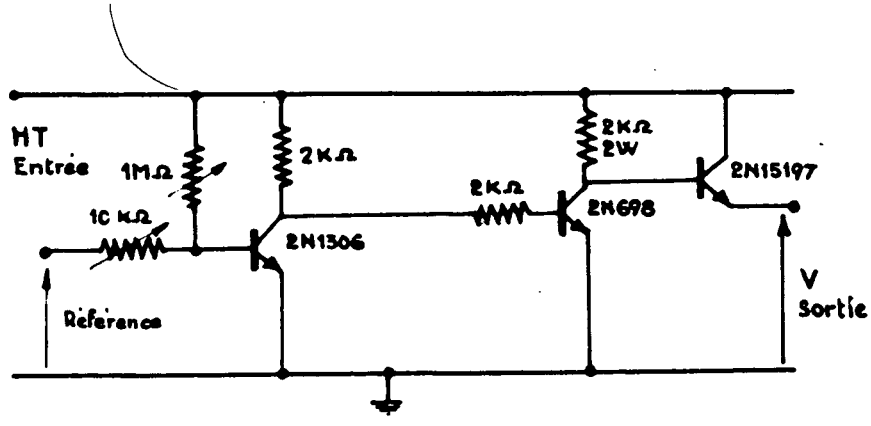


Schéma du chopper

Fig: XI

a) Mesure directe.

Dans ce cas, la tension aux bornes de la résistance de charge du P.M. alimente directement la voie Y de l'enregistreur. Ce montage est simple et rapide, mais il a l'inconvénient d'être sensible à de nombreux effets parasites.

b) Modulation à basse fréquence du faisceau d'électrons.

Un "chopper" (schéma Fig. XI) hache la tension de la grille G_2 et de la plaque du canon à électrons, en créneaux carrés (V = 0 pendant une demi-période, V = V_0 pendant l'autre demi-période). La lumière émise est alors, elle aussi, modulée en créneaux carrés, en phase avec la tension excitatrice. On mesure son intensité à l'aide d'un ensemble ampli-sélectif et détection synchrone (P.A.R. type HR8) (Fig. X).

La lumière émise par la cathode dans le domaine spectral considéré a une intensité constante, elle se trouve ainsi éliminée. Sont éliminées aussi les fluctuations lentes liées à l'intensité parasite. Ce point est particulièrement important pour l'étude de la raie rouge H_α dont la longueur d'onde est 6 563 Å.

Il subsiste cependant des variations parasites de la lumière émise par la cellule. Elles sont provoquées par les modifications du régime électronique (c'est-à-dire du nombre d'électrons traversant l'espace grille-plaque) dues à la variation du champ magnétique. Celui-ci modifie la charge d'espace ; nous avons vu que c'est elle qui limite le nombre des électrons qui traverse la grille G_2. Par exemple, ce nombre peut être multiplié par un facteur 2 ou 3 lorsque le champ passe de 0 à 1 000 G, dans les cellules de type B à grand espace grille-plaque.

c) Utilisation d'un ratiomètre.

Pour éliminer ce phénomène, nous effectuons, à l'aide d'un ampli analogique, le rapport de deux tensions proportionnelles respectivement à l'intensité lumineuse émise sur la raie étudiée (H_α ou H_β) et à l'intensité lumineuse émise par les molécules excitées ; cette dernière ne ren-

ferme pas d'information utile mais, comme l'intensité émise par les atomes (voir chapitre V), elle est proportionnelle au nombre d'électrons incidents. Le signal parasite est alors éliminé par le rapport.

Il suffit de partager le faisceau lumineux en plaçant, entre la dernière lentille et le photomultiplicateur muni de son filtre interférentiel, une lame semi-réfléchissante inclinée à 45 °. La portion réfléchie du faisceau est reçue sur un deuxième photomultiplicateur (1P21), devant lequel on a glissé un filtre Wrattenn°23 qui ne transmet que les raies émises dans le jaune (Fig. XII).

Le faisceau d'électrons est encore modulé à une fréquence de 80 Hz environ. Seules les parties modulées des courants anodiques sont détectées, grâce à deux systèmes de détection synchrone (PAR, HR8). Les tensions de sortie sont alors envoyées dans un ratiomètre (PAR 230) (Fig. XII), dont la tension de sortie alimente la voie Y d'un enregistreur XY.

2) Mesures en polarisation

Le plus souvent, il est intéressant de mesurer les variations de polarisation de la lumière étudiée. A cet effet, nous avons utilisé un analyseur linéaire (Polaroïd) monté sur une turbine à air comprimé réalisée au laboratoire, tournant de manière stable à 35 Hz environ. Ce système est placé entre les deux lentilles du banc d'optique.

Le faisceau d'électrons n'est plus modulé dans cette expérience.

L'intensité lumineuse reçue sur le photomultiplicateur est égale à

$$I = \frac{I_\pi + I_\sigma}{2} + (I_\pi - I_\sigma) \cos 4\pi\nu t$$

où ν est la fréquence de rotation de l'analyseur.

La partie modulée du courant anodique est détectée à la fréquence 2ν, grâce à une détection synchrone dont l'oscillation de référence est fournie directement par le polariseur tournant : la tranche d'une partie tournante est peinte par quartiers blancset noirs, une photodiode reçoit alors la lumière I.R d'une cellule photoémissive qui est diffusée par la peinture blanche (la noire est destinée à absorber). Ce polariseur est décrit plus précisément dans la thèse de DUPONT-ROC ([67]).

La différence de phase entre cette "référence" et la modulation du courant anodique est réglée avec un polariseur fixe, placé en avant de l'analyseur tournant orienté de telle manière qu'il ne transmette que I_π, et supprimé après le réglage.

La tension de sortie de la détection synchrone, ainsi réglée, est envoyée sur la voie Y d'un enregistreur.

Dans les cas où les variations de régime de la cellule étaient trop importantes, on a étudié alors le taux de polarisation lui-même à l'aide du ratiomètre (Fig. XIII). Le signal, envoyé alors en Y, est le rapport entre la partie modulée ainsi détectée et la partie continue du courant anodique.

Les signaux que nous avons étudiés jusqu'à présent ont toujours été assez intensespour que ces techniques suffisent. Il est bien évident qu'un système de moyennage de signaux améliorerait considérablement la méthode de détection actuelle ; mais il se pose alors le problème de la précision de la reproductibilité du balayage du champ magnétique, problème en cours de solution.

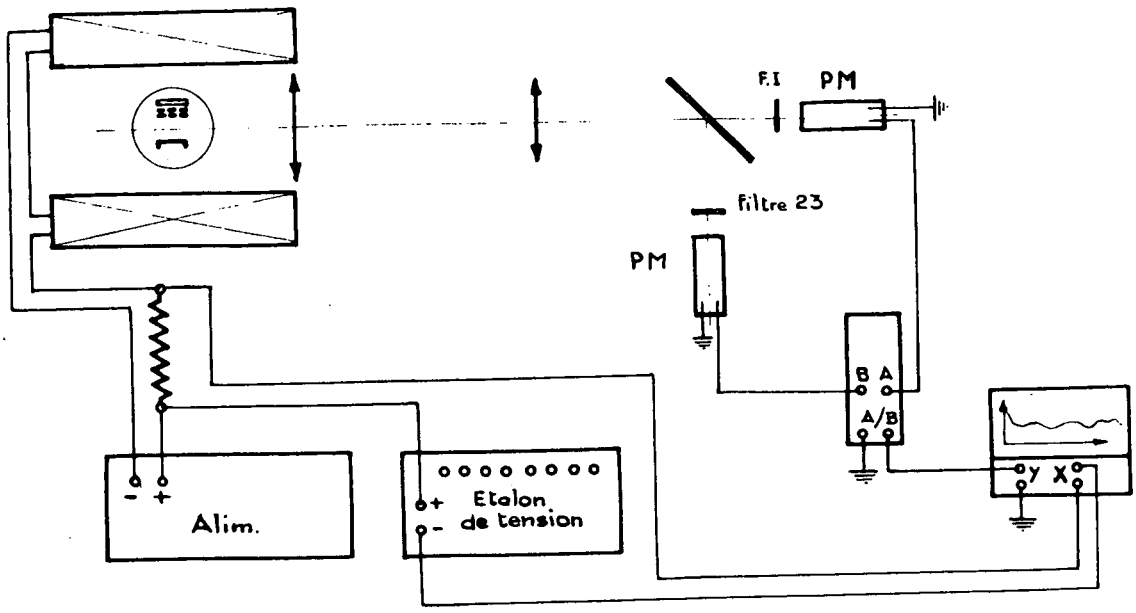


Fig: XII

SCHEMA DU MONTAGE AVEC RATIOMETRE

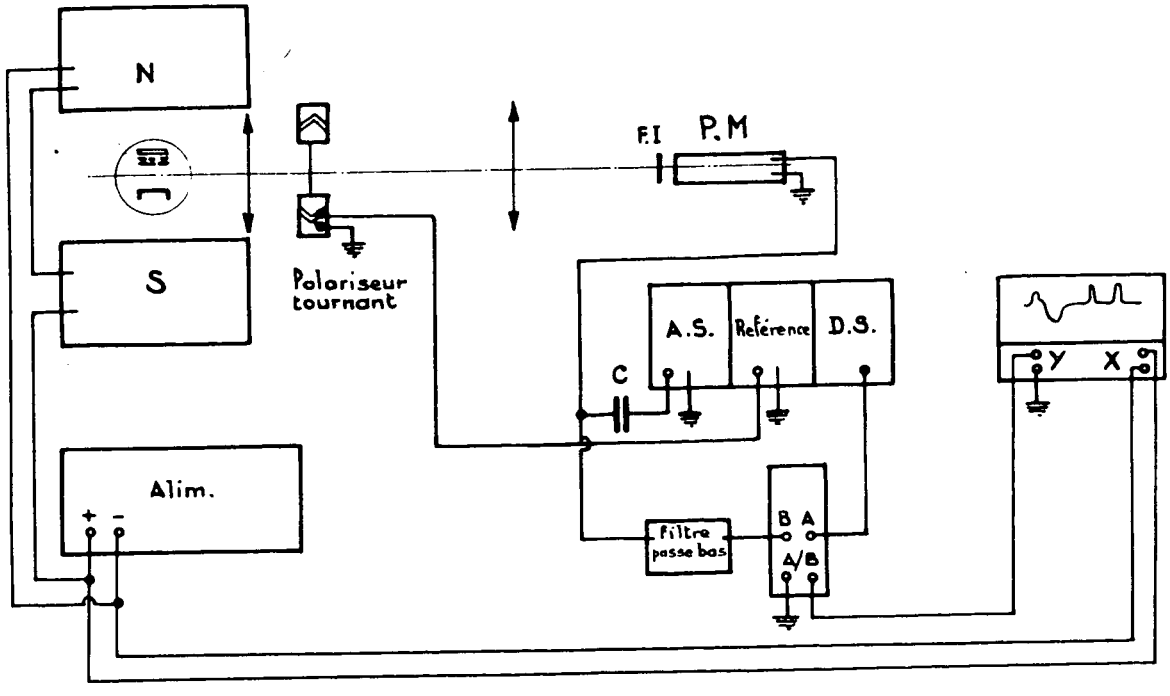


Fig: XIII

SCHEMA DU MONTAGE POUR LA MESURE DU TAUX DE POLARISATION

C H A P I T R E VII

COMPARAISON EXPERIENCE, THEORIE

Nous avons montré précédemment comment les anticroisements devaient apparaître sur l'intensité ou sur le taux de polarisation de la lumière émise par les atomes excités, lorsqu'on balaye le champ magnétique. Nous allons voir maintenant comment, à l'aide du dispositif expérimental que nous venons de décrire, nous avons observé et étudié ces signaux d'anticroisement, en les comparant aux courbes théoriques.

A - LES ANTICROISEMENTS OBSERVES ET LEUR IDENTIFICATION

1) L'observation globale

Il apparaît un certain nombre de résonances, sur la lumière émise par les atomes excités, quand on balaye le champ magnétique :

- certaines sont visibles uniquement sur le taux de polarisation
- d'autres, uniquement sur l'intensité totale de la lumière émise
- enfin certaines sont visibles par les deux techniques.

La figure XIV montre les variations du taux de polarisation linéaire $(I_\sigma - I_\pi)/(I_\sigma + I_\pi)$ et celles de l'intensité totale $(I_\sigma + I_\pi)$, en observation transversale, sur la raie H_α (émise par les atomes excités dans les niveaux $n = 3$), en fonction du champ magnétique $\vec{H}$.

La figure XV montre les variations du taux de polarisation linéaire $(I_\sigma - I_\pi)/(I_\sigma + I_\pi)$ de H_β $(n = 4 \rightarrow n = 2)$ en fonction de $\vec{H}$.

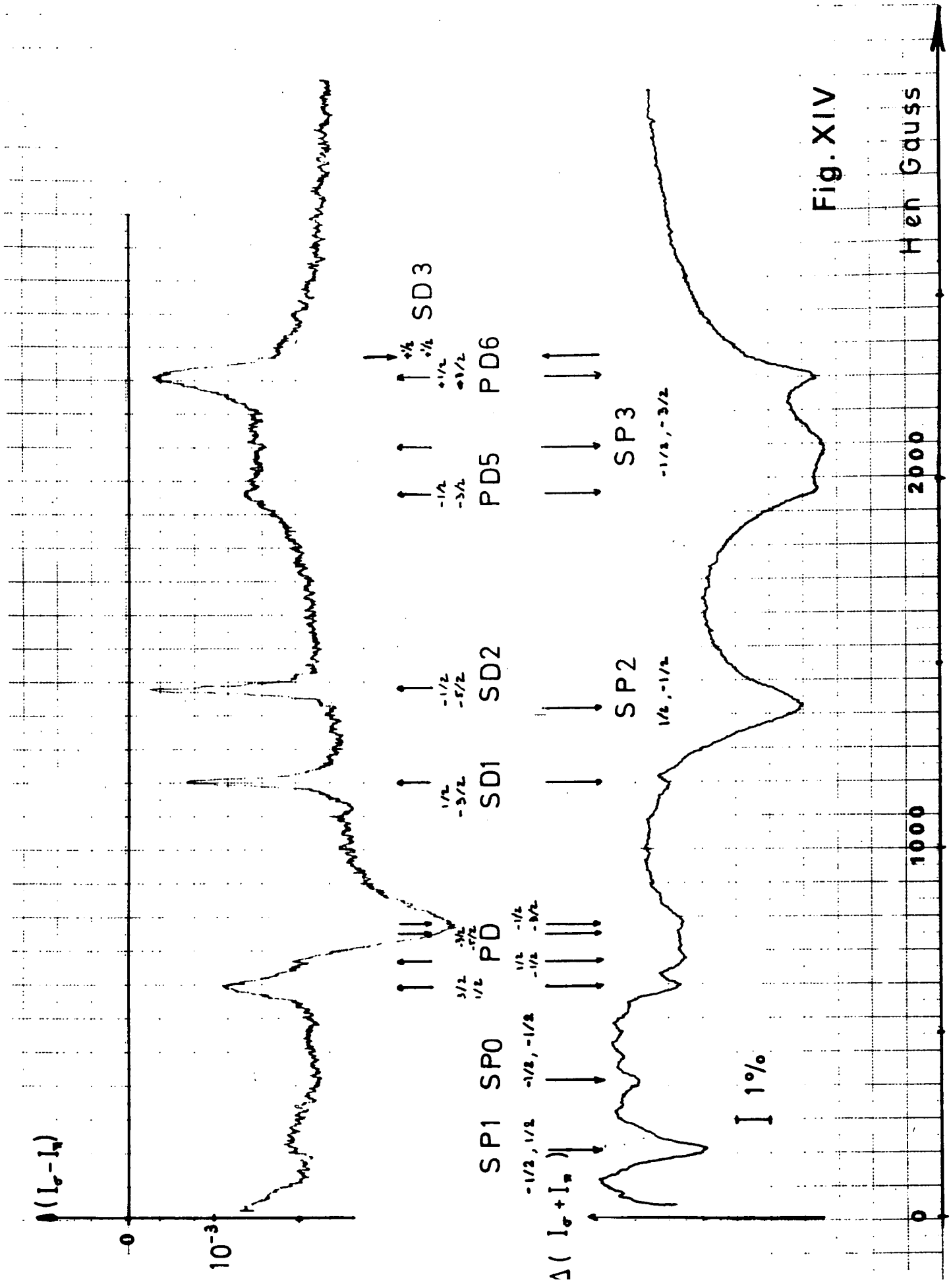


Fig. XIV
H en Gauss
0
1000
2000
1%
SP1
SP0
SP2
SP3
PD
SD1
SD2
PD5
PD6
SD3
10^{-3}

Le premier problème qui se pose alors est l'identification des résonances.

2) L'identification

Nous avons calculé la position attendue de chaque anticroisement, c'est-à-dire la valeur du champ magnétique pour laquelle il se produit. Nous avons pu ainsi comparer les positions attendues et les positions observées. L'identification en résulte avec peu d'ambiguïté pour les niveaux de n = 3.

Il va de soi que ces coïncidences entre positions prévues et positions effectives ne constituent que des présomptions et qu'elles doivent être confirmées par ailleurs.

Une première confirmation est obtenue par la comparaison des largeurs des différents signaux d'anticroisement. Les plus larges doivent correspondre aux anticroisements par couplage direct et, parmi eux, à ceux qui ont les plus grands termes de couplage, c'est-à-dire aux anticroisements S-P.

Inversement, les signaux les plus fins doivent correspondre aux anticroisements par couplage indirect, c'est-à-dire aux anticroisements S-D (et P-F pour n = 4). Les anticroisements P-D doivent avoir des largeurs intermédiaires.

L'examen de la figure XIV montre qu'il en est bien ainsi.

D'autre part, on peut chercher si le signal est plus important sur la composante I_π de la lumière ou sur la composante I_σ. Le calcul, au chapitre III, des probabilités d'émission, nous permet la comparaison.

L'utilisation de toutes ces informations nous conduit aux identifications reportées sur les figures XIV et XV.

Ensemble des anticroisements

n = 4

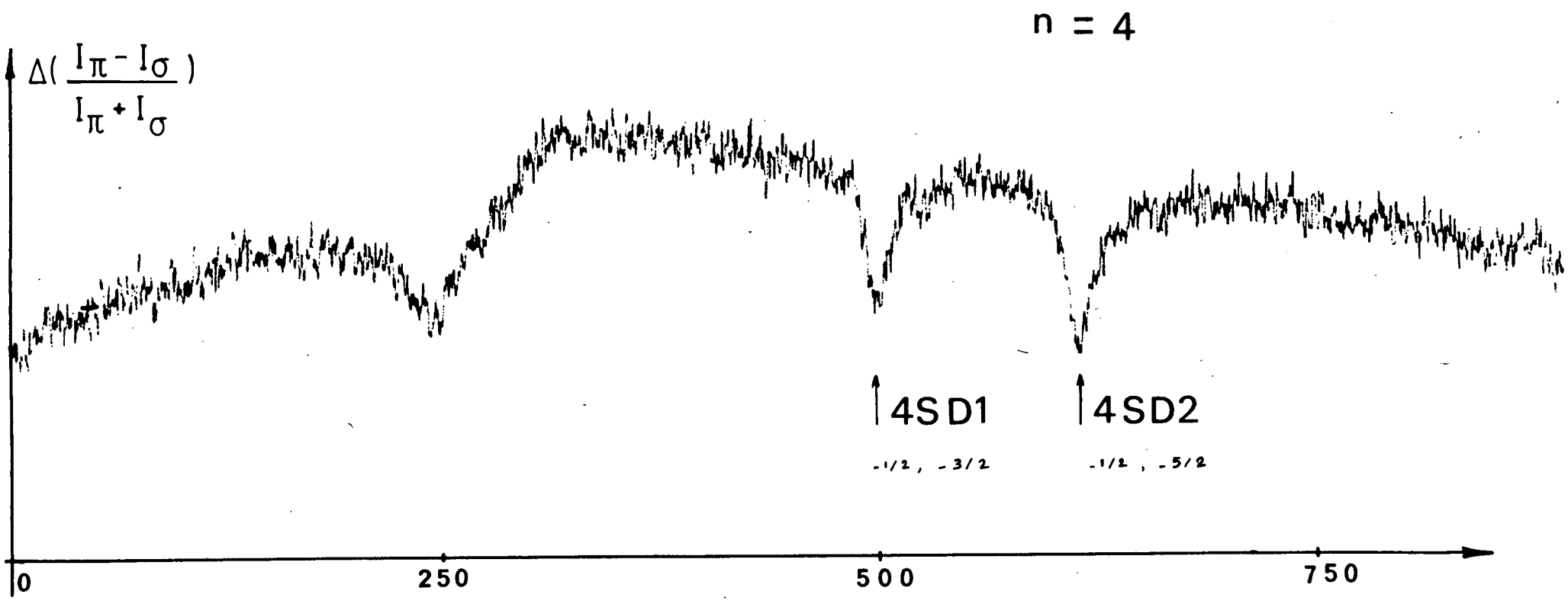


Fig. XV

L'identification des autres anticroisements observés sur l'ensemble des niveaux n = 4 n'est pas terminée actuellement ; nous reviendrons sur ce point à la fin de ce chapitre.

Nous allons étudier maintenant, plus précisément, les anticroisements ainsi identifiés.

B - DETERMINATION DES DIFFERENTS PARAMETRES

Dans le chapitre V, nous avons exprimé les signaux d'anticroisement en fonction d'un certain nombre de paramètres. La comparaison des courbes théoriques ainsi obtenues avec les courbes expérimentales va nous permettre de les déterminer.

1) Les différents paramètres

Ces paramètres ont deux origines très différentes :

- les uns, liés au mode de formation des atomes excités
- les autres, liés à l'atome d'hydrogène lui-même.

a - Les paramètres liés à la dissociation de H_2

Ces paramètres sont :

- les vitesses de formation ρ_i des sous-niveaux i concernés,
- la grandeur $|\vec{\vartheta}_{H^*}|$ de la vitesse des atomes, liée à la dissociation de la molécule d'hydrogène, dans le repère de celle-ci. Nous l'appelons aussi "vitesse d'explosion". Cette vitesse dépend de la différence entre l'énergie d'excitation de la molécule (inconnue) et celle de l'atome (12,1 eV pour n = 3, 12,8 eV pour n = 4).

Dans le chapitre V, nous avons exprimé les signaux d'anticroisement en fonction de ces seuls paramètres. Nous avions alors attribué aux structures fines des niveaux atomiques (y compris les Lamb-shifts) les valeurs théoriques

b - Les structures

En fait, le but premier du présent travail est de déterminer expérimentalement ces structures, et, en particulier, les déplacements radiatifs $3^2S_{1/2}$ - $3^2P_{1/2}$ et $3^2P_{3/2}$ - $3^2D_{3/2}$. Ils doivent donc, eux aussi, être considérés comme des paramètres.

Cependant nous avons admis - et cette hypothèse sera justifiée a posteriori - que les structures effectives sont très voisines des structures théoriques. Dans ces conditions, un écart entre les structures réelles et théoriques peut provoquer un déplacement de l'anticroisement supérieur à l'erreur de mesure (de l'ordre de 10^{-4}), mais reste sans influence observable sur les autres éléments du problème, c'est-à-dire les fonctions d'onde et les pentes des sous-niveaux aux points d'anticroisement. Il faudrait, en effet, un écart entre les structures supérieur à 10^{-2} (ce qui correspond à la précision sur les mesures d'amplitudes d'anticroisements), pour que son influence sur les fonctions d'onde et les pentes ne soit plus négligeable.

En résumé, pour chaque anticroisement, nous avons à déterminer :
- les vitesses de formation des sous-niveaux qui interviennent, soit deux paramètres dans le cas des anticroisements par couplage direct, et trois pour ceux par couplage indirect (avec un seul autre niveau),
- la vitesse d'explosion - ce dernier paramètre est commun à tous les anticroisements de même n, pour des conditions expérimentales données -,
- et enfin la position.

Nous allons voir dans quelles conditions ces paramètres peuvent être déterminés.

2) Conditions de détermination des différents paramètres.

Les calculs présentés précédemment (chapitre V) s'appuient sur l'hypothèse d'une répartition isotrope des vitesses d'explosion. Nous savons que ce n'est possible qu'au seuil de l'excitation, (c'est-à-dire pour l'énergie du faisceau d'électrons où apparaît l'émission atomique) où le taux de polarisation est nul.

Dans ces conditions, nous n'induisons pas de différences de populations entre les sous-niveaux excités, issus en champ nul, du même terme. Les coefficients ρ ne dépendent alors que du nombre quantique ℓ (et aussi bien sûr de n).

Les valeurs communes des vitesses de formation des différents états hyperfins $|n(s\ \ell)j\ m_j\ I\ m_I>$, seront appelées ρ_L, en omettant n pour alléger.

Ainsi, au seuil, les paramètres liés à l'excitation se réduisent à 4 pour l'ensemble des anticroisements n = 3.

3) Détermination des vitesses atomiques

La vitesse de l'atome détermine le champ électrique responsable du mélange des sous-niveaux, donc sa valeur fixe la forme des signaux d'anticroisement.

Au cours d'une étude préliminaire, nous avons calculé les formes des courbes qu'on pouvait attendre en attribuant aux atomes excités une répartition de vitesses maxwellienne, correspondant à différentes valeurs de la température. La figure XVI montre les courbes obtenues sur l'ensemble des anticroisements 3PD situés entre 800 et 1200 G, ainsi que la courbe expérimentale. Nous voyons qu'il faudrait supposer, pour rendre compte de la courbe expérimentale, que les atomes excités sont à une température de l'ordre de 5000 °K, ce qui est impossible dans les cellules utilisées.

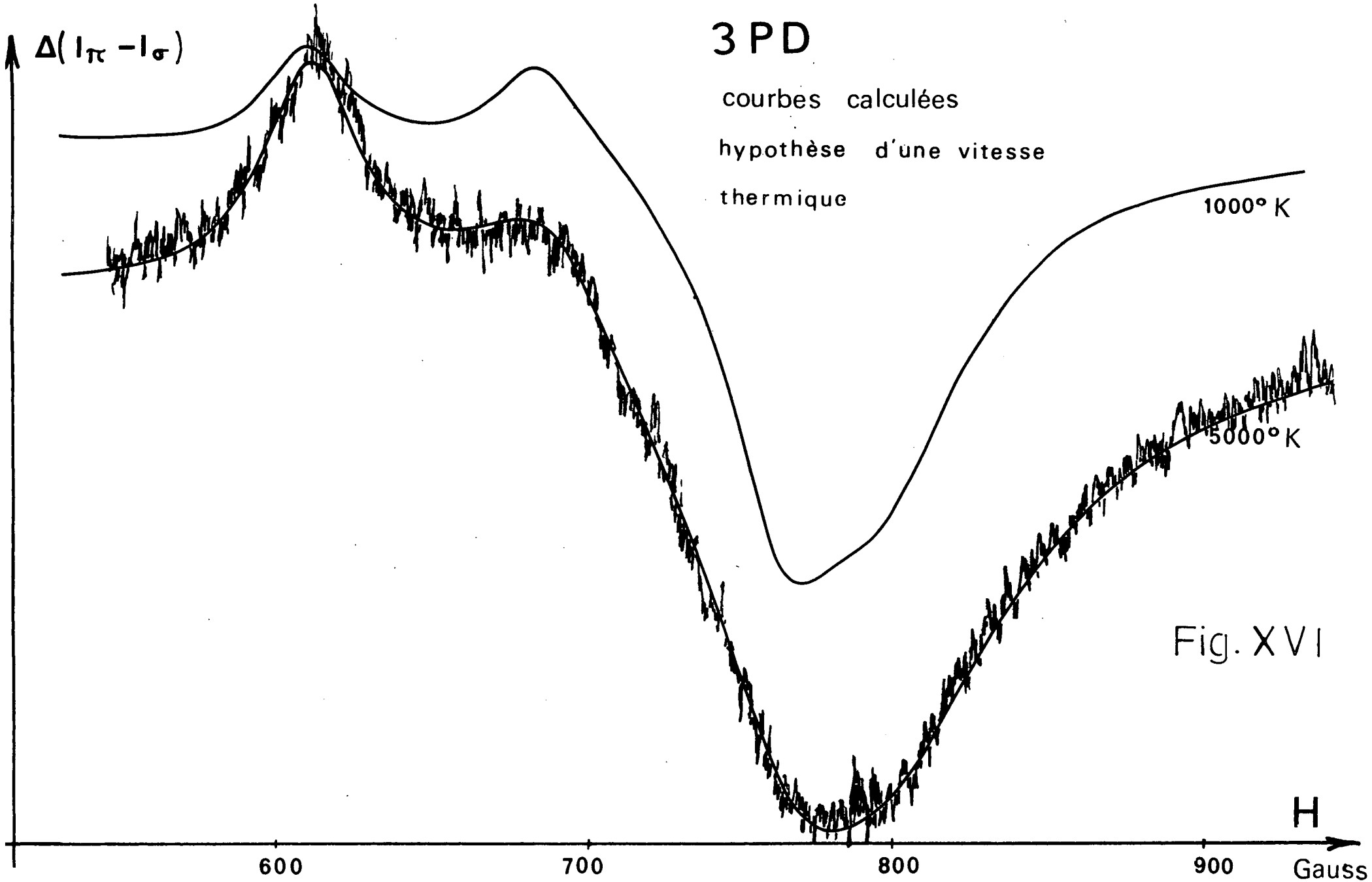

$\Delta(I_\pi - I_\sigma)$
3 PD
courbes calculées
hypothèse d'une vitesse
thermique
1000° K
5000° K
H
600
700
800
900
Gauss

Fig. XVI

La température y est au plus, de 1000 °K. C'est donc que la vitesse des atomes est liée au processus de dissociation ; elle est nettement plus grande que la vitesse thermique de H_2 à 1000 °K ($\simeq$ 3,5 km/s). Nous avons alors admis, et nous le justifierons plus loin, que la vitesse thermique $\vec{v}_{H_2}$ de la molécule avant la collision a un effet négligeable devant celui de la vitesse d'explosion $\vec{v}_{H^*}$.

Nous avons ainsi tracé la courbe des mêmes anticroisements PD situés entre 800 et 1200 G, en donnant différentes valeurs à la vitesse d'explosion. Les vitesses de formation ρ des niveaux n'interviennent que sur l'amplitude des anticroisements, par le facteur multiplicatif $(\rho_D/\gamma_D - \rho_P/\gamma_P)$ qui est le même pour tous.

Nous avons alors comparé la famille de courbes théoriques ainsi obtenue, et les courbes expérimentales observées près du seuil d'excitation. Nous en avons déduit la valeur de $|\vec{v}_{H^*}|$.

Cette étude a été faite seulement sur les variations du taux de polarisation ; en effet, au seuil d'excitation, la perturbation du faisceau d'électrons incidents par le champ magnétique provoque des variations parasites d'intensité lumineuse, qui sont les mêmes pour chaque composante de polarisation. Les mesures faites sur le taux de polarisation ne sont donc pas perturbées.

4) Détermination des coefficients ρ

Nous avons vu qu'au seuil d'excitation, le processus de formation des sous-niveaux est décrit par seulement 3 paramètres pour n = 3 : ρ_S, ρ_P et ρ_D. Rappelons en outre que toute excitation cohérente pouvait être négligée (voir chapitre V).

Dans ces conditions, l'intensité totale émise dans un angle solide $d\Omega$ autour de Oy, par l'ensemble des atomes excités dans les différents sous-niveaux de n = 3 , s'écrit :

$$I_t = \frac{3\ d\Omega}{8\pi} \sum_{i,\lambda} \sigma_{ii}\ \gamma_i\ f_i^{\lambda}$$

(voir chapitre III , B-4) ; en négligeant les effets d'anticroisement, elle devient :

$$I_t = \frac{3\ d\Omega}{8\pi}\ \frac{2}{3}\ (20\rho_D + 4\rho_S + 0{,}1183 \times 12\rho_P)$$

L'origine des coefficients ρ_D , ρ_S et ρ_P vient de ce que les sous-niveaux hyperfins sont au nombre de 20 pour $\ell = 2$ (ρ_D), 12 pour $\ell = 1$ (ρ_P), et 4 pour $\ell = 0$ (ρ_S). Il faut en outre tenir compte de ce que seulement 11,83 % des atomes dans l'état P, se désexcitent sur les niveaux $n = 2$. Le facteur 2/3 vient de la sommation sur les deux polarisations, en observation transversale.

Par ailleurs, l'amplitude du signal d'anticroisements PD peut se mettre sous la forme (équation V-4)

$$\Delta I = \frac{3\ d\Omega}{8\pi}\ (\rho_D/\gamma_D - \rho_P/\gamma_P)\ I_{th}$$

où I_{th} ne dépend pas des coefficients ρ .

Ainsi, dans ce cas :

$$\Delta I/I = 2\ \frac{I_{th}}{3}\ \{\rho_D/\gamma_D - \rho_P/\gamma_P\}\ \{20\rho_D + 4\rho_S + 1{,}420\ \rho_P\}$$

Plus généralement, la mesure de $\Delta I/I$, pour un anticroisement ou un groupe d'anticroisements (les anticroisements hyperfins en particulier ne sont pas résolus), permet d'obtenir une relation linéaire entre les différents coefficients ρ.

Il est bien évident que notre appareillage ne permet pas des mesures absolues des vitesses de formation ρ ; cependant à partir de deux telles relations, nous pouvons obtenir une mesure des valeurs relatives des coefficients ρ.

Une première relation, nous l'avons vu à titre d'exemple, est tirée de l'étude des anticroisements PD. Pour en obtenir une seconde, il nous faut étudier un autre anticroisement. Il serait tout indiqué de choisir à cet effet un autre anticroisement par couplage direct. En fait ce n'est pas possible. En effet, comme nous l'avons vu, des variations parasites de l'intensité totale imposent à cette étude d'être faite seulement sur les variations du taux de polarisation. Sur la figure XIV, on voit que les seuls autres anticroisements par couplage direct observables sont les anticroisements notés SP3, PD5 et PD6. Ils ne sont pas résolus et se superposent à SD3. Les différences de populations qui interviennent par leurs amplitudes sont $(\rho_S/\gamma_S - \rho_P/\gamma_P)$ pour le premier, et $(\rho_D/\gamma_D - \rho_P/\gamma_P)$ pour les deux autres. L'utilisation de ces courbes est trop compliquée. Nous avons trouvé plus commode d'étudier un anticroisement par couplage indirect : 3SD1 ou 3SD2 (ces notations simplifiées sont explicitées sur la figure XIV). Dans ce cas, leur amplitude peut se mettre sous la forme

$$I = \frac{3\ d\Omega}{8\pi} (\rho_S\ I_S + \rho_P\ I_P + \rho_D\ I_D)$$

à partir de l'équation V.8 où I_S , I_P et I_D ne dépendent pas des ρ, mais ont été calculés en donnant à $|\vec{\vartheta}_{H^*}|$ la valeur déterminée à partir des anticroisements PD comme il a été expliqué dans le paragraphe B-3.

On détermine ainsi les coefficients ρ_L en valeur relative.

Il reste, bien sûr, à s'assurer que les valeurs ainsi trouvées pour les paramètres permettent de rendre compte des courbes expérimentales obtenues sur tous les anticroisements observables dans ces conditions.

5) Détermination des structures

Une fois les paramètres liés au mode d'excitation évalués, les courbes théoriques de chaque anticroisement (ou groupe d'anticroisements)

sont calculées et confrontées aux courbes expérimentales. Cette fois, la position expérimentale est comparée à la position théorique.

A partir de cette mesure, on remonte à la structure en champ nul. L'écart entre la position expérimentale et la position théorique est suffisamment faible pour être considéré comme un élément différentiel dans l'équation donnant la position de l'anticroisement (voir chapitre II-C)

C - COMPARAISON DES COURBES THEORIQUES ET EXPERIMENTALES SUR n = 3, AU SEUIL D'EXCITATION

Comme nous l'avons vu, les seules mesures exploitables au seuil sont celles du taux de polarisation. Dans ces conditions, on observe sur n = 3 (figure XIV) quatre groupes de résonances :

- les 8 anticroisements entre sous-niveaux issus des niveaux $3^2D_{5/2}$, $3^2P_{3/2}$ notés (3PD)
- les 2 anticroisements hyperfins notés 3SD1 correspondant aux sous-niveaux ^2S $m_j = 1/2$, ^2D $m_j = - 3/2$ (issu de $D_{5/2}$) (j n'est plus un bon nombre quantique pour ce domaine de champ magnétique).
- les 2 anticroisements hyperfins correspondant aux sous-niveaux ^2S $m_j = - 1/2$, ^2D $m_j = - 5/2$ notés 3SD2
- un ensemble, en champ magnétique plus fort, correspondant à la superposition de 4 anticroisements hyperfins S-P, 4 entre P et D et 2 entre S et D.

Nous allons étudier successivement ces quatre groupes. Sur n = 4, nous avons observé plusieurs résonances parmi lesquelles nous avons identifié des anticroisements du type S-D que nous étudierons plus loin.

Plusieurs de ces mesures ont été faites en collaboration avec L. JULIEN ([38]) et T. DOMMANGET

1) Les huit anticroisements entre sous-niveaux P et D

a) Inventaire des anticroisements

Nous désignerons les sous-niveaux par la notation spectroscopique habituelle, la correspondance avec la notation de Lamb ([68]) est la suivante :

- Les sous-niveaux ^2D sont nommés par les lettres majuscules A à F pour les sous-niveaux issus de $^2D_{5/2}$, par valeurs décroissantes de m_j et de G à J pour les sous-niveaux issus de $^2D_{3/2}$.

- Les sous-niveaux ^2P sont notés par les lettres latines minuscules de a à d pour les sous-niveaux issus de $^2P_{3/2}$ et e et f pour ceux qui sont issus de $^2P_{1/2}$, et toujours par valeurs décroissantes de m_j.

- Les sous-niveaux $^2S_{1/2}$ sont nommés α pour $m_j = + 1/2$ et β pour $m_j = - 1/2$.

Les anticroisements observés, notés dans les deux nomenclatures, sont :

3^2D $m_j = 1/2$ $\quad 3^2P$ $m_j = 3/2$ $\quad$ (C,a) $\quad \begin{cases} m_f = 1 \quad m'_f = 2 \quad \text{à } 614{,}42 \text{ G} \\ m_f = 0 \quad m'_f = 1 \quad \text{à } 617{,}50 \text{ G} \end{cases}$

3^2D $m_j = - 1/2$ $\quad 3^2P$ $m_j = + 1/2$ $\quad$ (D,b) $\quad \begin{cases} m_f = 0 \quad m'_f = 1 \quad \text{à } 691{,}11 \text{ G} \\ m_f = - 1 \quad m'_f = 0 \quad \text{à } 692{,}74 \text{ G} \end{cases}$

3^2D $m_j = - 3/2$ $\quad 3^2P$ $m_j = - 1/2$ $\quad$ (E,c) $\quad \begin{cases} m_f = - 1 \quad m'_f = 0 \quad \text{à } 803{,}66 \text{ G} \\ m_f = - 2 \quad m'_f = 1 \quad \text{à } 803{,}04 \text{ G} \end{cases}$

3^2D $m_j = - 5/2$ $\quad 3^2P$ $m_j = - 3/2$ $\quad$ (F,d) $\quad \begin{cases} m_f = - 2 \quad m'_f = -1 \quad \text{à } 771{,}71 \text{ G} \\ m_f = - 3 \quad m'_f = -2 \quad \text{à } 769{,}56 \text{ G} \end{cases}$

b) Evaluation de la vitesse des atomes.

Comme nous l'avons dit en B-3, ce sont ces anticroisements 3PD qui nous ont servi à évaluer la vitesse des atomes. Pour cela, nous avons calculé les variations de taux de polarisation résultant de ces huit anticroisements. Nous avons supposé (§ B-4) que les sous-niveaux ^2P étaient formés à la même vitesse ρ_P par la dissociation et que, de même, tous les sous-niveaux ^2D étaient peuplés à la vitesse ρ_D.

La figure XVII montre comment se déforme la courbe résultante en fonction de la vitesse d'explosion des atomes, la vitesse thermique de la molécule étant négligée.

Nous appelons "largeur" d'une courbe représentant $\Delta I(H)$, la largeur à mi-hauteur de la portion $I_\sigma > I_\pi$ au-dessus de l'asymptote $I_\sigma = I_\pi$. Si nous comparons les "largeurs" des courbes ΔI pour différentes valeurs de $|\vec{\vartheta}_{H^*}|$ à la "largeur" de la courbe expérimentale, nous voyons alors que cette dernière correspond à la courbe calculée pour la valeur $|\vec{\vartheta}_{H^*}| = 8$ km/s à 1 km/s près

Il nous faut tenir compte maintenant de la vitesse d'agitation thermique des molécules d'hydrogène avant l'excitation. Sa distribution est sensiblement maxwellienne avec une température au plus égale à celle de la cathode, soit 1 000 °K. Cela est légitime car elle est séparée de l'espace d'observation par une distance de l'ordre du libre parcours moyen ; une partie des molécules dans l'espace d'observation sont donc à peu près en équilibre thermique avec la cathode ; les autres molécules sont, de même, à peu près en équilibre thermique avec les autres électrodes dont la température est 500 ° K environ. Tout cela est en accord avec les estimations de M.A. MARECHAL [69].

Nous aurons donc une limite supérieure de l'effet lié à la distribution des vitesses des molécules en attribuant à ces dernières une température égale à cette limite de 1 000 °K.

La figure XVIII montre l'influence de cette vitesse thermique sur la forme de la courbe calculée pour $|\vec{\vartheta}_H|$ = 8 km/s. Nous voyons qu'elle est très faible. Dès lors, le modèle de la répartition maxwellienne à 1 000 ° K constitue une approximation fort suffisante, et nous justifions a posteriori l'hypothèse conduisant à négliger l'influence de $\vec{\vartheta}_{H_2}$ pour les études préliminaires. Ce point conduit à de sérieuses économies du temps de calcul sur ordinateur (un facteur 1 000).

c) La comparaison des courbes théoriques et expérimentales.

La figure XIX montre ainsi une courbe expérimentale et les points de la courbe calculée dans ces conditions. L'accord est très satisfaisant.

En particulier, on est sûr, à ce stade, que l'écart entre les positions théoriques et les positions observées des anticroisements PD est inférieur à l'incertitude de la mesure soit ± 1 G (10^{-3} en valeur relative). Nous discuterons, dans le chapitre VIII, la valeur de la structure déduite de cette mesure.

D'autre part, l'amplitude relative de cet ensemble d'anticroisements, définie par le rapport

$$\Delta(I_\sigma - I_\pi)/ I_t$$

est de 2% environ ; son signe est tel que

$$\rho_D/\gamma_D > \rho_P/\gamma_P \quad \text{soit} \quad \rho_D > \rho_P/3$$

En vue de déterminer ces coefficients en valeur relative, nous avons étudié ensuite les anticroisements 3SD.

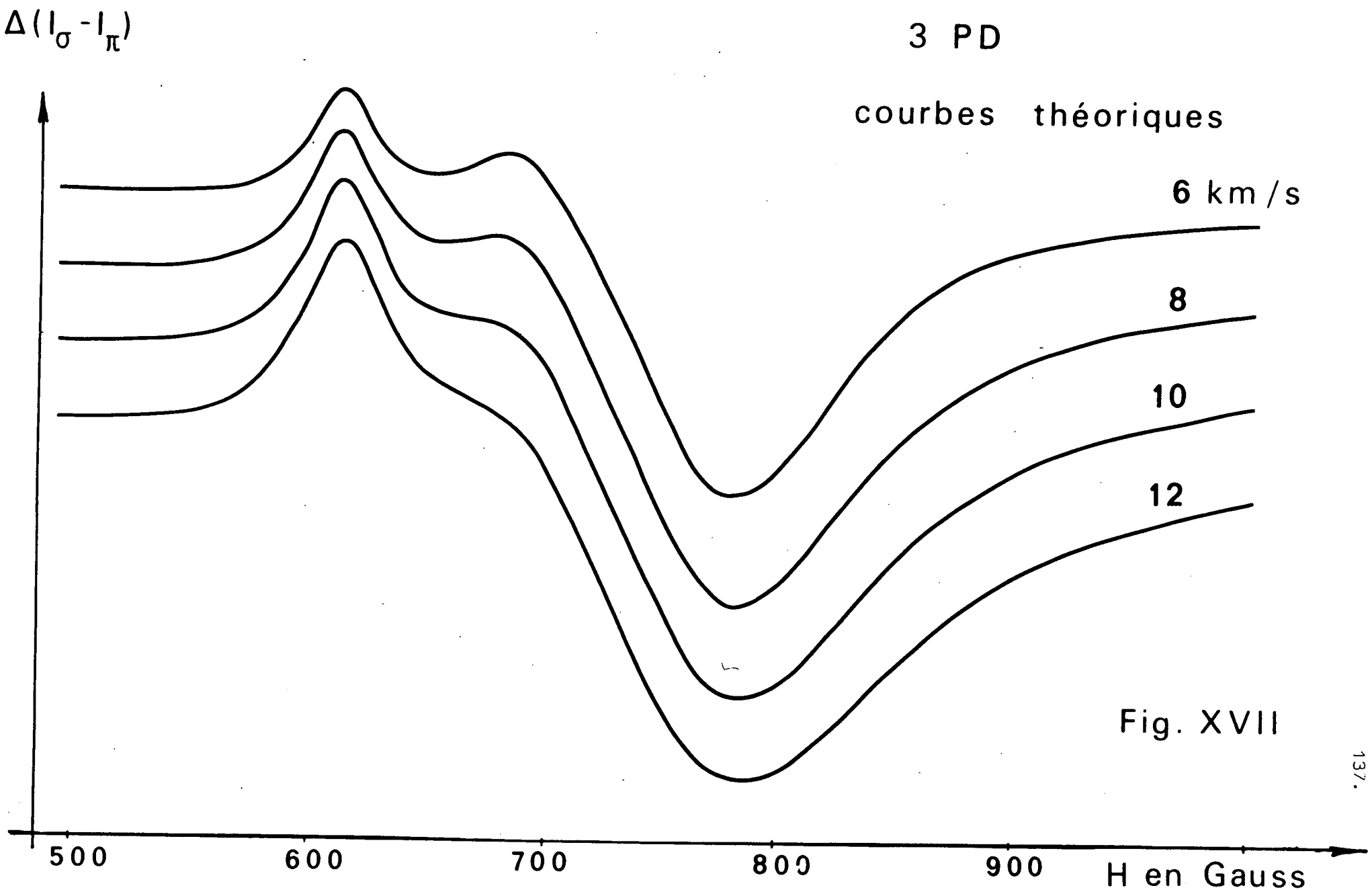

$\Delta(I_\sigma - I_\pi)$
3 PD
courbes théoriques
6 km/s
8
10
12
500
600
700
800
900
H en Gauss

Fig. XVII

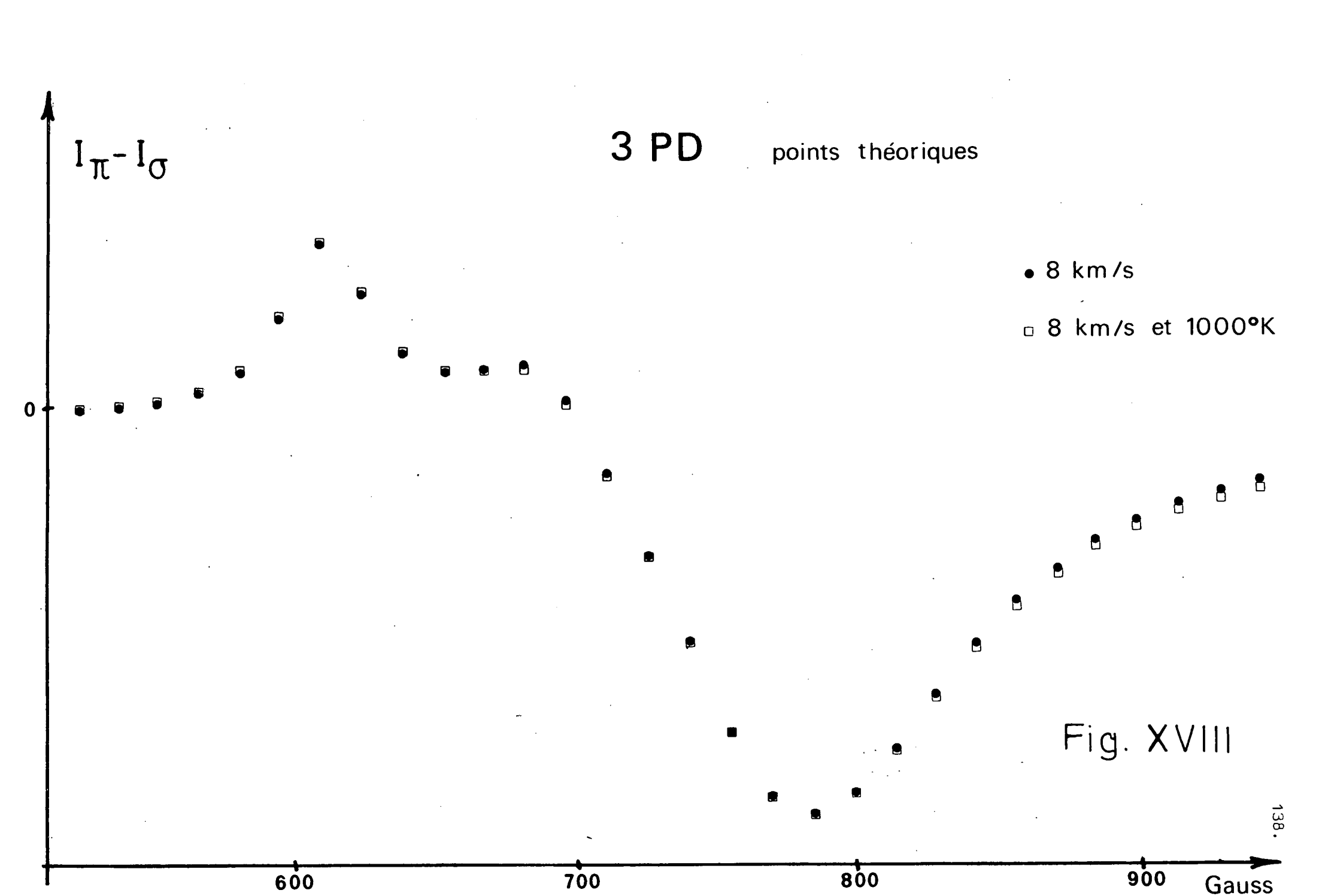
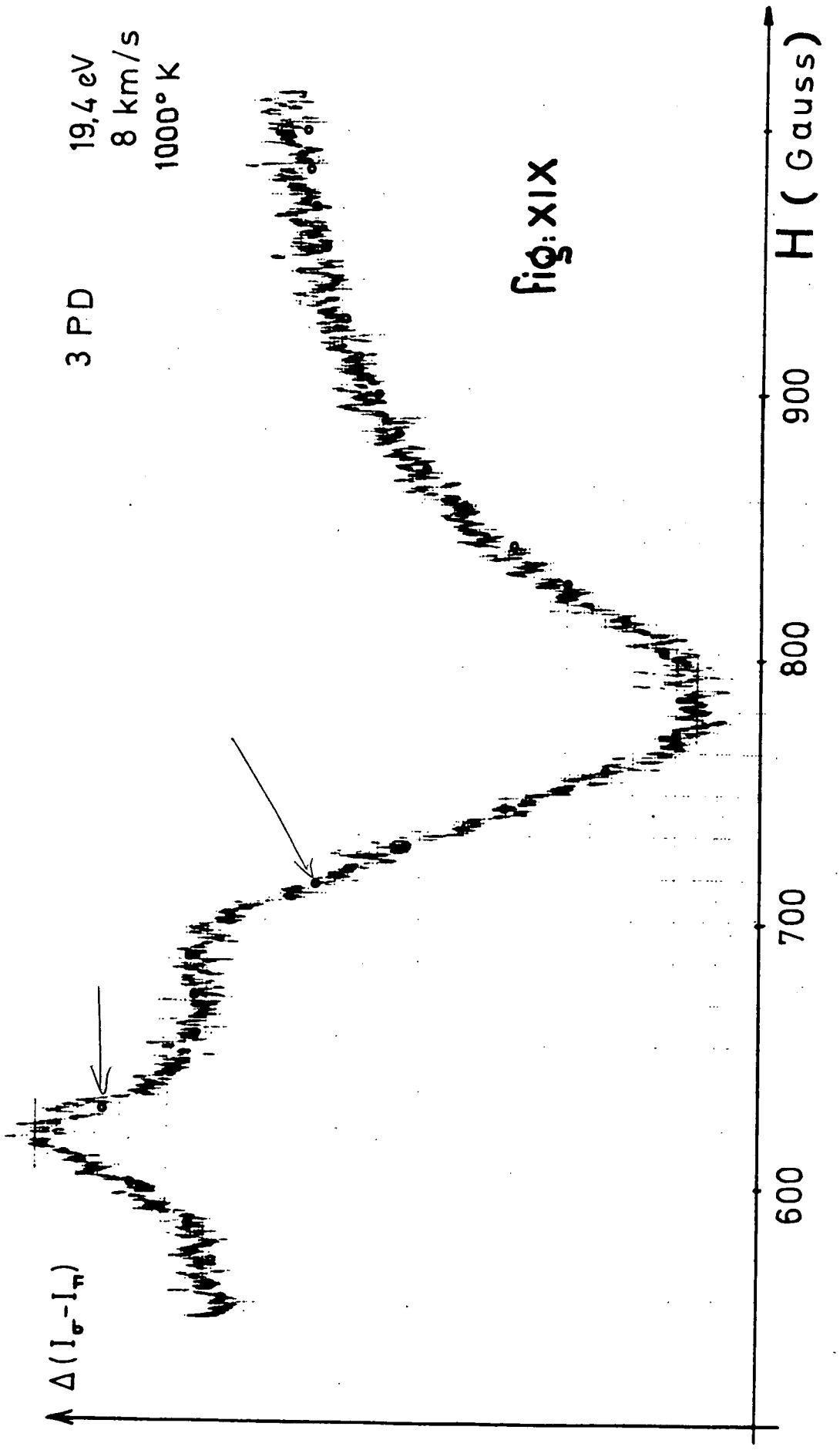

$I_\pi - I_\sigma$
3 PD
points théoriques
• 8 km/s
□ 8 km/s et 1000°K
0
600
700
800
900
Gauss

Fig. XVIII


3 PD
19,4 eV
8 km/s
1000° K
fig: XIX
$\Delta(I_\sigma - I_\pi)$
600
700
800
900
H (Gauss)

2) L'anticroisement entre les sous-niveaux issus de $3^2D_{5/2}$ $m_j = -3/2$, $3^2S_{1/2}$ $m_j = 1/2$ (E,α)

a) Valeurs des coefficients

C'est un anticroisement par couplage indirect, son intensité dépend linéairement des trois coefficients ρ_S , ρ_P et ρ_D suivant l'équation :

$$\Delta I = \frac{3\ d\Omega}{8\pi}\ (I_S\rho_S + I_P\rho_P + I_D\rho_D)$$

La figure XX montre les trois composantes I_S , I_P et I_D. Ces courbes ont été calculées en donnant à la vitesse d'explosion $|\vec{\vartheta}_{H^\star}|$ la valeur de 8 km/s, déterminée à partir des anticroisements PD comme il a été expliqué au § précédent et en négligeant l'influence de $\vec{\vartheta}_{H_2}$. Nous remarquons, sur cette figure, que si l'on ne peuplait que le niveau P (par les règles de sélection convenables) de sorte que $\Delta I \sim I_P\rho_P$, l'anticroisement entre les sous-niveaux S et D serait tout de même observable.

L'amplitude relative du signal d'anticroisement observé au seuil est de l'ordre de 1%. Ainsi, les anticroisements par couplage indirect apparaissent, en polarisation, avec des amplitudes comparables à celles des anticroisements par couplage direct.

A partir des valeurs des amplitudes relatives des signaux d'anticroisement (3PD et 3SD1), nous avons déterminé les valeurs relatives de ρ_S , ρ_P et ρ_D. Nous les exprimerons par rapport à la vitesse totale de formation des niveaux n = 3 : $20\rho_D + 12\rho_P + 4\rho_S = \Sigma$. Le coefficient ρ_S/Σ varie rapidement en fonction de l'énergie incidente. Il faut donc déterminer les coefficients ρ à partir de courbes prises dans les mêmes conditions expérimentales.

Pour l'énergie incidente, la plus faible où l'on ait pu travailler, les coefficients ρ mesurés sont :

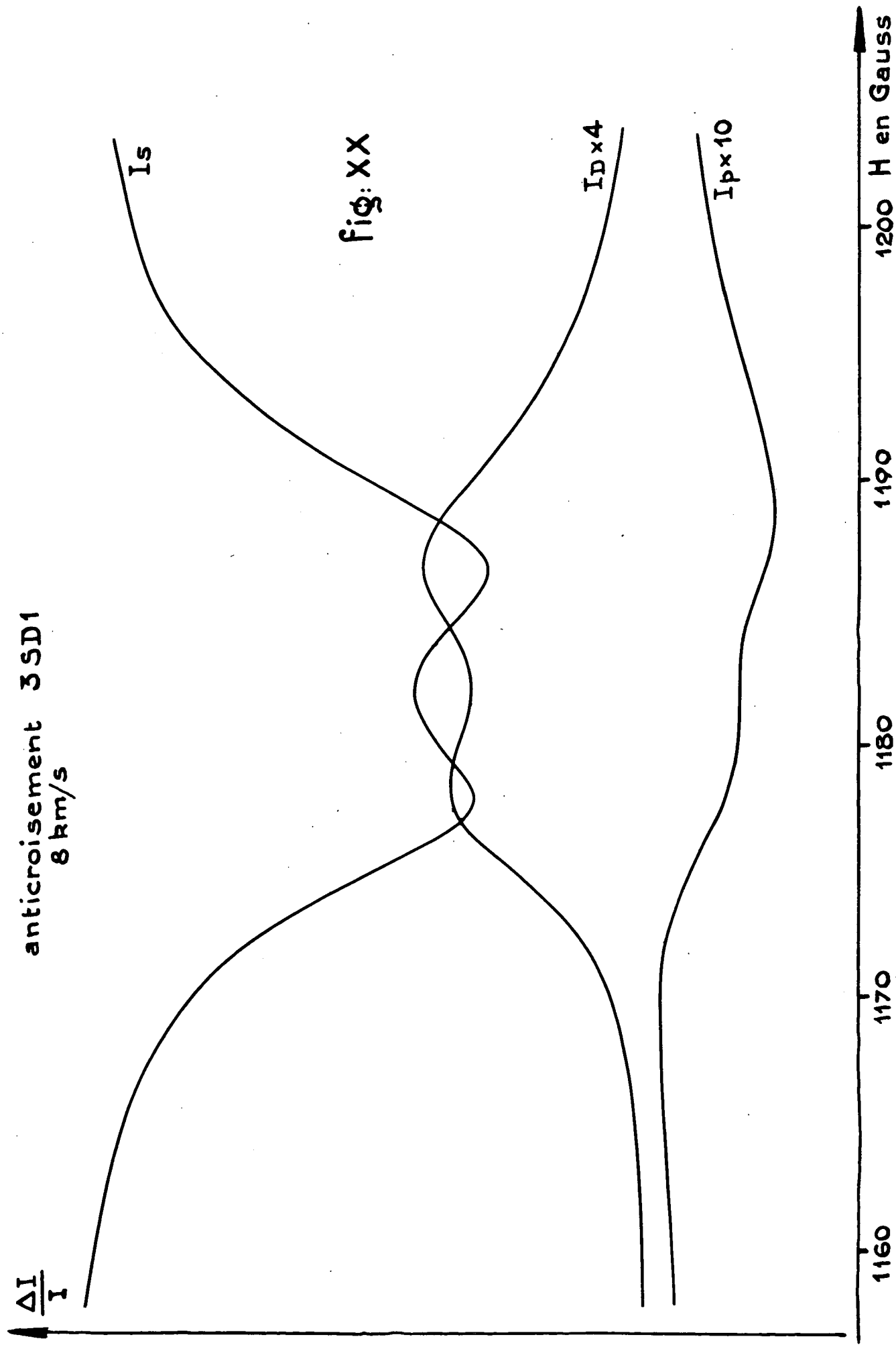

ΔI/I
anticroisement 3SD1
8 km/s
Is
ID x4
Ip x10
1160
1170
1180
1190
1200 H en Gauss

fig: XX

$$\rho_S/\Sigma = 0,008 \pm 0,001$$

$$\rho_P/\Sigma = 0,045 \pm 0,002$$

$$\rho_D/\Sigma = 0,021 \pm 0,001$$

tandis que pour une énergie incidente de 2 eV supérieure, la valeur de ρ_S/Σ a environ doublé.

La forme du signal d'anticroisement 3SD dépend peu des variations des coefficients ρ. Ces derniers n'ont d'influence que sur l'amplitude du signal.

b) Amélioration de la mesure de la vitesse

La forme de la courbe d'anticroisement dépend par contre de la valeur de $|\vec{\vartheta}_{H^\star}|$. Ici encore, nous l'avons calculée pour différentes valeurs de la vitesse d'explosion, (en négligeant l'influence de la vitesse thermique). Nous avons alors vérifié que la première détermination de $|\vec{\vartheta}_{H^\star}|$ à partir des 3PD est correcte. Mais de plus, le signal d'anticroisement 3SD1 permet une détermination plus précise de ce paramètre au seuil.

Nous avons porté, sur la figure XXI, les courbes calculées pour des vitesses d'explosion de 7,8 et 9 km/s, par rapport à une courbe expérimentale. Nous voyons ainsi très nettement le rôle de la vitesse.

On trouve : $|\vec{\vartheta}_{H^\star}| = 8,0 \text{ km/s} \pm 0,3 \text{ km/s}$

La détermination de la vitesse d'explosion par cet anticroisement est plus précise et surtout plus sûre. En effet, le signal de cet anticroisement résulte de la superposition de 2 anticroisements hyperfins seulement (voir introduction § C de VII), et, ainsi, il n'est pas sensible à l'alignement électronique que peut créer le processus d'excitation, dès que l'on s'éloigne un peu trop du seuil.

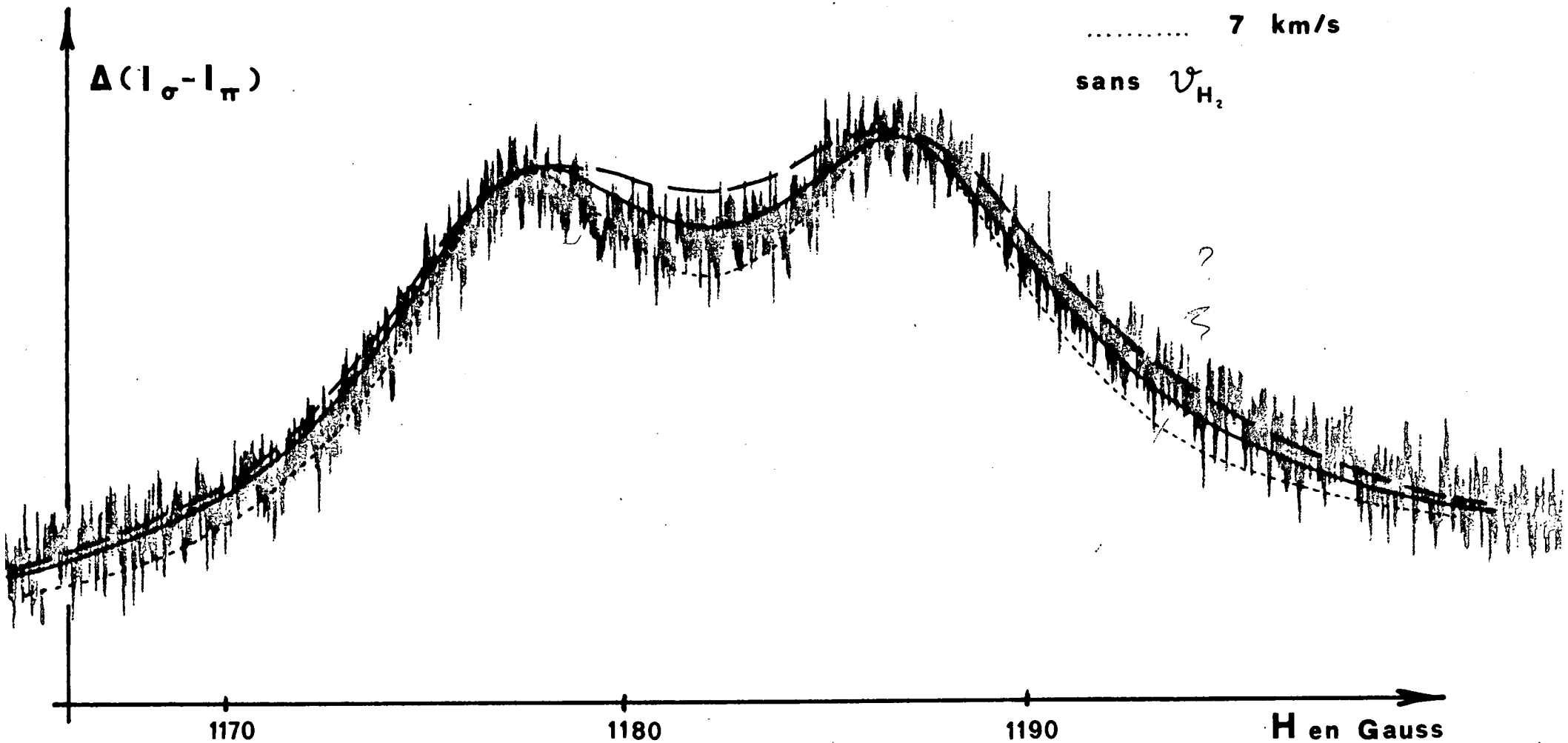

anticroisements
3 SD 1
courbes theoriques
9 km/s
8 km/s
7 km/s
sans ν_{H_2}
$\Delta(I_\sigma - I_\pi)$
1170
1180
1190
H en Gauss

Fig. XXI

Ici encore (figure XXII) nous voyons que l'influence de la vitesse thermique des molécules d'hydrogène, avant leur excitation, est faible.

c) La position

La figure XXIII montre une courbe expérimentale et les points théoriques pour les valeurs :

$$|\vec{\vartheta}_{H^*}| = 8 \text{ km/s} \quad \text{et } T = 1\,000 \text{ °K}$$

Nous voyons que l'accord entre les formes est excellent. Dans ces conditions, nous pouvons évaluer l'écart éventuel entre la position théorique et la position expérimentale :

$$H_{exp} = H_{th} + 0{,}14 \text{ G} \pm 0{,}28 \text{ G}$$

3) L'anticroisement $3^2S_{1/2}$ $m_j = -1/2$, $3^2D_{5/2}$ $m_j = -5/2$ (β.F)

Toute l'étude précédente a été reprise, sur cet anticroisement. Les résultats qu'on en tire, obtenus de manière indépendante de ceux du 3SD1, les confirment en tous points.

La figure XXIV montre l'influence des valeurs des vitesses de formation ρ_S , ρ_P et ρ_D , sur la forme et l'amplitude du signal d'anticroisement, en donnant aux atomes une vitesse d'explosion de 8 km/s (et en négligeant l'influence de $\vec{\vartheta}_{H_2}$).

La figure XXV montre la déformation de la courbe lorsqu'on change la grandeur de la vitesse d'explosion. Ici encore, il faut noter que cette forme ne dépend pratiquement pas des variations des valeurs relatives des coefficients ρ (notées dans le § 2-a).

La figure XXVI montre l'influence de la vitesse thermique. On voit que l'effet est là encore très faible.

3 SD1

Influence de la vitesse thermique

Fig. XXII

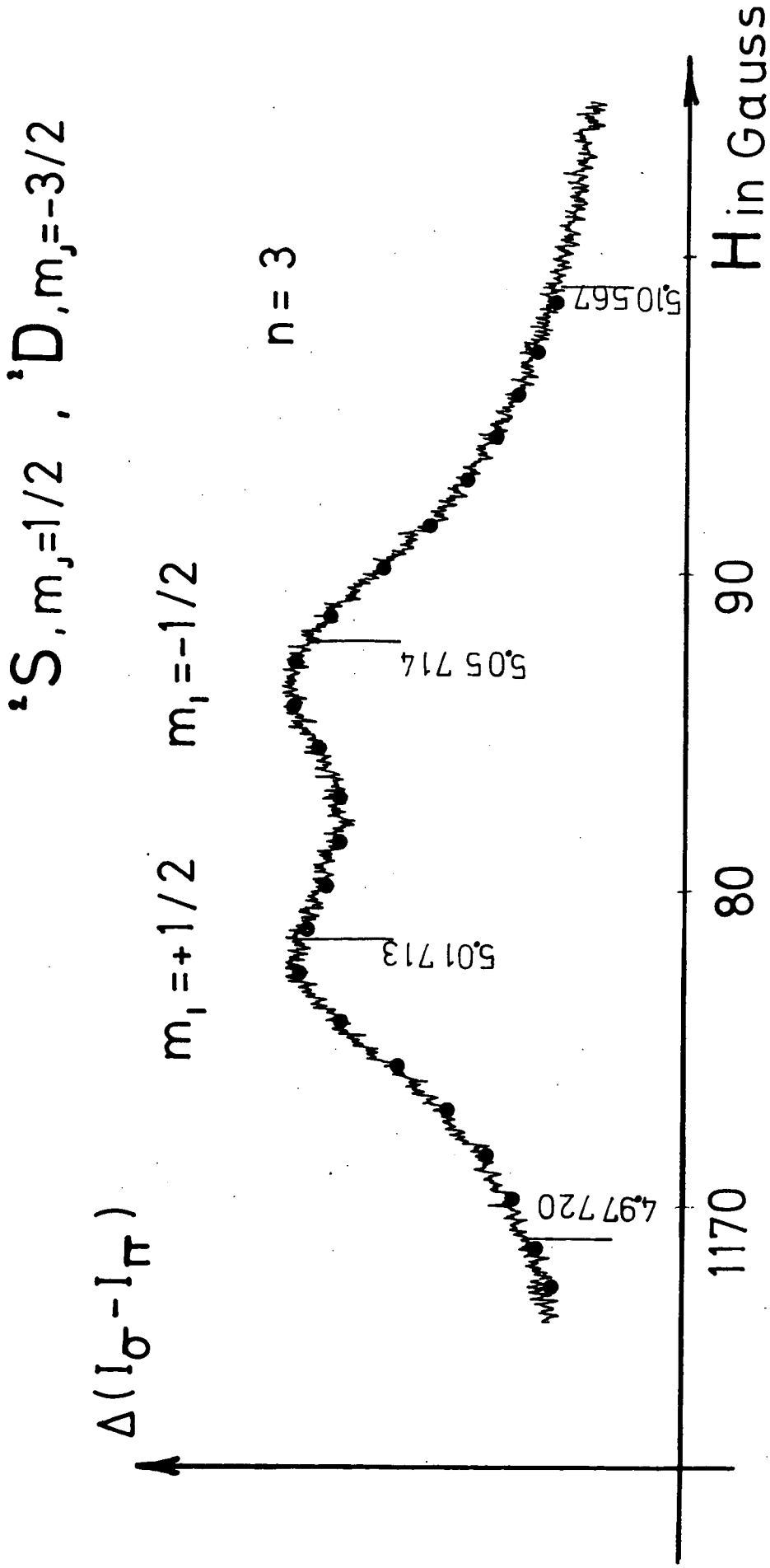

$^2S, m_j=1/2$, $^2D, m_j=-3/2$
n = 3
$m_l=+1/2$
$m_l=-1/2$
5.01713
5.05714
5.10567
4.97720
1170
80
90
H in Gauss
$\Delta(I_\sigma - I_\pi)$

Fig. XXIII

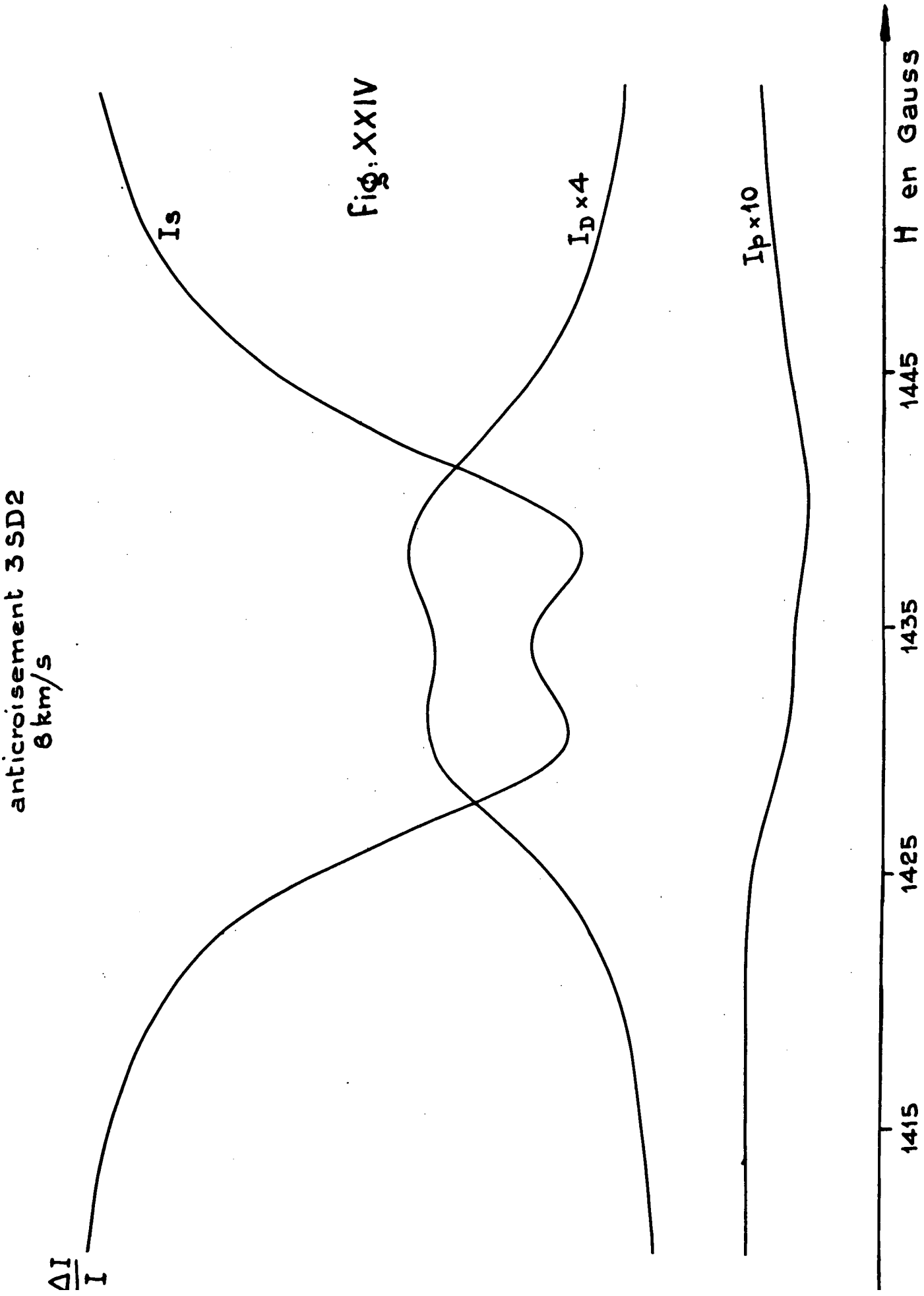

anticroisement 3SD2
8 km/s
$\frac{\Delta I}{I}$
I_S
$I_D \times 4$
$I_P \times 10$
1415
1425
1435
1445
H en Gauss

Fig. XXIV

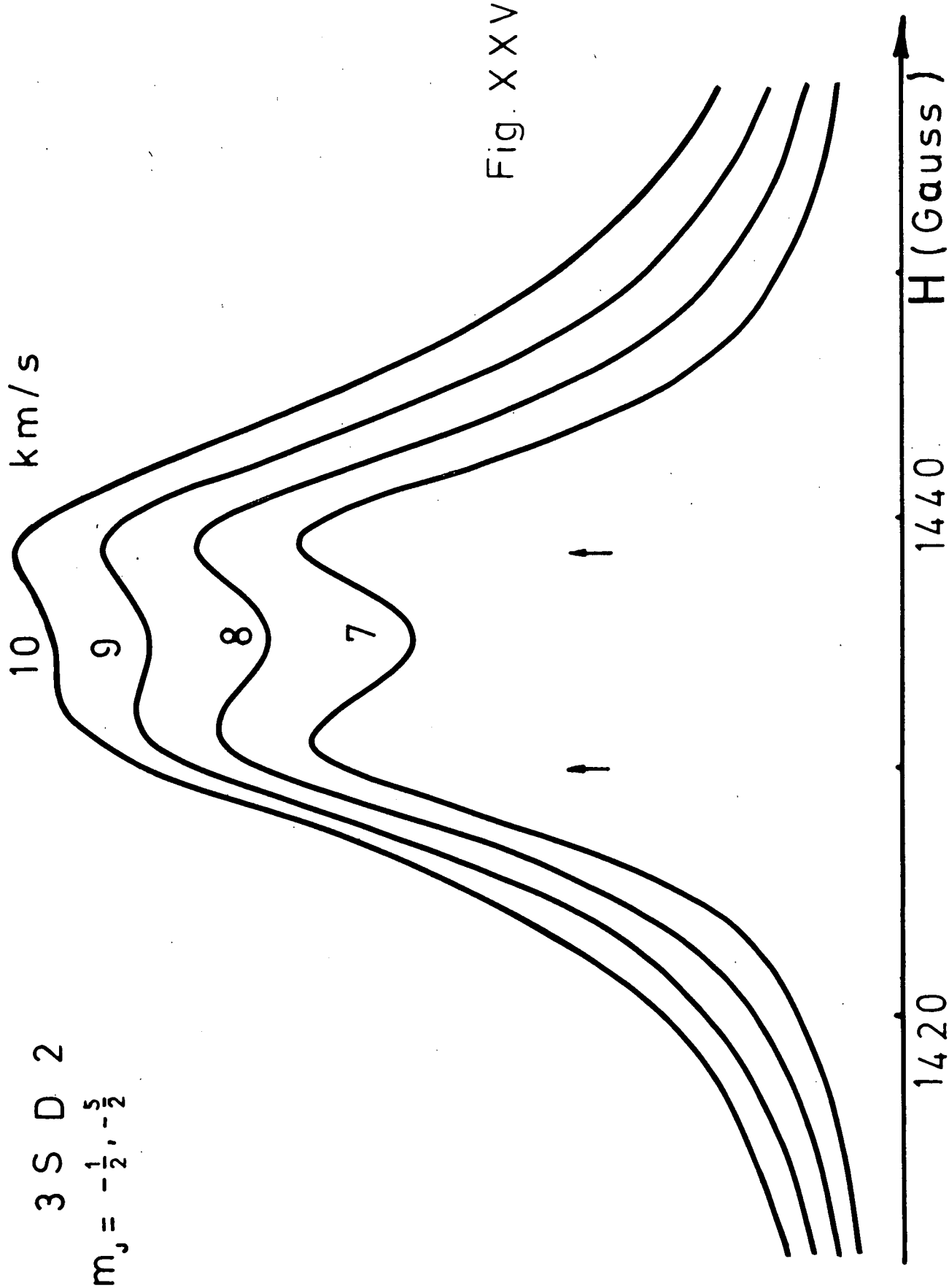


Fig. XXV

courbes théoriques

8 km/s

—— sans vitesse thermique

$^2S\ m_j=-1/2$, $^2D\ m_j=-5/2$

oo à 1000° K

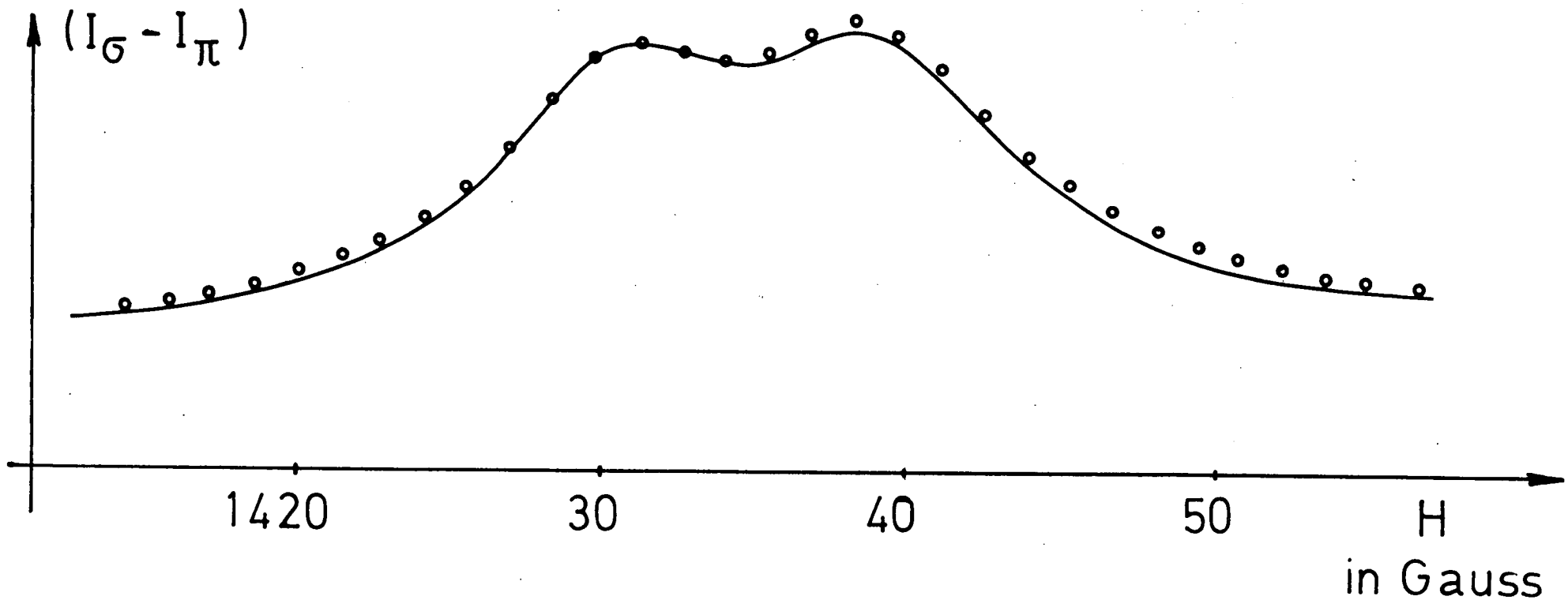


Fig. XXVI

La figure XXVII montre la courbe expérimentale obtenue dans les mêmes conditions que celle de la figure XXIII, et les points théoriques, calculés avec les mêmes valeurs des paramètres ρ_S , ρ_P , ρ_D et $|\vec{\vartheta}_{H^*}|$ que ceux de la figure XXIII. Nous voyons que l'accord est excellent. L'écart entre les positions théorique et expérimentale est :
$\Delta H = 0,20 \pm 0,22$ G.

Il faut souligner que toutes ces courbes sont prises près du seuil, de sorte que l'alignement atomique est négligeable.

4) L'ensemble des anticroisements en champ magnétique fort

a) Inventaire des anticroisements

Il existe en champ magnétique plus fort (entre 1300 et 2400 G) un ensemble de 5 × 2 anticroisements, non résolus (nous rappelons la nomenclature de Lamb entre parenthèses):

3^2S	$m_j = +1/2$	3^2P	$m'_j = -1/2$	(α,c)	$m_f = 1$, $m'_f = 0$	à 1373,1 G
					$m_f = 0$, $m'_f = -1$	à 1388,5 G
3^2S	$m_j = -1/2$	3^2P	$m'_j = -3/2$	(α,d)	$m_f = 0$, $m'_f = -1$	à 2105,9 G
					$m_f = -1$, $m'_f = -2$	à 2090,8 G
3^2P	$m_j = -1/2$	3^2D	$m'_j = -3/2$	(d,J)	$m_f = 0$, $m'_f = -1$	à 1977,5 G
					$m_f = -1$, $m'_f = -2$	à 1974,7 G
3^2P	$m_j = 1/2$	3^2D	$m'_j = -1/2$	(c,I)	$m_f = 1$, $m'_f = 0$	à 2291,6 G
					$m_f = 0$, $m'_f = -1$	à 2297,9 G
3^2S	$m_j = 1/2$	3^2D	$m'_j = 1/2$	(α,C)	$m_f = 1$, $m'_f = 1$	à 2330,9 G
					$m_f = 0$, $m'_f = 0$	à 2349,4 G

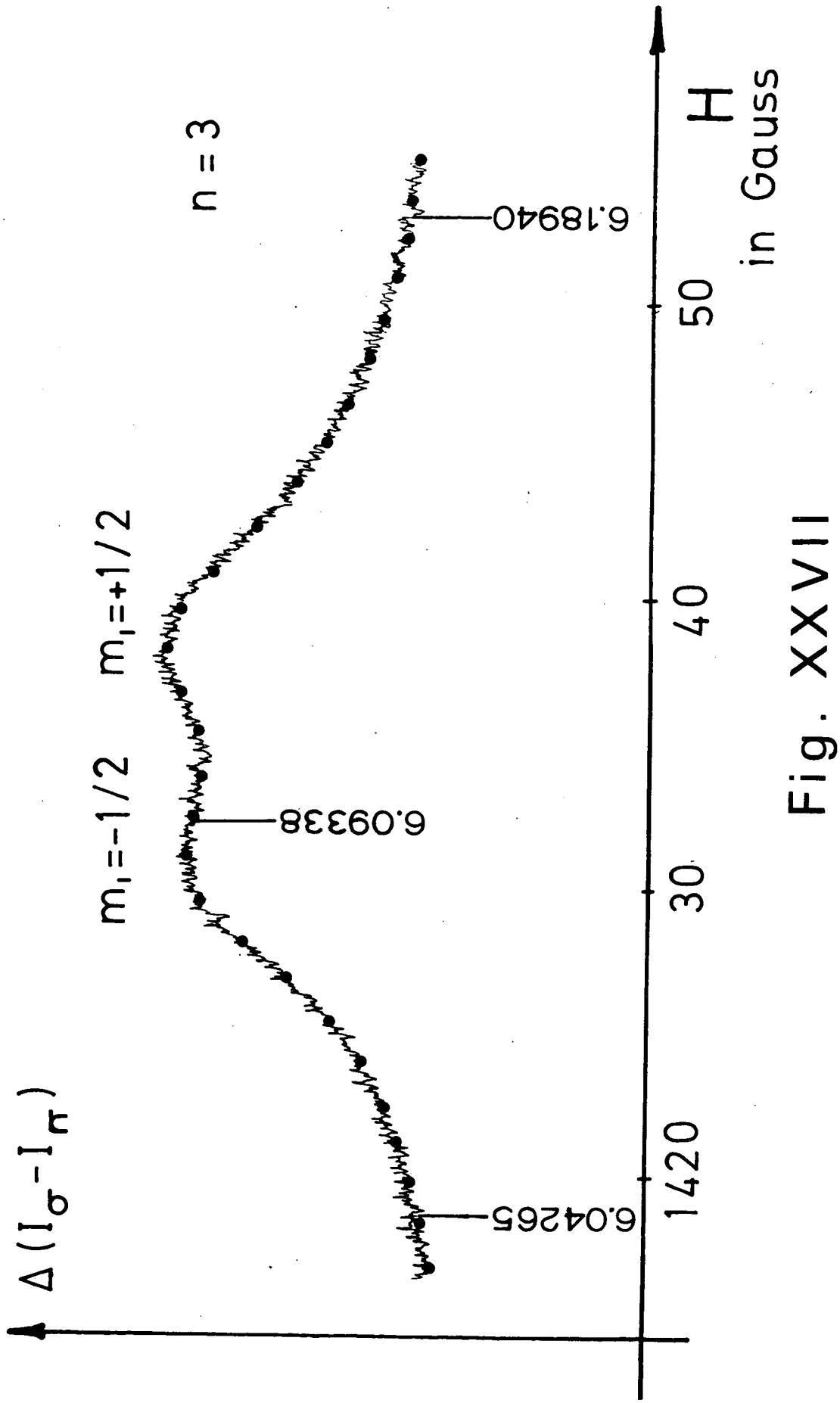

$^2S, m_j=-1/2$, $^2D, m_j=-5/2$
n = 3
$m_l=-1/2$
$m_l=+1/2$
6.09338
6.18940
6.04265
$\Delta(I_\sigma - I_\pi)$
1420
30
40
50
H
in Gauss

Fig. XXVII

Les huit premiers anticroisements sont par couplage direct, les deux derniers sont par couplage indirect avec $\Delta m_j = 0$.

b) Cas de l'anticroisement 3SD $\Delta m_j = 0$

Dans ce dernier cas, il est important de rappeler que cette fois, la cohérence induite entre les sous-niveaux n'est pas annulée par la répartition isotrope des vitesses autour de Oz (cf. chapitre V, § C-6-e). C'est là une complication qui n'apparaît pas ailleurs.

Il apparaît, d'autre part, une autre difficulté. En effet les sous-niveaux ^2S $m_j = 1/2$ et ^2D $m_j = 1/2$ sont couplés de 3 manières différentes par l'intermédiaire d'un sous-niveau 3^2P. On ne peut donc pas appliquer brutalement les résultats obtenus au chapitre V ; ceux-ci ont été établis dans le cas d'un seul couplage par un niveau intermédiaire.

Cependant, la courbe expérimentale de cet anticroisement se superpose aux courbes des anticroisements énumérés plus haut, d'amplitude plus grande (voir figure XXVIII). Il est donc difficile à observer ; nous nous contenterons d'une étude théorique approchée, après avoir estimé l'erreur commise en se ramenant à un problème à 3 niveaux.

Pour cela, nous avons cherché à comparer les différents coefficients de couplage exprimés en MHz; ils sont rassemblés dans le tableau VII.

Sous-niveau P intermédiaire	V_0 MHz	W_0 MHz	Ω MHz	$V_0 W_0 / \Omega$ MHz
$m_j = 3/2$	- 6,647	- 0,0814	6 205	+ 0,000087
$m_j = -1/2$ (issu de $^2P_{3/2}$)	5,914	+ 1,929	- 1 715	- 0,006652
$m_j = -1/2$ (j=1/2) (issu de $^2P_{1/2}$)	3,034	- 3,582	- 5 487	+ 0,001981

Les notations utilisées ont été définies au chapitre V § C-1 et 2, V_0 et W_0 ont été calculés pour un champ électrique transversal de 1 V/cm.

Les signaux d'anticroisement comprennent :

- une contribution due à la cohérence induite : son amplitude est proportionnelle à VW/Ω

- une contribution due aux populations, d'amplitude proportionnelle à $|VW|^2 / \Omega^2$

L'effet du couplage par le sous-niveau $3^2P_{3/2}$ $m_j = 3/2$ est au plus 1 % de l'effet des autres couplages. Nous commettons une erreur faible en le négligeant et nous sommes ramenés à un problème à 4 niveaux.

En première approximation, c'est-à-dire à l'ordre de perturbation le plus bas, les différents effets s'ajoutent algébriquement. Les signaux attendus sont alors :

- pour le terme cohérent (Eq. III.7 et chapitre V § C-6):

$$\Delta I_C \propto \sqrt{\gamma_S \gamma_D}\ \sqrt{\mathcal{P}^{2,1}_{3,0}\,\mathcal{P}^{2,1}_{3,2}}\ \Big(\sum_{j"m"} \mathcal{A}\mathcal{A}'^{*} + \text{c.c.}\Big)(\Sigma\ VW/\Omega)$$

$$\times\ \frac{\omega}{\omega^2 + \{(\gamma_S+\gamma_D)/2\}^2}\,(\rho_S/\gamma_S - \rho_D/\gamma_D)$$

- pour les populations (chapitre V § C-2) :

$$\Delta I_i \propto \Sigma(f_S^{\lambda} - f_D^{\lambda}) \times \Sigma\,\frac{|VW|^2}{\Omega^2}\,\frac{(\gamma_S + \gamma_D)}{\omega^2 + \{(\gamma_S+\gamma_D)/2\}^2}\,(\rho_S/\gamma_S - \rho_D/\gamma_D)$$

Nous avons évalué numériquement les rapports de branchements f_S, f_D, et les termes croisés des probabilités de transition pour les deux polarisations π et σ et leurs différences respectives. Numériquement les amplitudes des signaux ΔI_C et ΔI_i ont pour valeurs :

$$(\Delta I_C)^{\pi-\sigma}_{max} \propto \left| - 0{,}0245 \times 2 \sqrt{\gamma_S \gamma_D} \left(\sum VW/\Omega \right) \left(2/(\gamma_S+\gamma_D) \right) \left(\rho_S/\gamma_S - \rho_D/\gamma_D \right) \right|$$

et

$$(\Delta I_i)^{\pi-\sigma}_{max} \propto 0{,}2503 \left(\sum |VW|^2/\Omega^2 \right) \left(2/(\gamma_S+\gamma_D) \right) \left| \left(\rho_S/\gamma_S - \rho_D/\gamma_D \right) \right|$$

Si l'on tient compte de la distribution isotrope des vitesses (c'est-à-dire en intégrant sur l'angle $\varphi = (\vec{\vartheta}_{H^*}, \vec{O}z)$) et de la valeur numérique de $|\vec{\vartheta}_{H^*}| = 8$ km/s :

$$(\Delta I_i)^{\pi-\sigma}_{max} / (\Delta I_C)^{\pi-\sigma}_{max} \simeq 4{,}7$$

L'effet lié à la cohérence est donc en principe observable ; c'est le seul anticroisement qui ait cette propriété dans nos conditions expérimentales. En fait, on voit que les ordres de grandeur des probabilités de transition sont tels qu'il est près de 5 fois plus petit que l'effet lié aux populations.

Si l'on se limite au seul couplage par l'intermédiaire du niveau ^2P $m_j = - 1/2$ (issu de $^2P_{3/2}$), on commet une erreur systématique de 8 % environ sur ΔI_i et de 30 % environ sur ΔI_C (c'est-à-dire de 6 % par rapport à ΔI).

Le fait de se ramener à un problème à trois niveaux, entraîne donc une erreur de l'ordre de 15 %. La difficulté de discerner cet anticroisement sur le flanc de la courbe résultante des autres anticroisements est telle qu'un calcul approché à 15 % peut se justifier.

C'est dans ces conditions que nous avons calculé le signal d'anticroisement attendu, à partir des valeurs numériques des coefficients ρ déterminés précédemment. Nous avons tenu compte alors du signal lié à la cohérence induite.

c) Les anticroisements S.P

Les atomes excités dans des sous-niveaux $^2S_{1/2}$ ou $^2P_{1/2}$ rayonnent de manière isotrope, tandis que des atomes portés dans des sous-niveaux de $^2P_{3/2}$ rayonnent de manière anisotrope. Il en résulte que les signaux d'anticroisement SP ne sont observables, en polarisation, que si le sous-niveau ^2P est de j = 3/2 ; toutefois, comme les atomes dans les niveaux 3^2P se désexcitent à 88 % par l'émission de Lyman β (1050 Å) et à 12 % sur H_α, ces anticroisements donnent des signaux faibles.

Nous avons calculé la courbe théorique résultant des 4 anticroisements hyperfins, toujours avec une vitesse d'explosion $|\vec{\vartheta}_{H^\star}|$ = 8 km/s. L'amplitude du signal est déterminée par les valeurs des coefficients ρ déjà fixées.

Ces anticroisements sont très larges, de sorte qu'il est impossible d'en déduire une mesure précise de la structure $^2S_{1/2}$ - $^2P_{3/2}$. Nous constatons, d'autre part, tant sur les courbes expérimentales que sur les courbes théoriques que les deux premiers anticroisements sont très peu intenses et pratiquement négligeables.

d) Les anticroisements P.D

Ici encore, nous avons calculé le signal attendu pour l'ensemble des 4 anticroisements hyperfins entre sous-niveaux P et D pour une vitesse $|\vec{\vartheta}_{H^\star}|$ = 8 km/s et pour les coefficients ρ déjà fixés.

e) Comparaison entre les prévisions théoriques et les résultats expérimentaux.

La figure XXVIII montre sur la courbe expérimentale des points théoriques. Il apparaît un désaccord systématique, dans la région des anticroisements SD Δm_j = 0, inférieur à l'erreur de 15 % qui avait été introduite par les simplifications du calcul théorique.

Ce point mis à part, l'accord entre les courbes expérimentales et les valeurs théoriques est satisfaisant pour l'ensemble des anticroisements observés en champ magnétique "fort".

5) Cas des anticroisements (3^2S $m_j = 1/2$, 3^2D $m_j = -3/2$ issus de $^2D_{3/2}$) (α, J)

Les deux croisements hyperfins sont situés respectivement à 849,90 et 842,56 G. Les sous-niveaux S et D sont mélangés par 2 couplages indirects par l'intermédiaire des deux sous-niveaux $m_j = -1/2$, issus de $3^2P_{3/2}$ et de $3^2P_{1/2}$. C'est la même difficulté que pour l'anticroisement SD $\Delta m_j = 0$.

Les ordres de grandeur des coefficients de couplage, sont résumés dans le tableau VIII.

Sous-niveau P $m_j = -1/2$	V_0 MHz	W_0 MHz	Ω MHz	$\lvert VW\rvert/\Omega$ MHz
Issu de $^2P_{3/2}$	3,736	- 0,3591	1 067	0,00126
Issu de $^2P_{1/2}$	3,611	3,519	- 1 999	- 0,00635

Ces valeurs ont été calculées pour un champ électrique transversal de 1 V/cm. Nous voyons que les ordres de grandeur sont les mêmes que pour l'anticroisement SD , $\Delta m_j = 0$. La différence des rapports de branchement entre les polarisations π et σ est elle aussi du même ordre de grandeur que pour ce dernier : 0,3090 (contre 0,2503). Cependant le signal attendu doit être beaucoup plus faible, dans le rapport : $(E_1/E_2)^4$ (où E_1 et E_2 sont les champs électriques effectifs pour chaque anticroisement : $\vec{E} = \vec{\vartheta}_{H^\star} \Lambda \vec{H}$) soit dans la puissance quatrième du rapport de leurs positions :

$$(H_1/H_2)^4 = (847/2340)^4 \sim 1/58$$

Cet anticroisement est donc difficilement observable. Son amplitude est inférieure à 2.10^{-4} de l'intensité totale.

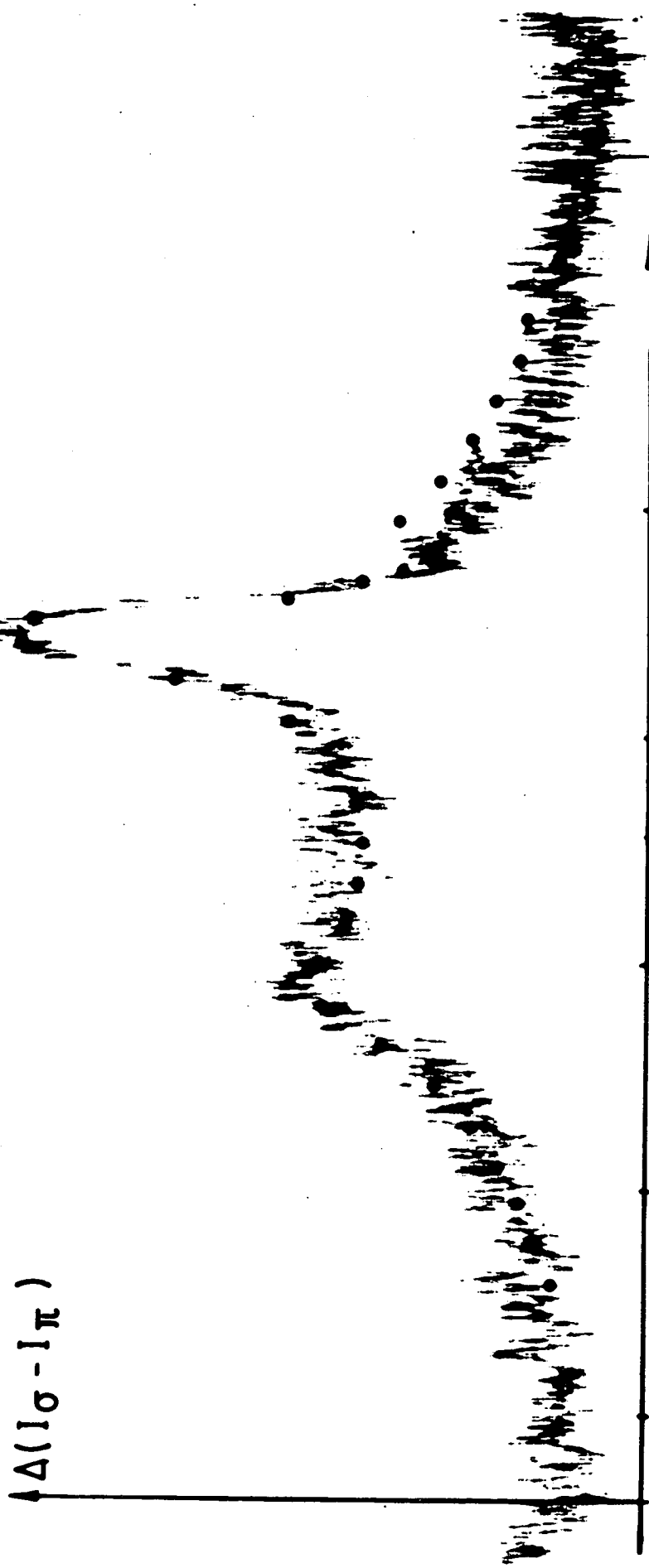


Fig XXVIII
anticroisements en champ fort

6) Résumé des observations au seuil

Nous avons étudié en polarisation, 22 anticroisements ; souvent ceux-ci n'étaient pas résolus. Grâce à seulement 3 paramètres ajustables indépendamment les uns des autres :

- vitesse des atomes : $\vec{v}_{H^*}$
- valeurs relatives des coefficients de formation des sous-niveaux : $\rho_S/\Sigma\rho$, $\rho_P/\Sigma\rho$ et $\rho_D/\Sigma\rho$

nous avons rendu compte des formes et des amplitudes relatives des signaux liés à ces 22 anticroisements.

L'étude précédente est donc cohérente et fournit une justification a posteriori de la validité de l'utilisation des hypothèses formulées et en particulier de l'hypothèse d'isotropie des vitesses d'explosion au seuil du processus de formation des atomes excités.

D - ETUDE DES ANTICROISEMENTS POUR DES ENERGIES D'EXCITATION LEGEREMENT SUPERIEURES AU SEUIL

Au seuil, il n'est pas possible d'étudier les variations d'intensité de la lumière émise : il y a trop d'effets parasites. Il nous faut donc utiliser des énergies d'excitation légèrement supérieures pour pouvoir comparer les informations obtenues par ces deux techniques.

On a alors à résoudre une autre difficulté :

Lorsque les électrons incidents ont une énergie supérieure au seuil d'excitation, il apparaît de la polarisation sur la lumière émise par les atomes excités. ZARE a montré ([52]) que, dans ce cas-là, la répartition des vitesses des atomes excités (qui sont des fragments de dissociation) est anisotrope.

1) Les effets d'une répartition anisotrope

La distribution angulaire des vitesses des fragments, est liée à la direction prise par l'axe de la molécule au moment de la dissociation (52) (48).

a) Si la dissociation se produit après un temps court par rapport à la période de rotation moléculaire (cas d'un niveau dissociatif), la distribution angulaire des fragments peut se mettre sous la forme

$$f_d(\theta) \propto 1 + \alpha \cos^2 \theta$$

où θ est l'angle du vecteur-vitesse avec la direction Oz du faisceau d'électrons : l'anisotropie de l'excitation demeure au moment de la dissociation. Le paramètre d'anisotropie α dépend de l'angle β que font les axes des molécules alignées avec Oz et du nombre quantique Λ de la molécule. Le paramètre α peut prendre toutes les valeurs supérieures ou égales à - 1.

Par exemple, le cas $\alpha = -1$ correspond à des molécules excitées dans un niveau Σ^+, $\alpha = +1$ à des molécules excitées dans un niveau Π.

b) Au contraire, si le processus de dissociation a lieu au bout d'un temps τ beaucoup plus long que la période de rotation de la molécule - cas d'un niveau prédissociatif - ($1/\omega \sim 2.10^{-14}$ s pour la rotation d'un niveau de $J = 1$, $\tau >> 1/\omega$ pour un niveau prédissociatif). La molécule a le temps de décrire un grand nombre de tours avant de se dissocier ; la distribution angulaire des fragments ne conserve alors qu'une partie de l'anisotropie créée au début de l'excitation.

JONAH (70) a montré que des molécules orientées perpendiculairement au faisceau d'électrons se dissociaient en fragments dont la distribution angulaire, pour $\omega\tau >> 1$, est proportionnelle à :

$$f_P(\theta) \propto 1 - \frac{1}{3}\cos^2\theta$$

Nous avons calculé le signal de l'anticroisement (3^2S $m_j = -1/2$, 3^2D $m_j = -5/2$) pour une vitesse d'explosion de 8 km/s, en donnant différentes valeurs au paramètre d'anisotropie. Les résultats sont représentés sur la figure XXIX.

On y voit que l'amplitude du signal en dépend, mais que sa forme varie très peu, en particulier si la répartition angulaire est proportionnelle à $f_P(\theta)$ (cas d'une prédissociation). Au-dessus du seuil, on observe des différences de populations à l'intérieur d'un même terme (n^2L): les différents coefficients ρ dépendent de chaque sous-niveau et sont trop nombreux pour être déterminés. Nous ne pouvons en connaître alors qu'un ordre de grandeur. Des mesures précises des amplitudes des signaux d'anticroisement, ne pouvant permettre de déterminer tous les coefficients ρ, ne sont plus alors nécessaires, et l'erreur systématique sur ces dernières, liée à l'anisotropie de la répartition des vitesses, est négligeable.

2) Conséquences des différences de populations créées à l'intérieur d'un même terme.

Pour les anticroisements 3PD, le signal correspond à la superposition des 4 anticroisements (en négligeant la structure hyperfine) dont les amplitudes relatives sont très sensibles à l'alignement : elles sont proportionnelles aux différences de populations (ρ/γ) entre le sous-niveau D et le sous-niveau P qui s'anticroisent ; or celles-ci sont très voisines, si bien qu'une faible différence entre les vitesses de formation de 2 sous-niveaux $^2D\ m_1$ et $^2D\ m_2$, (par exemple) entraîne un effet très sensible sur les amplitudes relatives des anticroisements $^2D\ m_1$, $^2P\ m_1'$ et $^2D\ m_2$, $^2P\ m_2'$.

Il n'est pas possible, dans ces conditions, de comparer les courbes expérimentales aux courbes précédemment calculées.

Effets d'anisotropie sur 3SD2

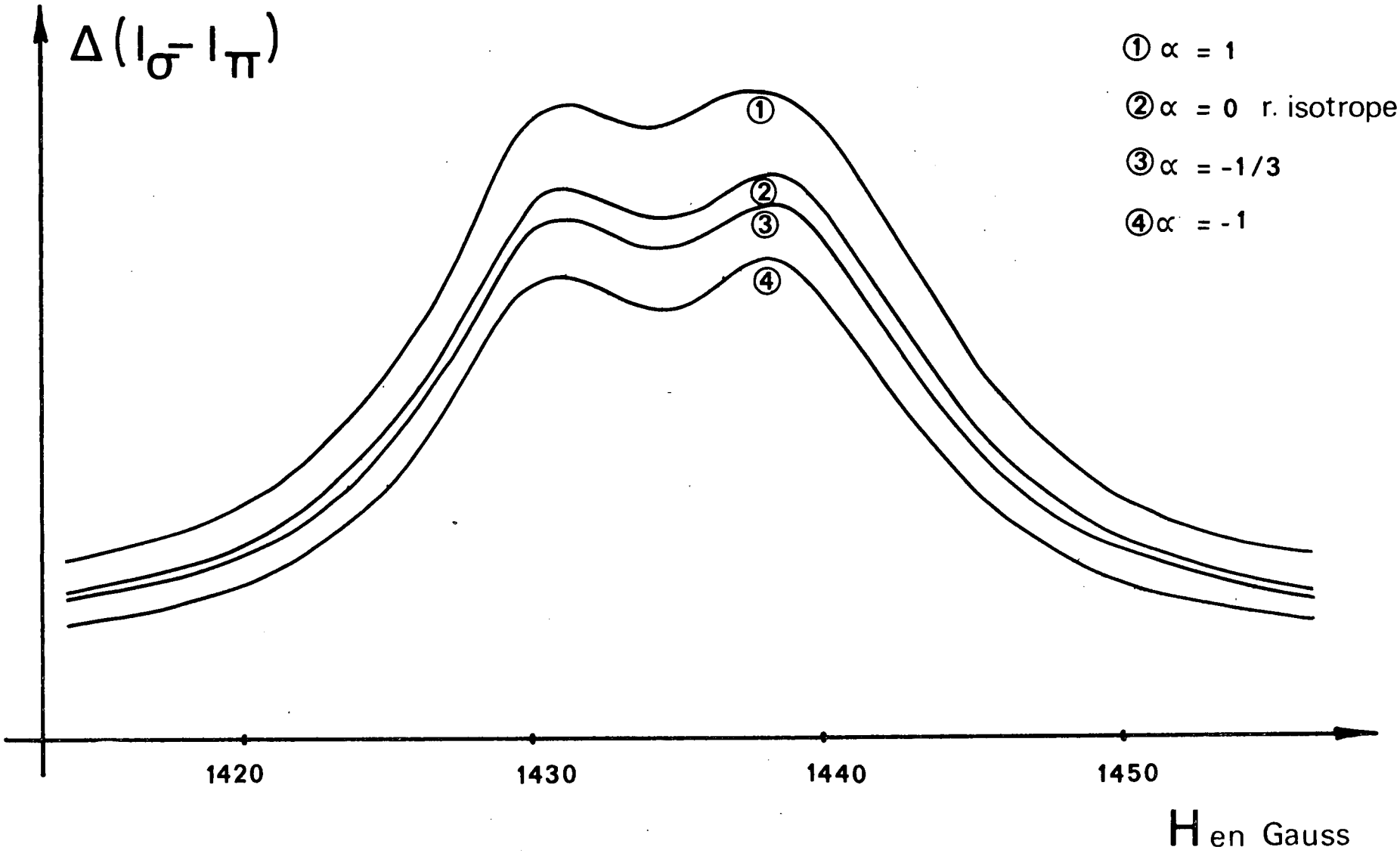


Fig. X X IX

L'ensemble des anticroisements en champ magnétique fort est, lui aussi, sensible à cet alignement.

Pour dépouiller ces courbes, il faudrait trop de paramètres ajustables et sans aucun moyen de contrôler leur détermination, pour que cela ait un sens.

Ainsi, il ne reste que les anticroisements 3SD1 et 3SD2 qui soient suffisamment bien résolus pour être exploitables.

3) Les anticroisements 3SD1, 3SD2

Nous remarquons très vite que, pour une énergie d'excitation comprise entre 21 et 27 eV environ, les signaux conservent la même forme et la même amplitude.

A partir de leur forme et de leur largeur, on peut déterminer, comme précédemment une valeur de $|\vec{\vartheta}_{H^\star}|$.

Les amplitudes des signaux ne changent pas en valeur relative de manière brutale quand l'énergie du faisceau d'électrons passe du seuil à une énergie d'excitation de 21 eV ; par conséquent les coefficients ρ gardent les mêmes ordres de grandeur. Comme dans le cas précédent, les formes des signaux S.D ne dépendent pratiquement pas du peuplement des niveaux P. La valeur de $|\vec{\vartheta}_{H^\star}|$ correspondante est de 9 km/s environ. L'accord entre les courbes expérimentales et les courbes théoriques calculées pour 9 km/s est nettement moins satisfaisant qu'il ne l'était au seuil avec la vitesse de 8 km/s (Fig. XXX).

Ces calculs s'appuient sur une hypothèse : les atomes excités ont été formés avec une énergie cinétique bien déterminée, c'est-à-dire à partir d'un seul niveau prédissociatif différent de celui qui est atteint au seuil. Une telle situation est vraisemblable :

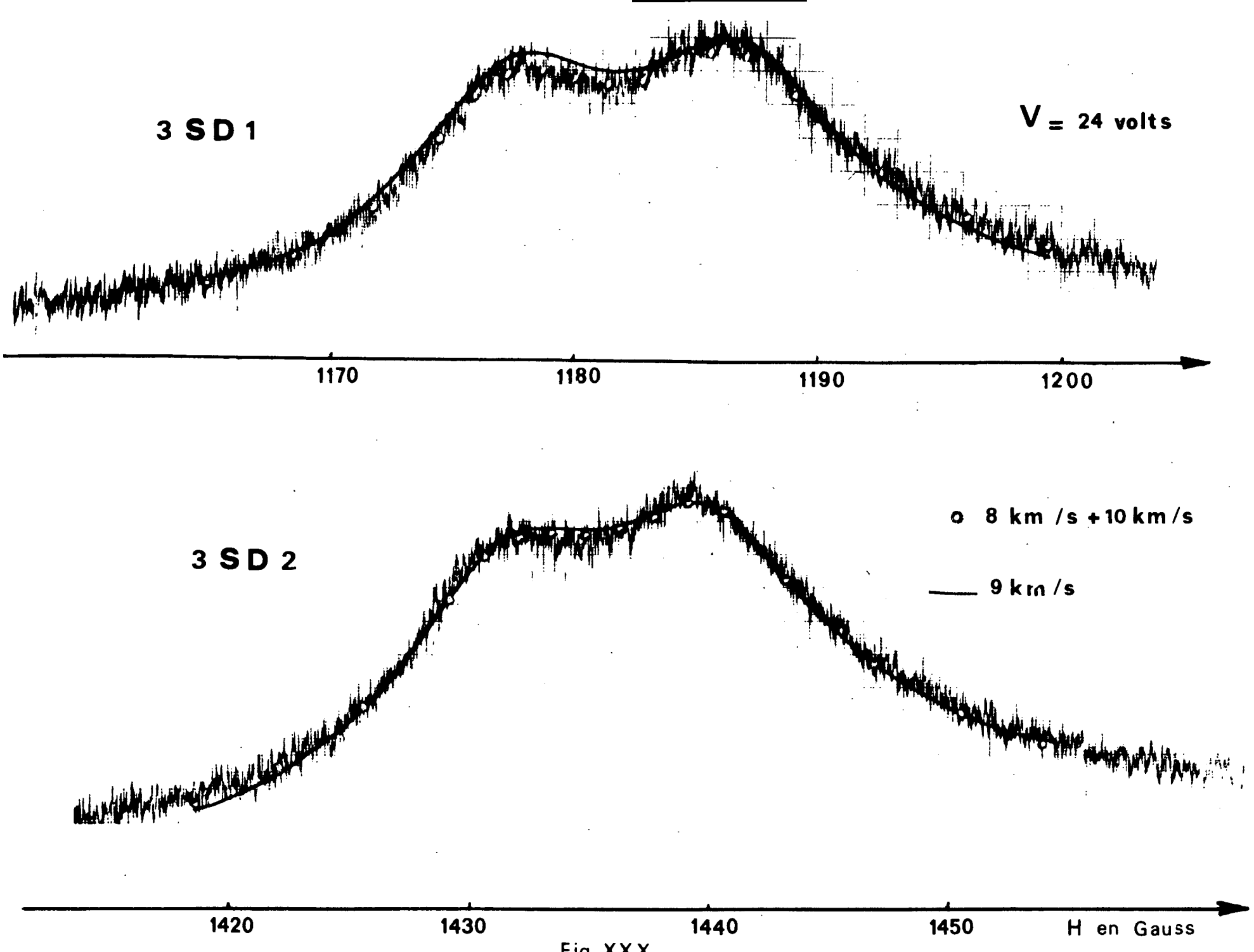

3 S D 1
V = 24 volts
1170
1180
1190
1200
3 S D 2
o 8 km /s +10 km /s
9 km /s
1420
1430
1440
1450
H en Gauss

Fig. XXX

Il suffit, pour rendre compte de la seule vitesse : 9 km/s de supposer que la section efficace du niveau, celui qui est atteint seul au seuil, a une croissance et une décroissance très rapides en fonction de l'énergie d'excitation, tandis que celle du second niveau a une croissance plus lente (Fig.XXXI).

Mais il est possible de formuler une autre hypothèse : le niveau atteint au seuil continue à être excité, et le deuxième niveau prédissociatif atteint est d'énergie telle que la vitesse moyenne des atomes des deux classes différentes de vitesses soit 9 km/s.

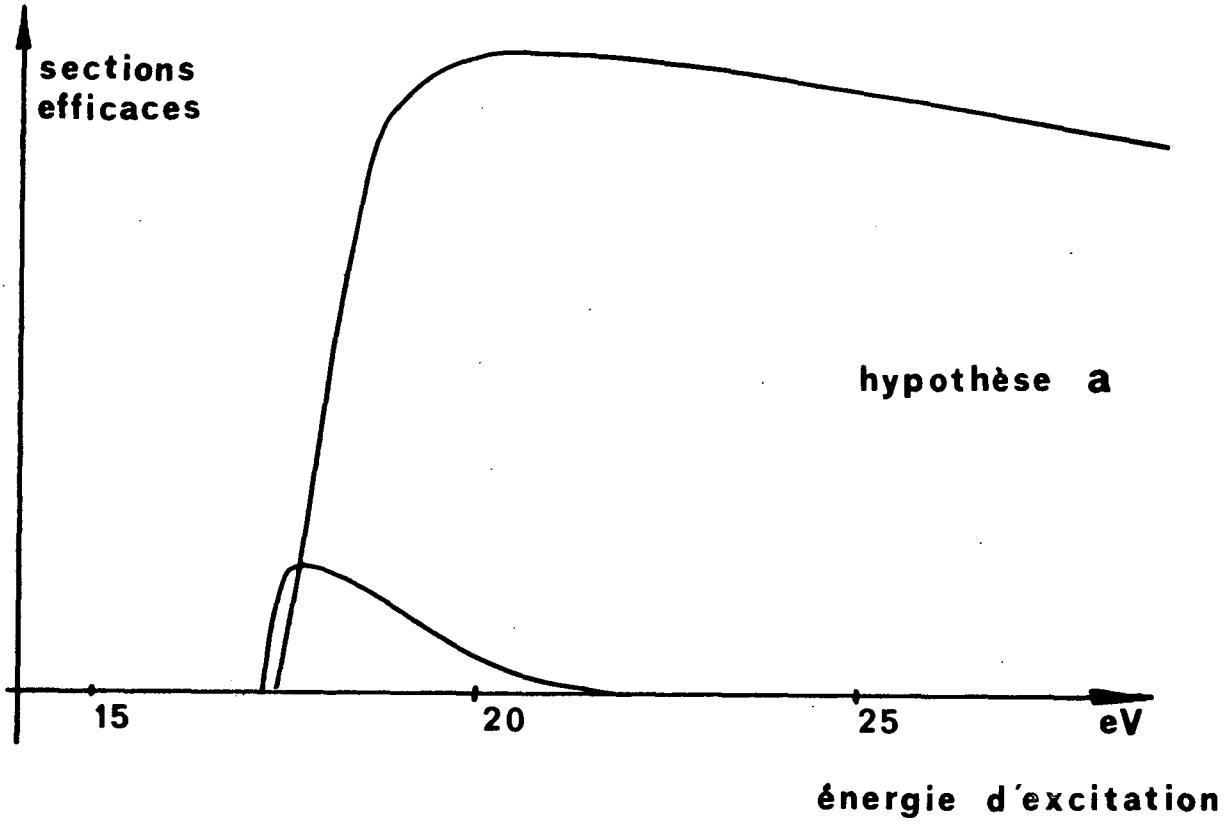
Nous avons vu, précédemment, que les formes de courbes dépendent de manière cruciale de $|\vec{\vartheta}_{H^*}|$ et sont peu sensibles à la vitesse thermique $\vec{\vartheta}_{H_2}$; c'est donc qu'elles sont sensibles à la valeur moyenne de la vitesse, et insensibles à sa distribution. Tout ceci pour dire qu'il n'est pas étonnant qu'une superposition de signaux d'anticroisement provenant d'atomes à des vitesses respectives de 8 et 10 km/s donne des résultats tout aussi acceptables que ceux obtenus à partir d'une distribution unique de vitesse à 9 km/s. (voir Fig. XXX). Nous touchons là une insuffisance de la présente méthode de détermination de $\vec{\vartheta}_{H^*}$. Nous discuterons ces valeurs dans le chapitre VIII.

Tout ce qui précède correspond à une étude des variations du taux de polarisation de la lumière émise - c'est la seule possible au seuil - il est important de comparer ces résultats avec ceux que l'on peut obtenir par l'étude des variations de l'intensité totale.

4) Etude des courbes en intensité totale

Une seule courbe est à peu près résolue, en intensité totale : elle est due au premier anticroisement entre sous-niveaux S et P.

a) Les anticroisements (3^2S $m_j = -1/2$, 3^2P $m_j = +1/2$)(β,e)


sections
efficaces
hypothèse a
15
20
25
eV
énergie d'excitation

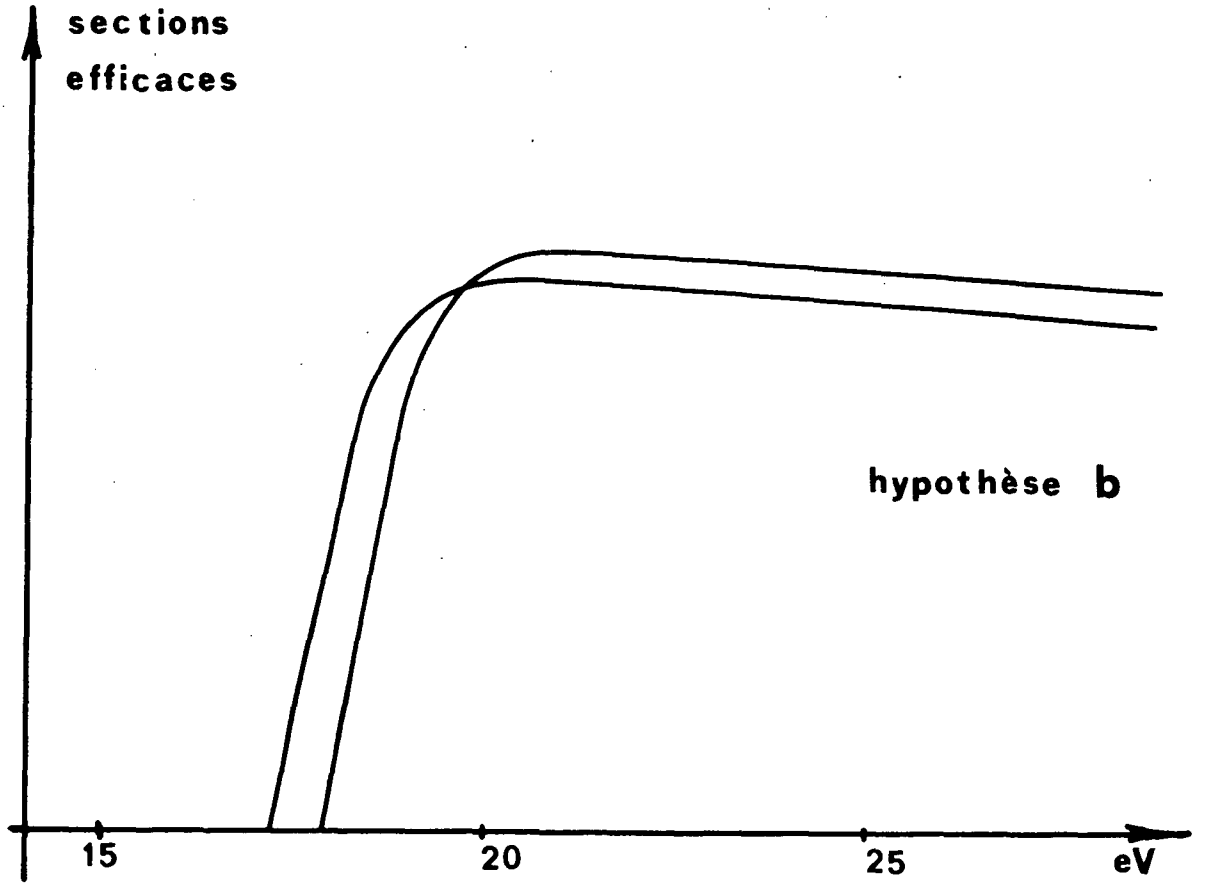

sections
efficaces
hypothèse b
15
20
25
eV

Fig. XXXI

Ils sont situés à 160,26 et 180,15 G.

La figure XXXII montre les courbes théoriques correspondant à différentes valeurs de $|\vec{\vartheta}_{H\star}|$.

Comme pour les anticroisements SD, la largeur des courbes observées ne change pas quand l'énergie d'excitation croît de 21 à 27 eV ; comme précédemment, cette largeur correspond à une vitesse de 9 km/s et,là encore, la forme de la courbe ne permet pas de trancher entre une répartition des vitesses unique à 9 km/s ou une superposition de deux répartitions à 8 et à 10 km/s, d'importances semblables.

La figure XXXIII montre une courbe expérimentale et des points calculés :

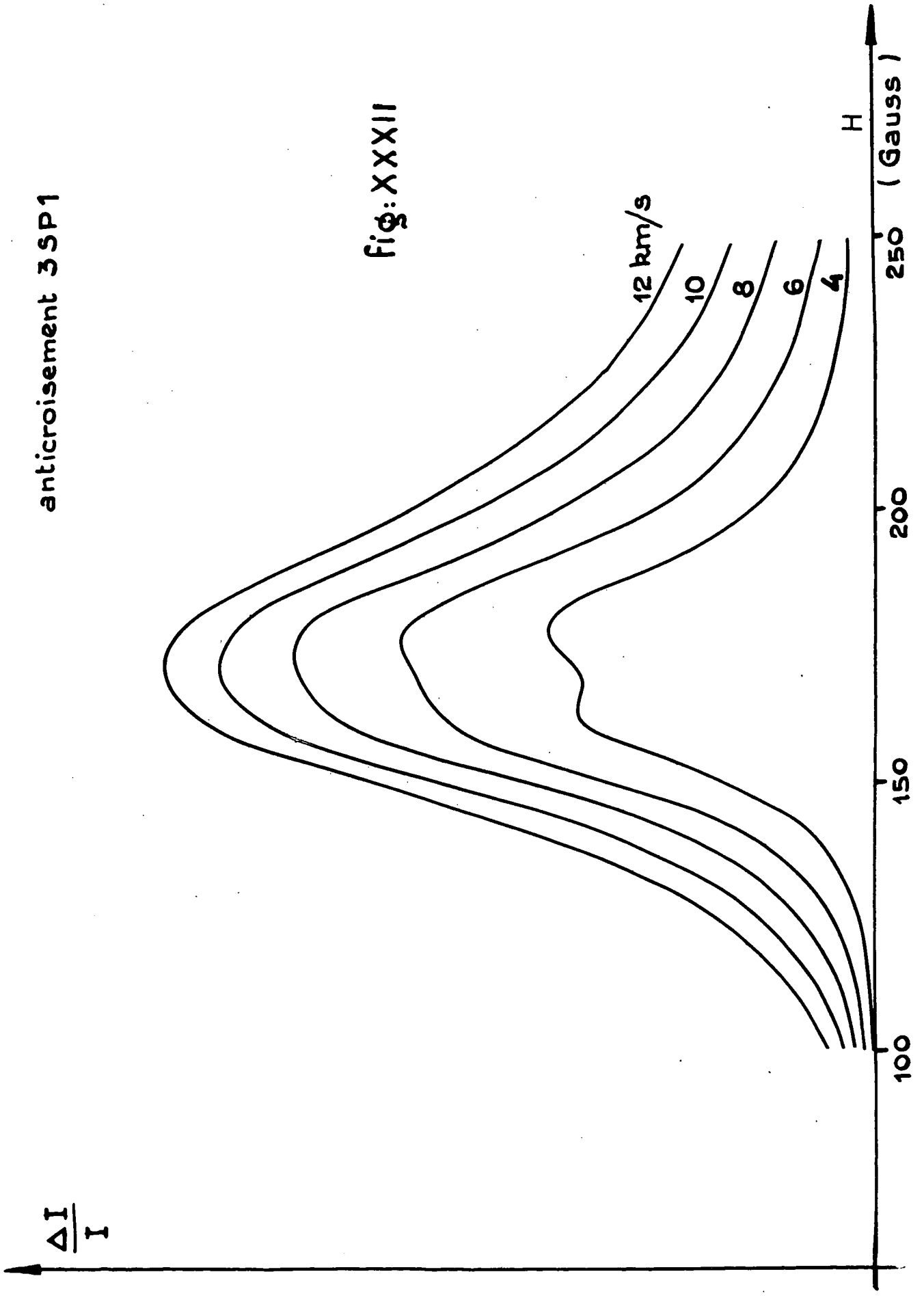
- pour une vitesse d'explosion de 9 km/s , en négligeant la vitesse thermique des molécules,
- pour une vitesse d'explosion de 9 km/s tenant compte de ϑ_H
- pour une superposition de deux répartitions à 8 et 10 km/s d'égale importance.

Nous voyons que, dans les trois cas l'accord est bon, et que l'influence de la vitesse thermique est vraiment négligeable. Cet anticroisement ne nous permet pas davantage de trancher entre les deux hypothèses précédentes.

De la comparaison de la position expérimentale avec la position théorique de l'anticroisement, nous pouvons déduire la structure en champ magnétique nul : $3^2S_{1/2} - 3^2P_{1/2}$, c'est-à-dire le Lamb-shift du niveau n = 3.

b) L'ensemble des autres anticroisements.

En observant la polarisation de la lumière émise, on peut isoler des anticroisements ou des groupes d'anticroisements ; au contraire, ce n'est pas possible lorsqu'on mesure les variations d'intensité totale, car l'anticroisement SP2 (α,c) : 3^2S $m_j = 1/2$, 3^2P $m_j = -1/2$ issu de $^2P_{3/2}$ (voir Fig. XIV) n'a plus une amplitude négligeable ; au contraire,


anticroisement 3SP1
Fig: XXXII
ΔI/I
12 km/s
10
8
6
4
100
150
200
250
H (Gauss)

il est l'un des plus intenses ; il s'étend des anticroisements 3PD aux anticroisements en champ fort. Les anticroisements SD deviennent, eux, pratiquement négligeables.

La figure XXXIV montre les courbes théoriques des différents anticroisements pour une vitesse de 9 km/s et pour une superposition : 8 km/s et 10 km/s.

Nous voyons que les formes de ces signaux sont bien celles des courbes observées Fig. XIV.

La courbe XXXV montre comment se placent, sur une courbe expérimentale, les points calculés pour des valeurs moyennes des paramètres ρ_S , ρ_P et ρ_D (en négligeant l'alignement), à 9 km/s.

Cette comparaison est en général peu aisée car les signaux se recouvrent sur une plage allant de 550 à 3 000 G et il est difficile de maintenir constantes les conditions d'excitation sur toute cette région de champ magnétique. Toutefois, en divisant l'intensité observée sur H_α par l'intensité d'un ensemble de raies moléculaires (à l'aide d'un ratiomètre) on peut atténuer un certain nombre d'effets sans cependant supprimer toutes les variations parasites, surtout en champ magnétique faible. La figure XXXVI montre l'amélioration apportée par cette technique.

Si l'on ne peut rendre compte parfaitement des courbes expérimentales pour cette raison, l'accord est cependant suffisamment bon pour confirmer la théorie précédente.

c) Cas de l'anticroisement SP $\Delta m_j = 0$.

C'est l'anticroisement 3^2S $m_j = - 1/2$, ^2P $m_j = - 1/2$ issu de $^2P_{1/2}$ (β,f). Les anticroisements hyperfins sont situés respectivement à 367,8 et 345,8 G.

Seul un champ électrique longitudinal peut induire cet anticroisement, un tel champ ne peut être créé que par la charge d'espace du canon à électrons.

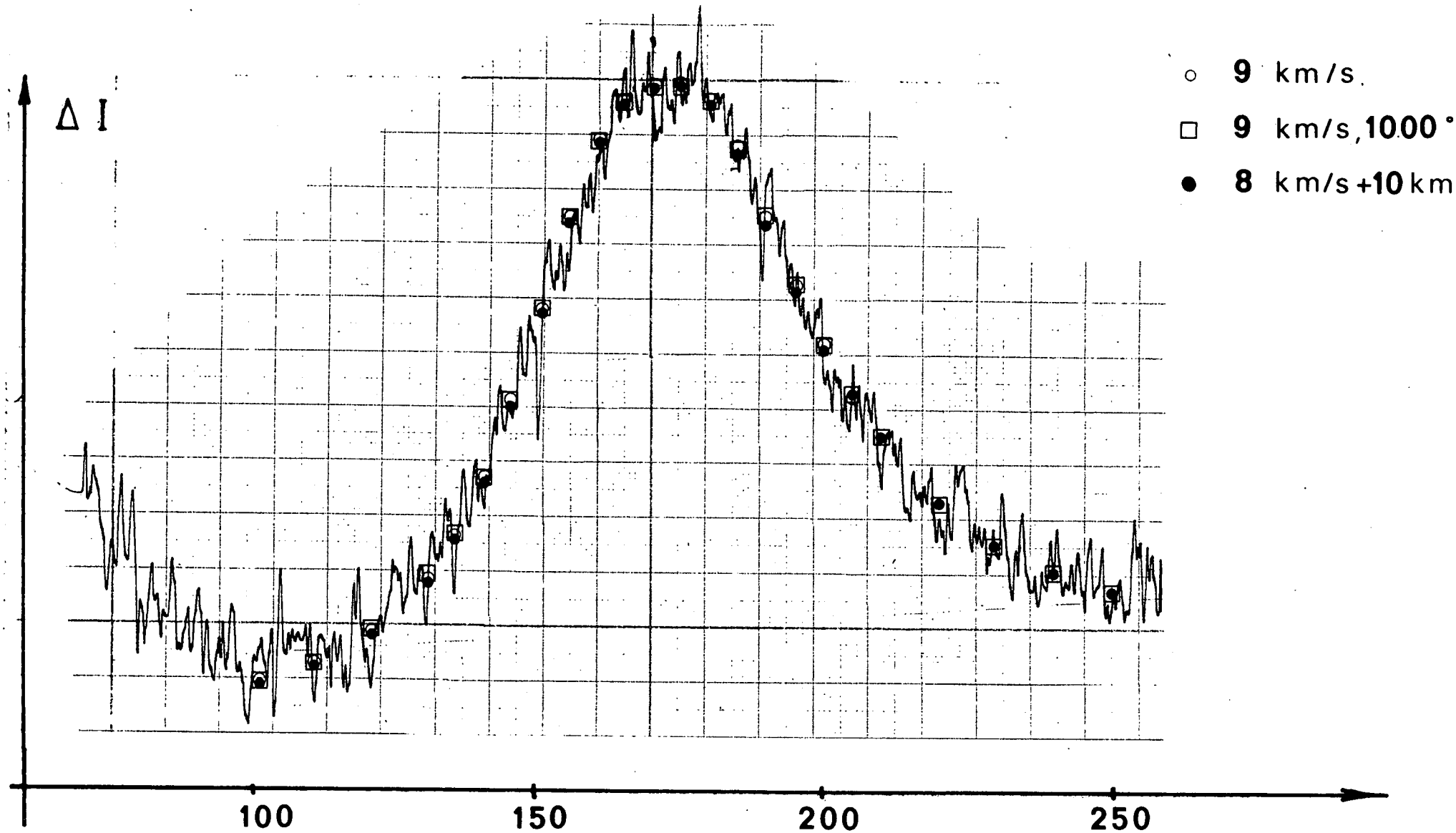

anticroisements 3SP1
ΔI
○ 9 km/s
□ 9 km/s, 1000 °K
● 8 km/s + 10 km/s
100
150
200
250
H en Gauss

Fig. XXXIII

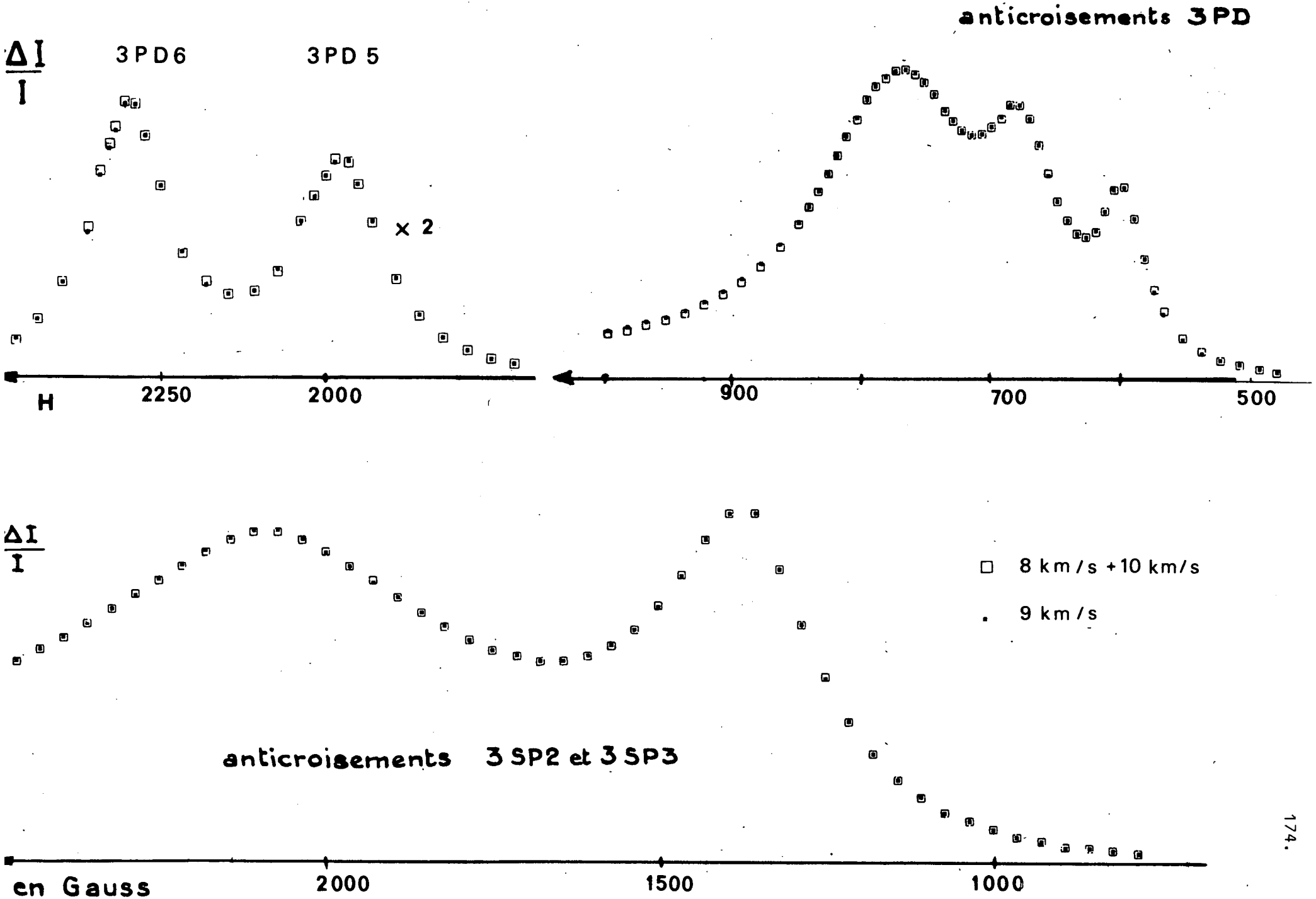

anticroisements 3PD
ΔI/I
3PD6
3PD 5
x 2
H
2250
2000
900
700
500
ΔI/I
□ 8 km/s +10 km/s
. 9 km/s
anticroisements 3 SP2 et 3 SP3
en Gauss
2000
1500
1000

Fig. XXXIV

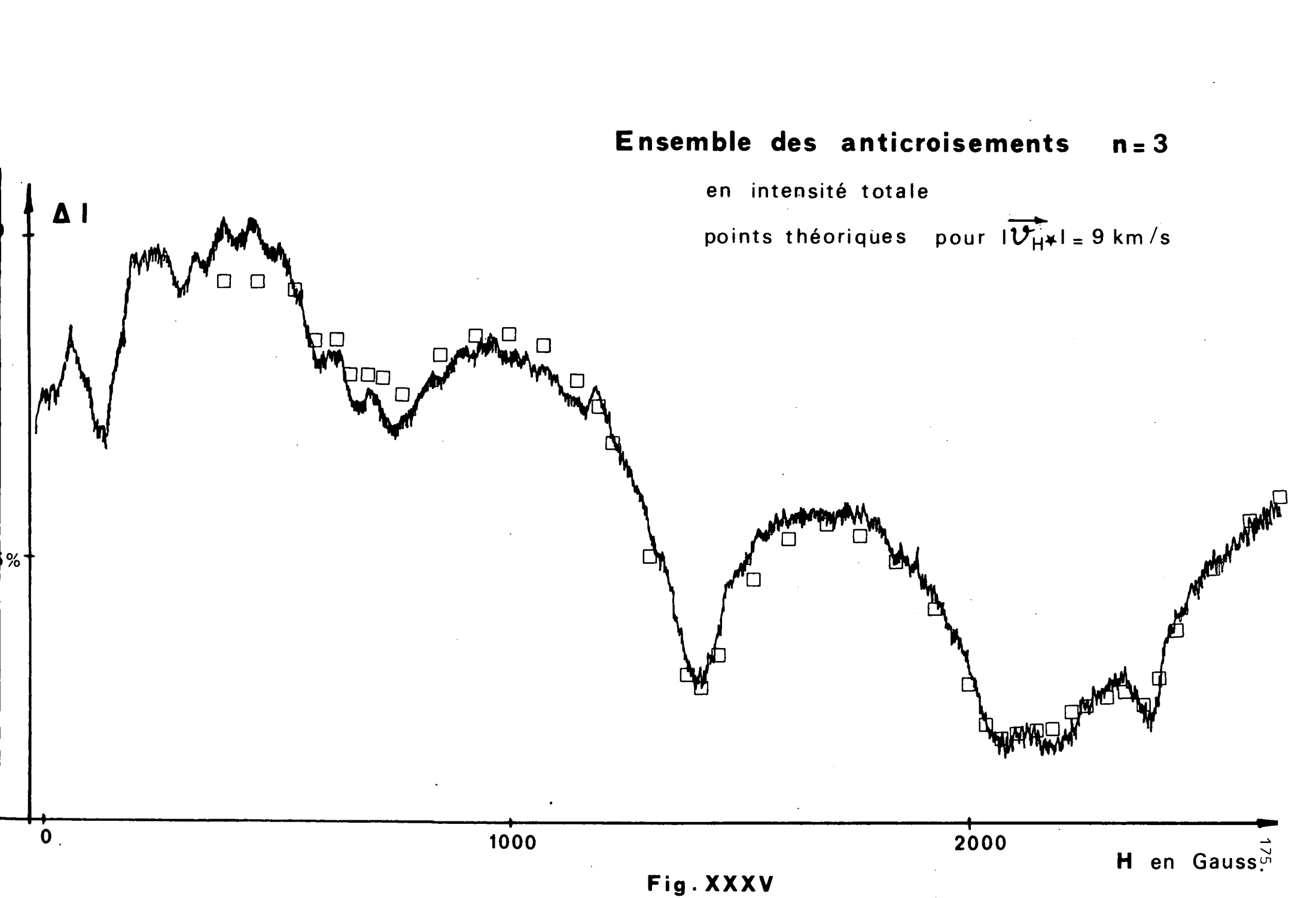

Ensemble des anticroisements n = 3
en intensité totale
points théoriques pour $|\overrightarrow{v_{H^*}}| = 9$ km/s
Δ I
%
0
1000
2000
H en Gauss.

Fig. XXXV

L'étude de cet anticroisement peut donc nous renseigner sur cette charge d'espace qui est susceptible de déplacer les autres anticroisements.

En comparant la largeur de l'anticroisement aux largeurs des courbes calculées et l'amplitude de la courbe observée pour cet anticroisement, soit à celle de l'anticroisement SP1 (^2S $m_j = -1/2$, ^2P $m_j = +1/2$ issus de $^2P_{1/2}$), soit à l'intensité totale, nous pouvons évaluer la charge d'espace pour chacune des cellules utilisées.

Ainsi, pour la cellule de type A (à faible écartement entre la grille et la plaque), le champ électrique moyen de charge d'espace ainsi évalué est de l'ordre de 1,5 ± 0,3 V/cm, tandis que pour les cellules de type B (à grand espace grille-plaque) ce champ n'est que de 0,3 ± 0,1 V/cm.

Nous pouvons ainsi estimer le déplacement des anticroisements étudiés dû au champ électrique longitudinal créé par la charge d'espace.

La figure XXXVII montre pour les deux types de cellules, pour des tensions d'excitation moyenne (24 V), les signaux obtenus, ainsi que les courbes calculées pour des valeurs différentes de $E_{//}$.

d) Conclusion

Ainsi, nous avons pu rendre compte des formes et des amplitudes de tous les signaux observés, soit sur la polarisation de la raie H_α, soit sur son intensité totale. L'accord est excellent au seuil d'excitation et moins bon pour des énergies supérieures, mais cependant satisfaisant.

E - EVOLUTION DES SIGNAUX D'ANTICROISEMENTS EN FONCTION DE L'ENERGIE D'EXCITATION

Nous avons étudié les différents anticroisements observés pour des énergies d'excitation allant du seuil (≃ 19 eV) jusque vers 27 eV. Nous avons vu que, si à 19 eV tout s'expliquait avec une vitesse d'explosion de 8 km/s, au-dessus de 21 eV environ, les courbes étaient plus larges,

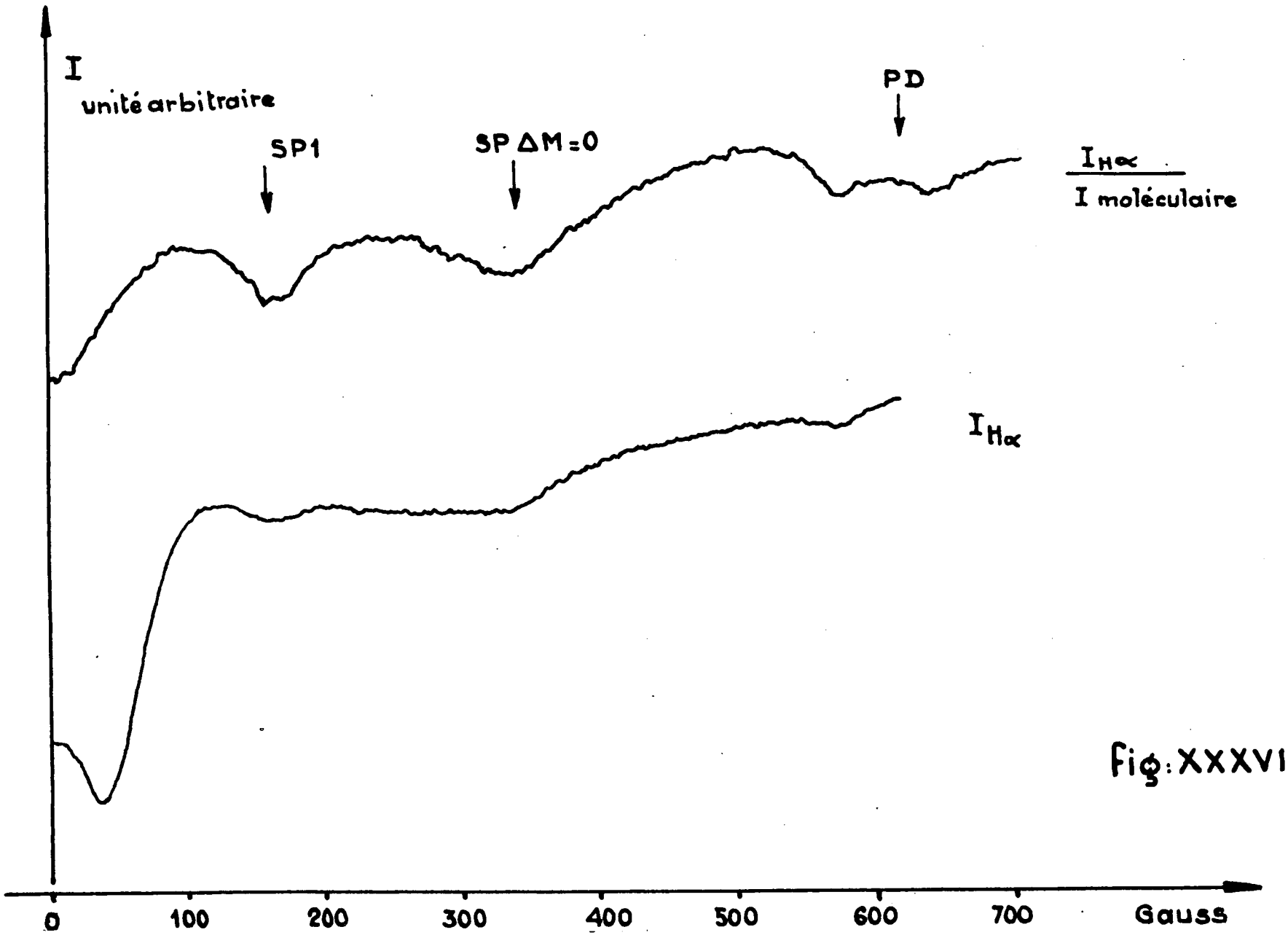

V = 24 volts
I
unité arbitraire
SP1
SP ΔM=0
PD
$\frac{I_{H\alpha}}{I \text{ moléculaire}}$
$I_{H\alpha}$
0
100
200
300
400
500
600
700
Gauss

Fig: XXXVI

et correspondaient à une vitesse de 9 km/s (nous avons vu alors différentes hypothèses possibles). Si l'on augmente encore l'énergie d'excitation, on voit les courbes d'anticroisements se déformer et s'élargir.

Nous nous sommes limités aux énergies inférieures à 50 eV; au-delà, la cellule se vide très rapidement, et les résultats perdent leur reproductibilité.

La figure XXXVIII montre comment évolue l'ensemble des anticroisements PD, pour des valeurs croissantes de l'énergie d'excitation. L'élargissement se traduit, comme pour l'ensemble des anticroisements en champ magnétique fort, par une déformation des courbes. Il est difficile de définir une largeur pour ces groupes d'anticroisements.

C'est sur les anticroisements S-D que nous avons mesuré la largeur des courbes expérimentales en fonction de l'énergie incidente. La figure XXXIX montre ces valeurs ainsi que les largeurs théoriques des courbes pour une répartition unique de vitesses (le module de celle-ci variant).

Les largeurs évoluent de manière analogue pour les deux anticroisements, ce qui était prévisible puisque ces largeurs dépendent de la même façon de la répartition de vitesses des atomes.

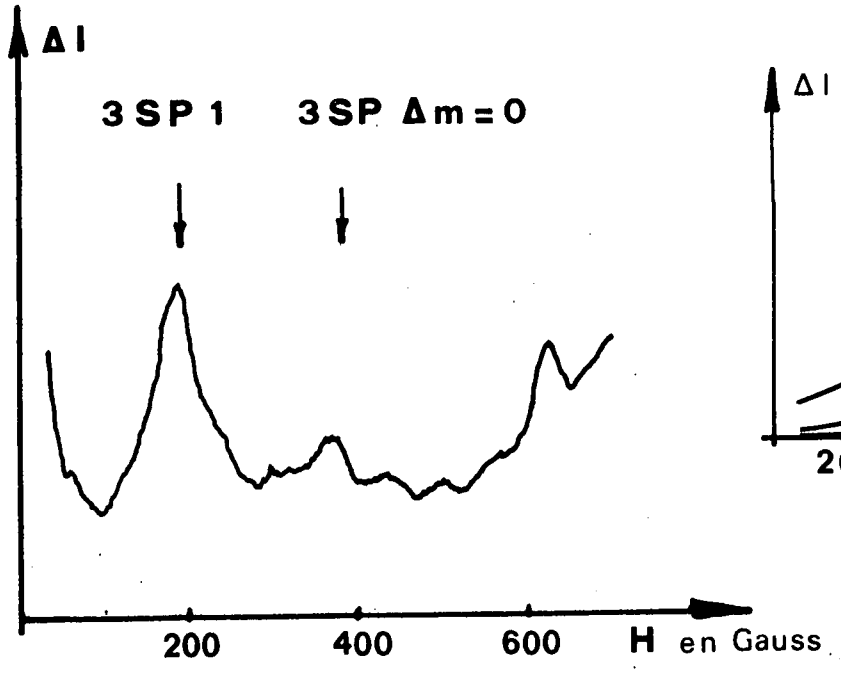
En augmentant l'énergie des électrons, l'amplitude des signaux change aussi.

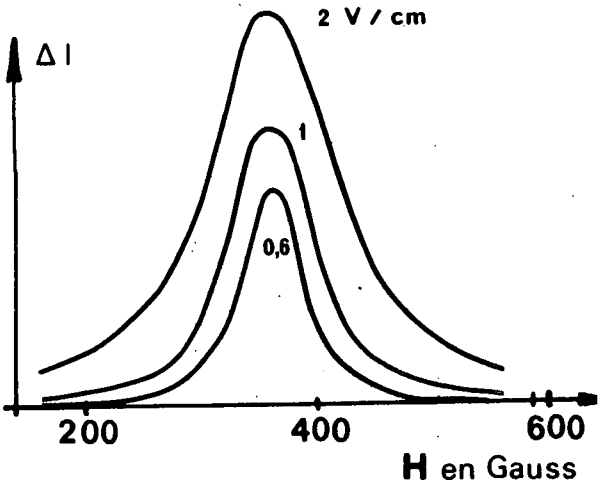
La figure XL montre comment celle-ci varie pour un certain nombre d'anticroisements.

Pour les amplitudes aussi, les évolutions sont toutes analogues ; elles présentent elles-aussi le même type de variations, avec deux paliers successifs.

anticroisements 3 SP

cellule de type **b**





courbes theoriques

cellule de type **a**

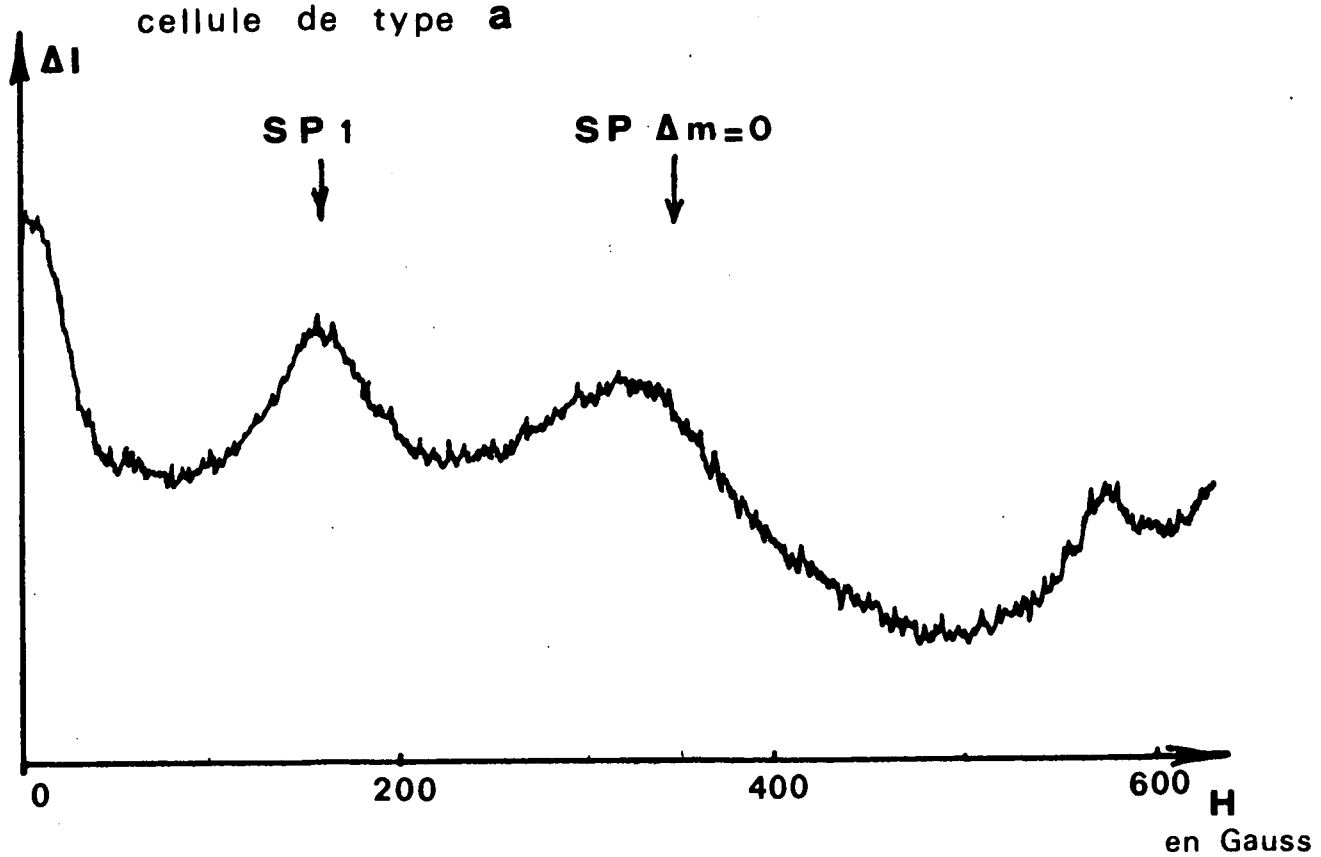


Fig. XXXVII

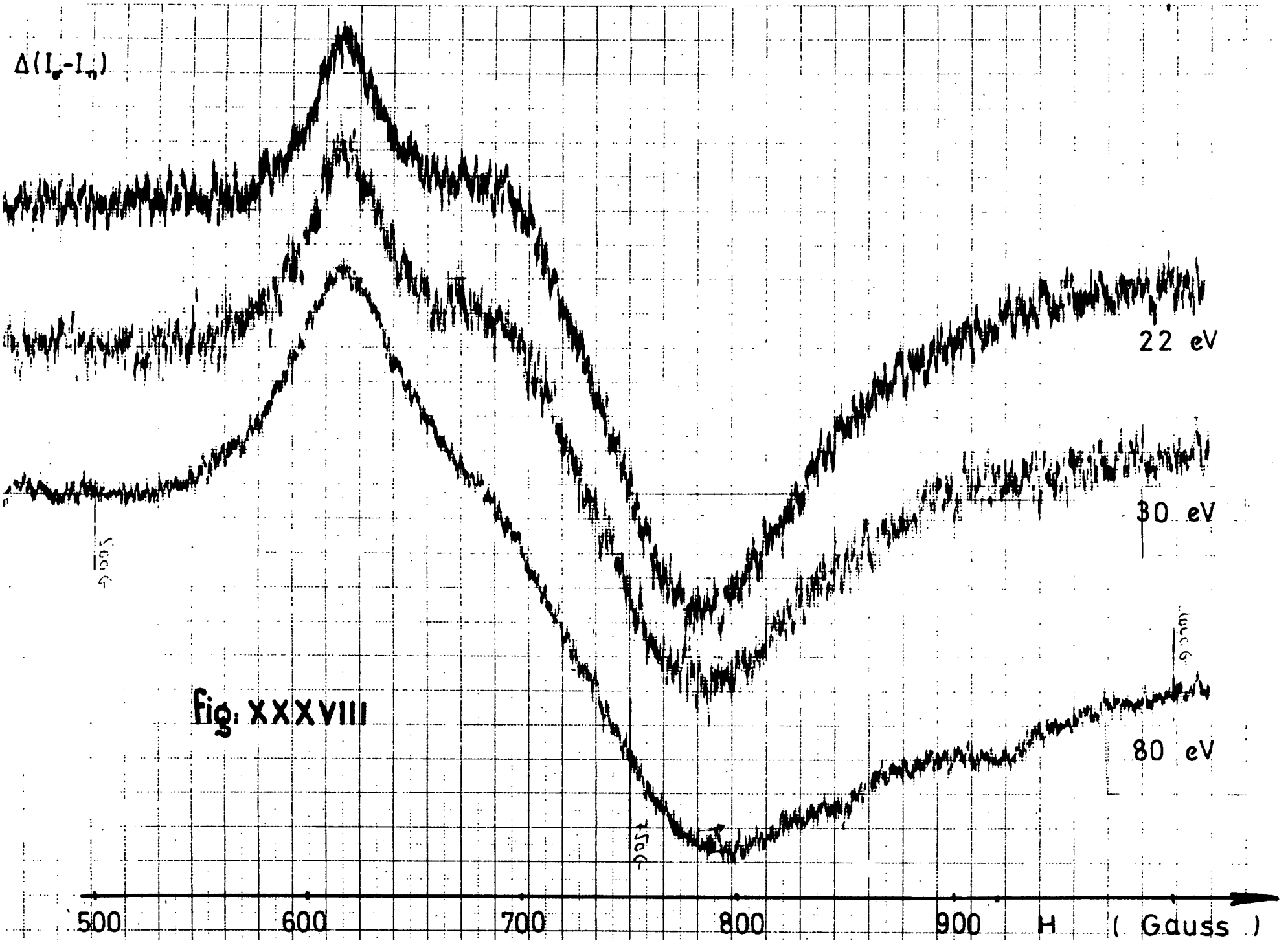


Fig: XXXVIII

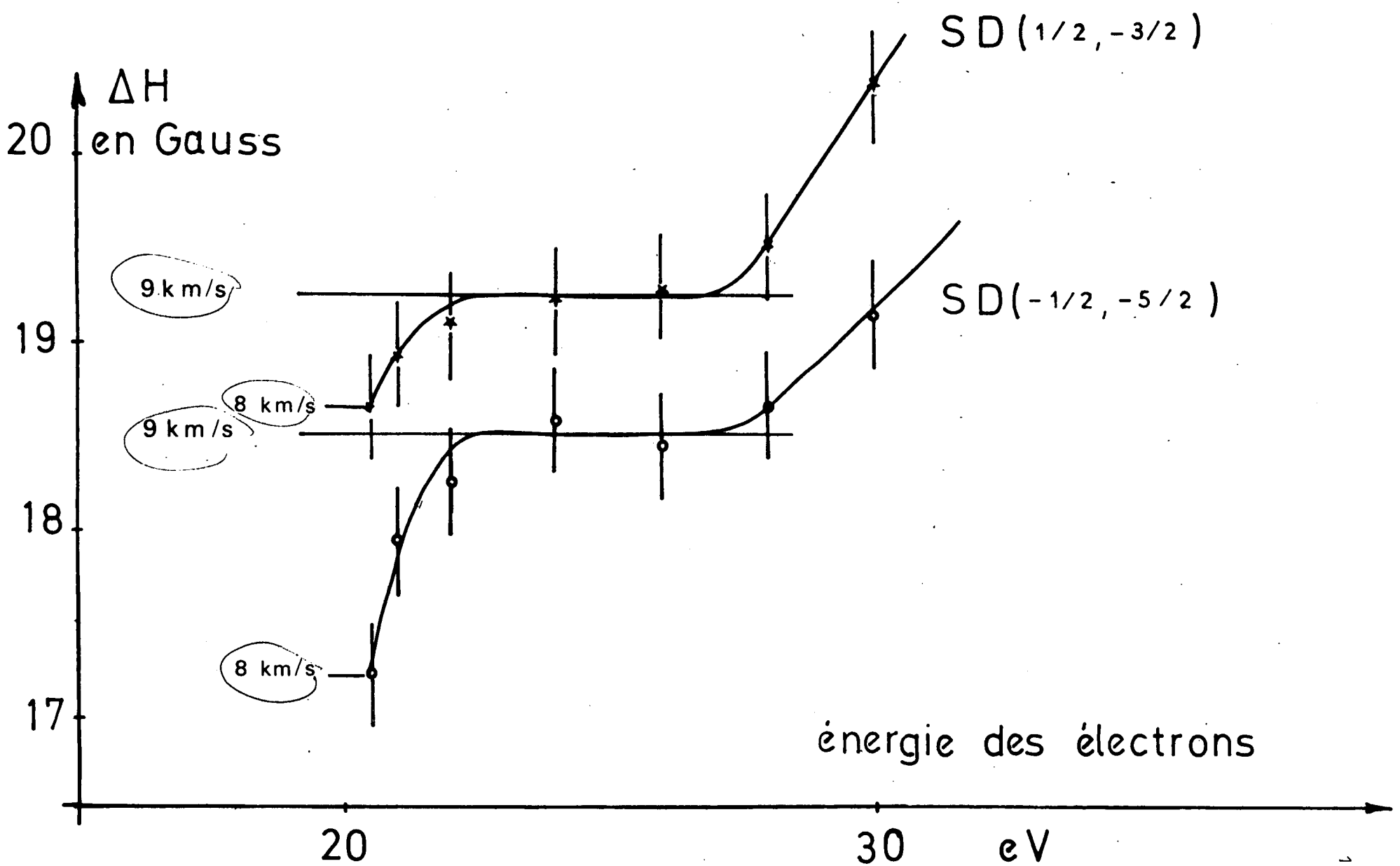

ΔH
en Gauss
20
19
18
17
SD (1/2, -3/2)
SD (-1/2, -5/2)
9 km/s
8 km/s
9 km/s
8 km/s
énergie des électrons
20
30
eV

Fig. XXXIX

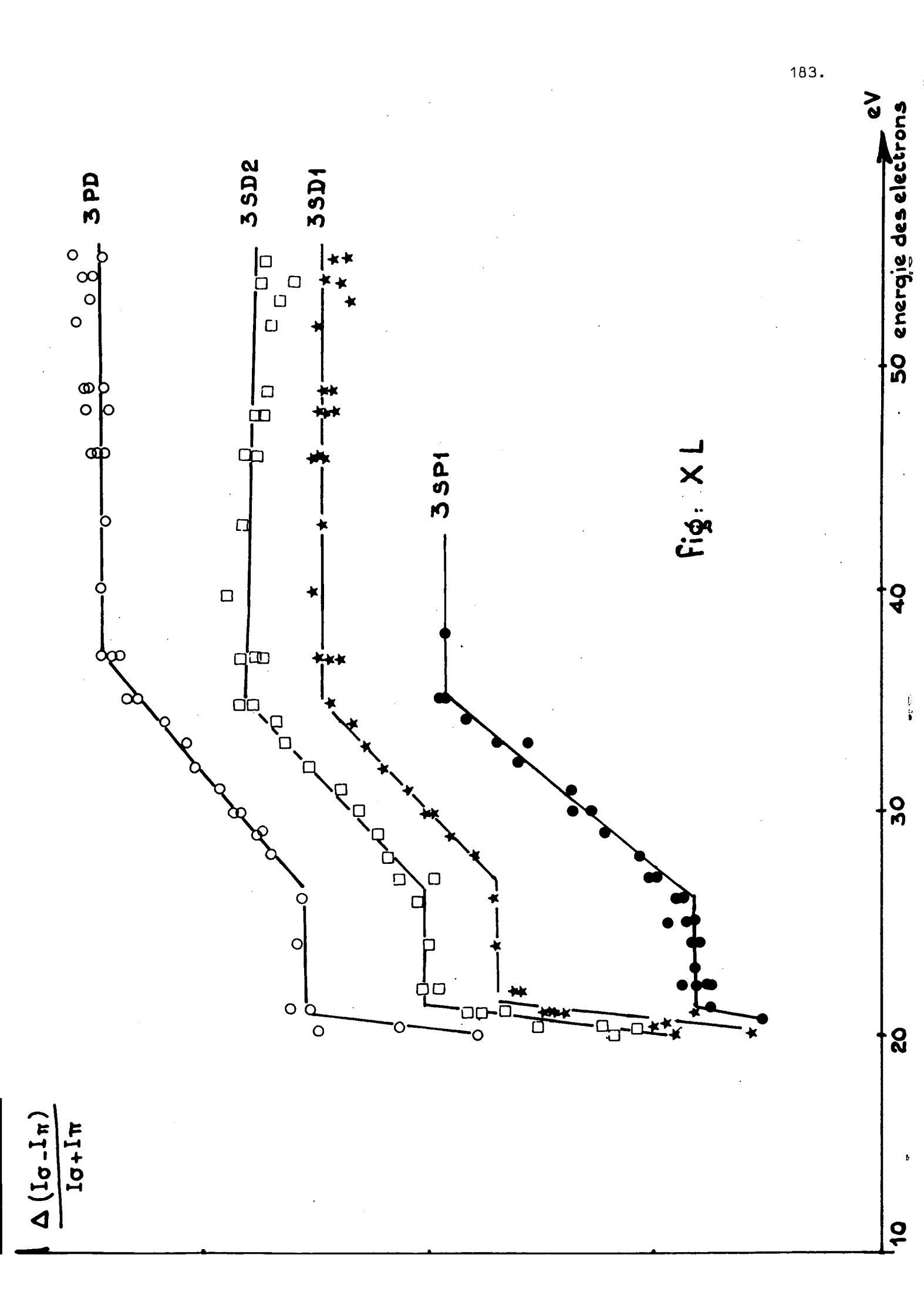

3PD
3SD2
3SD1
3SP1
$\frac{\Delta(I\sigma - I\pi)}{I\sigma + I\pi}$
10
20
30
40
50 energie des electrons
eV

Fig: X L

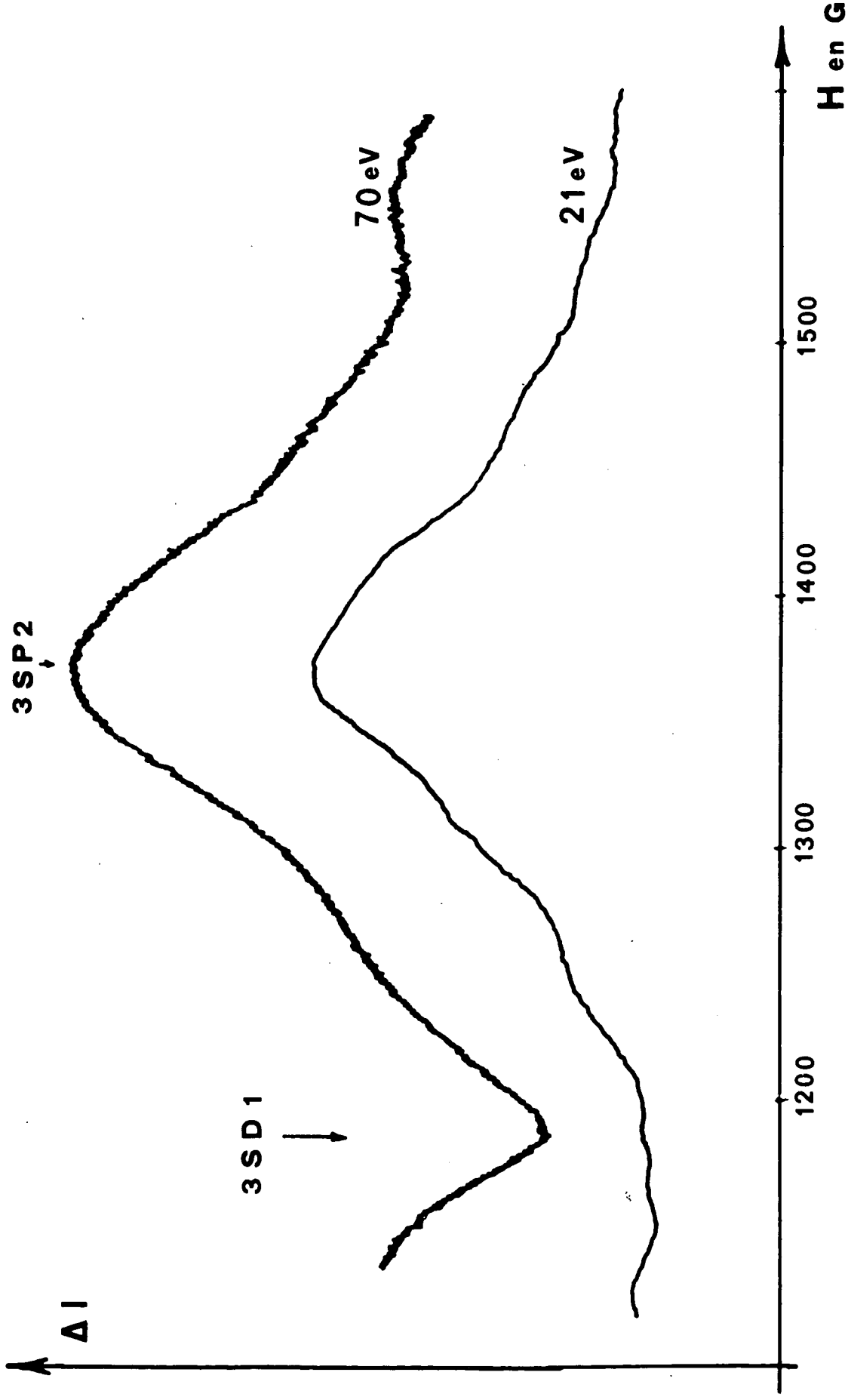

influence de l'énergie d'excitation
ΔI
3SD1
3SP2
70eV
21eV
1200
1300
1400
1500
H en Gauss

Fig. XLI

LAMB et SANDERS ont observé ([24]) des variations semblables sur l'amplitude de la résonance dipolaire électrique entre les sous-niveaux 3^2S $m_j = -1/2$, 3^2P $m_j = 1/2$ issu de $^2P_{1/2}$. Il est donc probable que la répartition des vitesses garde des caractéristiques constantes de 21 eV à 27 eV puis au-dessus de 35 eV (constantes mais différentes des premières) et que, pour ces mêmes énergies d'excitation, les vitesses de formation des niveaux S, P et D : ρ_S , ρ_P , ρ_D restent également constantes (à l'alignement près).

On remarque également, que pour des énergies d'excitation élevées, les anticroisements par couplage indirect sont favorisés par rapport aux anticroisements par couplage direct, ce qui témoigne d'une augmentation importante du champ électrique, donc des vitesses des atomes. La figure XLI montre de telles variations sur l'intensité.

D'autre part, alors que, jusqu'à 27 eV, on peut rendre compte des formes d'anticroisements par les calculs présentés précédemment, au-delà de 27 eV, on doit supposer une superposition de répartitions de vitesses : il s'ajoute à la répartition observée de 21 à 27 eV, une répartition d'atomes plus rapides dont la vitesse serait de 30 km/s environ.

Nous discuterons l'interprétation de ces courbes dans le chapitre suivant.

F - ETUDE DES ANTICROISEMENTS SD SUR n=4

L'étude des anticroisements sur n=4 est nettement plus complexe que sur n=3. En effet, aux 22 anticroisements homologues de ceux que nous avons observés pour n=3, s'ajoutent 10×2 anticroisements entre sous-niveaux D et F et 6×2 anticroisements P-F.

D'autre part, à champ électrique égal, les termes de couplage sont plus importants pour n=4 que pour n=3; les anticroisements sont donc plus élargis et fort mal résolus.

Nous avons, pour le moment, étudié seulement les anticroisements suivants :

4^2S $m_j = 1/2$ $\quad$ 4^2D $m_j = -3/2$ $\quad$ (E,α) $\quad$ { 496,57 G ; 500,60 G }

4^2S $m_j = -1/2$ $\quad$ 4^2D $m_j = -5/2$ $\quad$ (F,β) $\quad$ { 603,24 G ; 606,89 G }

Ils sont homologues des 3SD1 et 3SD2.

Mais dans le cas présent, les paramètres ρ_S , ρ_P , ρ_D , $|\vec{\vartheta}_{H^\star}|$ sont inconnus. Cependant, il est peu vraisemblable ([43]) que les ordres de grandeur des coefficients ρ_S , ρ_P et ρ_D pour n = 4 soient très différents de ceux de n = 3.

Nous avons donc admis que, comme pour n = 3, l'influence de la population du sous-niveau P était faible. Nous avons calculé alors les courbes attendues, pour des valeurs différentes de la vitesse des atomes excités. Les figures XLII et XLIII montrent les résultats de ce calcul. La valeur de la largeur des signaux observés conduit à attribuer à la vitesse d'explosion la valeur :

$$|\vec{\vartheta}_{H^\star}| = 8,5 \pm 0,5 \text{ km/s}$$

Les figures XLIV et XLV montrent les différentes contributions de ρ_S , ρ_P et ρ_D pour chacun des signaux, calculées pour cette valeur.

Celles-ci correspondent à des courbes de formes compliquées dont le maximum (ou minimum) n'a pas lieu pour chacune à la même valeur du champ magnétique.

Il est plus important de connaître les coefficients ρ dans ce cas encore que dans le précédent. Malheureusement les relations linéaires

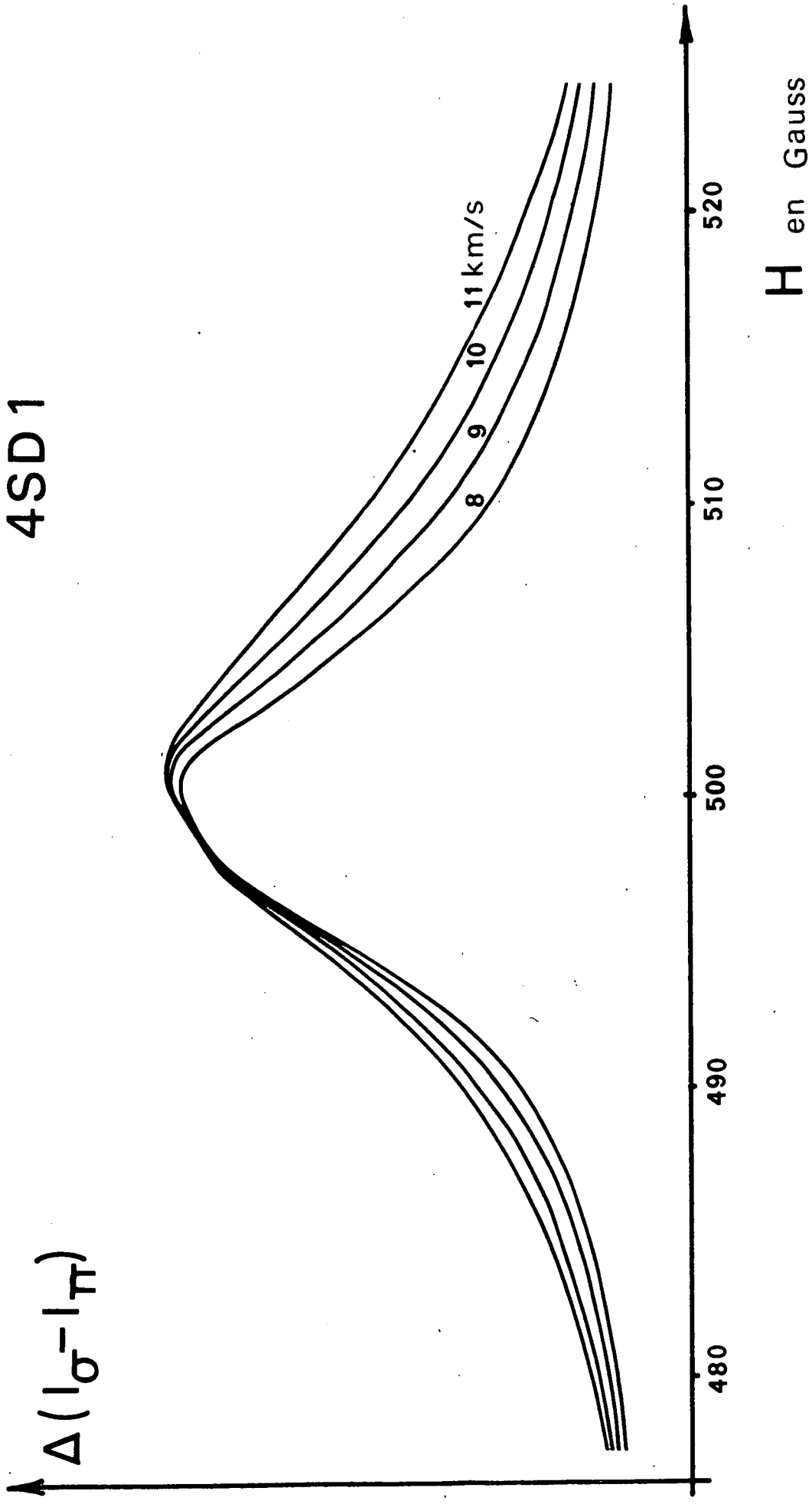

4SD1
$\Delta(I_\sigma - I_\pi)$
8
9
10
11 km/s
480
490
500
510
520
H en Gauss

Fig. XLII

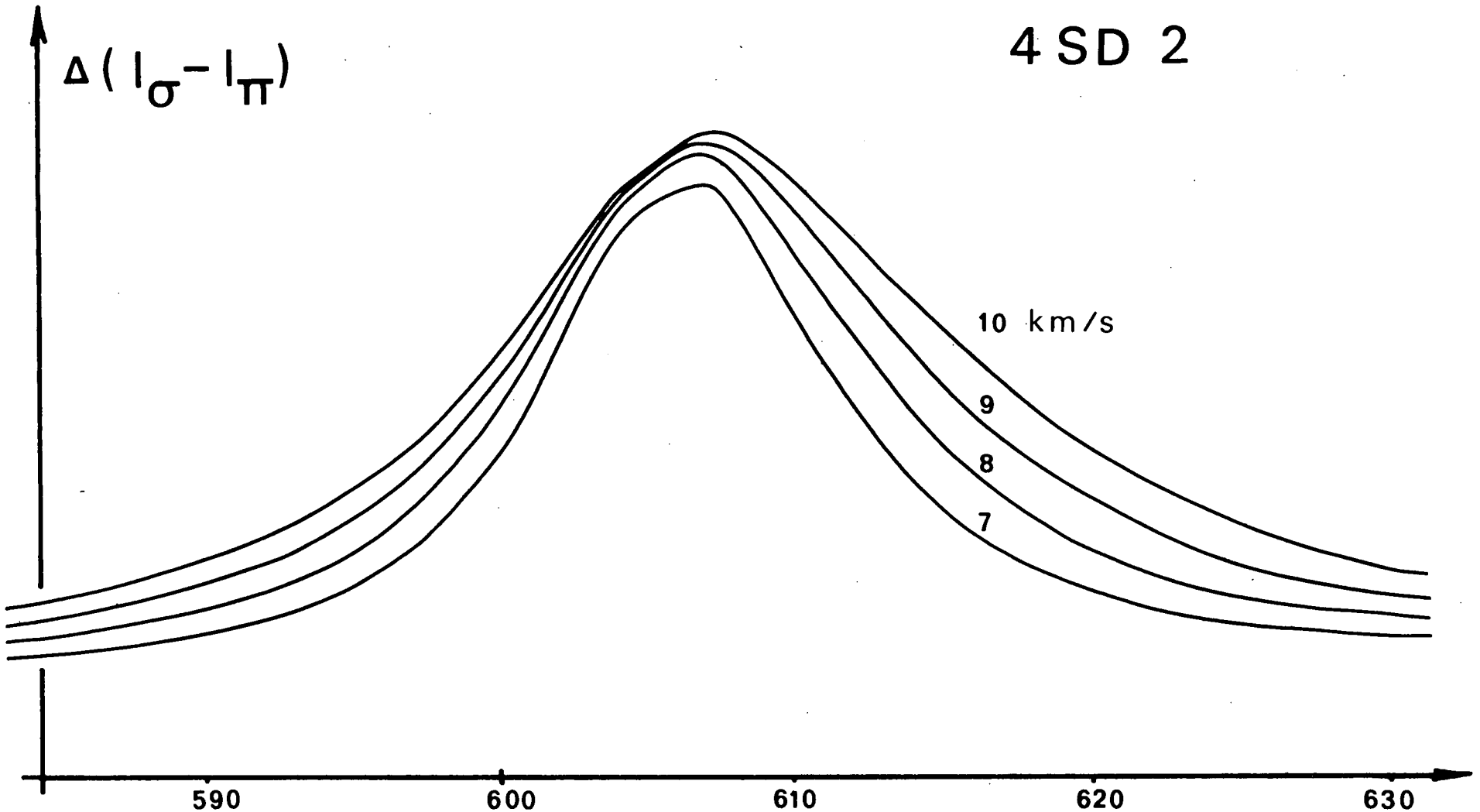


Fig. XLIII

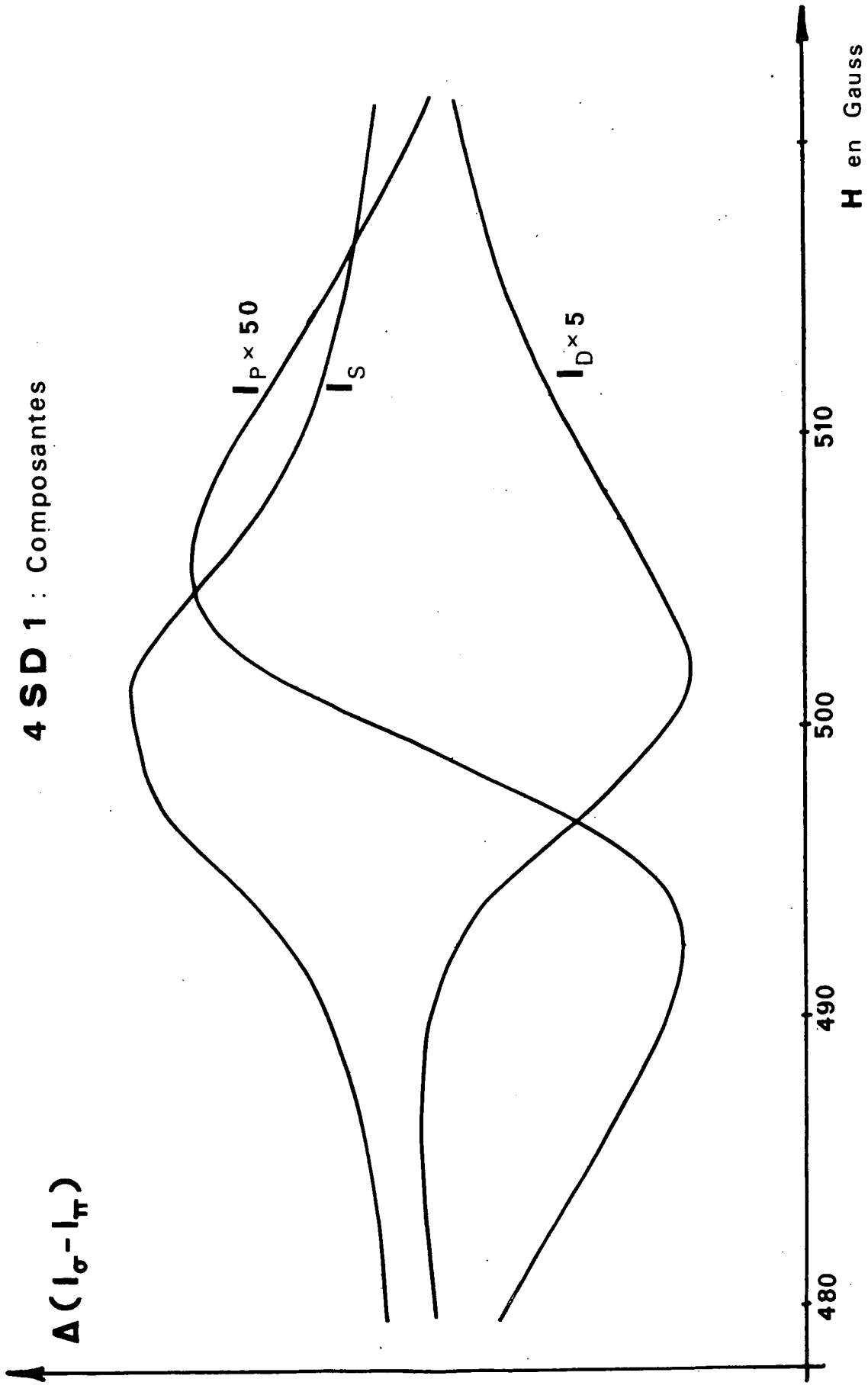


Fig. XLIV

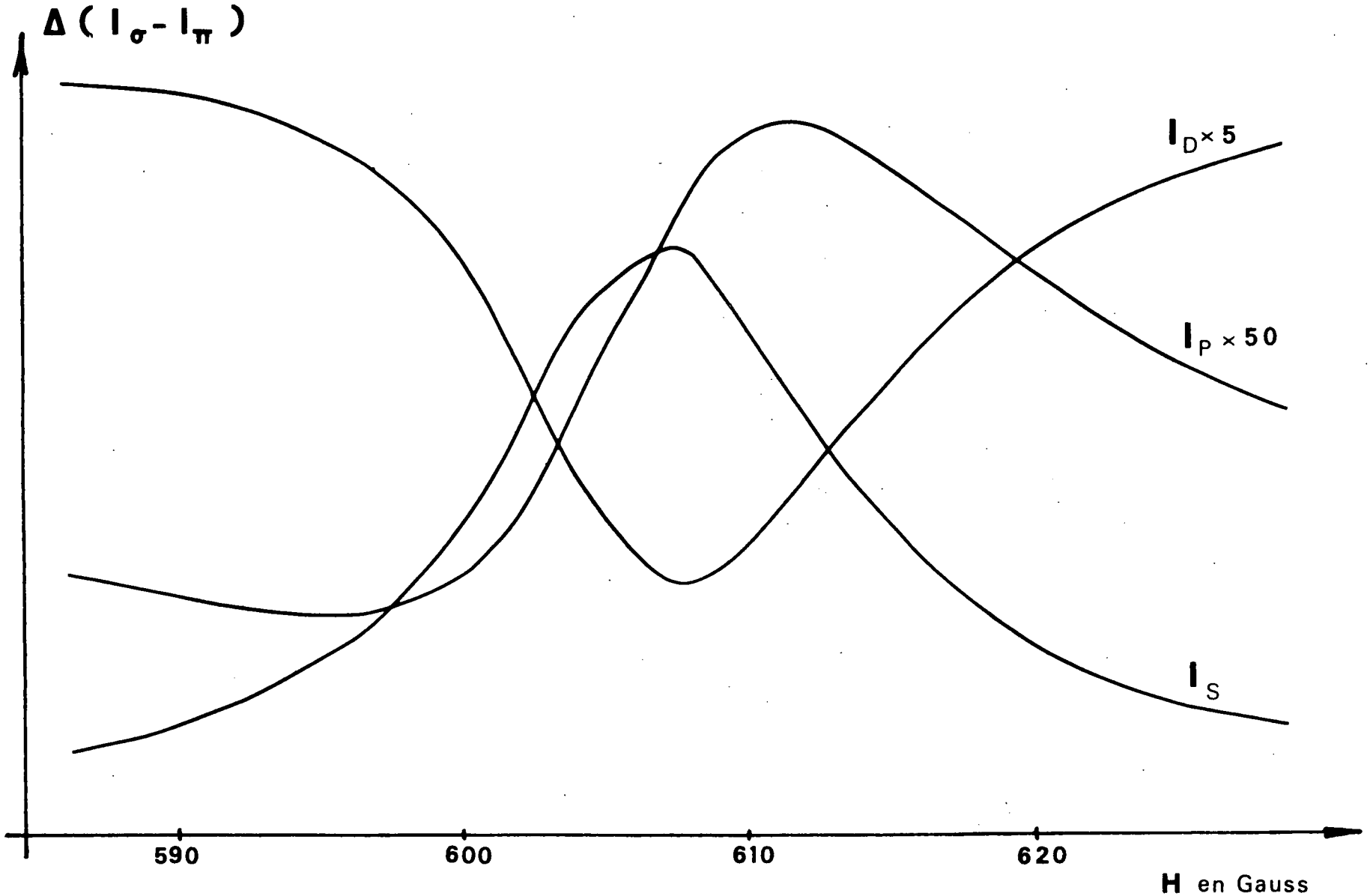


Fig. XLV

que nous déduisons des amplitudes relatives des 2 signaux ($\Delta I/I$) forment un système pratiquement dégénéré, dont nous ne pouvons rien espérer.

Nous avons donc tiré parti des déformations mêmes des courbes ; nous avons considéré l'hypothèse opposée ; le sous-niveau P est beaucoup plus peuplé que les autres (10 fois), et sòn influence est prédominante. L'accord est alors nettement moins favorable (il faut admettre, de plus, un écart important entre la position théorique et la position expérimentale). La figure XLVI montre une courbe expérimentale, près du seuil, et les courbes théoriques calculées pour différentes valeurs de ρ_P.

La figure XLVII montre l'influence de la vitesse thermique sur ces courbes ; elle est toujours très faible.

Enfin, les figures XLVIII et XLIX montrent la comparaison des courbes expérimentales et des points théoriques, pour une valeur de $\rho_P/\Sigma\rho$ semblable à celle déjà mesurée pour n = 3. L'accord est assez bon pour qu'on puisse estimer une valeur des positions expérimentales (comparées aux positions théoriques).

Comme pour n = 3, nous avons cherché à connaître l'évolution de ces croisements en fonction de l'énergie d'excitation.

Les figures L et LI montrent l'évolution des anticroisements en fonction de l'énergie d'excitation.

Afin de mieux séparer la raie H_β (4 868 Å) des raies d'émission moléculaires voisines ([71]) :

I	$(1s\sigma, 3p\pi)\,^1\Pi_g$ $v'=0$	→	B $(1s\sigma, 2p\sigma)\,^1\Sigma_u^+$ $v''=1$	4 875 Å 4 851 Å
J	$(1s\sigma, 3p\delta)\,^1\Delta_g$ $v'=1$	→	B $v''=3$	4 854 Å

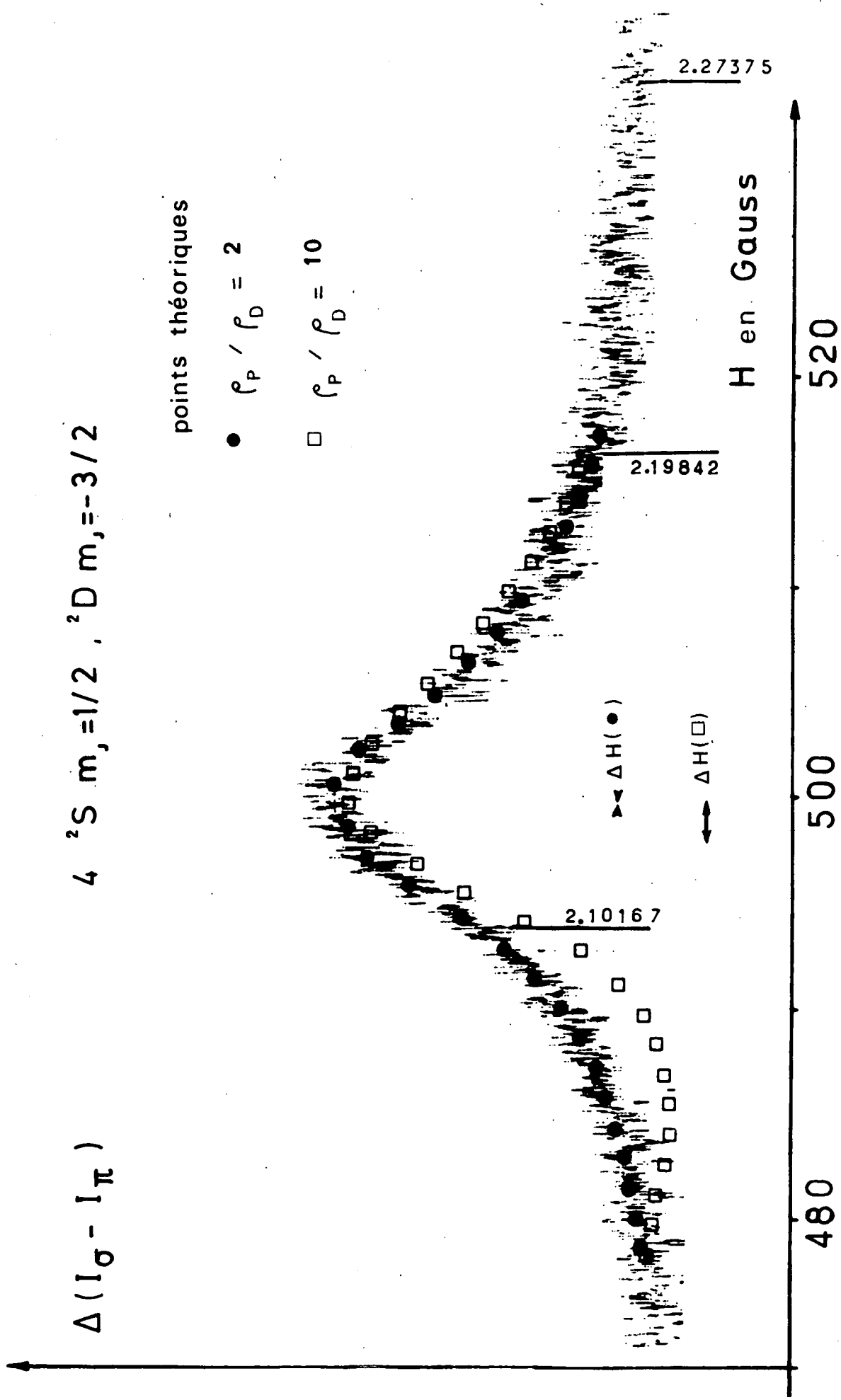

$\Delta(I_\sigma - I_\pi)$
$4\ ^2S\ m_j=1/2\ ,\ ^2D\ m_j=-3/2$
points théoriques
● $\rho_P / \rho_D = 2$
□ $\rho_P / \rho_D = 10$
2.27375
2.19842
2.10167
ΔH(●)
ΔH(□)
480
500
520
H en Gauss

Fig. XLVI

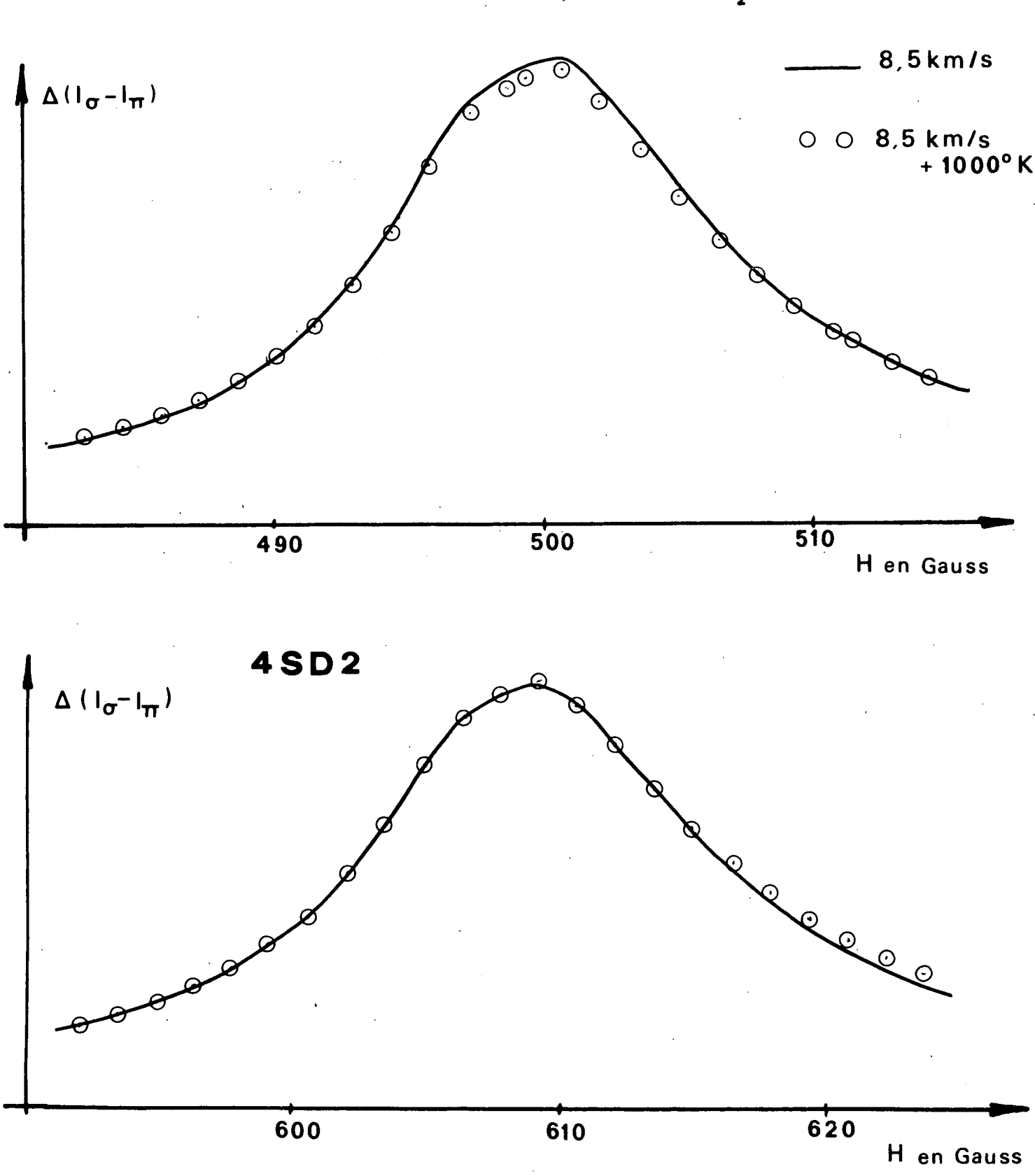

4 S D 1
Influence de ϑ_{H_2}
8,5 km/s
8,5 km/s
+ 1000° K
$\Delta(I_\sigma - I_\pi)$
490
500
510
H en Gauss
4 S D 2
$\Delta(I_\sigma - I_\pi)$
600
610
620
H en Gauss

Fig. XLVII

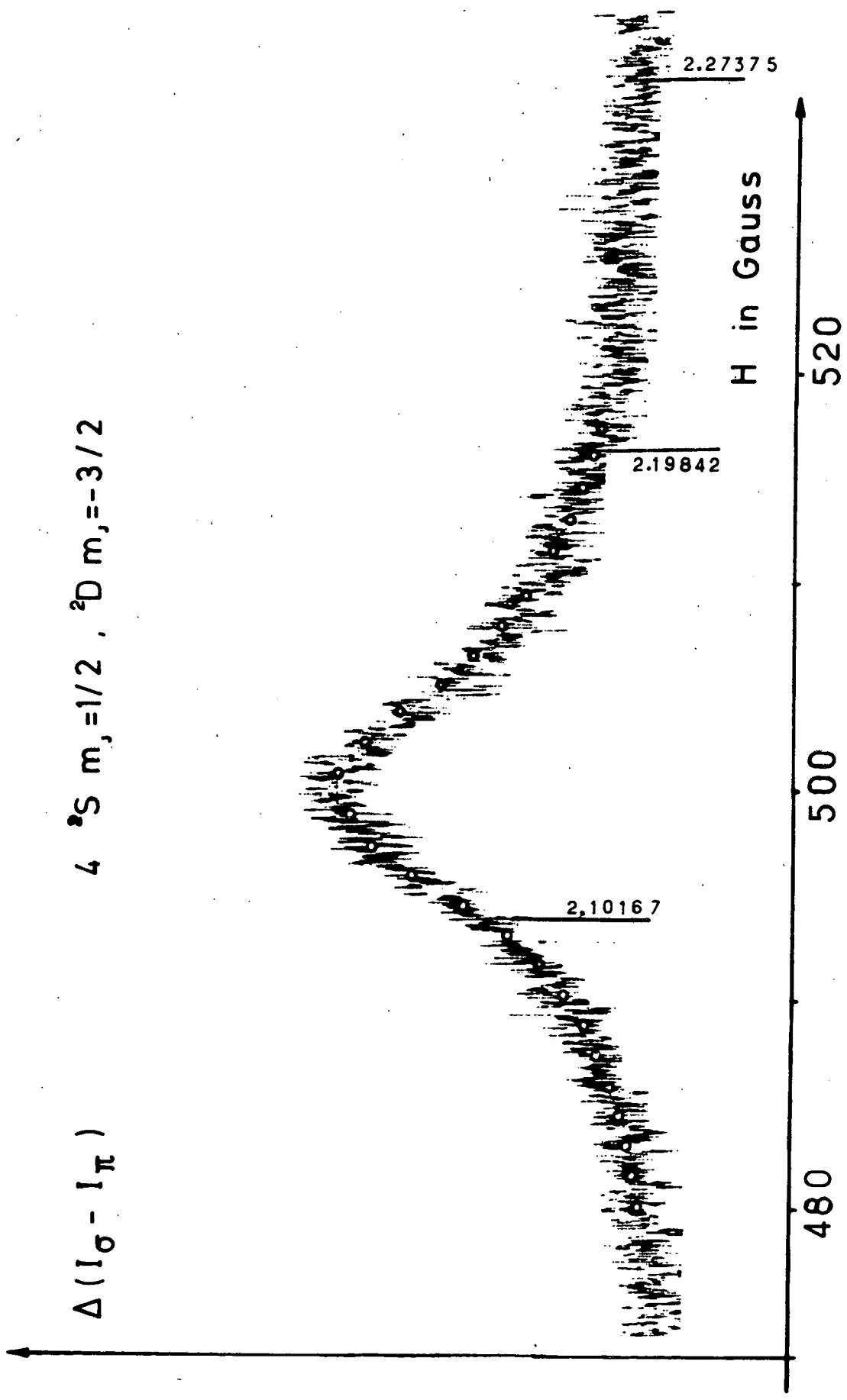

Δ (I σ - I π)
4 ²S m_j=1/2 , ²D m_j=-3/2
2.27375
2.19842
2,10167
480
500
520
H in Gauss

Fig. XLVIII

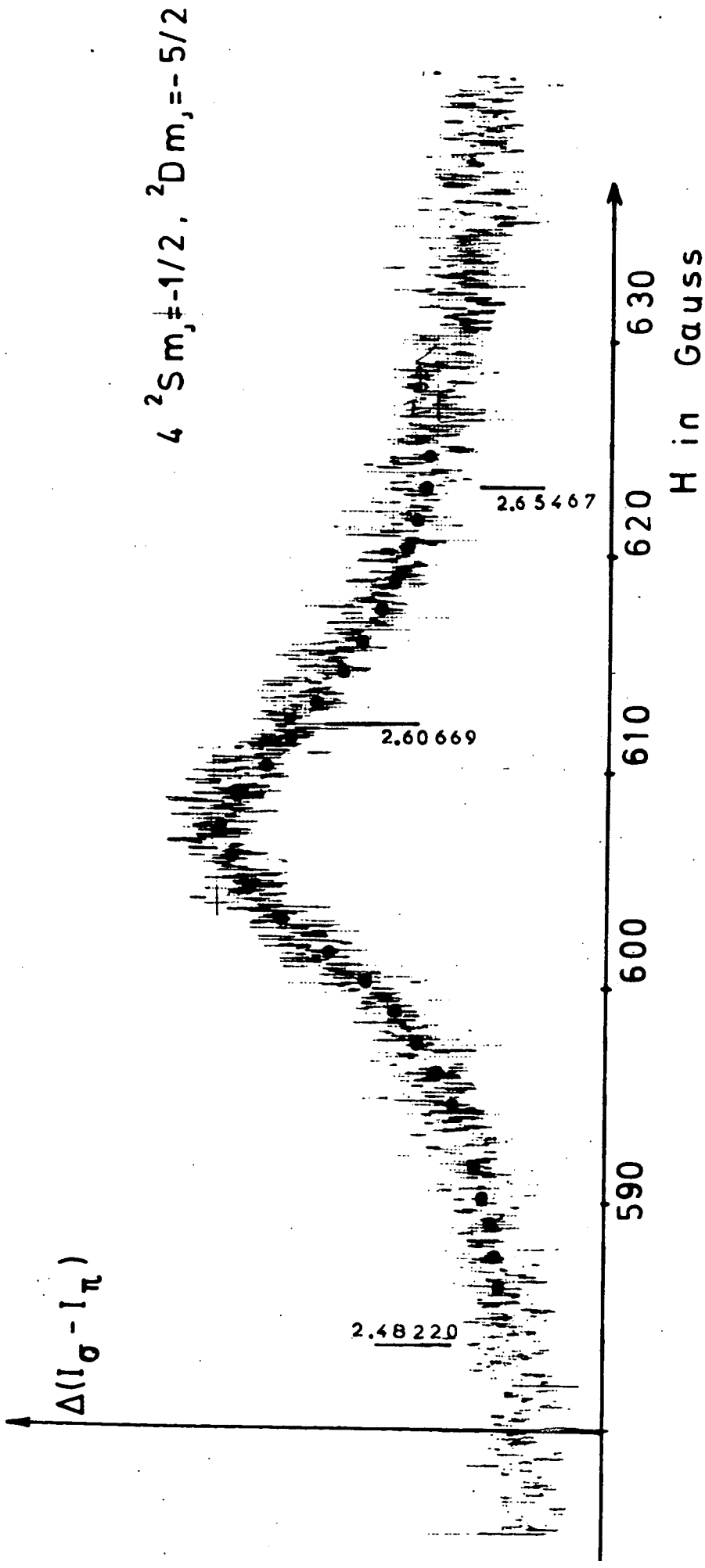

4 ²Sm,=-1/2 , ²Dm,=-5/2
Δ(I_σ - I_π)
2.48220
2.60669
2.65467
590
600
610
620
630
H in Gauss

Fig. XLIX

Nous avons utilisé deux filtres interférentiels identiques en série, de même largeur de bande - 15 Å - ; la proportion d'émission moléculaire reçue est alors beaucoup plus faible. L'amplitude relative des signaux ($\Delta I/I$) est ainsi considérablement augmentée. C'est aussi une des raisons pour lesquelles, on ne peut pas déterminer les coefficients ρ_S , ρ_P et ρ_D.

G - CONCLUSION

Pour l'ensemble des anticroisements étudiés, nous avons pu rendre compte des phénomènes rencontrés, nous avons pu expliquer la forme, le signe de la résonance ($\Delta I > 0$ ou < 0), son amplitude (au seuil), la position de toutes les résonances observées sur $n = 3$ et la forme et la position des deux résonances étudiées sur $n = 4$.

Cette étude nous a amenés à préciser un certain nombre de paramètres, relatifs à la dissociation de la molécule ou aux structures de l'atome. Ce sont ces paramètres que nous allons étudier dans le chapitre suivant.

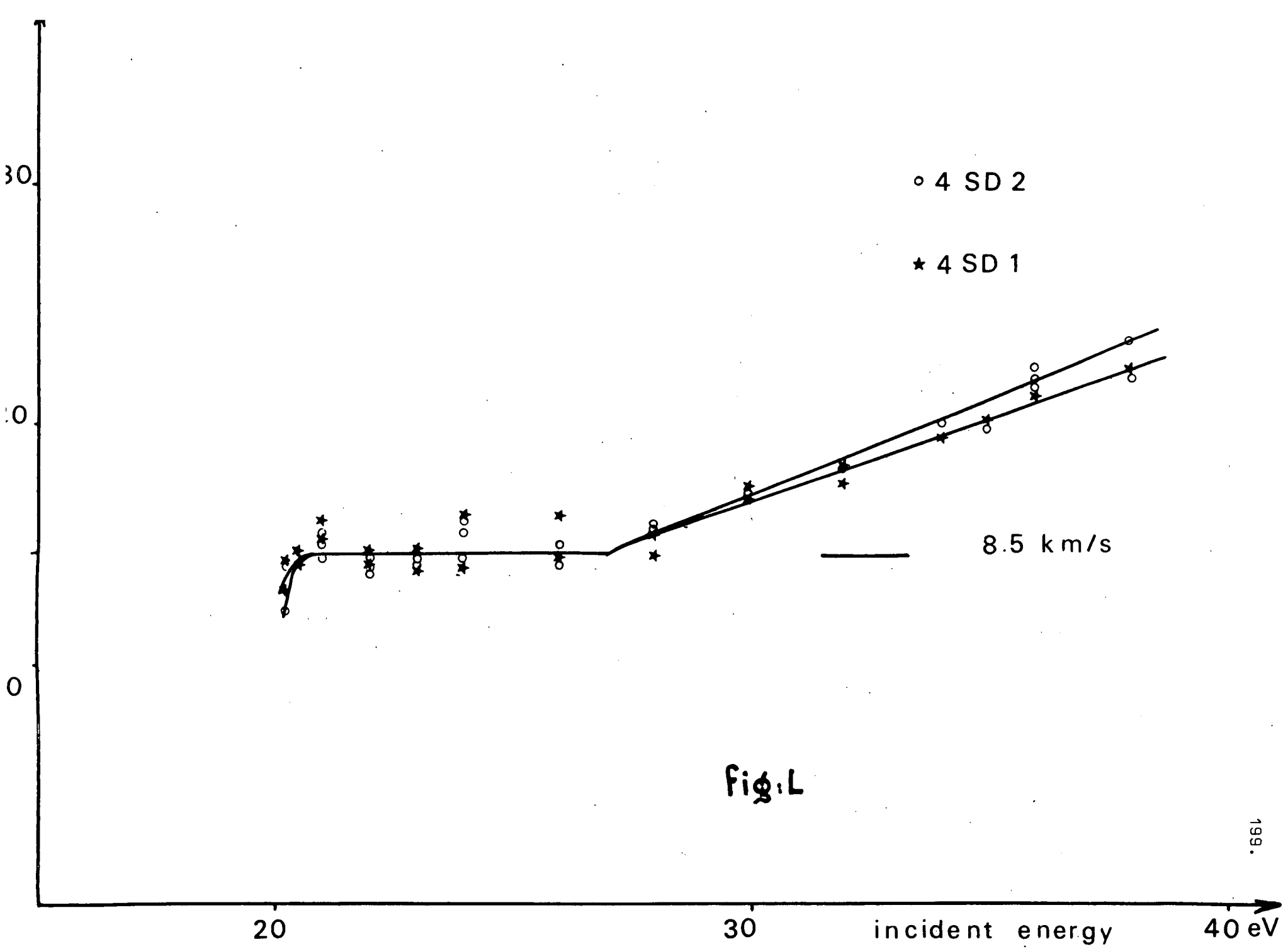


Fig:L

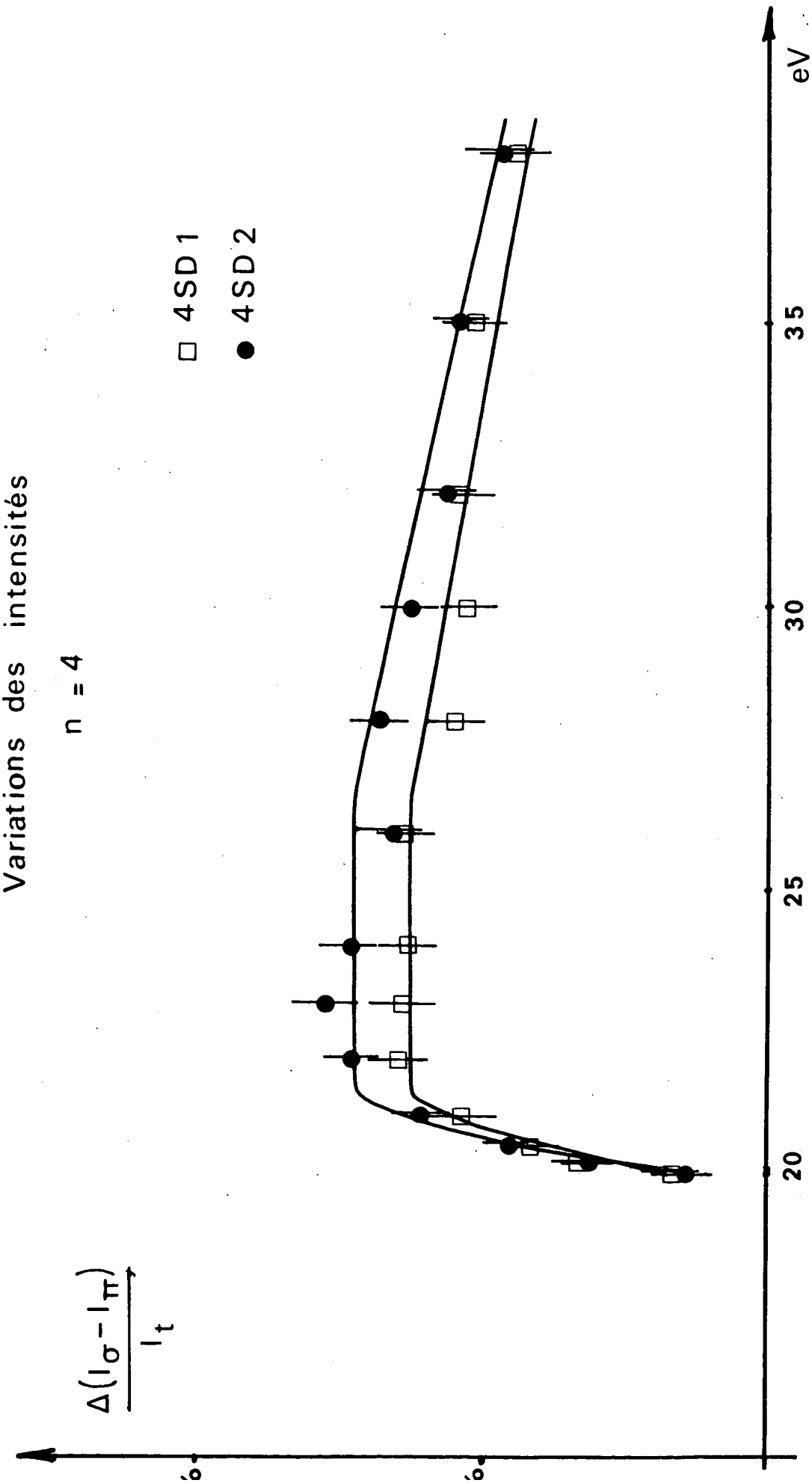

Variations des intensités
n = 4
□ 4SD 1
● 4SD 2
$\frac{\Delta(I_\sigma - I_\pi)}{I_t}$
20
25
30
35
eV

Fig. LI

C H A P I T R E VIII

DISCUSSION DES RESULTATS

En comparant les signaux d'anticroisement obtenus expérimentalement avec les courbes que nous avons calculées, nous avons pu déterminer un certain nombre de structures de l'atome d'hydrogène et de paramètres relatifs à la dissociation de la molécule H_2.

Le but de ce chapitre est de discuter ces résultats.

A - LES STRUCTURES ATOMIQUES

1) Les résultats

Les seuls anticroisements pour lesquels nous avons mesuré la position expérimentale (par rapport à la position théorique) sont les anticroisements 3SP1, 3PD, 3SD1, 3SD2, 4SD1, 4SD2 (les notations sont celles des figures XIV et XV).

Pour chaque anticroisement la valeur théorique H_{th} du champ de croisement a été déduite de la valeur théorique S_{th} de la structure en champ nul par une relation de la forme :

$$f(S_{th} , H_{th}) = 0$$

La position expérimentale a en fait la valeur :

$$H_{exp} = H_{th} + \Delta H$$

où l'écart ΔH est très petit, comme nous l'avons vu au chapitre VII.
La valeur effective S_{exp} de la structure est :

$$S_{exp} = S_{th} + \Delta S$$

Elle est solution de l'équation :

$$f(S_{exp}, H_{exp}) = 0$$

Soit, compte tenu des faibles valeurs de ΔH et ΔS

$$f'_S \Delta S + f'_H \Delta H = 0$$

Pour l'ensemble des anticroisement PD, pour un même faible écart ΔS, on trouve le même écart ΔH pour tous les anticroisements, à 20 % près environ, ce qui est supérieur à l'incertitude sur ΔH.

Pour tous les anticroisements, la structure hyperfine est supposée avoir sa valeur théorique.

La position des anticroisements hyperfins 3SD1 dépend de la structure $S_1 = {}^2D_{5/2} - {}^2S_{1/2}$ déterminée par les anticroisements 3SD2, et d'une deuxième structure qui est soit $S'_2 = {}^2D_{5/2} - {}^2D_{3/2}$, soit $S_2 = {}^2D_{3/2} - {}^2S_{1/2}$.
Les déterminations de S_2 et S'_2 ne sont pas indépendantes.

Les résultats sont rassemblés dans le tableau IX.

Aucune de ces valeurs expérimentales n'est en contradiction avec la théorie.

2) La mesure de $\mathcal{S}$.

Le Lamb-shift sur n = 3 a été mesuré depuis plusieurs années : de Lamb et Wilcox en 1960, à Fabjan et Pipkin (1972)

Anticroisement	Structure	S_{th} [17] (MHz)	ΔH (Gauss)	S_{exp} (MHz)
3 SP 1	$3^2S_{1/2}$ - $3^2P_{1/2}$	314,898	0,0 ± 0,35	314,9 ± 0,9
3 PD	$3^2D_{5/2}$ - $3^2P_{3/2}$	1078,01	0,0 ± 0,7	1078,0 ± 1,1
3 SD 2	$3^2D_{5/2}$ - $3^2S_{1/2}$	4013,20	+ 0,20± 0,22	4013,75± 0,60
3 SD 1	$3^2D_{5/2}$ - $3^2D_{3/2}$	1083,33	+ 0,14 ± 0,28	1083,0 ± 2,9
	$3^2D_{3/2}$ - $3^2S_{1/2}$	2929,86		2930,0 ± 2,3
4 SD 2	$4^2D_{5/2}$ - $4\ S_{1/2}$	1692,76	+ 0,12 ± 0,18	1693,0 ± 0,4
4 SD 1	$4^2D_{5/2}$ - $4^2D_{3/2}$	457,03	- 0,09 ± 0,23	458,0 ± 2,2
	$4^2D_{3/2}$ - $4^2S_{1/2}$	1235,7		1235,0 ± 2,1

TABLEAU IX

Le tableau X rassemble des résultats antérieurs avec les methodes de mesures.

Auteurs (réf.)	Méthode	Résultats (MHz)
KLEINPOPPEN ([18])	Jet atomique, radiofréquence H ≠ 0	313,6 ± 2,9
FABJAN, PIPKIN ([20])	Beamfoil et radiofréquence H = 0	315,11 ± 0,89
FABJAN, PIPKIN ([22])	Beamfoil, champs oscillants séparés H = 0	314,819 ± 0,048
LAMB et WILCOX ([19])	Enceinte, radiofréquence H ≠ 0	314,9 ± 0,8

TABLEAU X

La mesure de LAMB et WILCOX ([19]) a été effectuée sur du deutérium; la valeur présentée ici a été corrigée par le rapport théorique entre les Lamb-shift de D et H.

Le résultat que nous trouvons pour l'écart $3^2S_{1/2} - 3^2P_{1/2}$ est en accord avec toutes les valeurs antérieures ; il est nettement moins précis que celui des dernières mesures de Fabjan et Pipkin. Pour obtenir la même précision, il faudrait repérer la position de la résonance 3SP1 à mieux que 1/2000 de sa largeur. Ceci nous est impossible : le rapport signal sur bruit n'est que de l'ordre de 10, et, en outre, il apparaît de nombreuses causes de distorsions de la courbe (coir chapitre VII-§ A-4 et D-4).

Cependant, si leur technique est la mieux adaptée à la mesure de cette structure, elle est nettement moins bien adaptée à la détermination des autres structures, car les résonances qu'ils observent alors ne sont pas résolues.

3) Le Lamb-shift $3^2P_{3/2} - 3^2D_{3/2}$

Nous avons obtenu d'autres structures dans le but de déterminer l'écart $3^2P_{3/2} - 3^2D_{3/2}$. Dans le tableau XI, nous comparons leurs valeurs avec les résultats des mesures antérieures.

TABLEAU XI

Structures	Valeur théorique	Mesures (MHz) précédentes	Auteurs	nos résultats (MHz)
$3^2P_{3/2} - 3^2S_{1/2}$	2 935,19	2 933,5 ± 1,2 2 935,4 ± 2,0	Pipkin et al (20) Wilcox et Lamb (19)	2 935,7 ± 1,8
$3^2D_{5/2} - 3^2P_{5/2}$	1 078,01	1 080,3 ± 2,9	Pipkin et al (20)	1 078,0 ± 1,1
$3^2D_{3/2} - 3^2P_{1/2}$	3 244,75	3 255,6 ± 8,4	Pipkin et al (20)	3 244,9 ± 3,1

Nous obtenons ici des valeurs plus précises en général que celles des mesures passées. Les barres d'erreur se recouvrent.

On peut remarquer que nous avons mis en évidence, sur l'hydrogène, le Lamb-shift entre les niveaux de j = 3/2

$$\Sigma_3 = 3^2P_{3/2} - 3^2D_{3/2}$$

Cet intervalle est très nettement inférieur aux largeurs naturelles des niveaux : Γ_{3^2P} = 30 MHz et Γ_{3^2D} = 10 MHz.

Si nous tenons compte seulement des mesures que nous avons faites, nous sommes conduits à attribuer à cet écart la valeur :

$$3^2P_{3/2} - 3^2D_{3/2} = 5 \pm 4 \text{ MHz}$$

La seule mesure antérieure de cet écart est dûe à WILCOX et LAMB (19) ; elle ne permettait pas d'affirmer son existence : $\Sigma_3 = 5 \pm 10$ MHz. HÄNSCH, par absorption saturée, en 1972, confirma seulement son existence (72).

Cependant, aujourd'hui, personne ne met en doute les valeurs théoriques des structures fines : $^2L_{\ell+1/2} - {}^2L_{\ell-1/2}$.
La mesure de la structure $2^2P_{3/2} - 2^2P_{1/2}$ a même conduit à une détermination assez précise de la constante de structure fine [73]
Nous donnerons donc aux structures fines leurs valeurs théoriques a priori.
Nous pouvons déduire alors une valeur de Σ_3 de celle de l'écart $3^2D_{5/2} - 3^2P_{3/2}$:

$$\Sigma_3 = 3^2P_{3/2} - 3^2D_{3/2} = 5,3 \pm 1,1 \text{ MHz}$$

ou de la valeur de la structure $3^2D_{5/2} - 3^2S_{1/2}$. Dans ce dernier cas, il nous faut utiliser la meilleure détermination expérimentale du Lamb-shift $3S = 3^2P_{1/2} - 3^2S_{1/2}$, celle qui est dûe à FABJAN et PIPKIN [22]. Nous obtenons alors :

$$\Sigma_3 = 5,88 \pm 0,65 \text{ MHz}$$

De même, à partir de la valeur de l'écart $4^2D_{5/2} - 4^2S_{1/2}$ nous trouvons :

$$\Sigma_4 = 2,2 \pm 1,0 \text{ MHz}$$

la valeur du Lamb-shift $4S$ est due encore à FABJAN et PIPKIN [20].

On doit signaler que l'ion He^+ a été étudié, avec la même technique d'anticroisement, par EIBOFNER [75] [74], BEYER, et KLEINPOPPEN [60]. Dans ces expériences, le champ électrique responsable du mélange de niveaux est un champ extérieur dont on peut faire varier la grandeur. Le champ motionnel est au contraire négligeable. Leurs résultats sont (ici aussi, les structures fines ont leur valeur théorique):

He^+

$$\begin{cases} 3^2P_{3/2} - 3^2D_{3/2} = 75 \pm 15 \text{ MHz} & [74] \\ \qquad\qquad\quad\;\; 81 \pm 13 \text{ MHz} & [75] \\ 4^2P_{3/2} - 4^2D_{3/2} = 34,4 \pm 9,0 \text{ MHz} & [60] \end{cases}$$

4) Les principales causes d'incertitude

Les principales sources d'erreurs systématiques dans nos mesures sont :

- la charge d'espace : elle crée un champ électrique longitudinal qui peut déplacer les niveaux d'énergie, donc aussi les points d'anticroisement .

- les fluctuations des caractéristiques de l'excitation dues aux changements de régime du canon à électrons (par exemple : focalisation du faisceau d'électrons dans le champ magnétique). Il apparaît alors des variations indésirables sur l'intensité totale.

- dans le cas des anticroisements sur n = 4, les coefficients ρ et ϑ_{H^*} sont mal connus.

a) Influence de la charge d'espace.

Nous avons observé des déplacements sur les positions des anticroisements 3SD1 et 3SD2, variant avec les conditions expérimentales. Leurs sens et leurs valeurs relatives nous conduisent à les attribuer à des champs électriques longitudinaux peu reproductibles, pouvant atteindre 2,5 V/cm. Cette valeur est très supérieure à celle que nous avons déduite de l'étude de l'anticroisement SP $\Delta m_j = 0$, pour une cellule de type B, utilisée pour ces mesures. Pour cette raison, nous avons admis la dispersion des mesures comme plage d'erreur. L'incertitude du pointé proprement dit est nettement plus faible.

b) Influence des changements de régime de la cellule.

Lorsque le champ magnétique directeur varie, il apparaît dans le cellule deux phénomènes parasites :

- des changements d'intensité des courants électroniques : cela se traduit au stade de la détection par une variation continue d'intensité lumineuse, d'autant plus importante que le champ magnétique est plus faible, et qui se superpose aux anticroisements

- des changements de direction des électrons qui amènent des variations résonnantes en fonction de $\vec{H}$, dues vraisemblablement à des focalisations du faisceau d'électrons. Elles rappellent les pseudo-résonances cyclotron observées par LAMB ([24]), PEBAY ([61]), DECOMPS ([76]). Elles sont considérablement atténuées lorsqu'on augmente l'énergie du faisceau d'électrons.

Tous ces phénomènes conduisent à des variations d'intensité lumineuse. Le taux de polarisation, au contraire, y est peu sensible.

c) Les incertitudes sur les différents paramètres.

Les figures XX, XXIV, XLIV, XLV montrent que les différentes contributions des coefficients ρ_S , ρ_P et ρ_D , aux anticroisements 3SD1, 3SD2, 4SD1, 4SD2, ne résonnent pas exactement pour la même valeur du champ magnétique : cet effet est beaucoup plus important sur n = 4 que sur n = 3.

Sur n = 3, les coefficients ρ ont été déterminés avec une précision suffisante pour que l'incertitude sur la position de la courbe résultante soit négligeable par rapport à la dispersion des résultats notée au § a.

Sur n = 4, les coefficients ρ n'ont pas été déterminés, ils n'ont été qu'estimés. Ceci contribue à l'incertitude avancée. Il est possible que l'étude des anticroisements observés, mais non encore identifiés de manière certaine (Fig. XV), permette une détermination plus correcte des paramètres ρ . On améliorerait alors la précision des mesures de structures.

D'autre part, les signaux d'anticroisement par couplage indirect (nous l'avons vu au chapitre V § C) sont déplacés par le champ électrique qui les crée; pour que la mesure de la position de l'anticroisement soit correcte, il faut que ce champ électrique soit bien connu. Il n'y a qu'au seuil d'excitation que les vitesses des atomes et leur répartition aient pu être déterminées.

Pour améliorer les mesures, il faudrait une meilleure connaissance des répartitions desvitesses des atomes formés pour des énergies d'excitation supérieures au seuil, alors que le rapport signal/bruit est meilleur.

B - LES RESULTATS RELATIFS A LA MOLECULE H_2

La mise en évidence de "Lamb-shifts"était le but premier de ce travail ; nous avons été amenés en outre, pour interpréter les résultats expérimentaux, à nous intéresser au processus de formation des atomes excités. Nous avons vu que les molécules H_2 étaient portées par chocs électroniques dans un état dissociatif ou prédissociatif.

Nous allons rappeler d'abord les résultats que nous avons exposés précédemment.

Après collisions avec des électrons lents ($\sim$ 20 eV),les molécules d'hydrogène sont susceptibles d'émettre de la lumière visible dont le spectre contient des raies moléculaires (certaines ont pu être identifiées) et les raies de Balmer.

Les niveaux supérieurs de certaines de ces raies moléculaires ont été étudiés par M.A. MARECHAL, LOMBARDI, BALTAYAN ([77]) à Grenoble.

Les raies de Balmer apparaissent pour des énergies supérieures au seuil d'excitation des raies moléculaires (à $\simeq$ 4 eV au-dessus). Leur intensité croît nettement plus vite que celle des raies moléculaires.

1) Polarisation des raies de Balmer

VAN BRUNT et ZARE ont montré théoriquement en 1968 ([52]) que la lumière émise par des atomes d'hydrogène excités, produits de la dissociation de la molécule, peut être polarisée. VROOM et DE HEER ([43]) ont

observé effectivement 4% de polarisation environ sur les raies de Balmer lorsque l'énergie des électrons est de 50 eV. Ce taux décroît et change de signe lorsqu'on augmente l'énergie d'excitation.

Pour ce travail, où 50 eV est une limite supérieure de l'énergie d'excitation, nos résultats prolongent parfaitement ceux de VROOM et de HEER (Fig. LII) et confirment la théorie de VAN BRUNT et ZARE.

Mais cette polarisation est pour nous plus gênante qu'intéressante: elle naît de l'alignement des atomes d'hydrogène, et cet alignement rend l'étude de certains anticroisements impossible au-dessus du seuil (voir chapitre VII § B-1).

La polarisation de la lumière émise peut donner des informations sur l'anisotropie des dissociations. Le problème est particulièrement complexe dans le cas de l'hydrogène car, pour les énergies où apparaît la polarisation, il y a certainement plusieurs niveaux moléculaires parents, de contributions relatives inconnues.

Par contre, les informations recueillies à partir des anticroisements sont plus directement exploitables.

2) Etude de la dissociation de H_2 en fragments excités par les anticroisements

Si la position de l'anticroisement nous renseigne sur les structures de l'atome excité, l'intensité, la largeur et la forme de l'anticroisement peuvent nous renseigner sur les processus de dissociation.

Les figures XXXIX et XL montrent dans ces conditions l'évolution des largeurs et des intensités de certains anticroisements. Elles nous permettent de distinguer nettement 4 zones d'énergies d'excitation dans lesquelles les phénomènes mis en cause doivent être différents :

- la région près du seuil $19 < E_1 < 21$ eV
- le premier palier $21 < E_2 < 27$ eV
- la seconde pente $27 < E_3 < 35$ eV
- le second palier $35 \text{ eV} < E_4$

Nous nous proposons maintenant d'examiner séparément chacun des cas.

a) Le seuil et la région près du seuil.

α) La molécule est portée dans un état prédissociatif. La valeur observée (∿ 19 eV) pour le seuil de formation des atomes H (n = 3) ne constitue pas une mesure de l'énergie nécessaire au processus de dissociation.

En effet, cette énergie pour laquelle les raies de Balmer apparaissent peut varier entre 22 et 19 eV suivant que le champ magnétique (parallèle au faisceau d'électrons) est nul ou est de 1 000 G. environ. Les modifications de charge d'espace, dues principalement aux focalisations des électrons par le champ magnétique, sont responsables de ce déplacement du seuil. La charge d'espace crée un creux de potentiel entre les électrodes; la valeur exacte du seuil doit donc être inférieure à 19 eV, valeur déduite de la tension minimum appliquée aux électrodes.

L'étude des anticroisements, près du seuil, nous permet de déterminer l'énergie cinétique des atomes formés par dissociation
$E = \frac{1}{2} Mv^2 = \frac{1}{2} (10^{-3}/6{,}023.10^{23}) (8.10^3)^2$ J = 0,33 ± 0,02 eV.

L'énergie du niveau moléculaire mis en cause est ainsi la somme des énergies

- de dissociation de H_2 en atomes dans l'état 1^2S
- d'excitation de l'un de ces atomes dans l'état 3^2L
- cinétique des deux atomes

VIII.1 soit $E = 4{,}48 + 12{,}09 + 2 \times 0{,}33(\pm 0{,}04) = 17{,}23 \pm 0{,}04$ eV

TAUX DE POLARISATION DE H_α

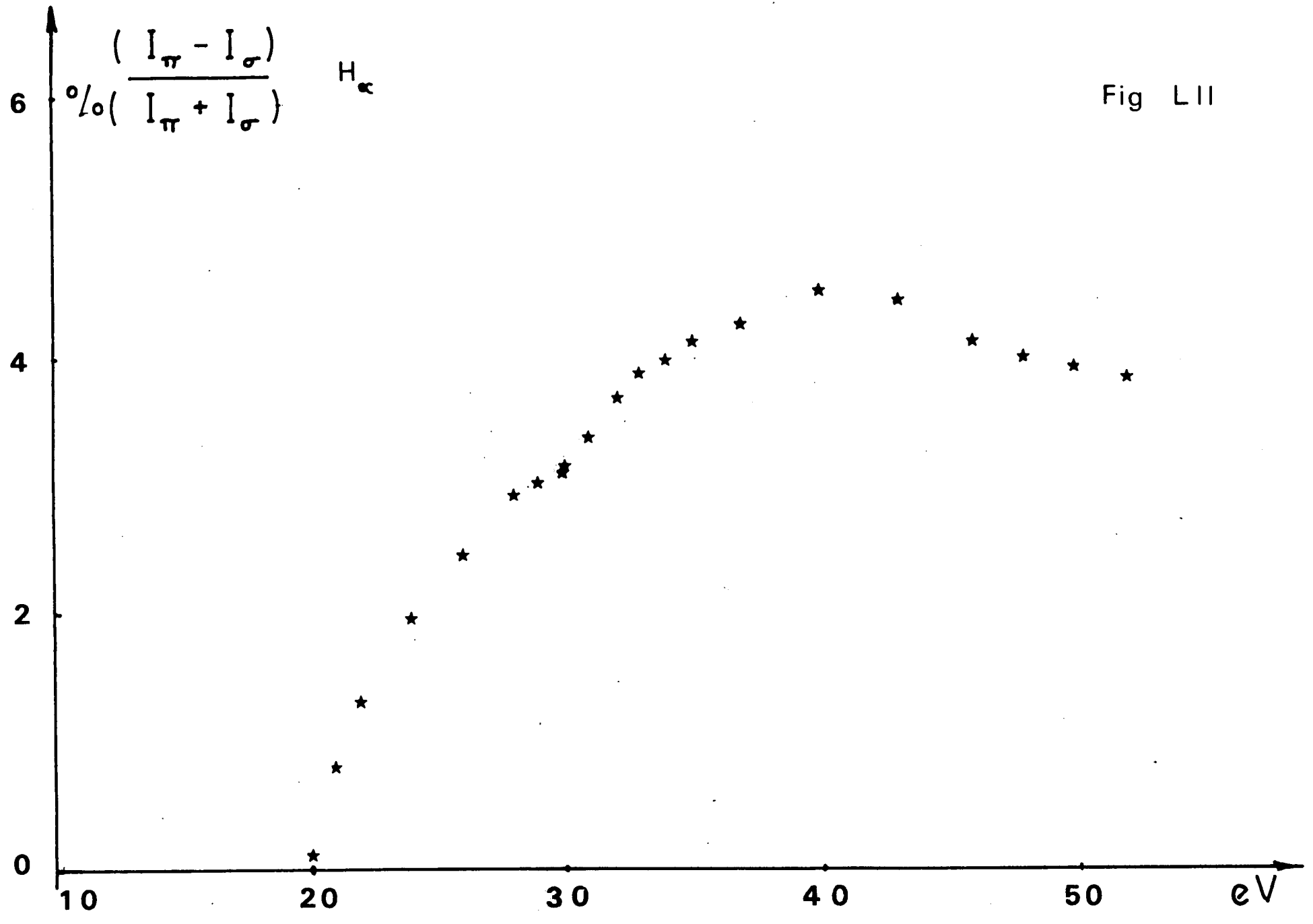


Fig LII

Cette valeur est effectivement inférieure aux 19 eV observés.

Cette énergie représente donc l'énergie du premier niveau excité de la molécule conduisant à la dissociation que nous observons. C'est le seul que l'on atteigne au seuil. Lorsqu'on augmente légèrement l'énergie des électrons incidents, on constate que les largeurs des anticroisements augmentent, donc la vitesse moyenne des atomes croît, et que les vitesses de formation des différents niveaux varient : cela prouve que d'autres niveaux moléculaires ont été atteints.

Il s'agit vraisemblablement de niveaux prédissociatifs. On peut justifier ce point comme suit :

- le domaine d'énergie où les largeurs des anticroisements varient au-dessus du seuil s'étend sur 2 eV environ. Si l'on suppose que le niveau atteint correspond à un état antilié (figure LIII)([42]), cette différence de 2 eV correspond à une pente trop faible dans la région de FRANCK et CONDON.

- Si ce niveau est dissociatif, parce qu'il correspond à la portion d'une courbe de potentiel d'un état lié situé au-dessus de l'énergie limite, l'argument précédent n'a plus de sens, comme l'on voit sur la figure III (chapitre IV). Cependant, dans ce cas, l'énergie cinétique des atomes formés serait comprise entre 0 et 2 eV. On observerait des atomes de vitesse inférieure à 8 km/s au seuil.

- Enfin, si, entre 17 et 19 eV (valeurs corrigées), un seul niveau dissociatif était atteint, il aurait une symétrie définie; on ne pourrait pas expliquer alors pourquoi, lorsque l'énergie d'excitation croît, on forme, en proportion, plus d'atomes dans l'état 3^2S qu'au seuil.

Il est donc vraisemblable d'une part que l'on atteint successivement plusieurs niveaux excités et d'autre part que ces niveaux sont prédissociatifs. Ce sont donc des niveaux de rotation-vibration, d'états liés

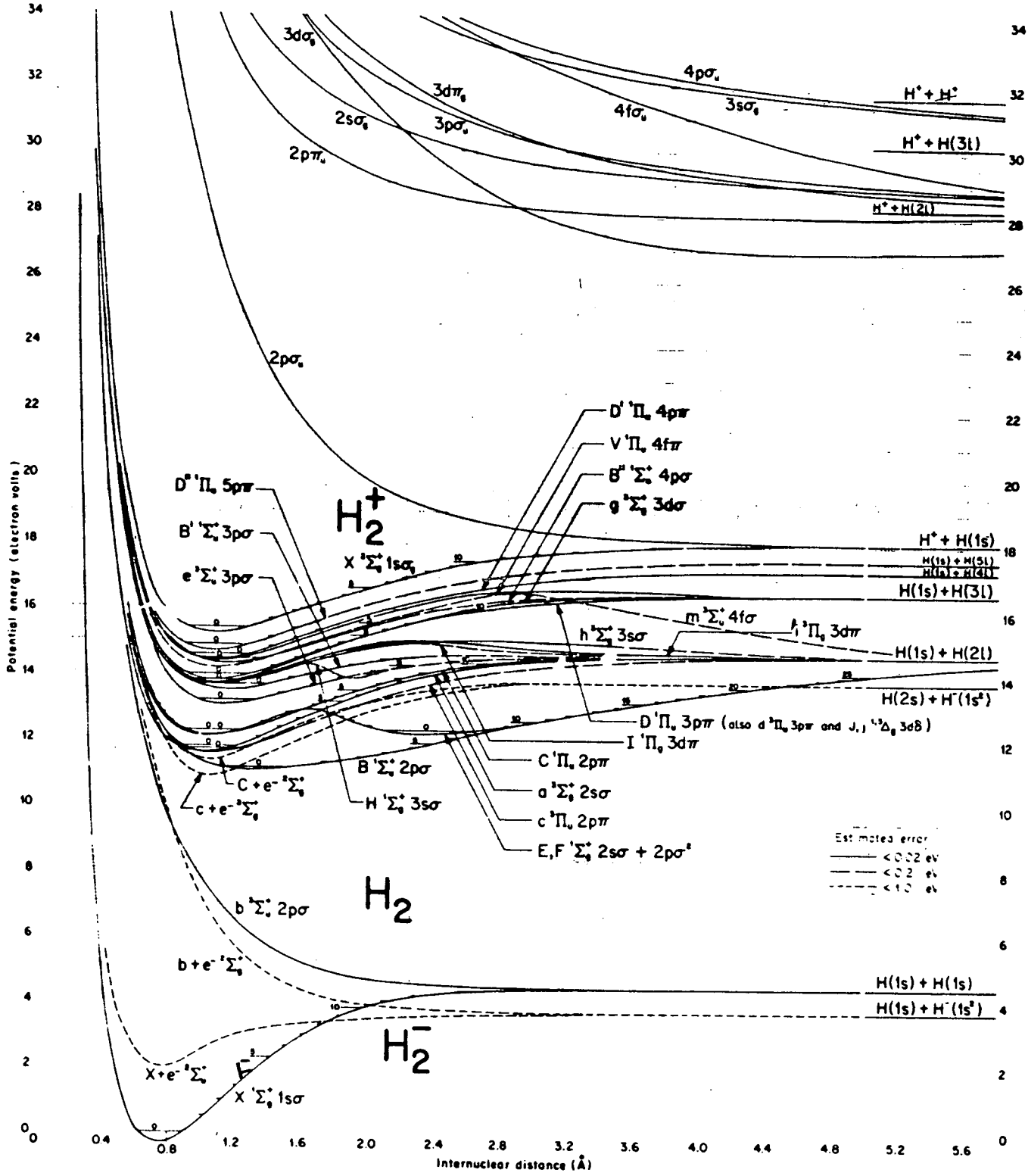


FIG. 2. Potential-Energy Curves for H_2^+, H_2, and H_2^-
A large-scale pullout of this drawing appears at the front of this issue
In general $1s\sigma$ has been omitted from state designations in order to save space

Extraite de la référence (42)

Fig LIII

mais perturbés par des niveaux dissociatifs. Leur énergie est parfaitement définie, à leur largeur naturelle près. Leur durée de vie est de 100 à 10.000 fois plus longue que celle de niveaux dissociatifs.

β) On peut déterminer les vitesses de formation des niveaux (n = 3). Au seuil, les valeurs de R_S , R_P, et R_D, vitesses de formation de l'ensemble des sous-niveaux S, P et D respectivement, sont :

VIII.2
$$\begin{cases} R_S/\Sigma R = 0,034 \pm 0,005 \\ R_P/\Sigma R = 0,54 \pm 0,02 \\ R_D/\Sigma R = 0,42 \pm 0,02 \end{cases}$$

R_S , R_P et R_D sont reliés aux coefficients ρ_S , ρ_P, et ρ_D déjà définis par $R_S = 4\ \rho_S$; $R_P = 12\ \rho_P$; $R_D = 20\ \rho_D$

Ces valeurs varient continûment de 17 à 19 eV où elles deviennent

VIII.3
$$\begin{cases} R_S/\Sigma R = 0,075 \pm 0,010 \\ R_P/\Sigma R = 0,51 \pm 0,02 \\ R_D/\Sigma R = 0,41 \pm 0,02 \end{cases}$$

L'incertitude de ces dernières valeurs est liée à l'alignement que nous n'avons pu étudier (chapitre VII § D). Nous voyons que si le niveau 3^2S se remplit plus vite au-dessus du seuil, les résultats ne sont pas pour autant très différents et les vitesses de formation des sous-niveaux (les coefficients ρ) sont du même ordre de grandeur :

$$\rho_S \simeq \rho_D/2 \simeq \rho_P/4$$

Nous voyons que l'hypothèse d'équipartition des vitesses de formation des sous-niveaux, formulée par LAMB ([24]) dans ces conditions, est assez proche de la réalité.

b) Le premier palier

Les énergies de ce domaine sont comprises entre 21 et 27 eV (valeurs observées) ou, en prenant les valeurs corrigées à partir de VIII-1, de 19 à 25 eV. Cette dernière est estimée à ± 1 eV près.

Pour de telles énergies d'excitation, les largeurs et les amplitudes relatives des anticroisements sont constantes.

Il semble donc que, dans cette zone d'énergie, les sections efficaces des niveaux moléculaires prédissociatifs restent constantes et qu'aucun autre niveau qui conduirait à la dissociation n'est atteint.

Les valeurs relatives des vitesses de formation des différents niveaux restent celles données en VIII-3.

Nous avons vu, dans le chapitre précédent, que ni les formes ni les largeurs des anticroisements ne permettent de trancher entre les deux interprétations suivantes :

- On n'obtient dans cette zone d'énergie que des atomes dont la vitesse d'explosion est 9 km/s ± 0,5 km/s. Ils proviennent d'un niveau prédissociatif dont l'énergie est, comme pour l'équation VIII.1, la somme des énergies de dissociation, d'excitation et de l'énergie cinétique des atomes :

$$E = 4,48 + 12,09 + 0,84(\pm 0,10) = 17,41 \text{ eV} \pm 0,10 \text{ eV}$$

La section efficace est alors très grande devant celle du niveau étudié en a) dont l'énergie est de 17,23 eV; alors, la contribution des atomes de vitesse 8 km/s est négligeable.

- On obtient au contraire deux catégories d'atomes qui proviennent de 2 niveaux moléculaires prédissociatifs peuplés avec des sections efficaces comparables. Les répartitions des vitesses correspondent à 8 et 10 km/s. Les énergies des niveaux sont respectivement 17,23 ± 0,04 eV et

$$E = 4,48 + 12,09 + 1,03 (\pm 0,11) = 17,60 \pm 0,11 \text{ eV}.$$

Ces niveaux conduisent à des vitesses de formation, pour les différents niveaux, du même ordre de grandeur.

On peut alors imaginer non pas deux niveaux, mais un ensemble de niveaux, d'énergies centrées autour de 17,4 eV, c'est-à-dire une situation analogue à celle qui a été observée dans le cas des atomes lents par CLAMPITT ([46]), ou CZARNIK et FAIRCHILD ([45]). Ils ont étudié la répartition des vitesses des atomes formés dans l'état 2^2S, dans une direction perpendiculaire au faisceau d'électrons; la largeur de chaque distribution est, dans leurs expériences, liée à la vitesse thermique de la molécule avant la collision.

Ces niveaux sont situés en-dessous de la courbe de potentiel de l'ion H_2^+ (voir Fig. LIII) dont l'énergie maximum, dans la région de Franck et Condon, est 18,7 eV, mais au-dessus du niveau vibrationnel v = 0 de cet ion qui est à 16,40 eV. (La figure est empruntée à la référence 42). La prédissociation est donc en compétition avec l'autoionisation.

c) La seconde pente

C'est une région qui se situe entre 25 et 33 eV (valeurs corrigées). Pour ces énergies, les largeurs des courbes augmentent de nouveau, ainsi que les intensités relatives. Il se manifeste peu à peu un nouveau processus conduisant à une autre classe d'atomes, de vitesses nettement plus grandes puisque les courbes s'élargissent, qui s'ajoute aux atomes lents précédemment formés, avec des vitesses d'excitation légèrement différentes encore pour les différents niveaux.

Mais, pour évaluer ces vitesses d'excitation, il faudrait pouvoir comparer les courbes expérimentales à des courbes théoriques. Il faudrait pour cela connaître mieux les répartitions de vitesses, ce qui n'est pas le cas.

Tout ce que nous pouvons faire c'est estimer l'ordre de grandeur des vitesses de cette nouvelle classe d'atomes ; l'énergie cinétique est telle que :

$$\frac{25 - 16,5}{2} < \frac{1}{2} m v^2 < \frac{33 - 16,5}{2} \text{ eV}$$

soit $29 \text{ km/s} < v < 40 \text{ km/s}$

De telles vitesses expliquent parfaitement les largeurs observées pour les courbes d'anticroisement.

Il y a une très grande analogie avec les résultats obtenus sur l'état 2^2S par LEVENTHAL et ses collaborateurs ([47]). Ils observent, pour des énergies d'excitation supérieures à 25 eV, la formation d'atomes rapides de vitesse moyenne 30 km/s, cette répartition ayant environ 10 km/s de large (ce qui est très supérieur à la largeur de celle des atomes lents , environ 5 km/s).

Il est vraisemblable que la formation des atomes rapides est due à un niveau dissociatif antilié, correspondant à une configuration doublement excitée et dont la limite asymptotique est la même que pour les niveaux prédissociatifs ($H(1^2S) + H(3^2L)$), soit 16,6 eV.

Si ce niveau conduisait à deux atomes excités, sa limite asymptotique serait ($H(2^2L$) + $H(3^2L)$, soit 26,7 eV, au seuil de ce processus, les atomes formés auraient une énergie cinétique nulle, on n'observerait pas un élargissement des courbes d'anticroisement.

La région de Franck et Condon de ce niveau s'étendrait de 25 à 33 eV (à ± 1 eV près).

Cette plage d'énergie est très grande devant la largeur en énergie du faisceau d'électrons ; si l'on augmente l'énergie du faisceau, la largeur de la distribution de vitesses des atomes rapides croît, car on

excite les molécules sur une portion de plus en plus grande de la courbe de potentiel. Par exemple, pour des électrons incidents de 30 eV, les atomes rapides ont entre 4,2 et 6,7 eV d'énergie cinétique. Cette plage d'énergie croît avec l'énergie incidente, la vitesse moyenne augmente. Il en est donc de même des largeurs et des amplitudes des anticroisements. Nous expliquons ainsi les pentes observées sur les courbes XXXIX et XL.

d) Le deuxième palier.

Pour des énergies incidentes supérieures à 33 eV, la totalité de la région de Franck et Condon du niveau dissociatif est atteinte, la distribution des vitesses reste donc désormais inchangée tandis que l'énergie incidente croît. Les vitesses d'excitation des différents niveaux restent constantes elles aussi : les amplitudes des courbes d'anticroisement présentent donc un palier.

e) Conclusion

Ainsi, en étudiant les largeurs, les amplitudes des courbes d'anticroisement, nous avons mis en évidence deux processus différents conduisant à des atomes excités dans l'état n = 3 :

- prédissociation conduisant à des atomes lents
- dissociation conduisant à des atomes rapides.

La figure LIVmontre l'emplacement des niveaux supposés par rapport aux niveaux connus de la molécule.

Actuellement, les niveaux excités de la molécule d'hydrogène sont connus jusqu'à 16,4 eV:c'est l'énergie du 4ème niveau vibrationnel de l'ion H_2^+ . Il n'est donc pas possible,dans ces conditions, d'identifier les niveaux mis en cause ici : leur énergie est supérieure à 17,2 eV.

Un projet d'expérience a donc été conçu, en collaboration avec L.U.R.E., pour aider à cette identification.

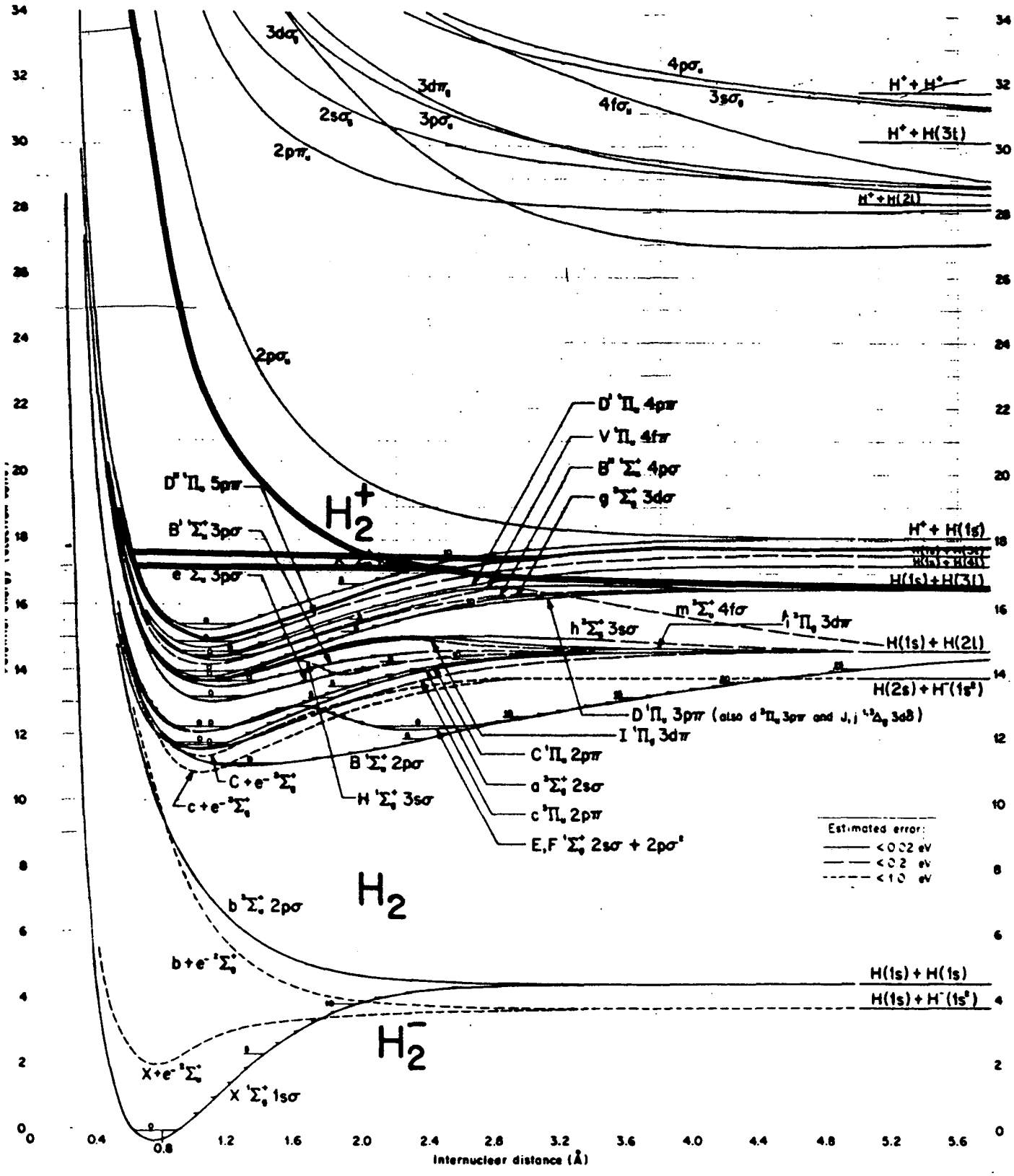


FIG. 2. Potential-Energy Curves for H_2^-, H_2, and H_2^+
A large-scale pullout of this drawing appears at the front of this issue
In general $1s\sigma$ has been omitted from state designations in order to save space

Fig LIV

3) Le projet de L.U.R.E.

Il s'agit, dans un premier temps, d'observer la photodissociation de la molécule H_2 par la fluorescence des fragments, c'est-à-dire de mesurer l'intensité des raies de Balmer en fonction de la longueur d'onde incidente.

Le domaine concerné se situe à des longueurs d'onde inférieures à 755 Å ($\simeq$ 16,57 eV). Il s'agissait donc de disposer d'une source puissante dans cette région U.V. très lointain. BEYER et WELDGE ([78]) ont tenté une telle expérience avec une source à He, puissante, mais présentant des raies. Leurs résultats ne sont guère utilisables.

Le rayonnement synchrotron de L.U.R.E. est parfaitement "blanc". Le spectre d'excitation des raies de Balmer peut être comparé au spectre d'absorption obtenu dans les mêmes conditions, afin de situer dans les séries de raies vibrationnelles les niveaux prédissociatifs.

En un deuxième temps, il sera peut-être possible de tirer parti du caractère pulsé du rayonnement de L.U.R.E. pour faire l'analyse en temps de la fluorescence, et déterminer ainsi les vitesses relatives de formation des différents niveaux 3^2S, 3^2P et 3^2D.

La réalisation de cette expérience est en cours, grâce à la collaboration de P.M. GUYON.

Ce n'est qu'après une telle expérience que nous pourrons trancher entre les hypothèses avancées en b) pour expliquer la vitesse moyenne de 9 km/s observée entre 19 et 25 eV.

4) Les courbes d'excitation

L'intensité lumineuse totale émise sur H_α , en fonction de l'énergie des électrons incidents - c'est-à-dire la courbe d'excitation de H_α - présente des variations qui mettent en évidence, elles aussi, les deux processus de dissociation. On observe sur la figure II (chapitre IV) la rupture de pente à 25 eV, correspondant au niveau dissociatif.

CONCLUSION

Dans le présent travail, nous avons obtenu des résultats qu'on peut répartir en deux catégories :

- résultats sur l'atome d'hydrogène excité
- résultats sur la molécule excitée par bombardement électronique.

Les premiers sont des mesures de structures de niveaux n = 3 et n = 4, et en particulier, la mesure de "Lamb-shifts"

$$\Sigma_3 = 3^2P_{3/2} - 3^2D_{3/2} = 5,88 \pm 0,65 \quad \text{MHz}$$

$$\Sigma_4 = 4^2P_{3/2} - 4^2D_{3/2} = 2,2 \pm 1,0 \quad \text{MHz}$$

La précision de la mesure de Σ_3 est ici très nettement supérieure à la seule mesure antérieure ([19]). La mesure de Σ_4 est la première, à notre connaissance.

Nous avons observé les anticroisements par deux techniques différentes :

- en mesurant les variations de l'intensité totale de la lumière de fluorescence: dans ce cas, la précision de nos mesures est équivalente à celle des mesures antérieures.
- en détectant les signaux sur la polarisation de la lumière; la précision de nos mesures est alors bien supérieure à celle obtenue par les autres techniques.

Nous avons obtenu, d'autre part, des informations sur des niveaux très excités de la molécule d'hydrogène, dans un domaine d'énergie qui n'a fait encore l'objet d'aucune étude.

Nous avons mesuré les vitesses de formation des différents niveaux de n = 3 obtenus à partir de prédissociation de la molécule H_2 dans un domaine d'énergie d'excitation allant de 17 à 25 eV.

Nous avons mesuré la vitesse des atomes produits au seuil d'excitation ; elle vaut 8,0 ± 0,3 km/s. Nous en avons déduit l'énergie du premier niveau moléculaire prédissociatif observable :

$$E = 17,23 \pm 0,04 \text{ eV}$$

Cette énergie est très supérieure à celle du niveau fondamental de l'ion H_2^+ ; donc, le niveau incriminé est dans un domaine où l'autoionisation est assez importante.

Nous avons mis en évidence deux processus conduisant à la dissociation en atomes excités (pour n = 3) de la molécule H_2 :

- le premier se fait par l'intermédiaire de niveaux prédissociatifs dont l'énergie est comprise entre 17,2 et 18 eV ; il forme des atomes lents ($\simeq$ 9 km/s)
- le second se fait par l'intermédiaire d'un niveau dissociatif, dont l'énergie, dans la région de Franck et Condon varie de 25 à 33 eV, et forme des atomes rapides (de 30 à 40 km/s).

Pour préciser ces résultats, nous avons entrepris une expérience de photodissociation de H_2 à L.U.R.E. qui devrait, dans un avenir très proche, nous permettre d'identifier les niveaux prédissociatifs présumés.

La présente étude a son prolongement tout naturel sur le deutérium. Il est vraisemblable que les énergies des niveaux moléculaires prédissociatifs sont très voisines, pour cet isotope, de celles de l'hydrogène

léger, les atomes plus lourds seront moins rapides ; comme les largeurs des courbes d'anticroisement varient très vite en fonction de cette vitesse, les résonances attendues devraient être plus étroites et les mesures de structures plus précises. Ainsi, il sera intéressant de voir les effets isotopiques aussi bien sur les niveaux atomiques (ceux-ci sont bien connus théoriquement) que sur les niveaux moléculaires (ceux-ci sont dans un domaine peu exploité).

D'autre part, pour obtenir une plus grande précision sur les mesures de "Lamb-shifts", il faudrait pouvoir disposer d'un champ électrique de grandeur réglable et de direction bien définie. Cela ne peut être envisagé que si l'on supprime le champ motionnel, donc si l'on dispose d'atomes de vitesses toutes parallèles au champ magnétique. Il est donc clair que dans ces conditions l'utilisation d'un jet atomique s'impose.

REFERENCES

[1] N. BOHR - Phil. Mag. 26, 1 (1913)

[2] T. LYMAN - Astr. J. 23, 181 (1906)

[3] J.J. BALMER - Ann. Phys. Chem. 25, 80 (1885)

[4] F. PASCHEN - Ann. Phys. (Leipzig) 27, 537 (1908)

[5] F. PASCHEN - Ann. Phys. (Leipzig) 50, 901 (1916)

[6] A. SOMMERFELD - Ann. Phys. (Leipzig) 51, 1 (1916)

[7] G. HANSEN - Ann. Phys. (Leipzig) 78,558 (1925)

[8] E. SCHRODINGER - Ann. Phys. 79,361 (1926)

[9] P.A.M. DIRAC - Proc. Roy. Soc A 117,610 (1928)

[10] W.V. HOUSTON et Y.M. HSIEH - Phys.Rev. 45, 263 (1934)

[11] W.E. LAMB et R.C. RETHERFORD - Phys. Rev. 72, 241 (1947)

[12] H.A. BETHE - Phys. Rev. 72, 339 (1947)

[13] N.M. KROLL et W.F. LAMB - Phys. Rev. 75, 388 (1949)
J.B. FRENCH, et V.F. WEISSKOPF - Phys. Rev. 75, 1240 (1949)
R.P. FEYNMAN - Phys. Rev. 76,769 (1949)

[14] G.W. ERICKSON et D.R. YENNIE - Ann. Phys. 35, 271 et 447 (1965)
M.F. SOTO - Phys. Rev. Lett. 17, 1153 (1966)

[15] S. TRIEBWASSER, E.S. DAYHOFF et W.E. LAMB - Phys. Rev 89, 98 et 106 (1953)
S.L. KAUFMAN, K.R. LEA, M. LEVENTHAL et W.E. LAMB - Phys. Rev. Lett. 22, 507 (1969)
T.W. SHYN, W.L. WILLIAMS, R.T. ROBISCOE et T. REBANE - Phys. Rev. Lett. 22, 1273 (1969)
T.V. VORBURGER et B.L. COSENS - Phys. Rev. Lett. 23,1273 (1969)
R.T. ROBISCOE et T.W. SHYN - Phys. Rev. Lett. 24, 559 (1970)

[16] T. APPELQUIST et S.J. BRODSKY - Phys. Rev. Lett. 24, 562 (1970)

[17] G. ERICKSON non publié
J.D. GARCIA et J.E. MACK - J.O.S.A. 55, 654 (1965)

[18] H. KLEINPOPPEN - Z. Phys. 164, 174 (1961)

[19] L.R. WILCOX et W.E. LAMB - Phys. Rev. 119, 1915 (1960)

[20] C.W. FABJAN, F.M. PIPKIN et M. SILVERMAN - Phys. Rev. Lett. 26, 347 (1971)

[21] C.W. FABJAN et F.M. PIPKIN - Phys. Lett. 36 A,69 (1971)

[22] C.W. FABJAN et F.M. PIPKIN - Phys. Rev. A 6. 556 (1972)

[23] M. MAUJEAN - Thèse de 3e cycle, Paris (1967)

[24] W.E. LAMB et T.M. SANDERS - Phys. Rev. 119, 1901 (1960)

[25] J. BROSSEL et F. BITTER - Phys. Rev. 86, 311 (1952)

(26) H. WIEDER et T.G. ECK - Phys. Rev. 153, 103 (1967)

(27) J.J. SAKURAI - Advanced Quantum Mechanics. (Addison-Wesley)

(28) C.G. DARWIN - Proc. Soc. A 116, 227 (1927)

(29) H.A. BETHE et E.E. SALPETER - Quantum mechanics of one- and two-electron atoms. (Springer-Verlag)

(30) M.L. LEWIS et V.W. HUGHES - Phys. Rev. A8, 625 (1973)

(31) J.D. JACKSON - Classical electrodynamics. (Wiley) p.578 -597

(32) C. COHEN- TANNOUDJI - Ecole d'été de Saas Fee (1968)

(33) X. ARTRU - Ann. Phys. 67,158 (1971)

(34) S.J. BRODSKY et R.G. PARSONS - Phys. Rev. 163,134 (1967)

(35) B.N. TAYLOR, W.H. PARKER et D.N. LANGENBERG - Rev. Mod. Phys. 41,375 (1969)

(36) B.P. JUDD - Operator techniques in atomic spectroscopy (Mc Graw-Hill)

(37) S. GOUDSMIT et E.BACK Z. Phys. 43,321 (1927)

(38) L. JULIEN - Thèse de 3e cycle, Paris (1974)

(39) A. MESSIAH - Mecanique quantique. (Dunod)

(40) E.L. CHUPP, L.W. DOTCHIN et D.J. PEGG - Phys. Rev. 175,44 (1968)

(41) C. COHEN-TANNOUDJI - Thèse, Paris (1962) et Ann. Phys. 7, 423 (1962)

(42) T.E. SHARP - Atomic Data 2,119 (1971)

(43) D.A. VROOM et F.J. DE HEER - J. Chem. Phys. 50, 580 (1969)

(44) L.D. WEAVER et R.H. HUGHES - J. Chem. Phys. 52, 2299 (1970)

(45) J.W. CZARNIK et C.E. FAIRCHILD - Phys. Rev. Lett. 26, 807 (1971)

(46) R. CLAMPITT - Phys. Lett. 28 A, 581 (1969)

(47) M. LEVENTHAL, R.T.ROBISCOE et K.R.LEA - Phys. Rev. 158, 49 (1967)

(48) M. MISAKIAN et J.C. ZORN - Phys. Rev. A 6, 2180 (1972)

(49) O. NEDELEC - Thèse, Grenoble (1965)

(50) J.P. DESCOUBES - Tèse, Paris (1967)

(51) D.J. BURNS et W.H.HANCOCK - Phys. Rev. Lett. 27, 370 (1971)

(52) R.J. VAN BRUNT et R.N. ZARE - J. Chem. Phys. 48, 4304 (1968)

(53) G. GRYNBERG - Thèse de 3e cycle, Paris (1972)

(54) S. HAROCHE - Thèse, Paris (1971)

(55) F.O. COLGROVE, P.A. FRANKEN, R.R. LEWIS et R.A. SANDS - Phys. Rev. Lett. 3, 420 (1959)

(56) H.K. HUGHES - Phys. Rev. 72,614 (1947); voir référence 11.

(57) G.W. SERIES - Phys. Rev. 136 A,684 (1964)

(58) J.M. WINTER - Thèse, Paris (1958)

(59) T. DOHNALIK et J. DUPONT-ROC - communication privée.

(60) H. J. BEYER et H. KLEINPOPPEN - J. Phys. B 5, L12 (1972)

(61) J.C. PEBAY-PEYROULA - Thèse, Paris (1959) et J. Phys. Rad. 20, 629 (1959)

(62) SPANGENBERG - Vacuum tubes. (Mc Graw Hill)

(63) M. KNOLL - Materials and processes of electron devices. (Springer-Verlag)

(64) L. BRILLOUIN - Phys. Rev. 67,260 (1945)

(65) B. CAGNAC - Thèse, Paris (1960)

(66) M. SOUTIF - Thèse, Paris (1950)

(67) J. DUPONT-ROC - Thèse, Paris (1972)

(68) W.E. LAMB et T.M. SANDERS - Phys. Rev. 103, 313 (1965)

(69) M.A. MARECHAL - Thèse, Grenoble (1973)

(70) C. JONAH - J. Chem. Phys. 55, 1915 (1971)

(71) Tables internationales de constantes selectionnées - 17 - (Pergamon)

(72) T.W. HANSCH - Atomic Physics 3 (1973), (Plenum Press)

(73) J.C. BAIRD, J. BRANDENBERGER, K.I. GONDAIRA et H. METCALF - Phys. Rev. A 5, 564 (1972)

(74) A. EIBOFNER et M. BAUMANN - Phys. Lett. 34 A, 421 (1971)

(75) A. EIBOFNER et M. BAUMANN - Z. Phys. 249,58 (1971)

(76) B. DECOMPS - Thèse de 3e cycle, Paris (1960)

(77) R. JOST, M.A. MARECHAL et M.LOMBARDI - Phys. Rev. A 5, 740 (1972)
P. BALTAYAN et O. NEDELEC - Phys. Lett. 37 A, 31 (1971)

(78) K.D. BEYER et K.H. WELDGE - Z. Nat. 22, 1161 (1967)

(79) C. FABRE - Thèse 3e cycle, Paris (1974)

-=-=-=-=-=-=-=-=-=-

Appendice A.

positions des croisements.

1/ Principe

Dans le cas où le degré algébrique des équations qui déterminent la position est supérieur à 2, nous avons calculé point par point le diagramme Zeeman pour chaque sous-niveau, au voisinage du point de croisement.

Par approximations successives, on atteint la précision souhaitée, les valeurs initiales étant obtenues en négligeant la structure hyperfine.

Ces calculs ont été effectués sur un terminal léger d'ordinateur (C11-10070), en temps partagé, en langage conversationnel.

Nous reproduisons, un calcul type, utilisé pour la recherche de la position du croisement P_0 D-1.

Les notations sont :

$$X = \mu_0 H \quad \text{(en MHz)}$$

$$Y = E_0 \quad \text{(en MHz)}$$

$$K = E(3^2S_{1/2}) - E(3^2P_{1/2})$$

$$L = -E(3^2P_{1/2})$$

$$M = E(3^2D_{3/2})$$

$$N = E(3^2P_{3/2})$$

l'énergie $E(3^2D_{3/2})$ est prise pour origine

et enfin $E = E_F$ (énergie de Fermi, en MHz)

$$B = m/M$$

$$C = (g_S - 2)/2$$

On obtient ainsi la pente des niveaux au voisinage du croisement.

```
      DIMENSION AA(4,4)
       REAL L,N,M

       R=1./1836.
       C=0.00116

       L=3244.7557
       M=1083.3369
       N=5.3317
       E=52.61
C      NIVEAU P0

       X=1123.
       Y=-655.

       DO 2 I=1,11
       AA(1,1)=N+E/20.-Y
       AA(1,2)=X*(2./3.+C/3.+2.46*R)
       AA(1,3)=-X*(1.+2.*C+R)*SQRT(2.)/3.
       AA(1,4)=0.
       AA(2,2)=N-E/12.-Y
       AA(2,3)=-E/48.*SQRT(2.)
       AA(2,4)=AA(1,3)
       AA(3,3)=-L+E/12.-Y
       AA(3,4)=X*(1./3.-C/3.+2.12*R)
       AA(4,4)=-L-E/4.-Y
       D1=AA(2,2)*AA(3,3)*AA(4,4)+2.*AA(2,3)*AA(2,4)*AA(3,4)-AA(2,2)*(AA(
      S3,4)**2)
      S-(AA(2,4)**2)*AA(3,3)-(AA(2,3)**2)*AA(4,4)

       D2=-AA(1,2)*AA(3,3)*AA(4,4)-2.*AA(1,4)*AA(2,3)*AA(3,4)
      S+2.*AA(1,4)*AA(2,4)*AA(3,3)+AA(1,2)*(AA(3,4)**2)
      S+2.*AA(1,3)*AA(2,3)*AA(4,4)-2.*AA(1,3)*AA(2,4)*AA(3,4)
       D3=AA(1,3)*(AA(2,4)**2)+2.*AA(1,4)*(AA(2,2)*AA(3,4))-2.*AA(1,4)*AA
      S(2,3)*

      SAA(2,4)-AA(1,3)*AA(2,2)*AA(4,4)
       D4=AA(1,4)*((AA(2,3)**2)-AA(2,2)*AA(3,3))
       D=D1*AA(1,1)+D2*AA(1,2)+D3*AA(1,3)+D4*AA(1,4)
       PRINT 1,X,Y,D
1      FORMAT(1X,3E13.6)
2      Y=Y+1.
       STOP
       END
```

En calculant Y pour deux valeurs rapprochées de x on détermine l'équation approchée du sous-niveau :

$$Y = 710{,}823 - 0{,}21\,(x - 968)$$

```
      DIMENSION A(4,4)
      REAL M
      B=1./1836.
      C=.00116
      M=1083.3369
      E=52.61
      X=1123.
      Y=-650.
      DO 11 I=1,11
      A(1,1)=M+E*3./140.-X*(1.+C/3.-1.60*B)-Y
      A(1,2)=X*((.4*SQRT(2.))*(1.+C/3.)+2.25*B)
      A(1,3)=-X*.8*(1.+2.*C+B)/SQRT(3.)
      A(1,4)=0.
      A(2,2)=M+(-E*.03)-X*(1.4+7./15.*C-.003*B)-Y
      A(2,3)=-E*SQRT(1.5)/200.-X*(1.+2.*C+B)*.2/SQRT(6.)
      A(2,4)=-.6*(1.+2.*C+B)/SQRT(2.)*X
      A(3,3)=E*.03-X*(.6-.3*C-2.3*B)-Y
      A(3,4)=X*(SQRT(3.)/5.-SQRT(3.)*C*.1+4.38*B*SQRT(3.)/4.)
      A(4,4)=-E/20.-X*(1.-C/2.-.11*B)-Y
      D1=A(2,2)*A(3,3)*A(4,4)+2.*A(2,3)*A(2,4)*A(3,4)-A(2,2)*(A(3,4)**2)
     S-(A(2,4)**2)*A(3,3)-(A(2,3)**2)*A(4,4)
      D2=-A(1,2)*A(3,3)*A(4,4)-2.*A(1,4)*A(2,3)*A(3,4)
     S+2.*A(1,4)*A(2,4)*A(3,3)+A(1,2)*(A(3,4)**2)
     S+2.*A(1,3)*A(2,3)*A(4,4)-2.*A(1,3)*A(2,4)*A(3,4)
      D3=A(1,3)*(A(2,4)**2)+2.*A(1,4)*(A(2,2)*A(3,4))-2.*A(1,4)*A(2,3)*
     SA(2,4)-A(1,3)*A(2,2)*A(4,4)
      D4=A(1,4)*((A(2,3)**2)-A(2,2)*A(3,3))
      D=D1*A(1,1)+D2*A(1,2)+D3*A(1,3)+D4*A(1,4)
      PRINT 2,X,Y,D
2     FORMAT(1X,3E13.6)
1     Y=Y+1.
      STOP
      END
```

On obtient alors :

$$Y = 709,279 + 0,780\,(x - 968)$$

Soit : $x = 969,56$ MHz

$y = 710,50$ MHz.

2) Les résultats :

Les positions sont exprimées en gauss.

3 SP 1		3 SP 2		3 SP 3		3SP Au = 0	
S_{-1} P_0	S_0 P_{+1}	S_0 P_{-1}	S_1 P_0	S_{-1} P_{-2}	S_0 P_{-1}	S_0 P_0	S_1 P_1
180,15	160,26	1388,5	1373,1	2090,8	2105,9	345,8	367,86

3PD							
D_{-3} P_{-2}	D_{-2} P_{-1}	D_{-2} P_{-1}	D_{-1} P_0	D_{-1} P_0	D_0 P_1	D_0 P_1	D_1 P_2
769,56	771,71	803,04	803,66	692,74	691,11	617,50	614,42

3PD 5		3PD6	
D_{-2} P_{-1}	D_{-1} P_0	D_{-1} P_0	D_0 P_1
1974,7	1977,5	2297,9	2291,6

3 SD1		3SD2		3 SD 3			
S_0 D_{-2}	S_1 D_{-1}	S_{-1} D_{-3}	S_0 D_{-2}	S_0 D_0	S_1 D_1	S_0 D_{-2}	S_1 D_{-1}
1186,84	1177,22	1430,17	1438,80	2349,4	2330,9	849,90	842,46

4 SD 1		4 SD2	
S_0 D_{-2}	S_1 D_{-1}	S_{-1} D_{-3}	S_0 D_{-2}
500,60	496,57	603,24	606,89

Les vecteurs d'onde, aux points de croisements, peuvent se mettre sous la forme :

$$|\varphi\rangle = \alpha\,|(sl)\,j\,+1/2\;m_j\rangle + \beta\,|(sl)\,j-1/2\;m_j\rangle$$

Nous avons calculé pour chaque croisement les coefficients α et β.

Nous avons noté également les coefficients $|V|/|\vec{E}|$ exprimés en MHz ainsi que les différences de pentes.

		α	β	V/E MHz	Δp MHz/MHz
SP 1	S	1	∞	5,43	0,67
	P	-0,0509	0,9981		
SP 2	S	1	–	6,40	1,37
	P	0,9427	0,3337		
SP 3	S	1	–	6,64	1
	P	1	–		
3SD1	S	1	–	5,12	2,13
	P	0,9659	0,2590	5,05	
	D	0,7310	0,6824		
3SD2	S	1	–	6,64	2,0
	P	1	–	5,76	
	D	1	–		
4SD1	S	1	–	9,35	2.18
	P	0,9657	0,2598	10,43	
	D	0,7301	0,68314		
4SD2	S	1	–	12,12	2,0
	P	1	–	11,89	
	D	1	–		

Appendice C.

Nous avons, dans le chapitre V, exprimé les populations des niveaux a, b et c en fonction d'expressions nommées A, B, C, D elles-mêmes définies à partir de P, Q, R et Δ.

Il s'agit de voir ce que ces expressions deviennent quand on fait l'hypothèse : $\Omega \gg V, W$ et γ

Nous effectuons des développements limités :

1°) Développement de Δ.

$$\Delta = \left(\frac{\gamma_a+\gamma_b}{2} + i\Omega\right)\left(\frac{\gamma_a+\gamma_c}{2} - i\omega\right)\left(\frac{\gamma_b+\gamma_c}{2} - i(\omega-\Omega)\right)$$
$$+ |V|^2\left(\frac{\gamma_a+\gamma_b}{2} - i\Omega\right) + |W|^2\left(\frac{\gamma_b+\gamma_c}{2} - i(\omega-\Omega)\right)$$
$$= R + iI$$

En exprimant indépendamment R et I et en utilisant l'écriture abrégée : $\gamma_{ab} = \frac{\gamma_a+\gamma_b}{2}$ ..., on obtient :

$$R = \gamma_{ac}\Omega^2 - \omega\gamma_c\Omega + \left(\gamma_{ab}\gamma_{bc}\gamma_{ca} - \omega^2\gamma_{ab} + |V|^2\gamma_{ab} + |W|^2\gamma_{bc}\right)$$

$$I = -\omega\Omega^2 + \Omega\left(-|V|^2 + |W|^2 - \gamma_{ac}\gamma_{bc} + \gamma_{ab}\gamma_{ac} + \omega^2\right)$$
$$- \omega\left(\gamma_{ab}\gamma_{ac} + \gamma_{ab}\gamma_{bc} + |W|^2\right)$$

2) Expressions de P et Q.

P et Q ont été définis par :

$$P = R.\,\mathcal{R}e(\Gamma_{ac}\Gamma_{bc}) + I.\,\mathcal{I}m(\Gamma_{ac}\Gamma_{bc})$$
$$\text{et } Q = R.\,\mathcal{R}e(\Gamma_{ac}\Gamma_{ab}) + I.\,\mathcal{I}m(\Gamma_{ac}\Gamma_{ab})$$

Nous les avons décomposés suivant les puissances décroissantes de Ω :

$$P = \gamma'_{ab} \Big\{ \Omega^2 \left(\gamma'^2_{ac} + \omega^2 + |W|^2 \gamma_{ac}/\gamma_{ab} \right)$$
$$- 2\omega\Omega \left(\gamma'^2_{ac} + \omega^2 - |V|^2 + |W|^2 \gamma_{ac}/\gamma_{ab} \right)$$
$$+ \omega^4 - 2\omega^2 \left(2|V|^2 - \gamma'^2_{ac} - \gamma^2_{bc} - |W|^2 \gamma_{ac}/\gamma_{ab} \right)$$
$$+ (\gamma_{ac}\gamma_{bc} + |V|^2)(\gamma_{bc}\gamma_{ac} + |V|^2 + |W|^2 \gamma_{bc}/\gamma_{ab}) \Big\}$$

et

$$Q = \gamma_{bc} \Big\{ \Omega^2 \left(\gamma'_{ac} + \omega^2 + |V|^2 \gamma_{ac}/\gamma_{bc} \right) - 2\omega\Omega |W|^2$$
$$+ \omega^2 \gamma^2_{ab} + (\gamma_{ac}\gamma_{ab} + |W|^2)(\gamma_{ab}\gamma_{ab} + |V|^2 \gamma_{ab}/\gamma_{bc} + |W|^2) \Big\}$$

3°) Calcul des expressions approchées de A, B, C.

Il s'agit ici de calculer seulement les deux termes d'ordre le plus grand en Ω.

$$|\Delta|^2 = R^2 + I^2 \simeq \Omega^4 (\gamma'^2_{ac} + \omega^2) - 2\omega\Omega^3 (\gamma'^2_{ac} + \omega^2 - |V|^2 + |W|^2)$$

$$A = 2\frac{P|V|^2}{|\Delta|^2} \sim 2\frac{|V|^2}{\Omega^2} \left[\gamma_{ab} + \frac{|W|^2 (\gamma_{ac} - \omega/\Omega (\gamma_c - \gamma_b))}{(\gamma'^2_{ac} + \omega^2) - \frac{2\omega}{\Omega} (\gamma'^2_{ac} + \omega^2 - |V|^2 + |W|^2)} \right]$$

de même

$$B = \frac{2Q|W|^2}{|\Delta|^2} \sim 2\frac{|W|^2}{\Omega^2} \left[\gamma_{bc} + \frac{|V|^2 \gamma_{ac} - 2\omega/\Omega \cdot \gamma_{bc} |V|^2}{(\gamma'^2_{ac} + \omega^2) - \frac{2\omega}{\Omega} (\gamma'^2_{ac} + \omega^2 - |V|^2 + |W|^2)} \right]$$

$$C = 2\frac{|V|^2|W|^2 R}{|\Delta|^2} \sim 2\frac{|V|^2|W|^2}{\Omega^2} \frac{\gamma_{ac}}{(\gamma'^2_{ac} + \omega^2) - \frac{2\omega}{\Omega} (\gamma'^2_{ac} + \omega^2 - |V|^2 + |W|^2}$$

A partir de ces expressions, on retrouve aisément les expressions V – 9, pour lesquelles on a cherché une forme plus symétrique. Il suffit de remarquer que

$$A, B, C \propto \frac{1}{\Omega^2}$$

alors que

$$AB - C^2 \propto \frac{1}{\Omega^4}$$

Appendice D

Nous allons montrer sur un exemple, comment nous avons calculé le déplacement des sous-niveaux qui s'anticroisent par l'ensemble des autres niveaux.

Exemple du 4SD2

Les sous-niveaux $4^2S_{1/2}$ $m_j = -1/2$ et $4^2D_{3/2}$ $m_j = -3/2$ sont mélangés par l'intermédiaire du sous-niveau $4^2P_{3/2}$ $m_j = -1/2$ lui-même perturbé individuellement par d'autres sous-niveaux.

1°) Le sous-niveau $^2S_{1/2}$ $m_j = -1/2$

Il est couplé aux sous-niveaux P $m_j = +1/2$

Son énergie E_S devient $E_S + \Delta E_S$ où ΔE_S est la somme des contributions des différents niveaux :

$$\Delta E_S = -\sum \frac{|V|^2}{\Delta}$$

$$= -(0{,}030 + 0{,}073)\, E_\perp^2$$

en MHz pour $E_\perp$ en V/cm.

2°) Le sous-niveau $^2D_{3/2}$ $m_j = -3/2$

Il est couplé aux sous-niveaux 4^2F $m_j = -3/2$ et $m_j = -7/2$

$$\Delta E_D = -(-0{,}143 + 0{,}003 + 0{,}001)\, E_\perp^2$$

Soit pour la différence d'énergie :

$$\Delta E_D - \Delta E_S = 0{,}242\, E_\perp^2 \quad \text{en MHz pour } E_\perp \text{ en V/c}$$

Résultats pour l'ensemble des autres enregistrements.

$E_\perp = 1$ V/cm	3SD1	3SD2	3SD3	4SD1	4SD2
$\Delta E_D - \Delta E_S$	0,0051	0,0186	0,077	0,267	0,242

$E_\perp = 1$ V/cm	PD5	PD6
$\Delta(E_p) - \Delta E_D$	− 0,0069	+ 0,0049

Appendice - E -

Exemple de calcul du signal d'anticroisement : 3SD1

```
      REAL I,M,N
      CA=1.
      CB=29.5
      CC=9.67
      AL=3255C.C874
      AM=1C83.33693
      B=1.16E-3
      RC=C.1
      RA=C.CB
      RB=.2
      CH=2.
      V0=8C.
      DVI=4.
      DFI=3.141593/2C.
      DT1=DFI
      DT2=DFI
      H=162C.
      D0 1 II=1,3C
      FST=C.
      FI=C.
      GH=(1.+2.*B)*H/3.
      GG=GH=5./5.
      A1=SQRT((1.+((AL-GH)/SQRT((AL-GH)**2+8.*(GH**2))))/2.)
      B1=+SQRT(1.-A1*A1)
      A2=SQRT((1.+((AM-GG)/SQRT((AM-GG)**2+(16./9.)*(GG**2))))/2.)
      B2=+SQRT(1.-A2**2)
      D0 4 K=1,2C
      FS3=C.
      T2=C.
      D0 9 K2=1,1C
      FS2=C.
      T1=C.
      D0 8 K1=1,1C
      VI=C.
      FS1=C.
      D0 7 I1=1,13
      E=H/14CCC.*SQRT((V0*SIN(T1))**2+(VI*SIN(T2))**2+2.*V0*VI*SIN(T1)*S
     SIN(T2)*C0S(FI))
      V=(A1*3.8379+B1*5.4276)*E
      W=(A1*A2*4.4552+A1*B2*1.4864+B1*B2*5.2553)*E
      M=2.13*(1647.653-H)+C.CC5C8*E*E
      N=38C.75-(H-1647.653)*1.4C6-C.CC182*E*E
      R=(CA+CB)*(CA+CC)*(CB+CC)/8.*M*N*(CB+CC)/2.-N*(M-N)*(CA+CC)/2.-M*(
     SM-N)*(CA+CB)/2.+V*V*(CA+CB)/2.+W*W*(CB+CC)/2.
      I=M*N*(M-N)-N*(CA+CC)*(CB+CC)/4.-M*(CA+CB)*(CB+CC)/4.-(M-N)*(CA+CB
     S)*(CA+CC)/4.-N*V*V-(M-N)*W*W
      D=R*R+I*I
      A=(((CA+CC)*(CC+CB)/2.-2.*M*(M-N)+2.*V*V)*R-(M*(CB+CC)+(M-N)*(CA+C
     SC))*I)*V*V/D
      B=(((CA+CB)*(CA+CC)/2.-2.*M*N+2.*W*W)*R-(N*(CA+CC)+M*(CA+CB))*I)*W
     S*W/D
```

```
52:           C=2.*R*V*V*H*H/D
53:           F=1.+A*(CA+CB)/(CA*CB)+B*(CB+CC)/(CB*CC)-2.*C/CB+((CA+CB+CC)*(A*B-
54:          SC*C)/(CA*CB*CC))
55:           X=(RA+A*(RA+RB)/CB+B*(CB+CC)/(CB*CC)*RA-C*(2.*RA/CB+RB/CB-RC/CC)
56:          S+(RA+RB+RC)*(A*B-C*C)/(CB*CC))/(CA*F)
57:           Z=(RC+A*(CA+CB)/(CA*CB)*RC+B*(RC+RB)/CB-C*(2.*RC/CB+RB/CB-RA/CA)
58:          S+(RA+RB+RC)*(A*B-C*C)/(CB*CA))/(CC*F)
59:           Y=(RA+RB+RC-X*CA-Z*CC)/CB
60:           M=2.13*(1661.121-H)+0.CC5C8*E*E
61:           N=39C.99-(H-1661.121)*1.4C6-C.CC182*E*E
62:           R=(CA+CB)*(CA+CC)*(CB+CC)/8.-M*N*(CB+CC)/2.-N*(M-N)*(CA+CC)/2.-M*(
63:          SM-N)*(CA+CB)/2.+V*V*(CA+CB)/2.+W*W*(CB+CC)/2.
64:           I=M*N*(M-N)-N*(CA+CC)*(CB+CC)/4.-M*(CA+CB)*(CB+CC)/4.-(M-N)*(CA+CB
65:          S)*(CA+CC)/4.-N*V*V-(M-N)*W*W
66:           D=R*R+I*I
67:           A=(((CA+CC)*(CC+CB)/2.-2.*M*(M-N)+2.*V*V)*R-(M*(CB+CC)+(M-N)*(CA+C
68:          SC))*I)*V*V/D
69:           B=(((CA+CB)*(CA+CC)/2.-2.*M*N+2.*W*W)*R-(N*(CA+CC)+M*(CA+CB))*I)*W
70:          S*W/D
71:           C=2.*R*V*V*H*H/D
72:           F=1.+A*(CA+CB)/(CA*CB)+B*(CB+CC)/(CB*CC)-2.*C/CB+((CA+CB+CC)*(A*B-
73:          SC*C)/(CA*CB*CC))
74:           XX=(RA+A*(RA+RB)/CB+B*(CB+CC)/(CB*CC)*RA-C*(2.*RA/CB+RB/CB-RC/CC)
75:          S+(RA+RB+RC)*(A*B-C*C)/(CB*CC))/(CA*F)
76:           ZZ=(RC+A*(CA+CB)/(CA*CB)*RC+B*(RC+RB)/CB-C*(2.*RC/CB+RB/CB-RA/CA)
77:          S+(RA+RB+RC)*(A*B-C*C)/(CB*CA))/(CC*F)
78:           YY=(RA+RB+RC-XX*CA-ZZ*CC)/CB
79:           PS=(Y+YY)*CB*C.C1334-(Z+ZZ)*CC*C.4C88
80:           PS1=PS1+PS*EXP(-VI*VI/85C.C)*VI*VI*DVI/25754.
81:      7    VI=VI+DVI
82:           PS2=PS2+PS1*SIN(T1)*DT1
83:      8    T1=T1+DT1
84:           PS3=PS3+PS2*SIN(T2)*DT2
85:      9    T2=T2+DT2
86:           PST=PST+PS3*DFI
87:      4    FI=FI+DFI
88:           PRINT 3,V8,H,PST,RA,RB,RC
89:      3    FORMAT(1X,2E11.4,E15.8,3E11.4)
90:      1    H=H+DH
91:           STOP
92:           END
```